

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR

FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA

ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA E INGENIERÍA DE ALIMENTOS



**MODELACIÓN Y SIMULACIÓN DE PROCESOS DE
TRASFERENCIA DE MASA EN INGENIERÍA QUÍMICA.**

PRESENTADO POR:

OSWALDO ENRIQUE CASTILLO ROGEL

FAUSTO JOSÉ RAMÍREZ GARCÍA

PEDRO RAFAEL SIGÜENZA FLORES

PARA OPTAR AL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

CIUDAD UNIVERSITARIA, MARZO 2019

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR

RECTOR:

MSc. ROGER ARMANDO ARIAS ALVARADO

SECRETARIO GENERAL:

MSc. CRISTÓBAL HERNÁN RÍOS BENÍTEZ

FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA

DECANO:

Ing. FRANCISCO ANTONIO ALARCÓN SANDOVAL

SECRETARIO:

Ing. JULIO ALBERTO PORTILLO

**ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA E INGENIERÍA DE
ALIMENTOS**

DIRECTORA:

Dra. TANIA TORRES RIVERA

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR
FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA E INGENIERÍA DE
ALIMENTOS

Trabajo de Graduación previo a la opción al Grado de:

INGENIERO QUÍMICO

Título:

**MODELACIÓN Y SIMULACIÓN DE PROCESOS DE
TRASFERENCIA DE MASA EN INGENIERÍA QUÍMICA.**

Presentado por:

OSWALDO ENRIQUE CASTILLO ROGEL

FAUSTO JOSÉ RAMÍREZ GARCÍA

PEDRO RAFAEL SIGÜENZA FLORES

Trabajo de Graduación Aprobado por:

Docente Asesor:

Dr. JOSÉ ANIBAL ERAZO CORNEJO

Ciudad universitaria, marzo 2019

Trabajo de Graduación Aprobado por:

Docente Asesor:

Dr. JOSÉ ANIBAL ERAZO CORNEJO

DEDICATORIA

Dedicamos este trabajo primeramente a Dios porque sin él, esto no hubiera sido posible, a nuestros padres por proveernos más de lo necesario, su apoyo y comprensión, a nuestros hermanos y demás familiares por estar ahí siempre apoyándonos cuando más lo necesitamos, a nuestros compañeros de carrera que hoy podemos decirles amigos y colegas con los cuales compartimos grandes momentos durante toda esta etapa.

A cada docente que tuvimos durante la carrera por sus enseñanzas, paciencia y dedicación para poder impartirnos sus conocimientos y enseñanzas.

Hacemos una mención especial para nuestros asesores en este trabajo a los ingenieros José Aníbal Erazo y Juan Ramírez, por dedicarnos un poco de su tiempo para poder haber realizado excelentemente y satisfactoriamente este proyecto, que servirá para las futuras generaciones de ingenieros químicos.

Todo esfuerzo tiene su recompensa y nosotros hoy la estamos recibiendo, el camino se puede volver largo y difícil pero no imposible de lograr. Como grupo esperamos que todo el tiempo invertido en esta investigación sirva como guía, que de una pauta donde hay otro tipo de enseñanza diferente a la tradicional, una herramienta que facilite el conocimiento en los diferentes temas impartidos en la materia de Operaciones Unitarias III, donde se estudian procesos de transferencia de masa. Que nuestros aplicativos sean el inicio de proyectos similares en donde el único obstáculo en la simulación es las barreras que cada mente puede tener.

Oswaldo Castillo, Fausto Ramírez y Pedro Sigüenza.

RESUMEN

Scilab es un programa muy poderoso de uso libre y su utilización a nivel académico representa una oportunidad accesible para estudiantes y docentes. Donde se pueda facilitar la resolución de algoritmos de gran complejidad.

En el presente trabajo se realizó la simulación de los diferentes temas impartidos en la cátedra de Operaciones Unitarias III, de la carrera de Ingeniería Química de la Universidad de El Salvador. Seleccionando los temas más relevantes impartidos en dicha materia para que los estudiantes y catedráticos tengan herramientas alternativas de aprendizaje y enseñanza en dicha cátedra.

En el documento se describen de forma general los problemas de cálculos los cuales fueron seleccionados por su grado de dificultad y aplicación. Al tener los resultados de las simulaciones se realizaron comparaciones de los datos obtenidos contra datos reales, para la verificación de su correcto funcionamiento los cuales se pudo observar que grado de error presentado en la comparación de respuestas era irrelevante (muy bajo), además, se analizó en base a criterios objetivos, la conveniencia de utilizar los programas informáticos desarrollados con fines educativos.

Para la correcta utilización de los programas informáticos (aplicativos) se elaboró un manual sobre el uso de cada uno de ellos, lo anterior permitirá que el usuario tenga una guía en donde explica detalladamente el uso de cada aplicativo.

ÍNDICE GENERAL

Pág.

ÍNDICE DE TABLAS	viii
ÍNDICE DE FIGURAS	x
INTRODUCCIÓN	1
OBJETIVOS	4
OBJETIVO GENERAL:	4
OBJETIVOS ESPECÍFICOS:	4
CAPITULO I: REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA	5
1.1 Introducción a la simulación.	5
1.1.2 Historia de la simulación.	5
1.1.3 Aplicaciones de la simulación.	7
1.1.4 Fundamentos para la simulación.	8
1.1.5 Etapas para el desarrollo de la simulación de un proceso químico.	9
1.1.6 Clasificación de las técnicas de simulación.	13
1.2 Simulación de procesos en ingeniería química.	15
1.3 Herramientas de simulación.	17
1.3.1 Simuladores comerciales.	17
1.3.2. Simuladores de código abierto.	21
1.3.3 Ventajas y desventajas del código libre.	23
1.4. Scilab.	24
1.4.1 Historia de Scilab.	24
1.4.2 ¿Qué puede hacer Scilab?	26
1.4.3. Scilab como plataforma de simulación.	27
1.4.4. Scilab en ingeniería química.	27
1.5 Transferencia de masa.	28
1.5.1 Definición general de la transferencia de masa.	29

ÍNDICE GENERAL

Pág.

1.5.2 Clasificación de la transferencia de masa.....	31
1.5.3 Aplicaciones de transferencia de masa.....	36
1.5.4 Enseñanza de Operaciones Unitarias que involucran procesos de transferencia de masa en la Escuela de Ingeniería Química e Ingeniería de Alimentos / Universidad de El Salvador.....	38
CAPITULO II: FUNDAMENTOS DE TRANSFERENCIA DE MASA	41
2.1 Difusión molecular en flujo laminar.....	41
2.2 Cálculo de coeficientes de difusión.....	42
2.2.1 Cálculo de coeficiente de difusión para gases.....	43
2.2.2 Difusividad para gases a altas presiones.....	46
2.2.3 Difusividad en fase líquida.....	47
2.3 Introducción difusión molecular en estado estable.....	48
2.3.1 Difusión molecular en estado estacionario en fluidos sin movimiento y en flujo laminar.....	49
2.3.2 Difusión molecular en gases (estado estacionario).....	50
2.3.3 Difusión molecular en líquidos en estado estacionario.....	52
2.4 Coeficientes individuales de transferencia de masa.....	53
2.5 Coeficientes globales de transferencia de masa.....	54
2.6 Operaciones de humificación.....	57
2.6.1 Clasificación de sistemas de enfriamientos evaporativo de agua.....	58
2.6.2 Definición de términos en sistemas de enfriamiento evaporativo.....	60
2.6.3 Ecuaciones fundamentales para operaciones de enfriamiento evaporativo.....	62
2.6.4 Perfiles de temperatura entre las fases.....	65
2.6.5 Diagrama $h_g - t_l$	71
2.6.6 Métodos para evaluar NTU.....	74
2.6.7 Método de Mickley.....	77
2.6.8 Influencia de las condiciones de proceso.....	80

ÍNDICE GENERAL

	Pág.
2.7 Absorción	81
2.7.1 Balances de materia en una torre de absorción.	82
2.7.2 Velocidad de absorción.	84
2.7.3 Cálculo de la altura de la torre.....	87
2.7.4 Coeficientes de película líquida.	92
2.7.5 Coeficientes de película gaseosa.	94
2.7.6 Absorción en columnas de platos.....	97
2.7.7 Líneas de operación para absorción.	101
2.7.8 Análisis del arrastre.....	105
2.7.9 Diseño de empaques y torres empacadas.	108
2.7.10 Contacto entre el líquido y el gas.	112
2.7.11 Caída de presión y velocidades límite de flujo.....	113
2.7.12 Diámetro de la columna.	119
2.7.13 Solución analítica: la ecuación de kremser.	121
2.7.14 Absorbedores y separadores de arrastre con varios solutos diluidos.	128
2.7.15 Absorción irreversible.....	131
2.7.16 Absorción con reacción química.	134
2.7.17 Operación con flujo en corrientes paralelas.	138
2.7.18 Absorción en tanques.	139
2.8 Secado de sólidos.	141
2.8.1 Humedad de equilibrio.	143
2.8.2 Humedad libre.	143
2.8.3 Humedad ligada.....	144
2.8.4 Humedad no ligada.....	144
2.8.5 Sólido solubles.	145
2.8.6 Cinética del secado.....	146

ÍNDICE GENERAL	Pág.
2.8.7 Curva de régimen de secado.....	147
2.8.8 Mecanismos del secado.....	151
2.8.9 Cálculo del tiempo de secado.....	151
2.8.10 Período de secado constante.....	152
2.8.11 Métodos analíticos para el cálculo de secado.....	152
2.9 Destilación.....	154
2.9.1 Destilación por arrastre de vapor.....	154
2.9.2 Destilación simple.....	155
2.9.3 Destilación instantánea.....	155
2.9.4 Destilación fraccionada.....	155
2.9.5 Diseño de columnas de pisos o platos.....	158
2.9.6 Cálculo de las líneas de operación para un diagrama de equilibrio.....	159
2.9.7 Procedimiento de cálculo de pisos (método de mc cabe-thiele).....	164
2.9.8 Condiciones límites de operación.....	166
 CAPITULO III: SIMULACIÓN DE PROCESOS DE TRANSFERENCIA	
DE MASA.....	168
3.1 Simulación de difusión.....	168
3.1.2 Simulación de cálculo de coeficiente de difusión para gases.....	168
3.1.3 Simulación de cálculo de coeficiente de difusión para líquidos.....	182
3.1 Simulación de operaciones gas-líquido.....	186
3.2.1 Simulación de coeficientes individuales de transferencia de masa.....	186
3.2.2 Simulación operaciones absorción de gases.....	192
3.2.3 Simulación operaciones de humidificación.....	198
3.2.4 Simulación operaciones de destilación.....	204
3.3 Simulación operaciones sólido-fluido.....	210
3.3.1 Simulación operaciones de secado.....	210

ÍNDICE GENERAL

Pág.

CONCLUSIONES	218
ANEXO A: CONSTANTES DE LENNARD – JONES.	A-1
ANEXO B: COEFICIENTES DE DIFUSIÓN DE TRANSFERENCIA DE MASA EN SISTEMAS BINARIOS.	B-1
ANEXO C: CARTAS PSICOMÉTRICAS.	C-1
ANEXO D: MANUAL PARA EL USO DE APLICATIVOS.	D-1

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla	Descripción	Pág.
Tabla 1.1:	Clasificación de las técnicas de simulación de procesos.....	14
Tabla 1.2:	Ventajas y desventajas de las aplicaciones de código libre.	23
Tabla 2.1:	Parámetros de Lennard-Jones. Reid, Prausnitz y O'Connell.	44
Tabla 2.2:	Volúmenes moleculares de difusión para algunas moléculas simples. Reid, Prausnitz y O'Connell.	45
Tabla 2.3:	Contribuciones de grupo para volúmenes moleculares de difusión. Reid, Prausnitz y O'Connell.	45
Tabla 2.4:	Perfiles de temperatura entre faces en una torre de destilación.	66
Tabla 2.5:	Constantes H de ley de Henry para CO ₂ , CO y H ₂ S en agua. H esta en atm/fracción molar.	99
Tabla 2.6:	Constantes de la ley de Henry y solubilidad para compuesto clorados en agua a 25 °C y 1 atm.	99
Tabla 2.7:	Absorción de amoníaco en agua.....	100
Tabla 3.1:	Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 001.....	168
Tabla 3.2:	Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 001.....	172
Tabla 3.3:	Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 002.....	173
Tabla 3.4:	Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 002.....	176
Tabla 3.5:	Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 003.....	177
Tabla 3.6:	Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 003.....	181
Tabla 3.7:	Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 004.....	182
Tabla 3.8:	Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 004.....	185

Tabla	Descripción	Pág.
Tabla 3.9:	Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 005.....	186
Tabla 3.10:	Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 005.....	191
Tabla 3.11:	Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 006.....	192
Tabla 3.12:	Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 006.....	197
Tabla 3.13:	Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 007.....	198
Tabla 3.14:	Cuadro ilustrativo del problema de cálculo 7.11.....	202
Tabla 3.15:	Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 007.....	203
Tabla 3.16:	Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 008.....	204
Tabla 3.17:	Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 008.....	209
Tabla 3.18:	Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 009.....	210
Tabla 3.19:	Cuadro ilustrativo del problema de cálculo 12.3.....	213
Tabla 3.20:	Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 009.....	217
Tabla A-1:	CONSTANTES DE LENNARD – JONES.	A-1
Tabla A-2:	CONSTANTES DE LENNARD – JONES calculadas a partir de viscosidad.....	A-3

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura	Descripción	Pág.
Figura 1:	Etapas para el desarrollo de simulación.....	10
Figura 2:	Modelado de reactor utilizado en el proceso de la metalurgia.....	28
Figura 3:	Difusión molecular.	31
Figura 4:	Representación esquemática del modelo de película estancada para un sistema gas-líquido..	34
Figura 5:	Representación del modelo de penetración de Higbie.....	34
Figura 6:	Desarrollo de capa límite de momentum y concentración, a lo largo de una placa inmersa en un flujo uniforme.....	35
Figura 7:	Movimiento de moléculas.....	42
Figura 8:	Difusión en solución binaria (etanol-agua).....	48
Figura 9:	Difusión de A, a través del no difundente B.....	51
Figura 10:	Diagrama de equilibrio donde se muestran las diferencias globales de concentración ..	55
Figura 11:	Esquema de torre de enfriamiento..	59
Figura 12:	Torre de enfriamiento en contracorriente de sección transversal circular.	61
Figura 13:	Torre enfriamiento atmosférica.	63
Figura 14:	Condiciones en la parte superior de la torre de enfriamiento.	66
Figura 15:	Condiciones en el fondo de la torre de enfriamiento.	67
Figura 16:	Perfiles de transferencia de calor.	69
Figura 17:	Diagrama $H_G - t_L$	72
Figura 18:	Explicación para la construcción de diagrama $H_G - t_L$	73
Figura 19:	Factor de corrección f para obtener la fuerza impulsora media eficaz en la columna....	76

Figura	Descripción	Pág.
Figura 20:	Nomograma de las características de una torre de enfriamiento para el cálculo de NTU.....	77
Figura 21:	Pasos para el trazo de la curva H –T.....	78
Figura 22:	Ejemplo de un gráfico mostrando la construcción del método de Mickley.....	79
Figura 23:	Diagrama del balance de materia para una columna empacada.....	83
Figura 24:	Identificación de las composiciones en la superficie de contacto en un fenómeno de absorción.. ..	87
Figura 25:	Diagrama de una torre de absorción empacada.. ..	88
Figura 26:	Líneas de operación típica para absorción o desorción de un gas ligeramente soluble. .	92
Figura 27:	Altura de una unidad de transferencia para desorción de oxígeno a partir de agua a 25 °C con empaque de anillos Rasching.	93
Figura 28:	Altura de una unidad de transferencia para la absorción de amoníaco en agua con anillos Rasching de cerámica de 1 ½ pulgadas.	96
Figura 29:	Columna de separación.....	103
Figura 30:	Ejemplo de diagrama McCabe-Thiele para absorción.....	104
Figura 31:	Columna de separación por arrastre.....	106
Figura 32:	Diagrama de McCabe-Thiele para separación por arrastre.....	106
Figura 33:	Correlación de O’Connell para eficiencia total de absorbedores de etapa de burbujeo.....	107
Figura 34:	Diseño de una torre empacada.	109
Figura 35:	Empaques comunes en torres: a) anillos Rasching; b) anillo metálico Pall; c) anillo plástico Pall; d) muntura Berl; e) montura cerámica Intalox; f) montura plástica Super Intalox; g) montura metálica Intalox.....	111
Figura 36:	Trazado esquemático de un empaque estructurado.	112

Figura	Descripción	Pág.
Figura 37:	Caída de presión en una torre empacada para el sistema aire-agua con monturas, Intalox de 1 in. ($1000 \text{ lb/ft}^3 \cdot \text{h} \approx 1.356 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$; $1 \text{ in. H}_2\text{O/ft} \approx 817 \text{ Pa/m}$).....	114
Figura 38:	Velocidades de inundación en monturas cerámicas, Intalox en un sistema aire-agua. ($1000 \text{ lb/ft}^3 \cdot \text{h} \approx 1.356 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$).....	116
Figura 39:	Correlación generalizada para la caída de presión en columnas empacadas. ($1 \text{ in H}_2\text{O/ft} \approx 817 \text{ Pa/m}$) (según Eckert).....	118
Figura 40:	Correlación generalizada alternativa de la caída de presión. ($1 \text{ in. H}_2\text{O/ft}$).....	119
Figura 41:	Tasas de flujo total en absorbedor.	121
Figura 42:	Absorbedor con fases diluidas. L y V son las tasas normales de flujo “y” y “x” son las fracciones de masa o molares.	122
Figura 43:	Diagrama de McCabe-Thiele para absorbedor con fases diluidas con líneas paralelas de equilibrio y de operación.	123
Figura 44:	Diagrama de McCabe-Thiele para absorbedor con fases diluidas ($L/V < m$).	123
Figura 45:	Absorbedor de varios solutos diluidos.....	129
Figura 46:	Esquema de etapas para la elaboración del diagrama de McCabe-Thiele para determinar la cantidad de etapas con el cálculo del soluto “B”.	130
Figura 47:	Solución para el absorbedor con fases diluidas, con tres solutos donde se especifica el soluto B, y los solutos A y B se obtienen por tanteos.	131
Figura 48:	Diagrama de McCabe-Thiele para absorción irreversible a contracorriente..	133
Figura 49:	Absorción concurrente irreversible: A) Aparato, B) Diagrama de McCabe-Thiele....	133
Figura 50:	Coefficientes de transferencia de masa para la absorción de CO_2 en NaOH al 4% con anillos metálicos Pall o monturas cerámicas Intalox ($G_y = 500 \text{ lb/ft}^2 \cdot \text{h}$)..	136
Figura 51:	Absorción de CO_2 en una solución de monoetilamina (MEA). Según Freguia y Rochelle.....	137

Figura	Descripción	Pág.
Figura 52:	Líneas de operación para flujos paralelos y en contracorriente para la absorción con reacción química irreversible.	138
Figura 53:	Altura de una unidad de transferencia para desorción de oxígeno a partir de agua a 25 °C con empaque de anillos Rasching. (Nota: en este sistema $HO_x \approx HX$)..	140
Figura 54:	Comportamiento de la concentración de solido en curvas de secado.....	142
Figura 55:	Curva de Equilibrio de humedad en el Diagrama de Fases, para un sólido insoluble..	145
Figura 56:	Curva de secado en condiciones constantes.	147
Figura 57:	Curva de Régimen de Secado..	149
Figura 58:	Diferentes tipos de curvas de secado.	150
Figura 59:	Representación de zona constante en curva de secado.....	153
Figura 60:	Esquema de un equipo de destilación por arrastre con vapor.....	154
Figura 61:	Esquema de un equipo de destilación simple.	155
Figura 62:	Esquema de un equipo de destilación fraccionada.	156
Figura 63:	Esquema de columna y platos de destilación.....	157
Figura 64:	Esquema de columna de platos sencilla.....	158
Figura 65:	Nomenclatura utilizada en los pisos o platos del sector de enriquecimiento.....	159
Figura 66:	Representación de las corrientes que entran y abandonan el plato n en el diagrama de equilibrio T-X-Y.....	160
Figura 67:	Esquema básico de una columna para realizar los balances de materia.	161
Figura 68:	Esquema del plato de alimentación.	163
Figura 69:	Pasos para la construcción de diagrama de Mc Cabe-Thiele.....	165
Figura 70:	Cálculo de número de pisos teóricos según el método gráfico de Mc Cabe-Thiele.	166
Figura 71:	Influencia de la razón de reflujo en el número de platos.	167
Figura 72:	Diagrama de flujo para el cálculo de difusión mediante la ecuación de Hirshfelder....	169
Figura 73:	Simulación efectuada con el aplicativo 001.	172

Figura	Descripción	Pág.
Figura 74:	Diagrama de flujo para el cálculo de difusión mediante la ecuación de Fuller.	173
Figura 75:	Simulación efectuada con el aplicativo 002..	176
Figura 76:	Diagrama de flujo para el cálculo de difusión mediante la interpolación de Hirshfelder.....	177
Figura 77:	Simulación efectuada con el aplicativo 003.	181
Figura 78:	Diagrama de flujo para el cálculo de difusión mediante la ecuación de Wilke-Chang.	182
Figura 79:	Simulación efectuada con el aplicativo 004.	185
Figura 80:	Diagrama de flujo para el cálculo de coeficientes globales.	187
Figura 81:	Simulación efectuada con el aplicativo 005..	191
Figura 82:	Diagrama de flujo para el cálculo de etapas en una operación de absorción.....	193
Figura 83:	Figura ilustrativa para el problema 8.2.	195
Figura 84:	Simulación efectuada con el aplicativo 006.	197
Figura 85:	Diagrama de flujo para el cálculo de altura de empaquetamiento de una torre de humidificación.....	198
Figura 86:	Figura ilustrativa del problema de cálculo 7.11.....	201
Figura 87:	Simulación efectuada con el aplicativo 007..	203
Figura 88:	Diagrama de flujo para el cálculo de platos para un proceso de destilación..	204
Figura 89:	Figura ilustrativa del problema de cálculo 21.2.....	207
Figura 90:	Figura ilustrativa del problema de cálculo 21.2.	208
Figura 91:	Simulación efectuada con el aplicativo 008..	209
Figura 92:	Diagrama de flujo para el cálculo de tiempo de secado.....	210
Figura 93:	Figura ilustrativa de una Curva típica de rapidez de secado. Condiciones de secado constantes.	212
Figura 94:	Figura ilustrativa del problema de cálculo 12.3, Grafica X1. Relación de X vs 1/N....	213

Figura	Descripción	Pág.
Figura 95:	Simulación efectuada con el aplicativo 009.	214
Figura 96:	Simulación efectuada con el aplicativo 009.. . . .	215
Figura 97:	Simulación efectuada con el aplicativo 009.	215
Figura 98:	Simulación efectuada con el aplicativo 009.	216
Figura 99:	Simulación efectuada con el aplicativo 009.. . . .	216
Figura 100:	Simulación efectuada con el aplicativo 009.	217
Figura C1:	Carta psicrometrica SI.....	C-1
Figura C1:	Carta psicrometrica Sistema Ingles.....	C-2
Figura D-1:	Imagen ilustrativa para la ejecución adecuado de los aplicativos de transferencia de masa...	D-1
Figura D-2:	Imagen ilustrativa para la ejecución adecuado de los aplicativos de transferencia de masa...	D-1
Figura D-3:	Imagen ilustrativa para la ejecución adecuado de los aplicativos de transferencia de masa...	D-2
Figura D-4:	Imagen ilustrativa para la ejecución adecuado de los aplicativos de transferencia de masa...	D-2
Figura D-5:	Imagen ilustrativa para la ejecución adecuado de los aplicativos de transferencia de masa...	D-2
Figura D-1:	Descripción de las variables de la ecuación de Hirschfelder con sus respectivas unidades.....	D-4
Figura D-2:	Cuadro de texto para el ingreso de la temperatura	D-5
Figura D-3:	Cuadro de texto para el ingreso de la presión.....	D-5
Figura D-4:	Cuadro de texto para el ingreso de algún valor experimental de las sustancias a evaluar.	D-5
Figura D-5:	Selección de las dos sustancias a ser evaluadas.....	D-6

Figura	Descripción	Pág.
Figura D-6:	Aplicativo ejecutado al presionar el botón de calcular.....	D-6
Figura D-7:	Insertar constantes de una sustancia que no se encuentre en el listado predeterminado.....	D-7
Figura D-8:	Descripción de las variables de la ecuación de Fuller con sus respectivas unidades.	D-8
Figura D-9:	Cuadro de texto para el ingreso de la temperatura..	D-9
Figura D-10:	Cuadro de texto para el ingreso de la presión.....	D-9
Figura D-11:	Cuadro de texto para el ingreso de algún valor experimental de las sustancias a evaluar.	D-9
Figura D-12:	Selección de las dos sustancias a ser evaluadas.....	D-9
Figura D-13:	Aplicativo ejecutado al presionar el botón de calcular.....	D-10
Figura D-14:	Insertar constantes de una sustancia que no se encuentre en el listado predeterminado.....	D-11
Figura D-15:	Descripción de las variables de la ecuación de Extrapolación de Hirschfelder con sus respectivas unidades.....	D-12
Figura D-16:	Cuadro de texto para el ingreso de la temperatura..	D-13
Figura D-17:	Cuadro de texto para el ingreso de la presión.....	D-13
Figura D-18:	Cuadro de texto para el ingreso de algún valor experimental de las sustancias a evaluar.....	D-13
Figura D-19:	Selección de las dos sustancias a ser evaluadas.....	D-13
Figura D-20:	Aplicativo ejecutado al presionar el botón de calcular.....	D-14
Figura D-21:	Descripción de las variables de la ecuación de Wilke-Chang con sus respectivas unidades..	D-15
Figura D-22:	Cuadro de texto para el ingreso de la temperatura.	D-16
Figura D-23:	Cuadro de texto para el ingreso de la viscosidad.....	D-16

Figura	Descripción	Pág.
Figura D-24:	Cuadro de texto para el ingreso de algún valor experimental de las sustancias a evaluar.....	D-16
Figura D-25:	Selección de las dos sustancias a ser evaluadas.....	D-17
Figura D-26:	Aplicativo ejecutado al presionar el botón de calcular.....	D-18
Figura D-27:	Insertar constantes de una sustancia que no se encuentre en el listado predeterminado.....	D-19
Figura D-28:	Cuadro de texto para ingreso de kG.	D-20
Figura D-29:	Cuadro de texto para ingreso de kL.....	D-21
Figura D-30:	Cuadro de texto para ingreso de la constante de Henry.....	D-21
Figura D-31:	Cuadro de texto para ingreso de la concentración en el líquido.	D-21
Figura D-32:	Cuadro de texto para ingreso de la presión parcial del gas.....	D-21
Figura D-33:	Aplicativo 005 ejecutado.....	D-22
Figura D-34:	Ejemplo de diagrama McCabe-Thiele para absorción.....	D-23
Figura D-35:	Cuadro de texto para ingreso de fracción molar inicial en corriente gaseosa.....	D-25
Figura D-36:	Cuadro de texto para ingreso de fracción molar inicial en corriente líquida.	D-25
Figura D-37:	Cuadro de texto para ingreso de remoción en corriente gaseosa.....	D-25
Figura D-38:	Cuadro de texto para ingreso de flujo de aire.....	D-25
Figura D-39:	Cuadro de texto para ingreso de relación de pendiente mínima L_{smin}	D-25
Figura D-40:	Cuadro de texto para ingreso de la constante de Henry para fracciones molares. .	D-25
Figura D-41:	Aplicativo 006 ejecutado.....	D-25
Figura D-42:	Ejemplo de un gráfico mostrando la construcción del método de Mickley.....	D-26
Figura D-43:	Cuadro de texto para ingreso de temperatura de entrada de agua	D-27
Figura D-44:	Cuadro de texto para ingreso de temperatura de salida de agua.	D-27
Figura D-45:	Cuadro de texto para ingreso de flujo de agua.	D-27
Figura D-46:	Cuadro de texto para ingreso de temperatura de entrada de aire.	D-28

Figura	Descripción	Pág.
Figura D-47:	Cuadro de texto para ingreso de Humedad de ingreso de aire.....	D-28
Figura D-48:	Cuadro de texto para ingreso de flux molar de aire.....	D-28
Figura D-49:	Cuadro de texto para ingreso de la relación kya.....	D-28
Figura D-50:	Cuadro de texto para ingreso de la relación Gs/Gsmin..	D-28
Figura D-51:	Aplicativo 007 ejecutado.....	D-29
Figura D-52:	Pasos para la construcción de diagrama de Mc Cabe-Thiele..	D-31
Figura D-53:	Cuadro de texto para ingreso de flujo de entrada.	D-32
Figura D-54:	Cuadro de texto para ingreso del factor la fracción del líquido de alimentación. ..	D-32
Figura D-55:	Cuadro de texto para ingreso de la fracción molar de alimentación.....	D-32
Figura D-56:	Cuadro de texto para ingreso de la fracción molar de agotamiento.....	D-32
Figura D-57:	Cuadro de texto para el ingreso de la fracción molar de destilado.	D-32
Figura D-58:	Cuadro de texto para el ingreso del valor del orden de la volatilidad relativa (α). ..	D-33
Figura D-59:	Cuadro de texto para el ingreso del valor del reciclo..	D-33
Figura D-60:	Aplicativo008 ejecutado.....	D-33
Figura D-61:	Cuadro de texto para el ingreso de la Humedad inicial.	D-35
Figura D-62:	Cuadro de texto para el ingreso de la Humedad final.....	D-35
Figura D-63:	Cuadro de texto para el ingreso de la relación de kilogramo de solido seco por metro cuadrado.....	D-35
Figura D-64:	Botón ingresar datos.....	D-35
Figura D-65:	Cuadro para el ingreso de data de humedad.	D-36
Figura D-66:	Cuadro para el ingreso de velocidad de secado.	D-36
Figura D-67:	Aplicativo 009 ejecutado.....	D-37

INTRODUCCIÓN

La mayor parte de procesos químicos requieren de una purificación de materias primas o separación componentes ya sea al inicio, al final o en puntos intermedios del proceso; en los casos antes mencionados las operaciones de transferencia de masa son muy utilizadas para tales fines.

Estos procesos de purificación o separación suponen altos costos los cuales son dependientes directamente del grado de separación (o pureza) requerido. A nivel de industrial se desarrollan diversos procesos que utilizan operaciones de transferencia de masa entre las que podemos mencionar: la obtención de aguardiente por destilación, secado de café y remoción de materiales en aguas contaminadas, entre otros.

Muchos de los problemas de cálculo relacionados con los procesos de transferencia de masa, requieren de la utilización de métodos numéricos, cálculo de funciones complejas, resolución de ecuaciones y funciones matemáticas complejas para su resolución. Por ello se hace importante contar con una herramienta rápida, eficiente y confiable que contribuya a la resolución matemática de los problemas planteados con anterioridad. Sería una tarea tediosa que consumiría mucho tiempo y recursos el tratar de resolver los problemas de transferencia de masa sin contar con una herramienta computacional adecuada.

El desarrollo en la informática actual, ha permitido el avance de entornos de programación tales como Matlab, Scilab, Matemática, GNU Octave, etc. que cuentan con herramientas que facilitan el análisis de datos, así como el numérico. Dichas herramientas de programación se vuelven un instrumento importante para el Ingeniero Químico a la hora de resolver problemas complejos especialmente aquellos relacionados con los procesos de transferencia de masa.

Las herramientas de programación por lo general incluyen funciones que permiten realizar en un corto tiempo procesos de cálculo que normalmente demandarían un tiempo largo para ser resueltos o bien realizar operaciones matemáticas repetitivas, acortando así esfuerzos, economizando recursos y presentando los resultados de manera rápida y facilitando el análisis por parte del usuario.

Los softwares tales como Maple, Matlab, Mathematica y Aspen, entre otros, son entornos con herramientas potentes para ingenieros; sin embargo, todos en su mayoría requieren de una licencia comprada para poder ser utilizados. Pero también existen softwares con licencias gratuitas, entre ellos Python, GNU Octave, Scilab, etc.

Scilab es un software de código libre para computación numérica que permite desarrollar aplicaciones ingenieriles y científicas, al igual que los softwares que requieren licencias de pago, este cuenta con herramientas para manejo de datos, herramientas para simulación de procesos (Xcos), funciones para análisis estadísticos, procesamiento de señales y desarrollo de aplicaciones, entre otros.

Scilab cuenta con herramientas para realizar procesos de cálculo, programación y simulación avanzados, además tiene una biblioteca muy completa de documentación sobre la utilización de sus comandos, se puede instalar en varios idiomas y programadores terceros pueden ayudar en el desarrollo de mejoras (en el código base) por ser código libre.

Cabe mencionar que, en la Universidad de El Salvador, Escuela de Ingeniería Química e Ingeniería de Alimentos, el plan de estudio de la carrera de Ingeniería Química data del año 1998, y no se presenta un enfoque a la utilización de herramientas computacionales tales como las que se mencionaron con anterioridad, razón por lo cual se ve necesario la creación de aplicativos y un manual de operación, que contribuyan a mejorar el proceso de enseñanza y aprendizaje en la asignatura Operaciones Unitarias III (Transferencia de Masa).

Durante el desarrollo del presente trabajo de graduación, se elaboraron los aplicativos y un manual de operación, ambos desarrollos contribuirán a la resolución de problemas relacionados con la transferencia de masa, así como la descripción de las metodologías, y variables utilizadas.

Dentro de las temáticas que se incluirán en el manual podemos mencionar: cálculo de coeficientes de transferencia de masa, problemas de transferencia en masa en procesos gas-líquido, problemas de transferencia de masa en proceso solido-líquido, entre otros.

En una fase inicial se estudió detalladamente el potencial que tiene Scilab como entorno para computación numérica, se definirá las ecuaciones relevantes que definan los modelos matemáticos que describen los problemas de transferencia de masa en operaciones tales como humidificación, secado, absorción, destilación, etc. Además, se analizarán las variables operativas que inciden en el proceso y posteriormente se desarrollarán aplicativos para resolución de diferentes problemas relacionados con los procesos de transferencias de masa.

Para verificar la pertinencia de los cálculos se compararon las respuestas obtenidas al utilizar los aplicativos con las respuestas de problemas propuestos en diferentes libros de texto de la asignatura transferencia de masa; de este modo se verificará la exactitud y el correcto funcionamiento de las aplicativos elaborados.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL:

- I. Desarrollar un manual técnico para complementar el proceso de enseñanza aprendizaje de la cátedra de Operaciones Unitarias III de Ingeniería Química de la Universidad de El Salvador a través de la herramienta de simulación utilizando el software libre Scilab.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- I. Desarrollar líneas de código aplicadas a fenómenos y procesos de transferencia de masa contenidos en la asignatura de Operaciones Unitarias III, de la carrera de Ingeniería Química, de la Universidad de El Salvador.
- II. Seleccionar los fenómenos más representativos contenidos en la asignatura Operaciones Unitarias III de la carrera de Ingeniería Química, de la Universidad de El Salvador, esta para elaborar algoritmos de programación que permitan el desarrollo y resolución de problemas relacionados a dichas temáticas.
- III. Aplicar los algoritmos de programación más adecuados para resolver los problemas y fenómenos de transferencia de masa seleccionados.

CAPITULO I.

REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.

1.1 INTRODUCCIÓN A LA SIMULACIÓN.

La simulación se define como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos. La solución de dichos modelos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permite tener un mejor conocimiento del comportamiento del proceso, (Martínez, 2000).

La definición de simulación más utilizada, se refiere a técnicas cuantitativas que utilizan un modelo matemático computarizado para presentar la toma real de decisiones bajo condiciones de incertidumbre, con objeto de evaluar alternativas de acciones con base a hechos o hipótesis. (I. Hernández, 2013).

En base a los conceptos mencionados con anterioridad podemos concluir que la simulación, es una técnica que imita el funcionamiento de sistemas reales, al crear un conjunto de hipótesis acerca del funcionamiento del sistema, expresándolo en relaciones matemáticas o lógicas.

1.1.2 HISTORIA DE LA SIMULACIÓN.

Los orígenes de la simulación se remontan a la segunda guerra mundial cuando dos matemáticos de la época, J.V. Neumann y S. Ulam, tenían como reto la resolución de problemas relacionados con el comportamiento de los neutrones. Los experimentos basados en evidencia experimental y/o empírica resultaban de elevado costo y en muchas ocasiones el problema era demasiado complejo para ser abordado por técnicas analíticas. Donde el primer despliegue a gran escala de una simulación fue el proyecto Manhattan, en el año de 1980, para la recreación de una detonación nuclear.

Durante la guerra fría (1947 – 1985) se intensificó el uso de la simulación para la resolución de problemas de carácter militar, trayectorias de satélites, guías de misiles, etc. Muchos de estos problemas requirieron de soluciones mediante el uso de ecuaciones diferenciales de alto grado de dificultad. Para, resolver esta situación se utilizaron computadoras analógicas para la resolución de los modelos matemáticos antes mencionados.

Durante los años 80 la simulación se potenció gracias a la aparición de computadores personales, además, el uso de los simuladores se generalizó en prácticamente todos los ámbitos de la ciencia e ingeniería.

La madurez de la simulación se dio en los años 90, ya que muchas empresas comenzaron a utilizar la simulación en etapas tempranas de sus proyectos para predicción de lugares que presentaban un mayor impacto en sus actividades, esto unido con la llegada de procesadores de alta velocidad favoreció el desarrollo y la utilización de aplicaciones informáticas destinadas a la simulación.

En la actualidad la simulación se realiza mediante computadoras y software diseñados específicamente para tal fin, siendo una poderosa técnica de resolución a problemas reales, experimentando y utilizando modelos matemáticos, de tal forma que con los resultados obtenidos se pueda obtener una buena estimación de las características y comportamientos reales del sistema.

Para la aplicación a problemas reales se realizan una serie de simplificaciones que toman la forma de relaciones matemáticas o lógicas, constituyendo un modelo que se usa para comprender el comportamiento del sistema real. Se trata de trasladar la realidad palpable a reglas matemáticas que representen de forma más fidedigna el fenómeno a estudiar.

Los modelos matemáticos que rigen los fenómenos reales, resultan ser en muchas ocasiones simples, siendo posible utilizar métodos matemáticos para obtener información exacta sobre su comportamiento. Tratan de generar una muestra de escenarios representativos para un modelo en el que una relación completa de todos los estados posibles. Sin embargo, la mayoría de los problemas en el mundo real no pueden representarse fácilmente utilizando modelos analíticos y se procede a estudiar los modelos mediante la simulación. (M. Ferreiro, 2011).

1.1.3 APLICACIONES DE LA SIMULACIÓN.

Aun conociéndose los enormes beneficios de la simulación como: proporcionar muchos tipos de alternativas a evaluar, reducir costos o dar un control total sobre el tiempo debido a que un fenómeno se puede acelerar, entre otros. Tomó tiempo que las empresas llegarán a utilizar la simulación como herramienta para la toma de decisiones reales, ya era muy difícil y costoso la validación del modelo matemático. Desde su aparición, la técnica de simulación ha ocupado un lugar de privilegio entre las herramientas de investigaciones de operaciones.

En general se puede hablar de tres tipos de aplicaciones de la simulación (M. Ferreiro, 2011):

- **Experimentación:** el cual es un modelo que es necesario cuando la experimentación directa sobre el sistema real es muy costosa y cuando el objetivo es el diseño de un nuevo sistema, dado que el modelo puede ir modificándose fácilmente hasta obtener el comportamiento deseado.
- **Predicción:** el modelo se puede usar para pronosticar el comportamiento real bajo ciertos estímulos.
- **Enseñanza:** el cual ayuda en la enseñanza-aprendizaje en temas donde realizar una experimentación es difícil por costos elevados.

1.1.3.1 APLICACIONES DE LA SIMULACIÓN EN INGENIERÍA.

Las áreas de aplicación de la simulación son muy diversas, basta mencionar solo algunas de ellas: análisis de impacto ambiental, diseño de manufacturas, análisis y diseño de comunicaciones, análisis de equipos de cómputo, capacitación en el área de operaciones, análisis financieros de sistemas económicos, entre otras.

La simulación puede ser utilizada en las diferentes etapas de diseño, realización y mejora de procesos, llegándose con esto a predecir el comportamiento del sistema al modificar sus variables.

1.1.4 FUNDAMENTOS PARA LA SIMULACIÓN.

La simulación inicia con la identificación y establecimiento de un proceso real de cualquier naturaleza para reproducir artificialmente un fenómeno, mediante algoritmos matemáticos por lo que estas reproducciones para la experimentación, tienen factores que la determinan que son:

- **Restricciones:** de manera general se puede decir que las restricciones son relaciones entre las variables de decisión y magnitudes que dan sentido a la solución del problema y las acotan a valores factibles, asimismo la construcción de herramientas matemáticas que lo restrinjan o los modelen.

Las restricciones son las limitaciones de operaciones que son impuestas a unas variables, en un solo sentido, sin afectar los límites del sistema. Estas pueden ser impuestas por el diseñador o la naturaleza del sistema.

- **Variables:** son las decisiones que afecta el objetivo del sistema, de manera directa a la optimización del sistema, por lo que sobre ellas se tiene que manejar alternativas.

Para la formulación de un modelo de simulación, es necesario especificar las relaciones entre las variables que afectan el sistema. Los modelos de simulación incluyen variables de decisión, variables incontrolables y variables dependientes.

Las variables de decisión están controladas por la persona que toma la decisión y suelen cambiar entre una y otra simulación, las variables incontrolables son eventos fortuitos que escapan del control de quienes toman las decisiones y las variables dependientes reflejan los valores de las variables de decisión y los de las variables incontrolables.

- **Modelo:** el modelo es una representación simplificada de la realidad, diseñada para representar, conocer y predecir propiedades del objeto real.

Los modelos de simulación se suelen clasificar de distintos tipos de acuerdo con criterios:

- I. Modelo continuo:** se define por ecuaciones diferenciales, ya que estas permiten conocer el comportamiento de las variables en un lapso continuo (dependientes de la variable tiempo).
- II. Modelo discreto:** en este tipo de simulación los cambios de estado del sistema pueden presentarse por medio de ecuaciones evaluadas en un punto determinado.
- III. Modelos dinámicos:** el estado del sistema evaluado varía a través de tiempo.
- IV. Modelos estáticos:** este tipo de simulación representa un resultado bajo un conjunto de situaciones o condiciones determinadas.
- V. Modelo determinístico:** son relaciones constantes entre los cambios de las variables del modelo, es decir que tanto las variables de entrada como de salida son constantes.
- VI. Modelo probabilístico:** tiene por lo menos una variable de entrada, la cual es independiente, y las variables de salida, que son dependientes. Ambas variables son aleatorias.

1.1.5 ETAPAS PARA EL DESARROLLO DE LA SIMULACIÓN DE UN PROCESO QUÍMICO.

En la preparación de la simulación de un proceso químico existen ciertos pasos a seguir en pequeña o gran escala. Los cuales podemos apreciar a continuación, véase figura 1.

1	• Identificación y formulación del problema
2	• Definición del sistema.
3	• Formulación del modelo.
4	• Localizar los datos necesarios.
5	• Seleccionar el paquete de simulación.
6	• Adquisición de los recursos computacionales.
7	• Experimentación.
8	• Interpretación.
9	• Implementación.
10	• Documentación para el uso apropiado de las herramientas seleccionadas.

Figura 1: Etapas para el desarrollo de simulación. (Chemical Engineering, 1994).

- a) **Identificación y formulación del problema:** en este paso debe quedar perfectamente establecido el objeto de la simulación. Implicando la recopilación de datos que describen las diferentes variables de entrada e identificación de sus límites. Habrá entonces que escoger algo que hará la diferencia en términos de ganar nuevas percepciones o de ofrecer mejoras importantes a los problemas que serán sometidos a simulación.
- b) **Definición del sistema:** el sistema en el cual se va a realizar la simulación debe estar perfectamente definido, identificando dónde estará la frontera del sistema a estudiar y las interacciones con el exterior que serán consideradas.
- c) **Formulación del modelo:** comienza con el desarrollo de un modelo simple que captura los aspectos relevantes del sistema real, en los que éstos dependen de la formulación del problema.

El arte de la modelación (numérica o matemática) consiste en la habilidad para analizar un problema, resumir sus características esenciales, seleccionar y modificar las suposiciones básicas que caracterizan al sistema, y luego enriquecer y elaborar el modelo hasta obtener una aproximación útil.

- d) **Localizar los datos necesarios:** el diseño y simulación de procesos químicos necesita de datos de propiedades físicas, termodinámicas, cinéticas y de transporte, los cuales se calculan a partir de modelos de propiedades con base teórica o empíricos.

La representación precisa de las propiedades es fundamental para la simulación de procesos. El usuario debe seleccionar un modelo para representar las propiedades, el uso de un modelo inadecuado puede cambiar los resultados de la simulación y perder validez.

Los errores en la simulación por una mala selección del modelo de propiedades físicas no se pueden detectar o prevenir fácilmente, los resultados parecen correctos, pero son erróneos, (Chemical Engineering Progress, octubre, 1996).

Se encontrará que los resultados de la simulación serán más sensitivos para ciertas variables que otras. Habrá de intentar ajustar algunos de los parámetros desconocidos y considerar la importancia que representan para el proceso. Este paso se denomina: *Análisis sensorial*.

Al diseñar un nuevo proceso o modificar uno existente es posible recolectar los mejores datos disponibles para las variables o diseñar un proceso para acomodar las posibles variaciones en los datos.

- e) **Seleccionar el paquete de simulación:** la simulación es implementada utilizando algún lenguaje de computación. Existen lenguajes específicos de simulación que facilitan esta tarea; también, existen programas que ya cuentan con modelos implementados para casos especiales.

Los simuladores de procesos en estado estacionario pueden ser fácilmente incorporados en los procesos que se desarrollan a nivel de las operaciones unitarias, así como también

en cálculos diversos en reactores químicos. Además, contienen paquetes termodinámicos capaces de representar el comportamiento de sistemas en equilibrio termodinámico, así como de diferentes equipos utilizados. Las opciones para uso de simuladores de procesos dinámicos son limitados, debido a las siguientes razones:

- Incorporación de técnicas de simulación robustas para calcular la respuesta de los procesos en función del tiempo tienden a ser complejos.
- Es difícil diseñar e implementar simuladores dinámicos para uso general debido a variables específicas para cada equipo.
- Existe una carencia de apreciación del valor de la simulación dinámica (Sistema que permite conocer los cambios o alteraciones de variables en el tiempo).

f) **Adquisición de los recursos computacionales:** el paquete de *simulación* seleccionado en la etapa anterior determinará los recursos computacionales, o en ciertos casos requerimientos de sistema en relación a software y hardware seleccionados. Algunos paquetes requerirán una amplia gama de recursos, tales como estaciones de trabajo complejas, mientras que otros tan solo requerimientos generales de una computadora personal.

El recurso informático seleccionado para el desarrollo de los módulos de simulación de procesos en este trabajo es la herramienta de computación numérica Scilab, el cual posee una extensa librería matemática y herramientas de aplicación en ingeniería, lo facilita la incorporación de los modelos de simulación y su representación e interfaz gráfica con el usuario.

g) **Experimentación:** en ésta etapa se realizan las simulaciones de acuerdo al diseño previo. Los resultados obtenidos son debidamente recolectados y procesados.

h) **Interpretación:** se analiza la sensibilidad que tiene el modelo con respecto a los parámetros que tienen asociados la mayor incertidumbre. El modelo será sensible a determinados parámetros si para pequeños cambios en los valores de los mismos las

respuestas varían notablemente. Si es así, se deberán recolectar datos adicionales para refinar la estimación de parámetros críticos.

- i) **Implementación:** el manejo de los simuladores desarrollados debe ser amigable, de tal forma que permita una fácil implementación y un uso adecuado, así como el aprendizaje y reconocimiento de las señales de error cuando las cosas no andan bien, ya que se corre el peligro debido al desconocimiento de las limitaciones y alcances del simulador utilizado, evitando sobrepasar los límites para los cuales ha sido diseñado. Para los programas de computación (simulación) comerciales el entrenamiento para la implementación de softwares de simulación es impartido mediante un curso desarrollado por la compañía que lo ha vendido, acompañado por un manual de usuario, tutoriales, soporte técnico y actualizaciones de algunas aplicaciones.

- j) **Documentación para el uso apropiado de las herramientas seleccionadas):** incluye la elaboración de la documentación técnica y manuales de uso de los equipos o programas desarrollados. La documentación técnica debe contener una descripción detallada del modelo desarrollado y de los datos requeridos para operatividad el modelo; también se debe incluir los cambios implementados en las etapas del desarrollo. Esta documentación será posteriormente de utilidad para futuros problemas que se presenten y de mejoramientos al proceso.

Para la simulación de procesos existe una clasificación de distintas técnicas acorde a ciertos criterios generales y particularidades el sistema en estudio, las cuales se presentan en el siguiente apartado.

1.1.6 CLASIFICACIÓN DE LAS TÉCNICAS DE SIMULACIÓN.

Podemos considerar a la simulación como aquella en la cual proponemos ciertos valores de entrada al simulador o programa de simulación para obtener resultados o valores de salida, tales que estiman el comportamiento del sistema real bajo esas condiciones.

Las técnicas de simulación pueden clasificarse según diversos criterios, por ejemplo, según el tipo de procesos (continuo o discontinuo), si involucra el tiempo (estacionario o dinámico),

las técnicas a emplearse en los módulos para la simulación de procesos termodinámicos son en su mayoría del tipo en estado estacionario, así mismo los utilizados para la simulación de la cinética de la reacción son del tipo de simulación dinámica. En la tabla 1.1 se presenta un detalle de la clasificación.

Tabla 1.1: Clasificación de las técnicas de simulación de procesos.

CLASIFICACIÓN	TIPOS	DESCRIPCIÓN
Tipo de Variable	Cualitativa	Estudia las relaciones causales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema.
	Cuantitativa	Describe numéricamente el comportamiento de un proceso, a través de un modelo matemático del mismo.
	Estado estacionario	Resuelve los balances de un sistema no involucrado la variable temporal.
	Estado dinámico	Plantea los balances en su dependencia con el tiempo.
Tipo de fenómeno	Determinístico	El sistema no contiene ningún elemento aleatorio, las ecuaciones dependen de parámetros y variables conocidas con certeza.
	Estocástico	El sistema posee ciertas variables sujetas a incertidumbre, que puede ser expresada por funciones de distribución de probabilidad.
Tipo de evento	Eventos discretos	Las relaciones funcionales del sistema solo permiten que el estado varíe en un conjunto finito (contable) de puntos temporales.
	Eventos continuos	Las relaciones funcionales entre las variables del sistema sólo permiten que el estado evolucione en el tiempo en forma continua.

Fuente: Martínez, 2000.

1.2 SIMULACIÓN DE PROCESOS EN INGENIERÍA QUÍMICA.

La simulación de un proceso químico tiene como objetivo representar las transformaciones químicas o físicas a través de un modelo matemático que implica la relación de diversas variables tales como: presión, temperatura, composiciones, etc.

Dichos modelos pueden ser utilizados en procesos que involucren balances de masa, balances energéticos asociados con el equilibrio de fases, así como con la cinética de las ecuaciones de reacciones químicas.

Todo se hace con el fin de establecer (predecir) un comportamiento para un proceso determinado, al modificar las variables involucradas, ya sea para predecir la operación o bien para mejorar el proceso, como también el cálculo de dimensiones y costos de equipo. Y así poder efectuar una evaluación económica preliminar del costo del proceso a implementar, en el que algunos datos de los equipos utilizados son de conocimiento general.

Los modelos matemáticos utilizados en la simulación incluyen ecuaciones lineales, no lineales y diferenciales, dichas ecuaciones se usan para simular el comportamiento de equipos, sus especificaciones y las propiedades fisicoquímicas.

La simulación puede estar orientada hacia procesos químicos desde la óptica de un punto de vista académico desarrollando en este caso programas (aplicativos), capaces de representar diversos procesos químicos, para ser analizados y estudiados entre las áreas de interés. Para realizar la simulación de procesos tenemos: Transferencia de masa, Termodinámica Química e Ingeniería de las Reacciones Químicas, entre otras, aplicando una metodología que permita incorporar las herramientas de simulación en el proceso de enseñanza - aprendizaje en diversas asignaturas de la carrera de Ingeniería Química e Ingeniería de Alimentos.

En el proceso de enseñanza - aprendizaje desarrollado en la carrera Ingeniería Química existen tres tipos de problemas que pueden resolverse por medio de simulación de procesos:

- **Simulación de un problema (análisis):** donde son especificadas las variables asociadas con las corrientes de alimentación y las variables del diseño de maquinaria de operaciones unitarias. Las incógnitas son las variables asociadas con todas las corrientes adicionales y con las corrientes de producto que salen del proceso. Es decir, se conocen las alimentaciones y los parámetros de los equipos, y las incógnitas son las condiciones de las corrientes de salida.
- **Problemas de diseño:** es similar al problema de simulación, excepto que algunas de las variables de diseño no están especificadas y se imponen restricciones a algunas variables de las corrientes (regularmente sólo restricciones de igualdad). El número de restricciones es igual al número de variables de diseño sin especificar. En el diseño se conocen las alimentaciones y las condiciones principales de las corrientes de salida, y las incógnitas son las dimensiones y especificaciones de algunos parámetros de los equipos.
- **Problemas de optimización:** las variables asociadas con las corrientes de alimentación y las variables de diseño pueden no estar especificadas. Por lo cual las variables sin especificar se determinan de modo que se minimiza la función objetivo (ecuación que será optimizada dadas las limitaciones o restricciones determinadas). En este caso, se pueden especificar restricciones de igualdad y desigualdad. (Martínez, 2000)

La simulación de procesos químicos es una herramienta moderna para la solución de los problemas en un proceso y permite verificar el comportamiento de dicho proceso al modificar una o más variables como la temperatura o presión, entre otras.

La variedad de aplicaciones orientadas a la simulación de procesos es grande. En el pasado sólo era usada la teoría de los sistemas (Estudio bibliográfico de los principios aplicables a los sistemas en cualquier campo de investigación) y el diseño de procesos, ahora se manejan simuladores en ingeniería ambiental, ingeniería de procesos, investigaciones científicas y tecnológicas.

En las diferentes etapas de un proyecto, puede haber necesidad de realizar simulaciones con diferentes niveles de sofisticación, tal como se describe a continuación:

- I. **Investigación y desarrollo:** prueba e factibilidad técnica y económica del proyecto.
- II. **Etapla crítica en la toma de decisiones:** evaluación de diferentes alternativas de procesos y condiciones de operación y se toman decisiones.
- III. **Planta piloto:** obtener mejores estimaciones de las condiciones de operación a escala industrial.
- IV. **Diseño:** proporciona todos los datos de proceso requeridos para el diseño de los diferentes equipos.
- V. **Simulación de plantas existentes:** cuando es necesario cambiar las condiciones de operación, o cuando se quieren sustituir materias primas.

1.3 HERRAMIENTAS DE SIMULACIÓN.

Los simuladores son dedicados fundamentalmente a la industria con el objetivo de mejorar e incrementar su eficiencia, para hacer simulaciones de diferentes procesos antes de que ocurran en realidad, permitiendo así resultados que pueden ser analizados para una futura realización de los mismos.

Los simuladores son poderosas herramientas para el ámbito de ingeniería o científico, donde podemos encontrar diferentes softwares comerciales y de código abierto.

1.3.1 SIMULADORES COMERCIALES.

Existe una gran variedad de simuladores comerciales, algunos de las cuales son poderosas herramientas de cálculo, con inmensos bancos de datos que contienen las propiedades físicas de miles de compuestos y sustancias químicas, selección de modelos termodinámicos, cálculos de equipos (teóricos y reales), análisis de costos, estado de agregación y condiciones

de operación, que le dan al simulador versatilidad y un amplio espectro de aplicación. Entre los simuladores comerciales más utilizados en Ingeniería Química podemos mencionar (Mendivil, 2012):

I. HYSYS

Fue adquirido por AspenTech en el 2004 por lo que es desarrollado en la actualidad por Aspen Technology. Es un simulador bidireccional, ya que el flujo de información va en dos direcciones (al inicio y final del proceso). De esta forma, puede calcular las condiciones de una corriente de entrada a una operación a partir de las correspondientes a la corriente de salida sin necesidad de cálculos iterativos. Posee un entorno de simulación modular tanto para estado estacionario como para régimen dinámico.

Es un software orientado a la simulación de plantas petroquímicas y afines. HYSYS es un programa interactivo enfocado a la ingeniería de procesos y la simulación, que se puede utilizar para solucionar toda clase de problemas relacionados con procesos químicos. Este simulador cuenta con una interfaz muy amigable para el usuario, además de permitir el empleo de operadores lógicos y herramientas que facilitan la simulación de diversos procesos.

II. Aspen Plus

En 1970, investigadores del Laboratorio de Energía del Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT) diseñaron un programa prototipo para la simulación de procesos, al cual denominaron Sistema Avanzado para Ingeniería de Procesos (ASPEN). Este software ha sido comercializado desde 1980 por la compañía AspenTech.

AspenTech ha desarrollado muchos programas dentro del marco de la simulación de procesos químicos, entre ellos se destaca el paquete Aspen Engineering Suite, el cual básicamente está desarrollado para aplicaciones del campo de la ingeniería. Entre los diversos programas de este paquete se encuentran programas como Aspen Plus, el cual tiene la base de datos más amplia entre los simuladores de procesos comerciales.

Además, modela y simula cualquier tipo de proceso para el cual hay un flujo continuo de materiales y energía de una unidad de proceso a otra. Posee herramientas para cálculos de costes y optimizaciones del proceso, generación de resultados en forma gráfica y en tablas y otros.

III. CHEMCAD.

Fue desarrollado en 1984 cuando los profesores universitarios, Dr. Rudy Motard y el Dr. Ernest Henley formó un equipo para desarrollar un simulador de procesos para computadoras personales en la Universidad de Houston en Estados Unidos. El simulador fue vendido a la sección de software de McGraw Hill (COADE) y luego siguió siendo desarrollado y distribuido por Chemstations Inc.

CHEMCAD ha continuado evolucionando hasta convertirse en un paquete de módulos que abarca cálculo y diseño de intercambiadores de calor (CCTHERM), simulación de destilaciones dinámicas (CC-DCOLUMN), simulación de reactores por lotes (CC-ReACS), simulación de destilaciones por lotes (CCBATCH), simulación de redes de tuberías (CC-SAFETY NET), entre otros módulos.

Este simulador es muy usado para el diseño, operación y mantenimiento de procesos químicos en una gran variedad de industrias entre las que podemos mencionar:

- I. Exploración de petróleo y gas.
- II. Diferentes procesos químicos – industriales.
- III. Industria farmacéutica
- IV. Biocombustibles.

De forma general este software, es una herramienta de productividad, el cual cuenta con muchas ventajas entre las que cabe mencionar las siguientes:

- Incremento en la productividad por el uso de información obtenida a partir de la simulación diaria de cálculos relacionados con las condiciones de operación.
- Maximizar la rentabilidad de las operaciones por el diseño más eficiente de nuevos procesos y equipos.

- Reducción de costos e inversiones de capital por la optimización y solución de los cuellos de botella existentes en los procesos y en los equipos.

IV. SuperPro Designer

El simulador de Plantas de Tratamiento de Efluentes Industriales SuperPro Designer desarrollado por Intelligen, Inc. en Estados Unidos, es un simulador de procesos en Ingeniería Ambiental vinculado con el acondicionamiento de los efluentes líquidos, gaseosos y sólidos producidos en las distintas industrias de proceso. Incluye un balance de materia global de la planta con la posibilidad de un balance térmico, distintos modelos que representan las etapas de tratamiento de un efluente en particular, una salida con las corrientes intervinientes y sus parámetros asociados (presión, temperatura, densidad, caudales totales e individuales por componente), una salida con los costos de los equipos principales, un análisis global de costos asociados al sistema de tratamiento, una salida con el impacto ambiental de las corrientes que ingresan al sistema y un análisis de factibilidad económica de la alternativa planteada.

Posee un banco de datos de propiedades fundamentales (básicas y ambientales) de 350 componentes, las propiedades derivadas de las mismas son calculadas cuando la simulación lo requiere. Existe la posibilidad además de la incorporación de nuevos componentes a la base de datos o de modificar las propiedades relacionadas a los existentes. Incluye reactores químicos y biológicos, columnas de separación (cromatográficas y de intercambio iónico), secadores de fases y componentes, equipos de impulsión de gases y líquidos, entre otros (Palladino & Navarro, s.f).

V. PRO/II

El software PRO/II es desarrollado por Simulations Sciences en Estados Unidos, es un simulador de estado estacionario que posibilita un análisis operacional y diseño de proceso. Está diseñado para realizar cálculos rigurosos de balance de masa y energía para una amplia variedad de procesos químicos, desde la separación de gas y petróleo hasta la destilación reactiva (proceso donde ocurre simultáneamente una reacción química con separación de productos), PRO II ofrece a las industrias del procesamiento de sólidos, gas natural, petróleo,

químicos y polímeros la solución de simulación de procesos más integral disponible en la actualidad (Schneider Electric, s.f.).

1.3.2. SIMULADORES DE CÓDIGO ABIERTO.

Los simuladores de código abierto presentan una alternativa en comparación con los simuladores comerciales al momento de desarrollar proyectos y trabajos de Ingeniería Química, cuando se cuenta con presupuesto limitado, ya que estos no representan ningún costo para adquirirlos.

El código abierto promueve la colaboración entre usuarios, esta característica supone el desarrollo rápido y variado de muchas de herramientas. Por ejemplo, los usuarios de un determinado programa pueden realizar personalizaciones, solventar fallos o mejorar las funcionalidades básicas gracias a los miembros de las comunidades o foros, con los términos de licencia bajo la que se adquiere el software. Sin embargo, se han desarrollado pocos simuladores gratuitos, siendo los principales:

I. COCO Simulator

Es un simulador secuencial gratuito, de estado estacionario, desarrollado por la empresa Amsterchem con estándares abiertos CAPE-OPEN (Ingeniería de Procesos Asistida por Computadora). Incluye un entorno para diagramas de flujo de proceso, operaciones unitarias, paquete de cinética de reacciones y paquete termodinámico. Incluye también la funcionalidad para graficar distintos tipos de variables.

II. ChemSep

ChemSep es un simulador para las operaciones de destilación, absorción y extracción, con una interfaz fácil e intuitiva. Permite un máximo de 40 componentes y 300 etapas de equilibrio utilizando una base de datos que abarca más de 300 productos químicos. ChemSep viene incluido en la descarga de COCO y puede ser utilizado desde COFE (Interfaz gráfica de COCO).

Además, ofrece una amplia variedad de formas de analizar los resultados de la simulación, como McCabe-Thiele y diagramas operativos, e incluye un modo de exportación

completamente configurable para visualizar los resultados en una gran variedad de formatos, hoja de cálculo, texto, y html.

III. GNU Octave

El proyecto fue creado alrededor del año 1988, pero con una finalidad diferente: ser utilizado en un curso de diseño de reactores químicos. Posteriormente, en el año 1992, se decidió extenderlo, y comenzó su desarrollo a cargo de John W. Eaton. La primera versión fue lanzada el 4 de enero de 1993, donde un año más tarde, el 17 de febrero de 1994, apareció la versión 1.0.

GNU Octave es un programa y lenguaje de programación para realizar cálculos numéricos. Como su nombre indica, Octave es parte del proyecto GNU¹. Entre sus características, se puede destacar que ofrece un intérprete, que permite ejecutar órdenes en modo interactivo. Nótese que Octave no es un sistema de álgebra computacional, sino que está orientado al análisis numérico.

IV. Python

Python fue creado a finales de los ochenta por Guido van Rossum en el Centro para las Matemáticas y la Informática (CWI, Centrum Wiskunde & Informatica), en los Países Bajos, como un sucesor del lenguaje de programación ABC, capaz de manejar excepciones e interactuar con el sistema operativo Amoeba. Python es un lenguaje de programación multiparadigma. Esto significa que más que forzar a los programadores a adoptar un estilo particular de programación, permite varios estilos: programación orientada a objetos, programación imperativa y programación funcional.

Una característica importante de Python es la resolución dinámica de nombres; es decir, lo que enlaza un método y un nombre de variable durante la ejecución del programa (también llamado enlace dinámico de métodos). Otro objetivo del diseño del lenguaje es la facilidad

¹ GNU es un sistema operativo de tipo Unix desarrollado para el Proyecto GNU, y auspiciado por la Free Software Foundation. Está formado en su totalidad por software libre, mayoritariamente bajo términos de copyleft. GNU es el acrónimo recursivo de "GNU's Not Unix".

de extensión. Se pueden escribir nuevos módulos fácilmente en C o C++. Python puede incluirse en aplicaciones que necesitan una interfaz programable.

V. Scilab

Scilab es un software de código libre para computación para análisis numérico, con un lenguaje de programación de alto nivel para cálculo científico. Es desarrollado por Scilab Enterprises, compatible con la GNU. El cual posee su propio lenguaje de programación y editor llamado SciNotes.

1.3.3 VENTAJAS Y DESVENTAJAS DEL CÓDIGO LIBRE.

Como ya se mencionó previamente, el uso de los simuladores tanto en la industria donde se presenten cambios físicos o químicos, así como para fines académicos, resulta necesario puesto que es una herramienta de apoyo para el diseño, caracterización, optimización, monitoreo y estudio del funcionamiento de procesos químicos.

Entre las ventajas y desventajas que ofrece la simulación de procesos químicos con código libre se tiene véase la tabla 1.2:

Tabla 1.2: Ventajas y desventajas de las aplicaciones de código libre.

<u>VENTAJAS</u>	<u>DESVENTAJAS</u>
<p>I. No tiene un costo.</p> <p>II. El desarrollo de código abierto pertenece a la comunidad de proveedores de estos softwares, por lo que su desarrollo y actualizaciones dependen principalmente de ellos, ampliando así la confianza en la continuidad del programa.</p> <p>III. Programas más eficientes en el uso de recursos.</p> <p>IV. Capacidad para modificar el software de modo que se adapte a las necesidades específicas del usuario.</p>	<p>I. Sigue siendo una opción minoritaria entre los consumidores particulares.</p> <p>II. Algunos softwares, no está respaldado por grandes compañías que proporcione soporte técnico.</p> <p>III. No presentan una interface visualmente atractiva.</p> <p>IV. La inexistencia de cursos de capacitación para estos recursos.</p>

Fuente: Cerquera, 2013.

1.4. SCILAB.

Scilab es un recurso libre y software de código abierto para computación numérica proveyendo un entorno poderoso para ingeniería y aplicaciones científicas (Scilab.org).

Scilab es distribuido como un recurso de código libre bajo la licencia CeCILL (Compatible con GPL), y está disponible para descargarse de forma gratuita. Scilab está disponible para GNU / Linux, Mac OS y Microsoft Windows XP/Vista/7/8,10.

Scilab es competidor directo con entornos como GNU, Octave y Sage dos entornos de sintaxis similar a Scilab y con funciones que apenas difieren entre ellas.

1.4.1 HISTORIA DE SCILAB.

La historia del software Scilab comienza en los años 80, con el desarrollo de Blaise, un software de CACSD (Diseño de Sistemas de Control Asistido por Computadora) creado por el INRIA (Instituto Francés de Investigación en Ciencias de la Computación y Automatización) y desarrollado principalmente por François Delebecque y Serge Steer con el objetivo de proporcionar una herramienta en control automático para investigadores.

En 1984, el software Blaise fue distribuido durante algunos años por la empresa SIMULOG (Empresa especializada en Computación Científica), la cual se convirtiera en la primer Startup (Empresa emergente) de INRIA, que a principios de los 90, SIMULOG dejó de distribuir a Blaise por lo cual el nombre del programa se convirtió en Scilab y luego fue desarrollado por INRIA, dentro del Grupo Scilab compuesto por los seis siguientes investigadores: Jean-Philippe Chancelier de la ENPC (Escuela Nacional de Pueblos y Pueblos), François Delebecque, Claude Gómez, Maurice Goursat, Ramine Nikoukhah y Serge Steer.

Entonces el INRIA decidió distribuir Scilab como un software libre de código libre, siendo Scilab 1.1, la primera versión lanzada de Scilab, se colocó en un sitio FTP (Protocolo de Transferencia de Archivos) anónimo, el 2 de enero de 1994.

Scilab Group, a finales del año 2002 desarrollo la versión 2.7 de Scilab, esto con la colaboración activa de desarrolladores externos, distribuyendo código fuente² y binario³ a través de Internet. A comienzos de 2003, para tener un mayor número de personas que descargaran y usaran Scilab, todo esto para asegurar su futuro, desarrollo, mantenimiento, soporte y promoción, INRIA decidió crear el Consorcio Scilab con el apoyo de empresas y organizaciones académicas.

Por lo cual en el 2008 el Consorcio Scilab integra la red de investigación de Digiteo⁴, para proporcionar un entorno adecuado para el crecimiento sostenido de la operación. El software Scilab fue desarrollado, mantenido y promovido por el Consorcio Scilab dentro de Digiteo.

Desde el 2008 Scilab se distribuye bajo la licencia CeCILL⁵, una licencia de código libre compatible con GNU GPL⁶. La empresa Scilab Enterprises se fundó en junio de 2010 con el apoyo de INRIA, para garantizar el futuro del software desarrollado, Scilab Enterprises se ha encargado por completo de la edición y desarrollo de Scilab.

Basado en el modelo y crecimiento del código libre, Scilab Enterprises también ofrece servicios profesionales y soporte para Scilab. Después de 5 años de versiones de Scilab hechas por Scilab Enterprises, el equipo operativo se une a ESI Group (Proveedor de Prototipos Virtuales) mediante la adquisición de la compañía Scilab Enterprises.

² El código fuente de un programa informático (software) con un conjunto de líneas de texto con los pasos que debe seguir la computadora para ejecutar dicho programa.

³ El código binario es el sistema numérico usado para la representación de textos, o procesadores de instrucciones de computadora, el cual es un sistema numérico de dos dígitos, o bit: el "0" /cerrado/ y el "1" /abierto/.

⁴ Digiteo es una Red Temática de Investigación Avanzada (RTRA).

⁵ La CeCILL (acrónimo en francés de "CEA CNRS INRIA Logiciel Libre") es una licencia francesa de software libre adaptada tanto a leyes francesas como a los diversos tratados internacionales y compatible con la licencia GNU GPL.

⁶ Es una licencia de derecho de autor ampliamente usada en el mundo del software libre y código abierto, y garantiza a los usuarios finales (personas, organizaciones, compañías) la libertad de usar, estudiar, compartir y modificar el software.

Cabe mencionar que ESI Group es un proveedor pionero y líder mundial en prototipos virtuales, aprovechando la física de los materiales. El equipo sigue comprometido con un software Scilab de código libre para el cálculo numérico, con la experiencia de, ESI Group ya ha demostrado su compromiso con el software de código abierto para ingenieros y científicos.

1.4.2 ¿QUÉ PUEDE HACER SCILAB?

Scilab es un software matemático, con un lenguaje de programación de alto nivel, para cálculo científico, interactivo de código libre. Es un lenguaje de programación de alto nivel permitiendo acceso a avanzadas estructuras de datos, gráficas 2-D y 3D (scilab.org).

Scilab es catalogado como un lenguaje de programación con objetos dinámicos, el cual incluye cientos de funciones especializadas para computación numérica, organizadas en librerías llamadas toolboxes que cubren muchas áreas como: simulación, sistemas y control, optimización y procesamiento de señales. Tiene cerca de 13,000 archivos, más de 400,000 líneas de código (en C y Fortran), 70,000 líneas de código de Scilab (especializado en librerías); 80,000 líneas de ayuda en línea y 18,000 líneas de configuración de archivos (Campbell, Chancelier & Niloukhan, Modeling and Simulation in Scilab / Scicos, 2017). Es óptimo para trabajar en algebra línea y cálculo numérico.

Dentro de las funciones que Scilab ofrece están:

- a) Capacidad de realizar cálculos con funciones elementales.
- b) Cálculo con vectores y matrices.
- c) Polinomios y funciones racionales.
- d) Procesamiento de señales.
- e) Gráficos en dos y tres dimensiones.
- f) Resolución de ecuaciones diferenciales numéricas.
- g) Xcos, es el simulador de sistemas dinámicos.

h) Muestreo aleatorio y estadísticas

i) Programación.

1.4.3. SCILAB COMO PLATAFORMA DE SIMULACIÓN.

Gracias a su capacidad para interconectarse con tecnologías y aplicaciones de terceros, Scilab también puede actuar como una plataforma única para reunir códigos escritos en diferentes lenguajes de programación en un solo lenguaje unificado, facilitando así su distribución, su respaldo y uso.

1.4.4. SCILAB EN INGENIERÍA QUÍMICA.

Scilab contiene potentes herramientas matemáticas que pueden ser utilizadas en la industria química. Entre las herramientas contenidas en Scilab podemos mencionar herramientas orientadas a la resolución de ecuaciones diferenciales las cuales son muy útiles en la resolución de problemas en estado dinámico, como los que podemos encontrar en los diferentes procesos industriales de manufactura, tratamiento, procesamiento, etc.

Como ejemplo del uso de estas herramientas en el área de la Ingeniería Química tenemos a la empresa ERAMET (Compañía Multinacional Francesa de Intercambio y Metalurgia) que se ha dedicado al estudio del modelado de los procesos en la industria metalúrgica, adonde la producción de ferroaleaciones requiere procesos complejos, realizados a temperaturas muy altas. Con el fin de optimizar el uso de agentes químicos de alto costo y reducir la duración del proceso, ERAMET está desarrollando un modelo numérico para simular el comportamiento de los reactores metalúrgicos neumáticos con Scilab. La complejidad del sistema (varias especies químicas, reacciones y la termodinámica) y la demanda industrial de una herramienta de simulación eficiente requieren el uso de varias características que Scilab posee, como el cálculo de vectores y matrices, gráficos en dos y tres dimensiones y cálculo de ecuaciones diferenciales numéricas, entre otros, como se puede evidenciar en la figura 2.

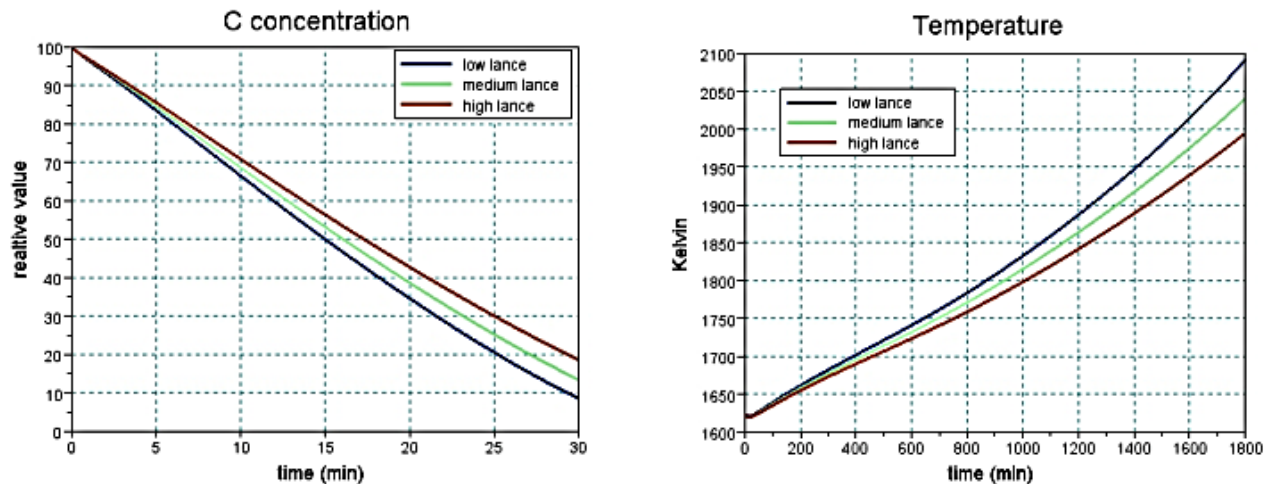


Figura 2: Modelado de reactor utilizado en el proceso de la metalurgia. (ERAMET RESEARCHES, 2010).

Así de igual forma en cálculos referentes a temáticas abordadas en el área de estudio de la Ingeniería Química, como el cálculo de propiedades energéticas a través de correlaciones matemáticas en el área de termodinámica química, de igual forma con la realización de procesos iterativos para la estimación de dimensiones de equipos, tanto en el área de manejo de fluidos como en la transferencia de calor, es así como se ha tenido a bien dentro de este trabajo su uso para la simulación de procesos de transferencia de masa.

1.5 TRANSFERENCIA DE MASA.

En el presente trabajo de investigación enfocaremos el desarrollo de aplicativos a los procesos de transferencia de masa impartidos en la Universidad de El Salvador, en la Escuela de Ingeniería Química e Ingeniería de Alimentos en la asignatura de Operaciones Unitarias III.

Debido a esto es necesario realizar un estudio previo del fenómeno de transferencia de masa y de los procesos relacionados con este fenómeno. La importancia del estudio de la transferencia de masa, radica en que la mayoría de los procesos químicos requieren de la purificación inicial de las materias primas o de la separación final de productos y subproductos, es por esto que, comprender los fenómenos y procesos de transferencia de masa, es de vital utilidad, así como tener herramientas que puedan ayudarnos a dar solución a los problemas concernientes a la temática y de la misma manera poder simular procesos

donde estos fenómenos se encuentren. Dentro de este trabajo de graduación se simularán problemas relacionados a la transferencia de masa, los cuales se abordan dentro de la asignatura de Operaciones Unitarias III, impartida por la Escuela de Ingeniería Química e Ingeniería en Alimentos de la Universidad de El Salvador, debido a esto partimos con los fundamentos teóricos de la transferencia de masa.

1.5.1 DEFINICIÓN GENERAL DE LA TRANSFERENCIA DE MASA.

Los fenómenos de transporte tienen lugar en aquellos procesos, conocidos como procesos de transferencia, en los que se establece el movimiento de una propiedad (masa, momentum o energía) en una o varias direcciones bajo la acción de una fuerza impulsora. Al movimiento de una propiedad se le llama flujo.

Un sistema con dos o más constituyentes recibe el nombre de mezcla. En las mezclas las concentraciones varían de un punto a otro presentan una tendencia natural a transferir materia haciendo mínimas las diferencias de concentración dentro del sistema. Este fenómeno se llama transferencia de masa o materia.

La transferencia de masa cambia la composición de soluciones y mezclas mediante procesos que no implican necesariamente reacciones químicas y se caracteriza por transferir una sustancia a través de otra u otras a escala molecular. Por ejemplo, cuando se ponen en contacto dos fases que tienen diferente composición, la sustancia que se difunde abandona un lugar de una región de alta concentración y pasa a un lugar de baja concentración.

El mecanismo de transferencia de masa, depende de la dinámica del sistema en que se lleva a cabo. Hay dos modos de transferencia de masa:

- **Molecular:** La masa puede transferirse por medio del movimiento molecular fortuito en los fluidos (movimiento individual de las moléculas), debido a una diferencia de concentraciones. La difusión molecular puede ocurrir en sistemas de fluidos estancados o en fluidos que se están moviendo.

- **Convectiva:** La masa puede transferirse debido al movimiento global del fluido. Puede ocurrir que el movimiento se efectúe en régimen laminar o turbulento. El flujo turbulento resulta del movimiento de grandes grupos de moléculas y es influenciado por las características dinámicas del flujo. Tales como densidad, viscosidad, etc.

Usualmente, ambos mecanismos actúan simultáneamente. Sin embargo, uno puede ser cuantitativamente dominante, por lo tanto, para el análisis de un problema en particular, es necesario considerar solo a dicho mecanismo. La transferencia de masa en sólidos porosos, líquidos y gases sigue el mismo principio, descrito por la ley de Fick, véase ecuación 1.1 la cual establece que el flujo másico se transporta desde una región de alta concentración a regiones de baja concentración, por medio de una magnitud que es proporcional al gradiente de concentración, o en términos más simples, que el soluto se moverá desde una región de alta concentración a una de baja concentración atravesando un gradiente de concentración.

$$J_A = -D_{AB} \frac{\partial c_A}{\partial z} \quad (ec. 1.1)$$

Donde:

J_A : es el flujo difusivo.

D_{AB} : el coeficiente de difusividad

c_A : es la concentración del componente A.

z : es la posición espacial.

En esta ecuación la velocidad de transferencia de masa depende de una fuerza impulsora (diferencia de concentración) sobre una resistencia, que indica la dificultad de las moléculas para transferirse en el medio. Esta resistencia se expresa como una constante de proporcionalidad entre la velocidad de transferencia y la diferencia de concentraciones denominado: "Difusividad de masa". Un valor elevado de este parámetro significa que las moléculas se difunden fácilmente en el medio.

1.5.2 CLASIFICACIÓN DE LA TRANSFERENCIA DE MASA.

La transferencia de masa cambia la composición de soluciones y mezclas mediante métodos que no implican necesariamente reacciones químicas y se caracteriza por transferir una sustancia a través de otra u otras a escala molecular. Cuando se pone en contacto dos fases que tienen diferente composición, la sustancia que se difunde abandona un lugar de una región de alta concentración y pasa a un lugar de baja concentración.

1.5.2.1 DIFUSIÓN MOLECULAR.

El transporte molecular resulta de la transferencia de moléculas individuales a través de un fluido por medio de los movimientos desordenados de las moléculas debido a su energía interna. Podemos imaginar a las moléculas desplazándose en líneas rectas con una velocidad uniforme y cambiando su dirección al rebotar con otras moléculas después de chocar. Entonces su velocidad cambia tanto en magnitud como en dirección. Las moléculas se desplazan en trayectorias desordenadas, y recorren distancias extremadamente cortas antes de chocar con otras y ser desviadas al azar. A la difusión molecular a veces se le llama también proceso de camino desordenado.

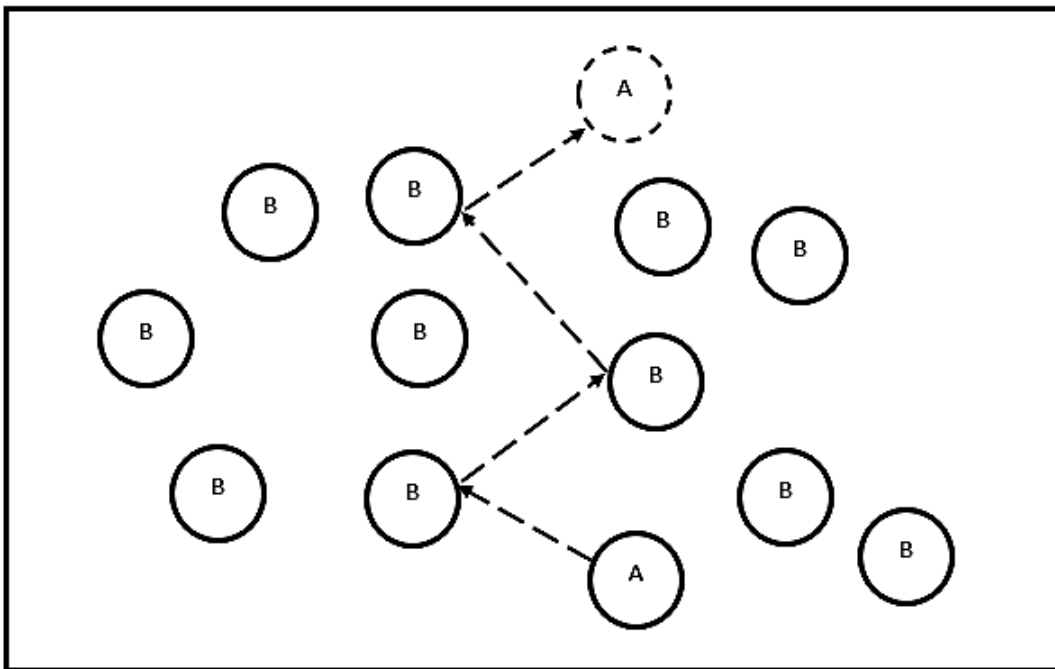


Figura 3: Difusión molecular. (McCabe et al, 2007).

En la figura 3, se muestra esquemáticamente el proceso de difusión molecular. Donde se ilustra la trayectoria desordenada que las moléculas de A que puede seguir difundiéndose del punto (1) al (2) a través de las moléculas de B. Si hay un número mayor de moléculas cerca del punto (1) con respecto al punto (2), entonces, y puesto que las moléculas se difunden de manera desordenada en ambas direcciones, habrá más moléculas de A difundiéndose de (1) a (2) que de (2) a (1). La difusión neta de A va de una región de alta concentración a otra de baja concentración.

El mecanismo real de transporte difiere en gran medida entre gases, líquidos y sólidos, debido a las diferencias sustanciales en la estructura molecular de estos 3 estados físicos:

- **Gases:** los gases contienen relativamente pocas moléculas por unidad de volumen. Cada molécula tiene pocas vecinas o cercanas con las cuales pueda interactuar y las fuerzas moleculares son relativamente débiles; las moléculas de un gas tienen la libertad de moverse a distancias considerables antes de tener colisiones con otras moléculas. El comportamiento ideal de los gases es explicado por la teoría cinética de los gases.
- **Líquidos:** los líquidos contienen una concentración de moléculas mayor por unidad de volumen, de manera que cada molécula tiene varias vecinas con las cuales puede interactuar y las fuerzas intermoleculares son mayores. Como resultado, el movimiento molecular se restringe más en un líquido. La migración de moléculas desde una región hacia otra ocurre, pero a una velocidad menor que en el caso de los gases. Las moléculas de un líquido vibran de un lado a otro, sufriendo con frecuencia colisiones con las moléculas vecinas.
- **Sólidos:** En los sólidos, las moléculas se encuentran más unidas que en los líquidos; el movimiento molecular tiene mayores restricciones. En muchos sólidos, las fuerzas intermoleculares son suficientemente grandes para mantener a las moléculas en una distribución fija que se conoce como red cristalina.

1.5.2.2 DIFUSIÓN CONVECTIVA.

La transferencia de masa por convección es un mecanismo de transporte que se lleva a cabo entre una superficie límite y un fluido en movimiento o entre dos fluidos en movimiento, relativamente no miscibles. Esto significa que la convección existirá siempre que ocurra transferencia de masa entre dos fases de naturaleza distinta.

Cuando ocurren procesos de transferencia de masa entre dos fases de naturaleza distinta, las condiciones en la zona cercana a la interface son difíciles de observar experimentalmente, en particular cuando prevalecen condiciones de flujo turbulento en su cercanía. Esto dificulta el análisis del proceso de transferencia de masa y la posibilidad de manipularlo con fines prácticos.

Una forma de abordar estos problemas es realizar mediciones experimentales en las regiones donde estas son posibles y postular modelos matemáticos que permitan describir los fenómenos en las zonas donde no es posible efectuar tales mediciones. La combinación de los resultados del análisis realizado con los modelos y los resultados experimentales ayuda a verificar si el modelo propuesto es realista. Para esta situación, el papel de los modelos matemáticos es establecer un puente entre lo que se observa en el seno del fluido y lo que ocurre en la vecindad de la interface. Los modelos que se han propuesto para explicar los fenómenos de transferencia de masa interfacial parten de la suposición de que la resistencia a la transferencia se limita a una región cercana a la interface.

En la literatura existen reportados numerosos modelos para tratar de describir la transferencia de masa interfacial, entre ellos podemos señalar:

- I. **El modelo la película estancada:** es una teoría simple para poder explicar la transferencia de masa interfacial, se asume que una película líquida estancada existe cerca de cada interface. En esta película como podemos observar en la figura 4, ocurre el proceso de transferencia de masa entre la interface y el seno del fluido. Según este modelo, la transferencia de masa a través de la película se lleva a cabo únicamente por difusión molecular en estado estacionario.

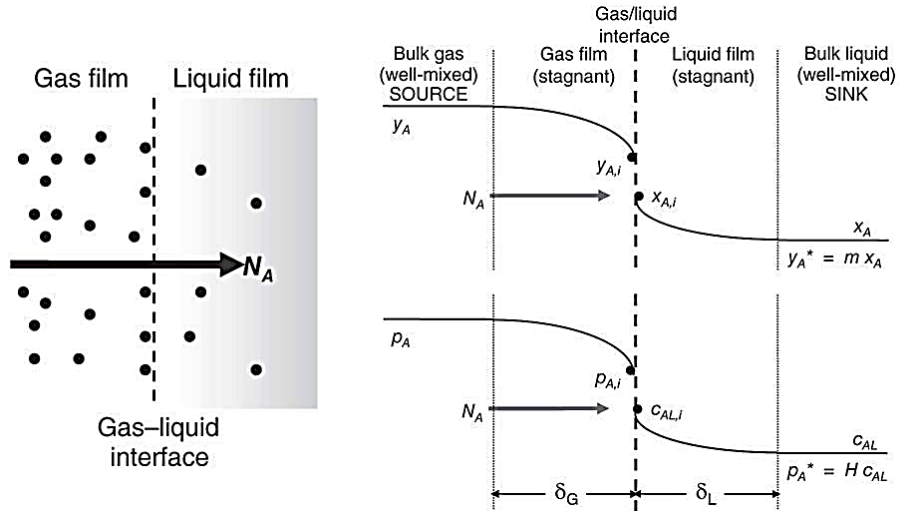


Figura 4: Representación esquemática del modelo de película estancada para un sistema gas-líquido. (McCabe et al, 2007).

II. **El modelo de penetración de Higbie:** en 1935 Higbie observó que, en muchas de las operaciones industriales, como la absorción de un gas en un líquido (interface gas - líquido), la transferencia es de muy breve duración y se repetía a lo largo del equipo. Este tiempo no permitía alcanzar el estado estacionario para el proceso de transferencia de masa local. Esto fue lo que lo condujo a proponer que la difusión molecular ocurre en un estado transitorio.

Supongamos que una burbuja está subiendo en un líquido donde los elementos líquidos son barridos en su superficie, permanecen en contacto con ella durante su movimiento y finalmente se separa en la parte inferior, véase figura 5.

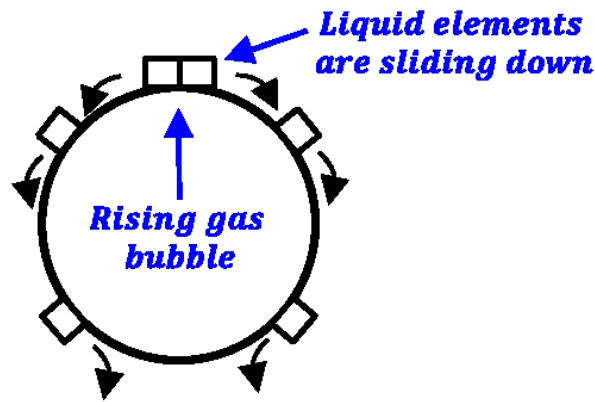


Figura 5: Representación del modelo de penetración de Higbie. (McCabe et al, 2007).

Higbie propuso un modelo de transferencia de masa convectiva en el que supone que la absorción tiene lugar durante una serie de breves contactos entre los fluidos; antes de alcanzar la homogeneidad de la disolución, el soluto se difunde una corta distancia en el absorbente y por ende se desarrolla un medio semi-infinito.

El modelo clásico de Higbie considera una renovación de superficie y supone que todos los elementos del fluido tienen el mismo tiempo de exposición.

III. El modelo de la capa límite: cuando un objeto sólido se mueve a través de un fluido o cuando un fluido se hace pasar a través de un objeto sólido, las moléculas de fluido cercanas a la superficie del objeto son perturbadas, se generan fuerzas entre el fluido y el objeto. La magnitud de estas fuerzas depende de varios factores, tales como la forma del objeto, la velocidad del fluido o del objeto, la densidad del fluido y su viscosidad. La región próxima a la superficie del objeto es formada por una capa delgada llamada capa límite, donde se concentran los efectos viscosos y en la que puede simplificarse mucho el modelo matemático.

Para que se forme una capa límite de concentración, la placa considerada debe contener un soluto A que sea ligeramente soluble en el fluido, es decir, que esto haga posible que se genere una diferencia de concentración entre la superficie y el seno del fluido que pasa sobre la placa. El espesor de capa límite de velocidad difiere del espesor de la capa límite de concentración véase figura 6.

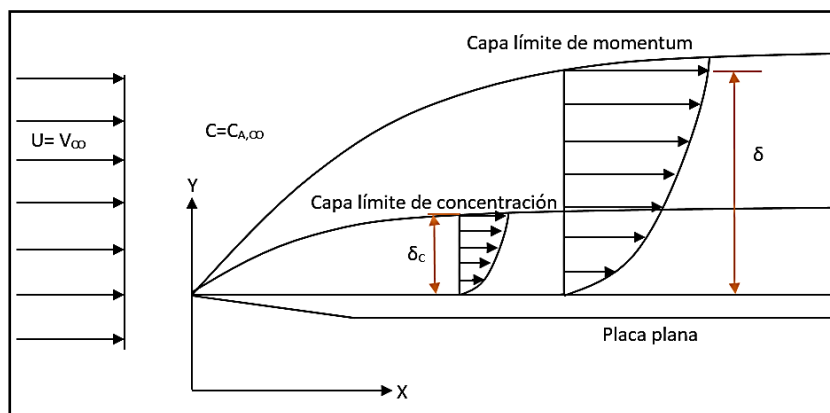


Figura 6: Desarrollo de capa límite de momentum y concentración, a lo largo de una placa inmersa en un flujo uniforme.

Los modelos de la película y de penetración son, generalmente, usados cuando se presentan interfaces gas-líquido, en cambio, el modelo de capa límite es utilizado cuando se presenta un contacto entre un fluido y una superficie sólida parcialmente soluble.

1.5.3 APLICACIONES DE TRANSFERENCIA DE MASA.

Una parte importante de las operaciones unitarias en Ingeniería química está relacionada con el problema de modificar la composición de soluciones y mezclas mediante métodos que no impliquen, necesariamente, reacciones químicas. Por lo común estas operaciones se encaminan a separar las partes componentes de una sustancia.

En el caso de mezclas, las separaciones pueden ser totalmente mecánicas, como la filtración de un sólido a partir de una suspensión en un líquido, la clasificación de un sólido por tamaño de partícula mediante cribado o bien la separación de partículas en un sólido basándose en su densidad. Por otra parte, si las operaciones cambian la composición de soluciones, entonces se conocen como operaciones de transferencia de masa; éstas son las que nos interesan en el presente estudio.

Es difícil de encontrar un proceso químico que no requiere de la purificación inicial de las materias primas o de la separación final de los productos y subproductos; para esto, se utilizan las operaciones de transferencia de masa. Como ejemplo podemos mencionar que: si se observa la gran cantidad de torres en una moderna refinería de petróleo, en cada una de ellas se realiza una operación de transferencia de masa. Con frecuencia, uno de los costos importantes en un proceso deriva del costo de las separaciones. Los costos por separación o purificación dependen directamente de la relación entre la concentración inicial y final de las sustancias separadas; si esta relación es elevada, también lo serán los costos de producción.

Algunos ejemplos de aplicaciones industriales que involucran procesos de transferencia de masa son:

- **La elaboración en la industria del ácido sulfúrico:** donde la fuente de azufre (pirita, mineral ferroso, desulfuración del crudo/GLP etc.) es llevada a un proceso de tostado para obtener dióxido de azufre, este se oxida a trióxido de azufre utilizando un catalizador por

el método llamado de contacto, el trióxido de azufre obtenido, se enfría y se hace pasar por una torre de absorción donde se combina con ácido sulfúrico concentrado en contracorriente formándose el ácido piro-sulfúrico. La importancia de la absorción en este proceso está en la formación del ácido piro-sulfúrico al darse la reacción del trióxido de azufre con una ducha de ácido sulfúrico (98%) en donde el gas es inyectado por la parte inferior de una columna ascendiendo y el ácido dispersado desde la parte superior de la columna provocándose su descenso dándose así un contacto Líquido - Gas en contracorriente (con reacción química).

- **Refinamiento del petróleo:** Cuando se extrae el petróleo crudo, dependiendo de dónde provenga, este contiene muchos componentes que requieren destilación para que el combustible pueda ser utilizado en un automóvil motor de combustión. Afortunadamente, los diversos tipos de hidrocarburos en ebullición que conforman el petróleo crudo tienen diferentes temperaturas de ebullición y esto hace posible que se pueden separar en fracciones.

Algunos ejemplos cotidianos de la transferencia de masa podemos encontrarlos cuando el agua, por evaporación, pasa de una piscina a una corriente de aire que fluye sobre la superficie del agua, las moléculas de vapor de agua se difunden, a través de las moléculas de aire en la superficie, dentro de la masa de la corriente de aire, la cual las arrastra consigo.

Un trozo de CO₂ sólido (hielo seco) también se hace más pequeño con el transcurso del tiempo, ya que sus moléculas de CO₂ se difunden hacia el aire (*transferencia de masa sólida a gaseosa*).

Cuando una pequeña fracción del O₂ que se encuentra en el aire se difunde hacia el agua de mar y satisface las necesidades de oxígeno de los animales marinos, la difusión del carbono hacia el hierro en el curso del cementado, el dopado de los semiconductores para transistores y la migración de moléculas dopadas en los semiconductores a alta temperatura son ejemplos de procesos de difusión de sólido a sólido.

1.5.4 ENSEÑANZA DE OPERACIONES UNITARIAS QUE INVOLUCRAN PROCESOS DE TRANSFERENCIA DE MASA EN LA ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA E INGENIERÍA DE ALIMENTOS / UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR.

En la Escuela de Ingeniería Química e Ingeniería de Alimentos, perteneciente a la Facultad de Ingeniería y Arquitectura de la Universidad de El Salvador, se imparten las asignaturas de Operaciones Unitarias III, tanto para el área de Química (OPU-315) como para el área de alimentos (OPN-315), dentro del presente trabajo nos enfocaremos únicamente a Operaciones Unitarias III impartida para el área de Ingeniería Química. (Para la carrera de Ingeniería Química).

En la asignatura Operaciones Unitarias III (OPU-315), se presenta una introducción a las operaciones de transferencia de masa, fundamentos de equilibrio de fase, difusión, coeficientes de transferencia de masa, transferencia de masa en la interface y operaciones por etapas de equilibrio, operaciones de humidificación, secado, lixiviación, intercambio iónico, adsorción de gases, destilación, extracción líquido-líquido y sólido-líquido y otros procesos de separación. Y tiene como objetivo que el estudiante obtenga un conocimiento técnico de los fenómenos de transferencia de masa, así como las principales operaciones unitarias basados en dichos fenómenos de igual forma poder realizar cálculos en los sistemas donde las mencionadas operaciones se desarrollen y se encuentre equipo vinculado con ellos.

Como parte de la metodología de la enseñanza-aprendizaje, se cuenta con dos clases expositivas a la semana de 100 minutos cada una, con una clase enfocada a la discusión de problemas de 100 minutos, y una parte practica la cual se desarrolla en los laboratorios de la Escuela de Ingeniería Química (Planta Piloto), donde se desarrollan diversos laboratorios con una duración aproximada de 200 minutos, así mismo se desarrolla de forma grupal un trabajo ex-aula con temas específicos de la asignatura.

El contenido que se imparte dentro de la asignatura Operaciones Unitarias III (OPU-315), está dividido en ocho unidades:

1. Fundamentos de la Transferencia de Masa.
 - 1.1 Concepto de transferencia de masa y de procesos de separación.
 - 1.2 Principales operaciones con transferencia de masa.

- 1.3 Importancia y aplicaciones de las operaciones con transferencia de masa.
2. Fundamentos del Equilibrio de Fases.
 - 2.1 Fundamentos. Ley de las fases. Equilibrio vapor líquido.
 - 2.2 Soluciones. Ley de Raoult y Volatilidad.
 - 2.3 Diagrama H-X, diagrama ternario.
3. Difusión y Coeficientes de Transferencia de Masa.
 - 3.1 Fundamentos. Difusividad y Ley de Fick.
 - 3.2 Difusión en gases, líquidos y sólidos.
 - 3.3 Estimación de la Difusividad para gases y líquidos.
 - 3.4 Coeficientes de transferencias de masa. Teorías.
 - 3.5 Analogías y correlaciones para la estimación de coeficientes de transferencias de masa.
 - 3.6 Torres de pared mojada.
4. Transferencia de Masa en la Interface y Operaciones por Etapas de Equilibrio.
 - 4.1 Coeficiente de transferencia de masa, individual y total.
 - 4.2 Principios de las etapas de equilibrio.
 - 4.3 Balanceo y método gráficos.
5. Operaciones de Humidificación.
 - 5.1 Definiciones. Uso de la carta Psicrométrica.
 - 5.2 Temperatura de Bulbo húmedo y de saturación adiabática.
 - 5.3 Ecuaciones de diseño para torres de enfriamiento de agua y de humidificación de aire o gases.
6. Secado.
 - 6.1 Fundamentos y definiciones. Mecanismos.
 - 6.2 Equipos de secado. Cálculos.
7. Absorción de Gases.
 - 7.1 Fundamentos. Balances.
 - 7.2 (L/G) mínimo, factor de absorción.
 - 7.3 Cálculos para columnas de platos y columnas empacadas, método de las unidades de transferencia y métodos gráficos.

7.4 Equipo para absorción de gases. Empaques, inundación. Cálculo del diámetro de la torre.

8. Destilación.

8.1 Fundamentos.

8.2 Destilación instantánea (flash)

8.3 Destilación continua (sistemas binarios)

8.4 Cálculo, método de McCabe & Thiele.

8.5 Eficiencia en destilación. Elementos de destilación multicomponente.

8.6 Equipo para destilación.

CAPITULO II

FUNDAMENTOS DE TRANSFERENCIA DE MASA.

2.1 DIFUSIÓN MOLECULAR EN FLUJO LAMINAR.

La difusión molecular (o transporte molecular) puede definirse como la transferencia (o desplazamiento) de moléculas individuales a través de un fluido por medio de los desplazamientos individuales y desordenados de las moléculas debido a su energía interna, y a una diferencia de concentraciones. La difusión puede ocurrir en sistemas de fluidos estancados o en fluidos que se están moviendo. Puesto que las moléculas se desplazan en trayectorias al azar, la difusión molecular a veces se llama también proceso con trayectoria aleatoria.

Por ejemplo, si en una probeta de 100 ml de capacidad llena de aire y es introducido bromo, sus moléculas comenzaran a dispersarse por corrientes del aire y tardara 23 min aproximadamente en este tipo la probeta tomara el color característico del bromo (rojo), pero si extraemos (previamente) el aire ya no habrá choque de partículas o moléculas de aire con el bromo y este libremente llenara en pocos segundos la probeta.

De acuerdo con la teoría de cinética de los gases⁷, se puede expresar que una molécula viaja en línea recta con una velocidad uniforme y choca con otra molécula, entonces su velocidad cambia tanto en magnitud como en dirección. La distancia promedio que viaja la molécula entre cada choque es su trayectoria libre promedio; su velocidad promedio depende de la temperatura. Como la molécula viaja en una trayectoria en zigzag, la distancia neta en la dirección en la cual se mueve durante cierto tiempo “rapidez de difusión”, sólo es una pequeña fracción de la longitud de su trayectoria real. Por esta razón, la rapidez de difusión es muy pequeña, aunque podría aumentar con un descenso de presión, que reduciría el

⁷ La teoría cinética de los gases es una teoría física y química que explica el comportamiento y propiedades macroscópicas de los gases (ley de los gases ideales), a partir de una descripción estadística de los procesos moleculares microscópicos.

número de choques y un incremento de temperatura, que aumentaría la velocidad molecular, véase figura 7.

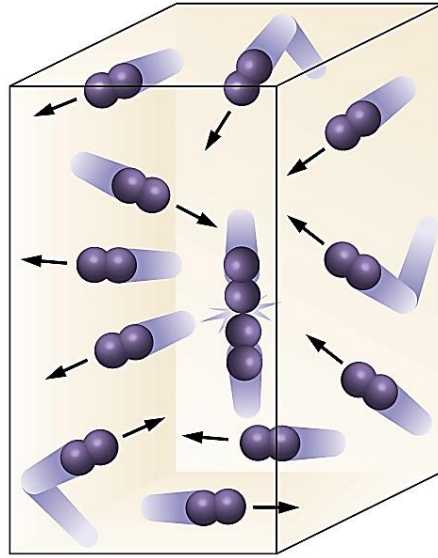


Figura 7: Movimiento de moléculas. (McCabe et al, 2007).

La difusividad, o coeficiente de difusión, D_{AB} de un componente A en solución en B, que es una medida de la movilidad de difusión, se define como la relación de su flux J_A y su gradiente de concentración.

$$J_A = -D_{AB} \frac{\partial c_A}{\partial z} = -cD_{AB} \frac{\partial x_A}{\partial z} \quad (\text{ec. 2. 1})$$

Definida como la primera ley de Fick, para la dirección z, donde el signo negativo realza que la difusión ocurre en el sentido del decremento de la concentración. La difusividad es una característica de un componente y su entorno (temperatura, presión, concentración ya sea en solución líquida, gaseosa o sólida, así como la naturaleza de los otros componentes).

2.2 CÁLCULO DE COEFICIENTES DE DIFUSIÓN.

La experiencia nos demuestra que cuando abrimos un frasco de perfume o de cualquier otro líquido volátil, podemos percibir el olor a una distancia de “x” metros, rápidamente en un recinto cerrado, esto es debido a que las moléculas del líquido después de evaporarse se difunden por el aire, distribuyéndose en todo el espacio circundante. Un fenómeno similar

ocurre cuando colocamos un terrón de azúcar en un vaso de agua, las moléculas de sacarosa se difunden por toda el agua.

Estos y otros ejemplos nos muestran que para que tenga lugar el fenómeno de la difusión, la distribución espacial de moléculas no debe ser homogénea, o sea debe existir una diferencia, o gradiente de concentración entre dos puntos del medio.

2.2.1 CÁLCULO DE COEFICIENTE DE DIFUSIÓN PARA GASES.

El coeficiente de difusión para gases, es una propiedad del sistema, la cual representa la facilidad de movimiento de un soluto a través de un solvente, depende de la presión, temperatura y la naturaleza de los componentes. Sus dimensiones pueden definirse a través de la definición de la ecuación 2.1 las cuales serán longitud² / tiempo. En gases, la difusividad aumenta con la temperatura, y disminuye al aumentar la presión. También disminuye al aumentar el peso molecular de los compuestos. En un gas a baja presión, la difusividad es independiente de la concentración, por lo que sí se cumple que $D_{AB} = D_{BA}$.

Cuando no se cuenta con datos experimentales para gases y necesitemos el cálculo de coeficientes de difusión se cuenta con diferentes tipos de modelos los cuales son:

I. Wilke-Lee.

$$D_{AB} = \frac{10^{-5} \left(1.084 - 0.249 \sqrt{\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \frac{1}{1000}} \right) T^{\frac{3}{2}} \sqrt{\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \frac{1}{1000}}}{P (r_{AB})^2 f \left(\frac{k \cdot T}{\epsilon_{AB}} \right)} \quad (ec. 2. 2)$$

II. Teoría Cinética de Champman-Enskog.

$$D_{AB} = \frac{0.0022662 \cdot T^{1.5}}{PM_{AB}^{0.5} \cdot \sigma_{AB}^2 \cdot \Omega_D} \quad (ec. 2. 3)$$

Es válida para bajas presiones y donde:

- ϵ_{AB} (energía característica, que se suele usar dividida entre la constante de Boltzmann κ)
- σ_{AB} (diámetro de colisión) son parámetros que dependen de las moléculas que interactúan y se obtienen a partir de los valores de las sustancias puras.

$$\sigma_{AB} = \frac{1}{2}(\sigma_A + \sigma_B) \quad (\text{ec. 2.4})$$

$$\frac{\epsilon_{AB}}{\kappa} = \left(\frac{\epsilon_A}{\kappa} \cdot \frac{\epsilon_B}{\kappa}\right)^{0.5} \quad (\text{ec. 2.5})$$

Tabla 2.1: Parámetros de Lennard-Jones. Reid, Prausnitz y O'Connell.

Sustancia	σ	ϵ/k	Sustancia	σ	ϵ/k	Sustancia	σ	ϵ/k
	(Å)	(K)		(Å)	(K)		(Å)	(K)
H ₂	2.847	59.7	UF ₆	5.967	236.8	Cl ₂	4.217	316.0
He	2.551	10.22	Hg	2.969	750.0	Br ₂	4.296	507.9
Ar	3.542	93.3	C ₂ H ₆	4.443	215.7	I ₂	5.160	474.2
Kr	3.655	178.9	C ₂ H ₄	4.163	224.7	HF	3.148	330.0
Xe	4.047	231.0	C ₂ H ₂	4.033	231.1	HCl	3.339	344.7
Aire	3.711	78.6	C ₃ H ₈	5.118	237.1	HBr	3.353	449.0
N ₂	3.798	71.4	CH ₃ - CH=CH ₂	4.678	298.9	HI	4.211	288.7
O ₂	3.467	106.7	CH ₃ -C≡CH	4.761	251.8	HCN	3.630	569.1
H ₂ O	2.649	356	n-C ₄ H ₁₀	4.687	531.4	H ₂ S	3.623	301.1
CO	3.690	91.7	Iso-C ₄ H ₁₀	5.278	330.1	SF ₆	5.128	222.1
CO ₂	3.941	195.2	n-C ₅ H ₁₂	5.949	341.1	CH ₃ -O-CH ₃	4.307	395.0
COS	4.130	336.0	C(CH ₃) ₄	6.464	193.4	C ₂ H ₅ -O- C ₂ H ₅	5.678	313.8
CS ₂	4.483	467.0	n-C ₆ H ₁₄	5.949	399.3	CH ₃ Cl	4.182	350.0
C ₂ N ₂	4.361	348.6	Ciclopropano	4.807	248.9	CH ₂ Cl ₂	4.898	356.3
NH ₃	2.900	558.3	Ciclohexano	6.182	297.1	CHCl ₃	5.389	340.2
NO	3.492	116.7	Benceno	5.349	412.3	CCl ₄	5.947	322.7
N ₂ O	3.828	232.4	CH ₃ -OH	3.626	481.8	CCl ₂ F ₂	5.116	280.0
SO ₂	4.112	335.4	C ₂ H ₅ -OH	4.530	362.6	SiH ₄	4.084	207.6
F ₂	3.357	112.6	CH ₃ -CO-OH	4.600	560.2	SiF ₄	4.880	171.9
SiF ₆	5.128	222.1	-	-	-	-	-	-

Fuente: "The Properties of Gases and Liquids". 5ª ed., McGraw-Hill (2000).

III. Ecuación de Fuller.

$$D_{AB} = \frac{0.00143 * T^{1.75}}{PM_{AB}^{0.5} \left[(\Sigma V_A)^{\frac{1}{3}} + (\Sigma V_B)^{\frac{1}{3}} \right]^2} \quad (\text{ec. 2. 6})$$

Utilizable de igual forma para presiones bajas (máximo 10 bar), donde los valores de Σv (sumatoria de volúmenes moleculares de difusión), para algunas moléculas simples se obtienen directamente de tablas; para otros compuestos deben estimarse por contribución de grupos.

Tabla 2.2: Volúmenes moleculares de difusión para algunas moléculas simples. Reid, Prausnitz y O'Connell.

Molécula	Σv	Molécula	Σv	Molécula	Σv	Molécula	Σv
H ₂	6.12	He	2.67	CO	18.0	Cl ₂	38.4
F ₂	6.84	Ne	5.98	CO ₂	26.9	Br ₂	69.0
N ₂	18.5	Ar	16.2	N ₂ O	35.9	SO ₂	41.8
O ₂	16.3	Kr	24.5	NH ₃	20.7	SF ₆	71.3
Aire	19.7	Xe	32.7	H ₂ O	13.1	CCl ₂ F ₂	114.8

Fuente: "The Properties of Gases and Liquids". 5ª ed., McGraw-Hill (2000).

Tabla 2.3: Contribuciones de grupo para volúmenes moleculares de difusión. Reid, Prausnitz y O'Connell.

Átomo	v	Átomo	v	Átomo	v	Átomo	v
C	15.9	H	2.31	O	6.11	N	4.54
F	14.7	Cl	21.0	Br	21.9	I	29.8
S	22.9	Cierre de anillo					-18.3

Fuente: "The Properties of Gases and Liquids". 5ª ed., McGraw-Hill (2000).

IV. Extrapolación de Hirschfelder.

Se emplea para estimar la difusividad a una cierta temperatura T_2 y presión P_2 cuando ya se tiene como dato la difusividad a otra temperatura T_1 y presión P_1 conocidas.

$$D_{ABT_2P_2} = D_{ABT_1P_1} \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{1.5} \left(\frac{P_1}{P_2}\right) \quad (ec. 2. 7)$$

Cuando el rango de temperatura es grande (mayor a 50°), se necesita incluir también un factor adicional relacionando las integrales de colisión a ambas temperaturas:

$$D_{ABT_2P_2} = D_{ABT_1P_1} \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{1.5} \left(\frac{P_1}{P_2}\right) \left(\frac{\Omega_{DT_1}}{\Omega_{DT_2}}\right) \quad (ec. 2. 8)$$

2.2.2 DIFUSIVIDAD PARA GASES A ALTAS PRESIONES.

No existe un valor específico de presión a partir del cual se considere "alta". Normalmente los métodos para gases a baja presión comienzan a mostrar desviaciones significativas a presiones de 10 atmósferas o mayores. A diferencia de los gases a baja presión, la difusividad de los gases sí depende de la composición cuando la presión es alta. Los métodos para gases a alta presión generalmente requieren de datos a la misma temperatura del sistema, pero a baja presión (indicado aquí con un asterisco *). Esta baja presión suele ser 1 bar ó 1 atm, aunque puede ser otra presión siempre y cuando sea baja presión.

I. Ecuación de Riazi y Whitson.

$$\frac{\rho \cdot D_{AB}}{(\rho \cdot D_{AB})^*} = 1.07 \left(\frac{\mu}{\mu^*}\right)^{b+c \cdot P_r} \quad (ec. 2. 9)$$

Para calcular la presión reducida P_r se emplea la presión pseudocrítica de la mezcla, mientras que b y c son funciones del factor acéntrico de Pitzer de la mezcla ω_{AB} :

$$P_{c,AB} = y_A P_{c,A} + y_B P_{c,B} \quad (ec. 2. 10)$$

$$P_r = \frac{P}{P_{c,AB}} \quad (ec. 2. 11)$$

$$b = -0.38\omega_{AB} - 0.27 \quad c = -0.1\omega_{AB} - 0.05 \quad (ec. 2. 12)$$

Este método no se debe usar para estimar difusividades a baja presión porque no predice el valor correcto de difusividad. Otra dificultad que presenta es que la viscosidad μ y la viscosidad a baja presión μ^* generalmente dependen también de la composición.

II. Método de He y Yu.

$$D_{AB} = 1 \times 10^{-5} \alpha \left(\frac{T}{M_A} \right)^{0.5} \exp \left(\frac{-0.3887 \cdot \rho_{B,r}}{1 - 0.23 \cdot \rho_{B,r}} \right) \quad (\text{ec. 2. 13})$$

Este método es aplicable a para altas presiones, donde α es un factor que depende únicamente de las propiedades del solvente.

La densidad reducida del solvente está dada por $\rho_{B,r} = \rho_B / \rho_{B,c}$, con la densidad del solvente ρ_B evaluada a la temperatura y presión del sistema. El método original cubre los rangos $0.66 < T_r < 1.78$ y $0.22 < \rho_{B,r} < 2.62$, y probablemente no sea confiable fuera de esos rangos.

Donde α (α) es calculada mediante los valores del solvente utilizando la siguiente ecuación:

$$\alpha = 14.882 + 5.908 \times 10^{-3} \left(\frac{T_{c,B} \cdot V_{c,B}}{M_B} \right)^{0.5} + 2.0821 \times 10^{-6} \left(\frac{T_{c,B} \cdot V_{c,B}}{M_B} \right)^2 \quad (\text{ec. 2. 14})$$

2.2.3 DIFUSIVIDAD EN FASE LÍQUIDA.

Los modelos para estimar coeficientes de difusión en líquidos no son tan exactos como para gases. En un líquido, la difusividad aumenta cuando aumenta la temperatura, disminuye cuando aumenta el peso molecular, y casi no es afectada por la presión.

La difusividad depende fuertemente de la concentración, por lo que en muchos casos sólo puede estimarse para concentraciones muy bajas, es decir a dilución infinita (indicado con un superíndice cero). Por lo tanto, D_{AB}^0 representa la difusividad de A cuando tenemos dilución infinita en B; es decir, que cada molécula de A está rodeada prácticamente de B puro.

Ya que pocas veces se puede estimar el efecto de la concentración, desde el punto de vista práctico se asume que la difusividad es a dilución infinita, donde aplica a concentraciones tan altas como 5 ó 10% mol de A en B.

I. Modelo de Wilke-Chang.

$$D_{AB}^0 = 7.4 \times 10^{-11} \frac{(\phi M_B)^{0.5} \cdot T}{\mu \bar{V}_{b,A}^{0.6}} \quad (\text{ec. 2. 15})$$

Para dilución infinita donde ϕ es un factor adimensional de asociación del solvente (2.6 para agua, 1.9 para metanol, 1.5 para etanol, y 1.0 si no es un solvente asociado), y $V_{b,A}$ el volumen molar del soluto a su temperatura de ebullición, el cual puede ser calculado con $V_{b,A}=0.285V_c^{1.048}$

El modelo de Wilke-Chang es bastante usado, pero en algunos casos puede llegar a tener errores elevados. Este método no debe emplearse cuando el soluto es agua.

2.3 INTRODUCCIÓN DIFUSIÓN MOLECULAR EN ESTADO ESTABLE.

A partir de lo que se considera con la expresión de la ley de Fick donde se presenta la relación entre el flux (cantidad de masa que se mueve por unidad de volumen en una unidad de tiempo) y el cambio de la concentración cuando existe movimiento en las partículas de este, con esto en mente podemos a partir de un experimento podemos entender. Considérese una caja, que está separada en dos partes mediante una partición P. En la sección I se coloca 1 kg de agua (A) a la derecha y en la sección II, a la izquierda, 1 kg de etanol (B) (las densidades de los líquidos son diferentes y la partición está colocada de tal forma que la profundidad de los líquidos en cada sección sea la misma), véase figura 8.

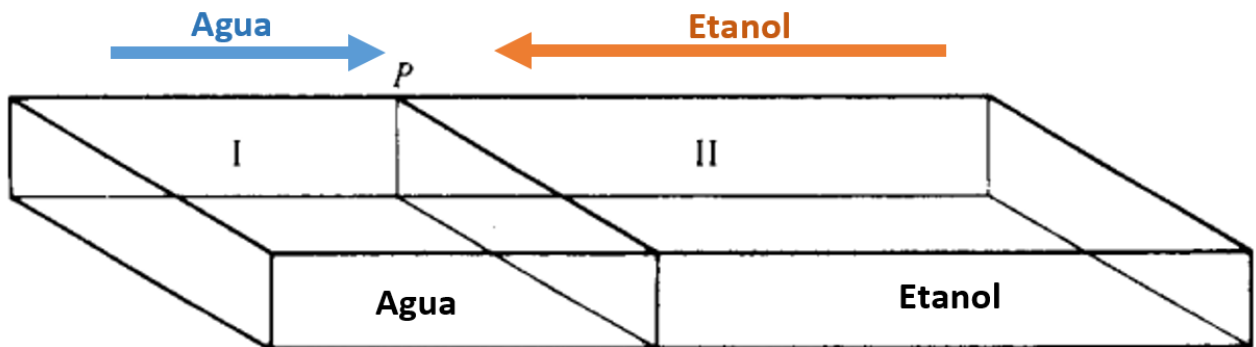


Figura 8: Difusión en solución binaria (etanol-agua). (Treybal, 1986).

Cuando se elimina cuidadosamente la partición de la caja, se inicia el proceso de difusión de los líquidos. Cuando la concentración sea uniforme a lo largo de la caja y el proceso de difusión se complete: en toda la caja habrá 50% de masa de cada componente.

Es claro que, aunque el agua se difundió hacia la derecha y el etanol hacia la izquierda, hubo un movimiento neto de masa hacia la derecha, de tal forma que, si la caja se hubiese equilibrado inicialmente sobre el filo de un cuchillo, al final del proceso se hubiese inclinado hacia la derecha. Si se toma como positiva esa dirección hacia la derecha, entonces el flux N_A de A con relación a la posición fija P sería positivo y el flux N_B de B sería negativo. Por condición del estado estacionario, el flux neto es:

$$N_A + N_B = N \quad (\text{ec. 2. 16})$$

Para llegar al resultado que:

$$N_A = (N_A + N_B) \cdot \frac{c_A}{c} - D_{AB} \cdot \frac{\partial c_A}{\partial z} \quad (\text{ec. 2. 17})$$

$$-D_{AB} \cdot \frac{\partial c_A}{\partial z} = D_{BA} \cdot \frac{\partial c_B}{\partial z} \quad (\text{ec. 2. 18})$$

2.3.1 DIFUSIÓN MOLECULAR EN ESTADO ESTACIONARIO EN FLUIDOS SIN MOVIMIENTO Y EN FLUJO LAMINAR.

A partir de esto si lo aplicamos al caso de la difusión en el sentido únicamente de z, donde N_A y N_B son constantes (estado estacionario), de igual forma tomando que D_{AB} es constante, podemos separar variables e integrar (ec. 2.17).

Donde el estado 1 indica el principio de la trayectoria de difusión (C_A elevada) y el estado 2 el final de la trayectoria de difusión (C_A bajo). Donde $z_2 - z_1 = z$

$$N_A = X_A \cdot N + J_A \quad (\text{ec. 2. 19})$$

$$N_A = (N_A + N_B) \cdot X_A - D_{AB} \cdot \frac{\partial c_A}{\partial z} = (N_A + N_B) \cdot \frac{c_A}{c} - D_{AB} \cdot \frac{\partial c_A}{\partial z} \quad (\text{ec. 2. 20})$$

Separando variables e integrando a ambos miembros:

$$\int_{C_{A1}}^{C_{A2}} \frac{-dc_A}{c N_A - c_A (N_A + N_B)} = \frac{1}{c D_{AB}} \int_{z_1}^{z_2} dz$$

$$N_A = \frac{N_A}{N_A + N_B} \cdot \frac{c D_{AB}}{RT(z_2 - z_1)} \cdot \ln \left[\frac{\frac{N_A}{N_A + N_B} \frac{c_{A2}}{c}}{\frac{N_A}{N_A + N_B} \frac{c_{A1}}{c}} \right] \quad (\text{ec. 2. 21})$$

2.3.2 DIFUSIÓN MOLECULAR EN GASES (ESTADO ESTACIONARIO).

Se puede aplicar la ley de gases ideales a la ecuación anterior y así utilizarse a partir de las presiones parciales o su fracción molar.

$$N_A = \frac{N_A}{N_A+N_B} \cdot \frac{D_{AB} \cdot P_t}{RT(Z_2-Z_1)} \cdot \ln \left(\frac{\left[\frac{N_A}{N_A+N_B} \right] P_t - \bar{P}_{A2}}{\left[\frac{N_A}{N_A+N_B} \right] P_t - \bar{P}_{A1}} \right) \quad (ec. 2. 22)$$

$$N_A = \frac{N_A}{N_A+N_B} \cdot \frac{D_{AB} \cdot P_t}{RT(Z_2-Z_1)} \cdot \ln \left[\frac{\frac{N_A}{N_A+N_B} - Y_{A2}}{\frac{N_A}{N_A+N_B} - Y_{A1}} \right] \quad (ec. 2. 23)$$

I. Difusión en Estado Estacionario de A, a Través del No Difundente B.

Este análisis puede realizarse si no se toma consideración el flujo de uno de los elementos.

$N_B = 0$, $N_A = \text{Constante}$.

$$\frac{N_A}{N_A+N_B} = N_B \quad (ec. 2. 24)$$

Con esto a partir de la ecuación 2.22 tenemos:

$$N_A = \frac{D_{AB} \cdot P_t}{RT(Z_2-Z_1)} \ln \left(\frac{P_t - \bar{P}_{A2}}{P_t - \bar{P}_{A1}} \right) \quad (ec. 2. 25)$$

Definiendo como:

$$\bar{P}_{B,m} = \frac{\bar{P}_{B2} - \bar{P}_{B1}}{\ln \left(\frac{\bar{P}_{B2}}{\bar{P}_{B1}} \right)} \quad (ec. 2. 26)$$

Tenemos:

$$N_A = \frac{D_{AB} \cdot P_t}{RT(Z_2-Z_1) \bar{P}_{B,m}} (\bar{P}_{A1} - \bar{P}_{A2}) \quad (ec. 2. 27)$$

La sustancia A se difunde debido a su gradiente de concentración $-dP_A/dz$ (El gradiente de concentración se expresa en términos de presión por los cambios de esta durante el fenómeno). La sustancia B también se difunde con relación a la velocidad molar promedio con un flux J_B que depende de $-dP_B/dz$, pero se toma que esta velocidad es la misma a la que

fluye la sustancia difundente, con lo que puede hacerse su $N_B = 0$, relativo a un lugar fijo del espacio véase figura 9.

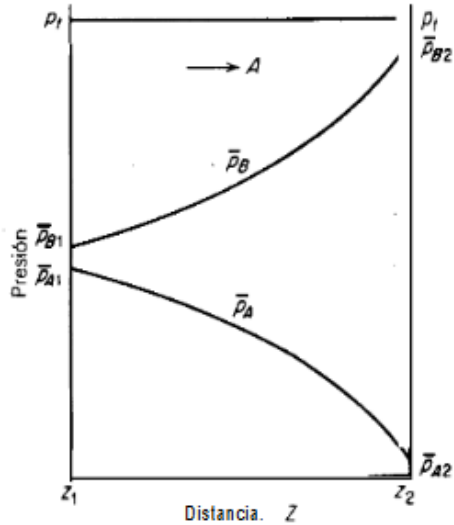


Figura 9: Difusión de A, a través del no difundente B. (Treybal, 1986).

II. Contradifusión Equimolar de Gases en Estado Estacionario.

En esta situación consideramos que $N_A = -N_B$, las dos constantes, una situación muy frecuente en las operaciones de destilación.

$$N_A = (N_A + N_B) \frac{\bar{P}_A}{P_t} - \frac{D_{AB}}{RT} \cdot \frac{d\bar{P}_A}{dz} \quad (ec. 2. 28)$$

$$N_A = \frac{D_{AB}}{RT(z_2 - z_1)} (\bar{P}_{A1} - \bar{P}_{A2}) \quad (ec. 2. 29)$$

III. Difusión en Estado Estacionario en Mezclas Multicomponentes.

Las expresiones para la difusión en sistemas de multicomponentes se vuelven muy complicadas, pero con frecuencia se pueden manejar utilizando la difusividad efectiva, la cual puede obtenerse a partir de sus difusividades individuales de cada uno de los componentes, donde N_i es positivo si la difusión es en la misma dirección que A y negativo si es en la dirección opuesta.

D_{AB} se puede reemplazar por $D_{A,m}$ (Difusión efectiva):

$$D_{A,m} = \frac{N_A - y_A \cdot \sum_{i=A}^n N_i}{\sum_{i=A}^n \frac{1}{D_{Ai}} (y_i \cdot N_A - y_A \cdot N_i)} \quad (ec. 2.30)$$

En el caso especial de que todos los $N_i=0$ excepto N_A , o sea caso de difusión de N_A , a través de componentes no difundentes:

$$D_{A,m} = \frac{1 - y_A}{\sum_{i=B}^n \frac{y_i}{D_{Ai}}} = \frac{1}{\sum_{i=B}^n \frac{y_i}{D_{Ai}}} \quad (ec. 2.31)$$

Donde: y_i = Fracción mol del componente i, libre de A.

2.3.3 DIFUSIÓN MOLECULAR EN LÍQUIDOS EN ESTADO ESTACIONARIO.

Partiendo de la integración del flujo de A (ec. 2.21), no se puede suponer que el coeficiente de difusividad y la concentración son constantes, ya que la difusividad pueden variar considerablemente con la concentración, debido al escaso conocimiento de las difusividades en líquidos, se hace uso de una concentración promedio y el mejor promedio que se tenga de la D_{AB} .

$$N_A = \frac{N_A}{N_A + N_B} \cdot \frac{D_{AB}}{z_2 - z_1} \cdot \left(\frac{\rho}{PM} \right)_{av} \cdot \ln \left[\frac{\frac{N_A}{(N_A + N_B)} - X_{A2}}{\frac{N_A}{(N_A + N_B)} - X_{A1}} \right] \quad (ec. 2.32)$$

IV. Difusión en Estado Estacionario de A, a Través del No Difundente B.

De la misma manera que en los gases se tiene que $N_B = 0$.

$$N_A = \frac{D_{AB}}{(z_2 - z_1) X_{Bm}} \cdot \left(\frac{\rho}{PM} \right)_{av} \cdot (X_{A1} - X_{A2}) \quad (ec. 2.33)$$

Siendo X_{Bm} una media logarítmica de las fracciones calculada de la misma forma que la Presión en el caso de los gases visto anteriormente.

Contradifusión Equimolar en Estado Estacionario.

Partimos de $N_A = - N_B$

$$N_A = \frac{D_{AB}}{(z_2 - z_1)} \cdot (C_{A1} - C_{A2}) = \frac{D_{AB}}{(z_2 - z_1)} \cdot \left(\frac{\rho}{P_M}\right)_{av} \cdot (X_{A1} - X_{A2}) \quad (ec. 2. 34)$$

V. Difusión en Sistemas Reaccionantes en Superficies Catalíticas.

Para utilizar estas ecuaciones, debe conocerse la relación entre N_A y N_B . Ésta generalmente se fija por otros motivos.

$$N_A = \frac{2 \cdot P_t \cdot D_{AB}}{ZRT} \cdot \ln \left(\frac{2 \cdot P_t - \bar{P}_{A2}}{2 \cdot P_t - \bar{P}_{A1}} \right) \quad (ec. 2. 35)$$

2.4 COEFICIENTES INDIVIDUALES DE TRANSFERENCIA DE MASA.

En la región turbulenta, las partículas del fluido ya no se mueven de forma ordenada, como en la subcapa laminar. Por lo contrario, porciones relativamente grandes del fluido, llamadas remolinos, se mueven con rapidez de una posición a otra; un componente apreciable de su velocidad se orienta perpendicularmente a la superficie a través de la cual está fluyendo el fluido.

Debido al rápido movimiento de remolino, los gradientes de concentración en la región turbulenta serán menores que los que existen en la película.

El mecanismo del proceso de flujo en que intervienen los movimientos de remolinos en la región turbulenta no han sido estudiados de manera específica, es por ello que no se tiene una total comprensión de estos. Sucede lo contrario con el mecanismo de la difusión molecular de líquidos, al menos para gases, en el cual se conoce bastante bien, puesto que puede describirse en función de una teoría cinética que proporciona resultados que están de acuerdo con los experimentales.

Es posible que no sea plana la superficie a través de la cual sucede la transferencia; si así sucede, la trayectoria de difusión en el fluido puede tener una sección transversal variable; en ese caso, N se define como el flux en la interfase de la fase, en donde la sustancia abandona o entra a la fase para la cual el coeficiente de transferencia de masa es F . N_A es positiva cuando C_{A1} está en el principio de la trayectoria de transferencia y C_{A2} en el final. De cualquier forma, una de estas concentraciones se encontrará en el límite de la fase. La forma

en que se defina la concentración de A en el fluido modificará el valor de F; generalmente se establece de forma arbitraria.

$$N_{A,z} = k_G(\overline{P}_{A,G} - \overline{P}_{A,L}) = k_y(y_{A,G} - y_{A,i}) \quad (\text{ec. 2. 36}) \quad \text{Fase Gaseosa.}$$

$$N_{A,z} = k_L(C_{A,i} - C_{A,L}) = k_x(x_{A,i} - x_{A,L}) \quad (\text{ec. 2. 37}) \quad \text{Fase Líquida.}$$

$$N_{A,z} = k_G(\overline{P}_{A,G} - \overline{P}_{A,L}) = k_L(C_{A,i} - C_{A,L})$$

$$-\frac{k_L}{k_G} = \frac{(\overline{P}_{A,G} - \overline{P}_{A,L})}{(C_{A,i} - C_{A,L})} \quad (\text{ec. 2. 38})$$

Donde:

$$k_G(=) \frac{\text{moles de A transferidos}}{(\text{Tiempo})(\text{Área interfásica})(\text{Presión})} \quad (\text{ec. 2. 39})$$

$$k_y(=) \frac{\text{moles de A transferidos}}{(\text{Tiempo})(\text{Área interfásica})(\text{Fracción molar})} \quad (\text{ec. 2. 40})$$

$$k_L(=) \frac{\text{moles de A transferidos}}{(\text{Tiempo})(\text{Área interfásica})(\text{Concentración(molA/vol)})} \quad (\text{ec. 2. 41})$$

$$k_x(=) \frac{\text{moles de A transferidos}}{(\text{Tiempo})(\text{Área interfásica})(\text{Fracción molar})} \quad (\text{ec. 2. 42})$$

2.5 COEFICIENTES GLOBALES DE TRANSFERENCIA DE MASA.

En determinaciones experimentales de la rapidez de la transferencia de masa, generalmente es posible determinar, por muestreo y análisis, las concentraciones de soluto en la masa total de los fluidos. Sin embargo, el muestreo adecuado de los fluidos en la interface es generalmente imposible, puesto que la mayor parte de las diferencias de concentración, como $y_{A,G} - y_{A,i}$, tienen lugar en distancias extremadamente pequeñas. Un aparato ordinario de muestreo resultaría tan grande en comparación con esta distancia que sería imposible acercarse lo suficiente a la interface. Por tanto, el muestreo y el análisis proporcionarán $y_{A,G}$, o $x_{A,L}$, pero no $y_{A,i}$ ni $x_{A,i}$. En estas circunstancias, sólo puede determinarse un efecto global en función de las concentraciones en la masa principal. Sin embargo, estas concentraciones

no tienen de suyo las mismas bases en función del potencial químico. A partir de la Imagen 8, tenemos que la curva de distribución en el equilibrio es única a temperatura y presión dadas, entonces y_A^* , en el equilibrio con $x_{A,L}$, es una medición a partir de $x_{A,L}$, tan adecuada, como lo es $x_{A,L}$ mismo, y más aún, teniendo la misma base que $y_{A,G}$. Entonces, el efecto completo de la transferencia de masa de las dos fases puede medirse en función de un coeficiente global de transferencia de masa K_y .

$$N_{A,z} = K_G(\overline{P}_{A,G} - \overline{P}_A^*) = K_y(y_{A,G} - y_A^*) \quad (\text{ec. 2. 43})$$

$$N_{A,z} = K_L(C_A^* - C_{A,L}) = K_x(x_A^* - x_{A,L}) \quad (\text{ec. 2. 44})$$

Donde:

P_A^* es la presión parcial de A en el equilibrio con $C_{A,L}$ en la fase líquida y y_A^* es la composición del gas en el equilibrio.

C_A^* es la concentración de A en el equilibrio con $P_{A,G}$ en la fase gaseosa y x_A^* es la composición del líquido en el equilibrio.

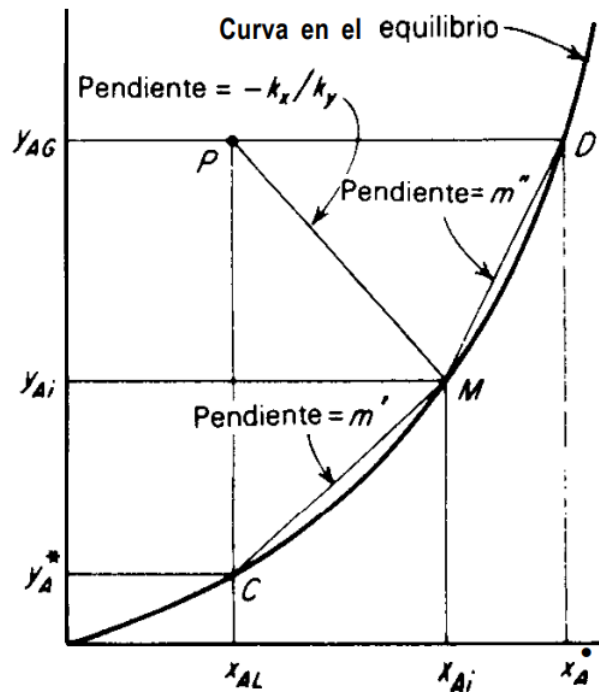


Figura 10: Diagrama de equilibrio donde se muestran las diferencias globales de concentración. (Treybal, 1986).

A partir de la geometría se tiene que m' es la pendiente de la cuerda CM. Sustituyendo las diferencias de concentración por sus (flux/coeficiente) equivalentes.

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{m}{k_L} \quad (ec. 2.45)$$

$$\frac{1}{K_y} = \frac{1}{k_y} + \frac{m}{k_x} \quad (ec. 2.46)$$

Esto muestra la relación entre los coeficientes de transferencia para cada fase por separado; el coeficiente global tendrá la forma de una suma de resistencias, de la misma forma para líquido con la pendiente de la cuerda MD.

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{m k_G} + \frac{1}{k_L} \quad (ec. 2.47)$$

$$\frac{1}{K_x} = \frac{1}{m' k_y} + \frac{1}{k_x} \quad (ec. 2.48)$$

Con las ecuaciones anteriores podemos deducir las relaciones entre las resistencias:

$$\frac{\text{Resistencia en la fase gas}}{\text{Resistencia total en ambas faces}} = \frac{\frac{1}{k_G}}{\frac{1}{K_G}} \quad (ec. 2.49)$$

$$\frac{\text{Resistencia en la fase líquida}}{\text{Resistencia total en ambas faces}} = \frac{\frac{1}{k_L}}{\frac{1}{K_L}} \quad (ec. 2.50)$$

Cuando la relación de equilibrio es lineal la relación entre los coeficientes totales puede obtenerse por:

$$\overline{P_{A,G}} = m C_A^* \quad (ec. 2.51)$$

$$\overline{P_A^*} = m' C_{A,L} \quad (ec. 2.52)$$

En estas condiciones la pendiente puede ser dada por la ley de Henry. La cual establece que la cantidad de gas disuelta en un líquido (concentración) a temperatura constante es proporcional a la presión parcial del gas sobre el líquido.

En el caso de un gas soluble, “m” es pequeña, por lo que podemos afirmar que la mayor resistencia a la transferencia de masa se encuentra en la fase gaseosa; por lo que se dice que el sistema está controlado por la fase gaseosa. En caso contrario cuando la m es grande se dice que el sistema está controlado por la fase líquida.

2.6 OPERACIONES DE HUMIFICACIÓN.

Son operaciones de contacto directo entre dos fases inmiscibles (gas/líquido), a diferente temperatura, e involucran transferencia de calor y de masa simultáneas a través de una interface. La fase gaseosa puede ser una mezcla (gas/vapor). La fase líquida se considera pura (el gas es insoluble en el líquido).

Estas operaciones se designan genéricamente como Humidificación y Deshumidificación.

- Humidificación: se aumenta el contenido de vapor del gas (o la mezcla).
- Deshumidificación: se reduce el contenido de vapor de la mezcla por condensación parcial.

Algunas aplicaciones de estas operaciones tenemos:

- I. Enfriamiento de un gas o una mezcla (gas/vapor) caliente por contacto directo con un líquido frío. El gas (o la mezcla gas/vapor) se enfría debido a la vaporización parcial del líquido, aumentando su contenido de “humedad”.
- II. Humidificación de un gas: contacto directo de una mezcla (gas/vapor) caliente (baja humedad) con un líquido frío que se vaporiza enfriando la mezcla y aumentando su contenido de humedad hasta un cierto valor requerido (por ejemplo, aire para ingresar en un secador).
- III. Deshumidificación de una mezcla gas/vapor caliente por contacto directo con un líquido frío. Parte del vapor condensa disminuyendo la humedad de la mezcla. (Acondicionamiento de aire).

- IV. Enfriamiento de un líquido por contacto directo con un gas (o una mezcla gas/vapor de baja humedad) frío. El líquido se enfría por transferencia de calor sensible y también por evaporación parcial. El gas (o la mezcla) aumentan su temperatura y contenido de humedad. (Ej: enfriamiento evaporativo de agua por contacto directo con aire ambiente).

En estos casos se lleva a cabo:

- Transferencia de calor sensible (del gas al líquido o del líquido al gas).
- Transferencia de calor latente (desde la interface a la fase gaseosa, o desde la fase gaseosa a la interface).
- Transferencia de masa (desde la interface a la fase gaseosa, o desde la fase gaseosa a la interface). No existe transferencia de masa en la fase líquida ya que ésta es pura.

2.6.1 CLASIFICACIÓN DE SISTEMAS DE ENFRIAMIENTOS EVAPORATIVO DE AGUA.

- I. **Estanques o piletas:** existen dos tipos de estanques los cuales se mencionan a continuación:
- **Estanques simples:** el área de interface es la que suministra la superficie del líquido en la pileta. El flujo del aire (viento) es paralelo a la superficie del agua.
 - **Estanques con rociadores:** se aumenta la interface colocando sobre la pileta líneas de caños con rociadores que sobresalen (alimentados con el agua de la pileta) que generan un volumen de gotas en contacto con el aire. En ese volumen se da flujo cruzado del aire (viento) con respecto al agua (gotas que ascienden desde los rociadores y caen a la pileta).
- II. **Torres atmosféricas:** son aquellas en que se pone en contacto el agua, alimentada a la cabeza de la torre, con el aire que circula debido a la velocidad del viento entrando y saliendo de la torre a través de persianas colocadas en los costados de la misma (flujo cruzado agua/ aire), véase figura.

Las torres atmosféricas pueden ser:

- Con rociadores, sin relleno.
- Con distribuidor de agua y relleno.

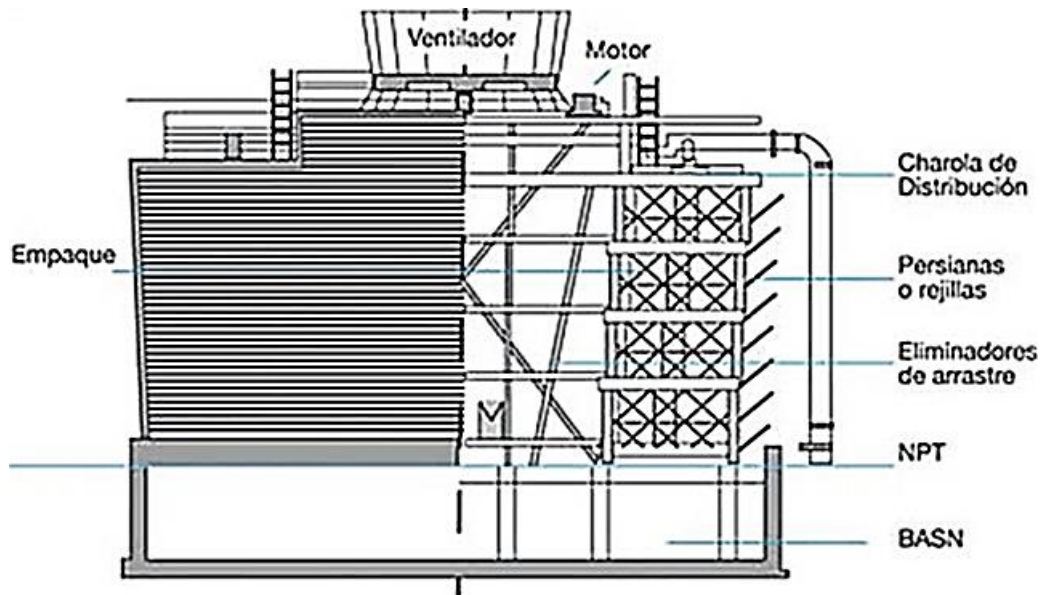


Figura 11: Esquema de torre de enfriamiento. (Cerna, 2012).

III. Torres de tiro natural o hiperbólicas: equipos de altura y diámetro muy importantes, usados para enfriar cantidades muy importantes de agua. El flujo ascendente del aire se genera por diferencias de densidad entre el aire frío que ingresa y el aire caliente que egresa. La diferencia es mayor cuando más húmedo sea el aire ambiente. La forma del equipo favorece el tiraje. La zona donde se produce transferencia de calor y masa está en la parte inferior de la torre: una pileta de forma anular alimenta el agua caliente al relleno poniéndola en contacto con el aire. Debajo de éste una pileta recoge el agua fría.

IV. Torres de tiro mecánico: la circulación del aire a través del equipo se realiza por medio de un impulsor (ventilador). Según la ubicación del mismo se pueden dividir como:

- Tiro inducido: ventilador colocado en la cabeza de la torre véase figura 11.

- Tiro forzado: ventilador en la base de la torre.

Estas torres tienen relleno de distintos tipos. Según la circulación del agua y el aire a través del equipo se las clasifica en:

- a) Torres de tiro inducido.
- b) flujos en co-corriente.
- c) flujos en contracorriente.
- d) flujo cruzado.
- e) Torres de tiro forzado (sólo operan con flujos en contracorriente).

La mayor diferencia entre los estanques simples y los restantes equipos es el área de interface que suministran. En los primeros es la superficie del líquido en contacto con el aire, y para lograr altas áreas de interface ocupan áreas importantes. En los restantes, y por distintos medios (rociadores, relleno) se aumenta mucho el área de interface lográndose un equipo mucho más compacto, aunque de mayor costo.

2.6.2 DEFINICIÓN DE TÉRMINOS EN SISTEMAS DE ENFRIAMIENTO EVAPORATIVO.

Estos equipos normalmente operan en un circuito cerrado: reciben el agua caliente proveniente de los servicios de enfriamiento de la planta (intercambiadores de calor, reactores, condensadores, etc.) y la enfrían para que pueda ser re utilizada. Es por esto que hay que tener claro los siguientes términos en sistemas de enfriamiento evaporativos tales como:

- a) **Circulación o carga de agua (L)**: flujo másico de agua caliente alimentado al sistema de distribución y circulado a través del equipo véase figura 12.
- b) **Carga de aire (G)**: flujo másico de aire, expresado en aire seco, que ingresa al equipo. Es un valor constante entre la entrada y salida.

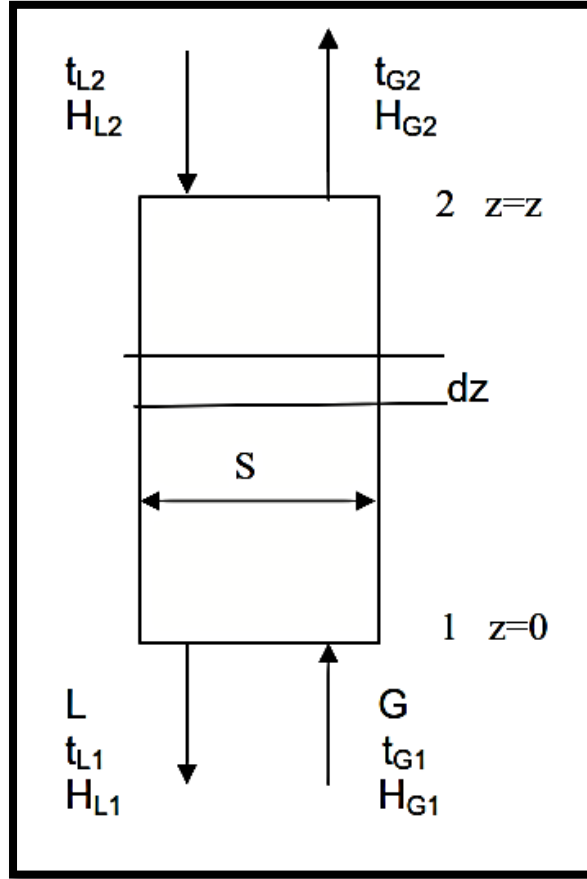


Figura 12: Torre de enfriamiento en contracorriente de sección transversal circular. (McCabe et al, 2007).

- c) **Rango de enfriamiento (R)**: diferencia entre las temperaturas de entrada y salida del agua al equipo.

$$R = t_{L2} - t_{L1} \quad (ec. 2.53)$$

- d) **Aproximación (A)**: diferencia entre la temperatura de salida del agua fría (t) y la temperatura de bulbo húmedo del aire de entrada (t_{wb1}). Esta última es la mínima temperatura a la que podría enfriarse el agua en un equipo ideal cuya interface fuese infinita. La aproximación nos indica cuánto se acerca el equipo real al ideal, y se fijan valores mínimos en base a consideraciones económicas.

$$A = t_{L1} - t_{wb1} \quad (ec. 2.54)$$

e) **Carga térmica (Q)**: es la cantidad de calor eliminado del agua en el equipo.

$$Q = L C_{pL} (t_{L2} - t_{L1}) \quad (ec. 2.55)$$

f) **Arrastre**: cantidad de agua que es arrastrada por el aire de salida en forma de finas gotas. Se trata de minimizar el arrastre por medios mecánicos (eliminadores de arrastres, persianas, etc.) pues representan una pérdida de agua y ocasionan deterioros en equipos cercanos. En torres de tiro mecánico se estiman en 0.1 a 0.2% del flujo de agua circulada.

g) **Evaporación (E)**: es el flujo másico de agua que se requiere evaporar en el equipo para lograr eliminar la carga térmica Q del agua circulada. (y que se incorpora al aire aumentando su temperatura y humedad)

$$E = \frac{Q}{\lambda} = \frac{L C_{pL} (t_{L2} - t_{L1})}{\lambda} \quad (ec. 2.56)$$

Normalmente E está entre 1 y 5% del agua circulada.

f) **Reposición (Lo)**: es el flujo másico de agua que debe ser agregado al circuito para compensar las pérdidas de agua debidas a la evaporación, el arrastre y las purgas.

g) **Purga (P)**: en el equipo se pierde agua (pura) por evaporación (el arrastre es muy pequeño) y se repone con agua (que contiene sólidos).

Al cabo de varios ciclos de operación el contenido de sólidos en el agua recirculada va aumentando ocasionando problemas (obstrucciones, corrosión). Para mantener constante el contenido de sólidos es necesario realizar purgas, las que pueden ser intermitentes o continuas.

2.6.3 ECUACIONES FUNDAMENTALES PARA OPERACIONES DE ENFRIAMIENTO EVAPORATIVO.

En el enfriamiento evaporativo de agua con aire interesa obtener las ecuaciones de:

- I. Balance de masa.
- II. Balance térmico.
- III. Transferencia de calor.

IV. Transferencia de masa.

Consideremos una torre de sección transversal circular de área S , véase figura 13 en la que se enfría una carga de agua (L) desde t_{L2} hasta t_{L1} , circulando en contracorriente con una carga (G) de aire ambiente.

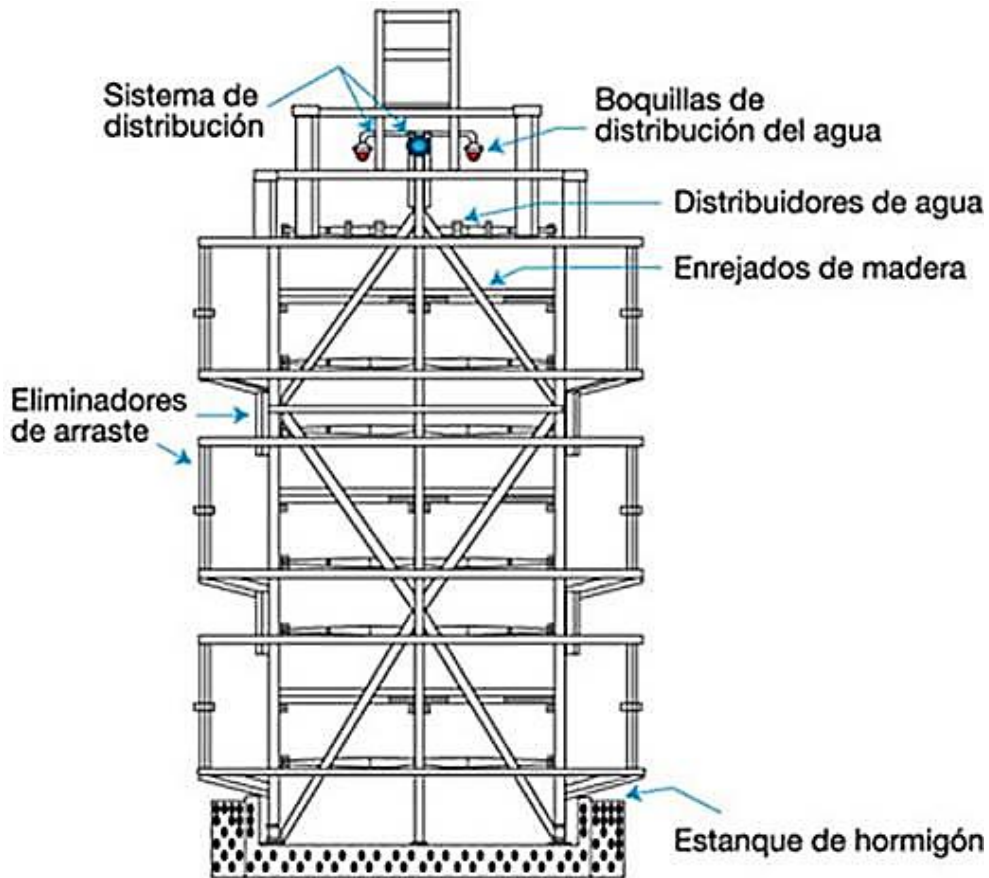


Figura 13: Torre enfriamiento atmosférica. (Cerna, 2012).

Suponemos:

- I. *Proceso adiabático.*
- II. *Sección 1: base de la torre.*
- III. *Sección 2: cabeza de la torre.*
- IV. *G : lb aire seco /h ft² de sección transversal de torre.*
- V. *L : lb de agua /h ft² alimentada a la torre.*
- VI. *G es constante desde la base a la cabeza de la torre ($G_1 = G_2$).*
- VII. *L varía desde la cabeza a la base de la torre debido a la evaporación ($L_2 < L_1$).*

VIII. El aire se considera insoluble en el agua.

I. Balance de masa.

Para el agua en el elemento de torre de altura dz.

$$dL = GdY \quad (ec. 2.57)$$

El agua evaporada aumenta la humedad absoluta del aire (Y).

II. Balance térmico.

Considerando proceso adiabático a presión constante. Como la evaporación está entre 1 y 5% de (L.S), a los efectos del balance térmico se supone que L es constante.

$$GdH_G = LdH_L \quad (ec. 2.58)$$

H_G : entalpía relativa de una mezcla aire/vapor de agua a t_G y P constante, y se expresa como la suma de las entalpías de los componentes más un término de interacción, que para el sistema aire/ agua puede despreciarse.

$$H_{\text{aire}} = C_{p_{\text{aire seco}}} (t_G - t_o) \quad (\text{Btu/lb aire seco}) \quad (ec. 2.59)$$

$$H_{\text{vapor}} = \lambda_o + C_{p_{\text{vapor}}} (t_G - t'_o) \quad (\text{Btu/lb agua}) \quad (ec. 2.60)$$

Estados de referencia:

$$H_{\text{aire}} = 0 \quad \text{a} \quad t_o = 0^\circ\text{F}$$

$$H_{\text{agua líquida}} = 0 \quad \text{a} \quad t'_o = 32^\circ\text{F}$$

λ_o : calor de vaporización del agua a t'_o

$$H_G = C_{p_{\text{aire seco}}} (t_G - t_o) + Y[\lambda_o(t_G - t'_o)] \left(\frac{\text{Btu}}{\text{lb}_{\text{aire seco}}} \right) \quad (ec. 2.61)$$

Y : humedad absoluta del aire en (lb agua/lb aire seco).

Para la mayoría de los cálculos puede tomarse como referencia:

$$C_{p_{\text{aire seco}}} = 0.24 \text{ Btu/lb } ^\circ\text{F} \quad \text{y} \quad C_{p_{\text{vapor}}} = 0.45 \text{ Btu/lb } ^\circ\text{F}$$

$$dH_G = C_h dt_G + \lambda_o dY \quad (ec. 2.62)$$

$$C_h = C_{p_{aire\ seco}} + Y C_{p_{vapor\ agua}} \left(\frac{Btu}{lb_{aire\ seco} \text{ } ^\circ F} \right) \quad (ec. 2.63)$$

Dónde:

- C_h es el calor húmedo.
- H_L : entalpía del agua a t_L

Estado de referencia:

$$HL = 0 \quad a \quad t'_o = 32 \text{ } ^\circ F \text{ y } 1 \text{ atm}$$

$$H_L = C_L (t_L - t_o) \quad (ec. 2.64)$$

- C_L : calor específico del líquido.

$$dH_L = C_L dt_L \quad (ec. 2.65)$$

Por lo que el balance de entalpía es:

$$G dH_G = G C_h dt_G + G \lambda_o dY = L C_L dt_L \quad (ec. 2.66)$$

Integrando esta expresión para toda la altura de la torre, suponiendo que C_h y C_L no varían:

$$G(H_{G2} - H_{G1}) = L C_L (t_{L2} - t_{L1}) \quad (ec. 2.67)$$

Con lo que tendríamos la línea de operación de la torre que se presenta en la figura 14.

2.6.4 PERFILES DE TEMPERATURA ENTRE LAS FASES.

Desde que el agua ingresa a la torre a t_{L2} en el distribuidor (Cima de la torre) hasta que llega a la pileta a t_{L1} (Base de la torre) su temperatura va disminuyendo. El aire, circulando en contracorriente, aumenta tanto su temperatura (t_G) como su humedad absoluta (Y).

Para la mayor parte de la altura de la torre se cumple que $t_L > t_G$. En la zona próxima a la base de la torre, puede ocurrir que: $t_i < t_G$ y aún que $t_L < t_G$.

Designando por t_i a la temperatura de la interface agua/aire, los perfiles de temperatura para ambas zonas de la torre cumplen:

Tabla 2.4: Perfiles de temperatura entre faces en una torre de destilación.

Parte superior de la torre	Parte inferior de la torre
$t_L > t_i > t_G$	$t_i < t_G$
	$t_i < t_L$
	$t_L < t_G$ (con $t_L > t_{wb1}$)

Fuente: Welty et al, 2008.

Esto determina la dirección de la transferencia de calor sensible, según se puede véase en las Figuras 14 y 15 siguientes:

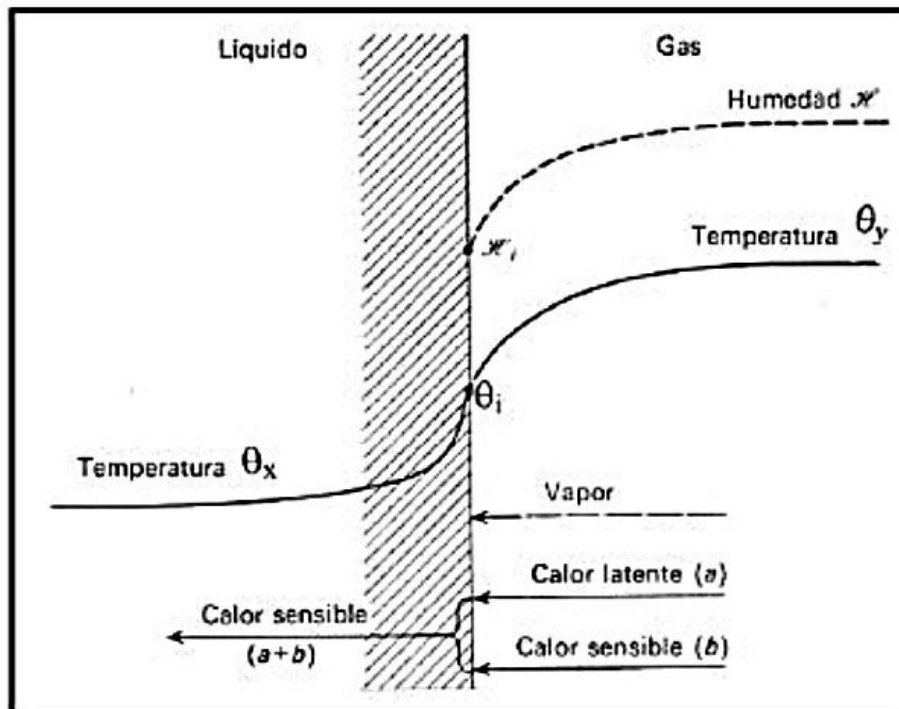


Figura 14: Condiciones en la parte superior de la torre de enfriamiento. (Welty et al, 2008).

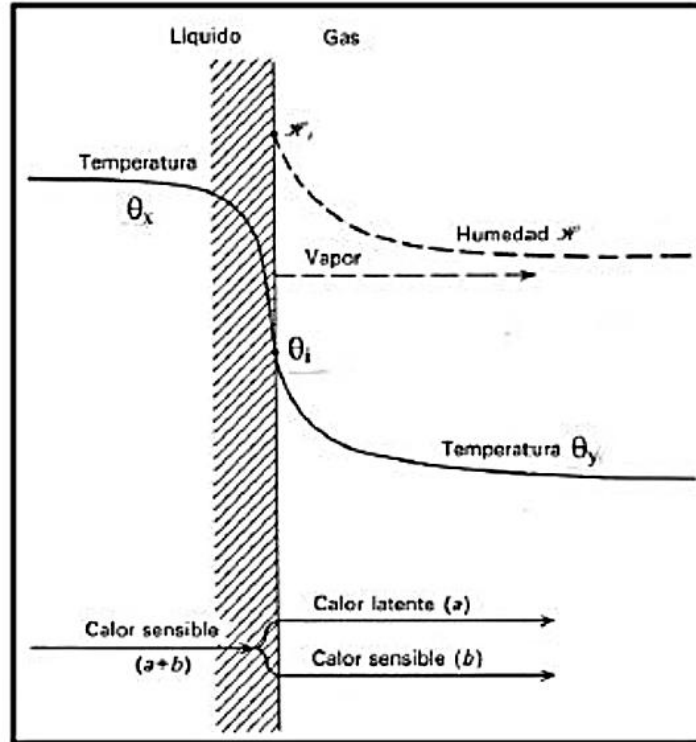


Figura 15: Condiciones en el fondo de la torre de enfriamiento. (Welty et al, 2008).

Las ecuaciones de transferencia de calor se deducen para la zona en que $t_L > t_i > t_G$, que describe el comportamiento de la mayor parte de la torre son:

I. Ecuaciones de transferencia de calor.

En estado estacionario (flujos y temperaturas constantes con el tiempo en cada sección de la torre) se cumple:

$$Q_{\text{sensible de enfriamiento de líquido}} = Q_{\text{vaporización del agua en interface}} + Q_{\text{sensible calentamiento gas}} \quad (\text{ec. 2.68})$$

En cada sección de la torre se tienen valores de la temperatura del agua, temperatura de la interface y temperatura del aire: $t_L > t_i > t_G$.

Estas diferencias de temperatura ocasionan véase figura 16:

- Transferencia de calor sensible desde el líquido a la interface por convección natural o forzada, según que la fase líquida este como gotas (torre con rociadores) o como película que escurre (torre con relleno).
- Transferencia de calor sensible desde la interface al seno del aire en flujo por convección forzada.
- Transferencia de calor latente en la interface por evaporación del agua.

La mayor parte del enfriamiento del agua se debe a la evaporación de parte de ella, el resto aumenta la temperatura del aire. El agua evaporada aumenta la humedad del aire.

Transferencia de calor sensible la expresamos mediante el uso de coeficientes individuales de transferencia de calor, h_L y h_G para la fase líquida y gaseosa, respectivamente. Consideremos dos secciones próximas de una torre con rociadores, separadas por dz . Sea S el área de la sección transversal de la torre. En cada instante las gotas que pasan por cada sección constituyen la interface de la misma.

Suponemos que en dz se puede considerar:

$$(t_L - t_i) = \text{cte}; \quad (t_i - t_G) = \text{cte}; \quad \lambda_{ii} = \text{cte}; \quad (Y_i - Y) = \text{cte}; \quad L = \text{cte}$$

$$Q_{\text{sensible de enfriamiento del líquido}} = h_L dA (t_L - t_i) = L S dH_L \quad (\text{ec. 2.69})$$

$$Q_{\text{sensible de calentamiento del gas}} = h_G dA (t_i - t_G) = G S C_h dt_G \quad (\text{ec. 2.70})$$

Donde, dA es el área de la interface (área superficial de todas las gotas) contenida en el volumen de torre $dV = S dz$. Donde z es la altura.

Si la torre fuese rellena, dA sería el área superficial del relleno contenido $S dz$.

Como es difícil determinar dA , se hace uso del área de interface volumétrica para la transferencia de calor.

a_h : área de interface por unidad de volumen (ft^2/ft^3).

$$dA = a_h dV = a_h S dz \quad (\text{ec. 2.71})$$

Donde a_h es una característica del tipo de interface (gotas o relleno) y del tipo de operación y régimen, y se determina experimentalmente como el producto ($a_h \cdot h_L$) ó ($a_h \cdot h_G$) en un equipo de operación y régimen de flujo que el equipo a escala industrial.

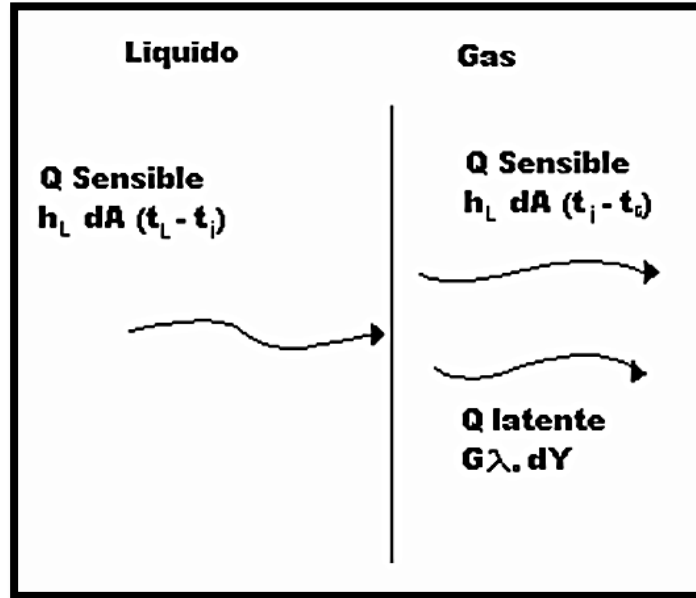


Figura 16: Perfiles de transferencia de calor. (Welty et al, 2008).

Aplicando lo mencionado anteriormente referente a a_h .

$$Q_{\text{sensible de enfriamiento del líquido}} = (h_L a_h) S dz (t_L - t_i) = L S C_L dt_L \quad (\text{ec. 2.72})$$

$$Q_{\text{sensible de calentamiento del gas}} = (h_G a_h) S dz (t_i - t_G) = G S C_h dt_G \quad (\text{ec. 2.73})$$

Reordenando tenemos:

$$\frac{h_L a_h dz}{L C_L} = \frac{dt_L}{(t_L - t_i)} \quad (\text{ec. 2.74})$$

$$\frac{h_G a_h dz}{G C_h} = \frac{dt_G}{(t_i - t_G)} \quad (\text{ec. 2.75})$$

- Transferencia de calor latente: en el elemento de torre de altura dz , desde la interface a la temperatura de la interface (t_i) al seno del aire.

$$Q_{\text{vaporización}} = G S \lambda_o dY \quad (\text{ec. 2.76})$$

II. Ecuación de transferencia de masa.

La transferencia de masa se verifica sólo en la fase gaseosa, por difusión convectiva del agua evaporada en la interface hacia el seno del aire que fluye.

Haciendo uso del modelo de la película estancada, se supone que el mecanismo es difusión molecular del vapor de agua a través del aire (considerado componente estacionario).

Se definen los coeficientes individuales de transferencia de masa k_Y ó k_G según que los potenciales se expresen en humedades absolutas o en presiones parciales del agua entre la interface y el seno del aire.

Por la dificultad en medir el área de interface se usa el área volumétrica de interface a_k que puede ser igual o menor que a_h (es igual en torres con rociadores, y puede ser menor en torres rellenas si parte del relleno no está mojado). El área volumétrica de interface se determina experimentalmente a escala piloto como el producto (a_k, k_Y).

Entre las dos secciones de torre separadas por dz , la cantidad de agua evaporada (lb/h) será:

$$\frac{dY}{(Y_i - Y)} = \frac{(k_Y a_k) dz}{G} \quad (\text{ec. 2.77})$$

Si el potencial está dado en presiones parciales, se tendría una expresión similar:

$$\frac{dP_A}{(P_{Ai} - P_A)} = \frac{(k_Y a_k) dz}{G} \quad (\text{ec. 2.78})$$

Integrando para toda la torre las ecuaciones (2.74), (2.75), (2.77), (2.78), se obtiene el número de unidades de transferencia (NTU) requeridas en esa operación, respectivamente. Las cuales serían el NUT de transferencia de calor en fase líquida, el NUT de transferencia de calor en fase gaseosa y los NUT de transferencia de masa. En ellas aparecen condiciones en las fases (t_L, t_G, Y, P_A) y condiciones en la interface (t_i, Y_i, P_{Ai}).

Como la variación de las condiciones de interface a lo largo de la torre no puede expresarse como función de las condiciones de las fases, la integración directa no puede ser realizada. Se requiere transformar las expresiones para que sean integrables.

Haciendo uso de la relación de Lewis: $h_G / (k_Y Ch) = 1$ para el sistema aire/agua.

$$h_G = k_Y C_h \quad y \quad a_h = a_k \quad (ec. 2.79)$$

Llegamos a la expresión:

$$\frac{dt_L}{H_i - H_G} = \frac{k_Y a_k dz}{L C_L} \quad (ec. 2.80)$$

En esta ecuación la única variable de la interface es H_i que es la entalpía del aire saturado a la temperatura (t_i). De igual forma se vincula el cambio de propiedad (temperatura del líquido que se enfría) con el potencial que lo produce (humidificación y calentamiento del aire, expresado por medio de su entalpía).

Si suponemos que la resistencia a la transferencia de calor en el líquido es mucho menor que la resistencia a la difusión en el aire (quien controla la transferencia de calor y masa simultáneamente, es el mecanismo de difusión del vapor en el aire), podemos tomar que la temperatura del líquido es igual a la de la interface ($t_i \approx t_L$), por lo tanto H_i es la entalpía del aire saturado a t_L , lo que permite su determinación por medio de tablas de aire (Perry 6ª edición, T 12-1) ó de la carta psicrométrica (Perry 6ª edición, Fig. 12-1 a 12-3). Así integrando para toda la torre se obtiene el número de unidades de transferencia respectivamente de la transferencia de calor y más, tanto en la fase líquida como entre el líquido y el gas.

Todas las expresiones de NTU son adimensionales, a excepción de la que está relacionada con las entalpías. De estas expresiones de NUT puede obtenerse la altura de la torre (z) que requiere esa operación, lo que permite dimensionar la torre.

2.6.5 DIAGRAMA $H_G - t_L$.

Si se grafica la entalpía del aire húmedo (H_G) vs. La temperatura del agua (t_L), se tiene una recta con pendiente LC_L / G con lo que tendríamos la línea de operación de la torre, expresada en el balance térmico entre la fase líquida y la fase gaseosa, para cualquier sección de la torre comprendida entre la base y la cabeza de la misma (torre de sección transversal circular).

$$H_G = H_{G1} + \left(\frac{LC_L}{G}\right) (t_L - t_{L1}) \quad (ec. 2.81)$$

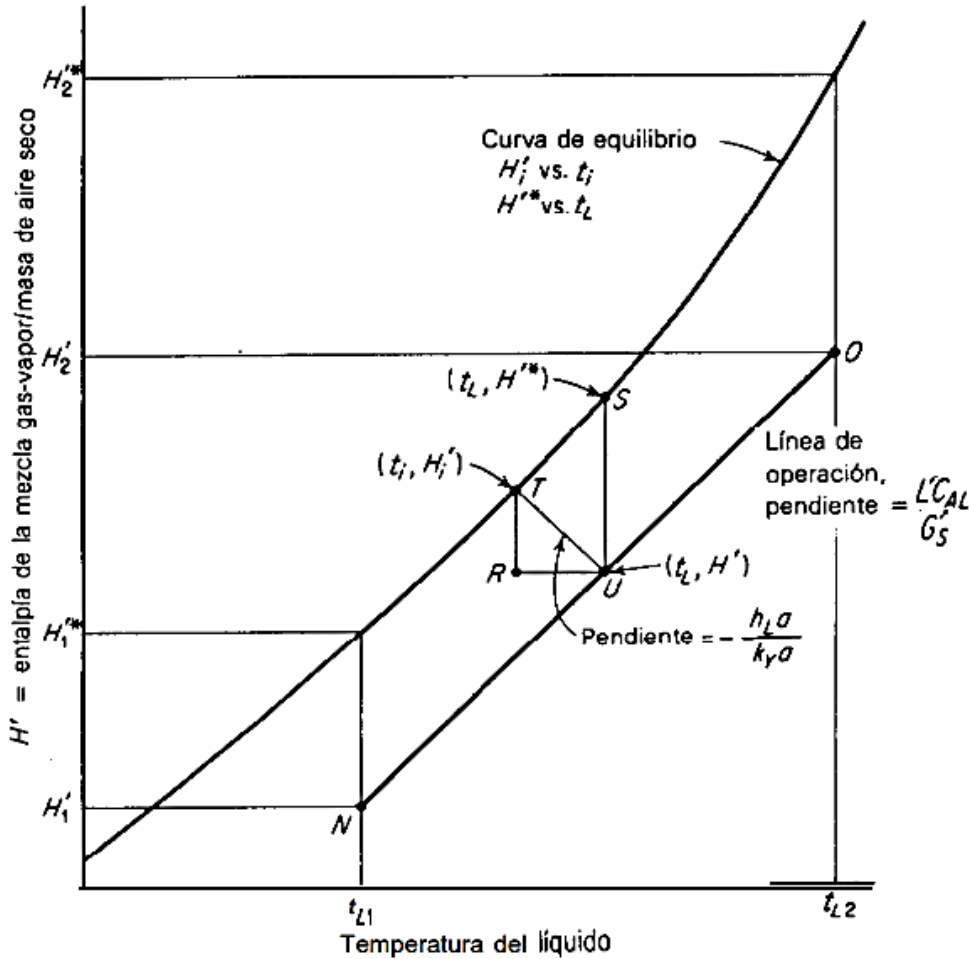


Figura 17: Diagrama $H_G - t_L$. (Treybal, 1986).

La curva de equilibrio representa las condiciones de equilibrio en la interface, donde H_i es la entalpía del aire saturado a la temperatura de la interface que sería la entalpía del líquido ($t_i=t_L$), a presión atmosférica.

Para la línea de potencial se tiene:

$$\frac{H_G - H_i}{t_L - t_i} = - \frac{h_L}{k_Y \sigma'} \quad (ec. 2.82)$$

Por la suposición hecha para tomar que $t_i = t_L$ se puede aproximar que las líneas de potencial tienen pendiente infinita ($h_L \gg \gg k_Y$).

Dentro del diagrama en la parte de las abscisas, aparece el Rango (R) y la Aproximación (A):

$$R = t_{L2} - t_{L1} \quad (\text{ec. 2.83})$$

$$A = t_{L1} - t_{wb1} \quad (\text{ec. 2.84})$$

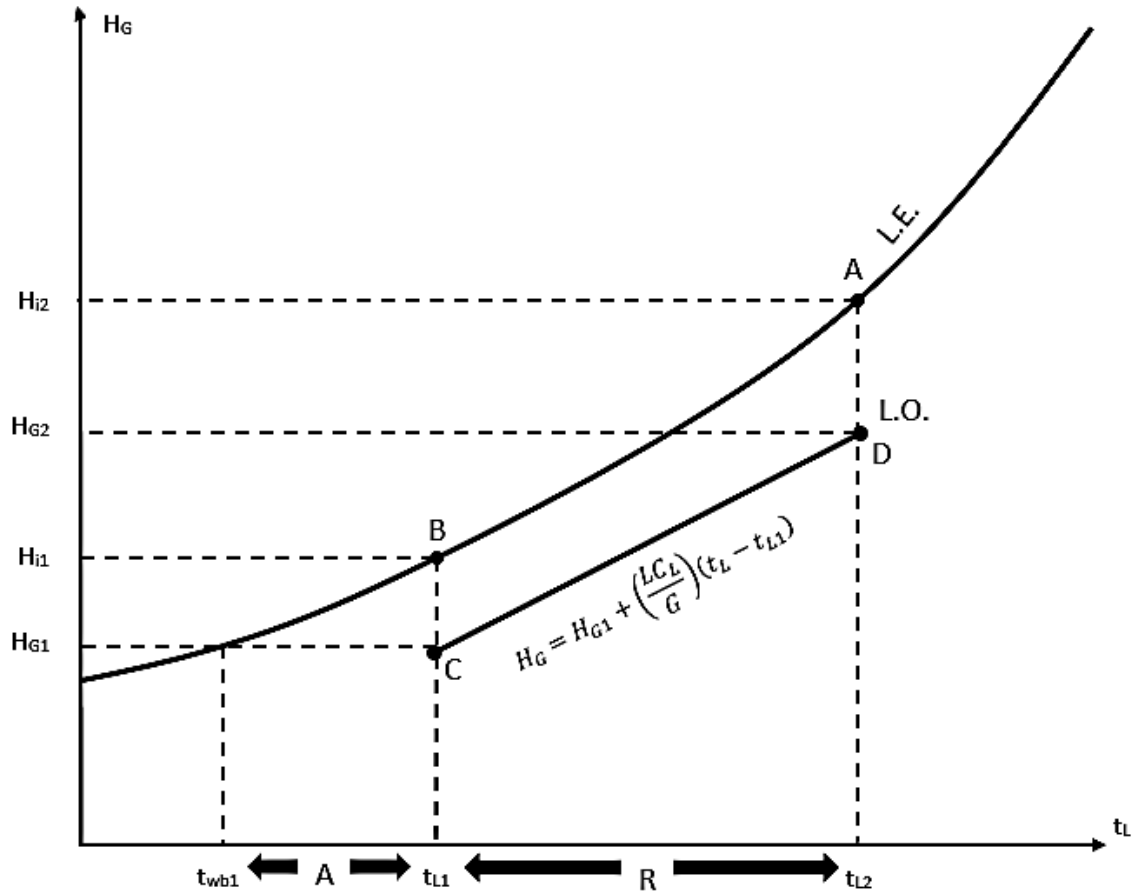


Figura 18: Explicación para la construcción de diagrama $H_G - t_L$ (McCabe et al, 2007).

Donde se puede apreciar en la figura 18, lo que a continuación se describe:

○ Línea de operación.

C: base de la torre; aire ambiente (supuesto saturado) en contacto con agua fría a t_{L1}

D: cabeza de la torre; aire de salida de la torre en contacto con agua caliente a t_{L1}

○ Interface Agua – Aire.

Suponiendo $t_i = t_L$

A: interface en la cabeza de la torre (aire saturado a t_{L2}).

B: interface en la base de la torre (aire saturado a t_{L1}).

2.6.6 MÉTODOS PARA EVALUAR NTU.

Evaluando NTU (Numero que mide la dificultad para efectuar la separación de las partículas de soluto), de cualquiera de sus expresiones, se obtiene la altura z requerida por la torre para la operación considerada. Las ecuaciones generalmente utilizadas son las resultantes del análisis de transferencia de masa.

I. Integración Numérica

Trabajando por intervalos. Tomando $t_i = t_L$

$$NTU_G = \int_1^2 \frac{dH_G}{(H_i - H_G)} = \frac{k_Y a_k z}{G} \quad (ec. 2.85)$$

Se divide el rango t_{L1} a t_{L2} en intervalos tales que permitan suponer que $(H_i - H_G)$ es constante en el intervalo, y se calcula para la temperatura superior del mismo.

Donde:

- H_i - entalpía del aire saturado a t_L (tablas o diagrama psicrométrico).
- H_G - se determina por la línea de operación a partir de H_{G1}

Luego se grafica $(1 / (H_i - H_G))$ vs H_G , e integra numérica o gráficamente.

II. Método de Carey y Williamson.

Supone que la función $(H_i - H_G) = \Delta H$ varía en forma parabólica desde la base a la cabeza de la torre y la define por tres puntos:

- Base de la columna: ΔH_1
- Cabeza de la columna: ΔH_2
- ΔH_m sección en que el agua está a la temperatura $t_{Lm} = (t_{L1} + t_{L2}) / 2$

$$\Delta H_1 = (H_{i1} - H_{G1}) \quad (ec. 2.86)$$

Donde:

- H_{i1} : aire saturado a t_{L1} (tablas o diagrama psicométrico).
- H_{G1} : aire ambiente (se le puede considerar saturado a t_{wb1} ; supuesto conservativo).

$$\Delta H_2 = (H_{i2} - H_{G2}) \quad (ec. 2.87)$$

Donde:

- H_{i2} : aire saturado a t_{L2} (tablas o diagrama psicométrico).
- H_{G2} : con ecuación de línea de operación (ec. 2.87).

$$\Delta H_m = (H_{im} - H_{Gm}) \quad (ec. 2.88)$$

Donde:

- H_{im} : aire saturado a t_{Lm} (tablas o diagrama psicométrico).
- H_{Gm} : utilizando la ecuación de línea de operación (ec. 2.88), pero a condiciones 2 de t_{Lm}

Define el potencial medio efectivo por $f \Delta H_m$ a usar en la ecuación resultante de la transferencia de masa:

$$\int_1^2 \frac{dH_G}{H_i - H_G} = \frac{H_{G2} - H_{G1}}{f \Delta H_m} = \frac{k_Y a_k z}{G} = NTU \quad (ec. 2.89)$$

$$\int_1^2 \frac{dt_L}{H_i - H_G} = \frac{t_{L2} - t_{L1}}{f \Delta H_m} = \frac{k_Y a_k z}{G} = NTU \quad (ec. 2.90)$$

El factor f se obtiene de la figura 19 adjunta, donde se grafica $(\Delta H_m / \Delta H_1)$ vs $(\Delta H_m / \Delta H_2)$, siendo f el parámetro de las curvas. (La ordenada y la abscisa son intercambiables).

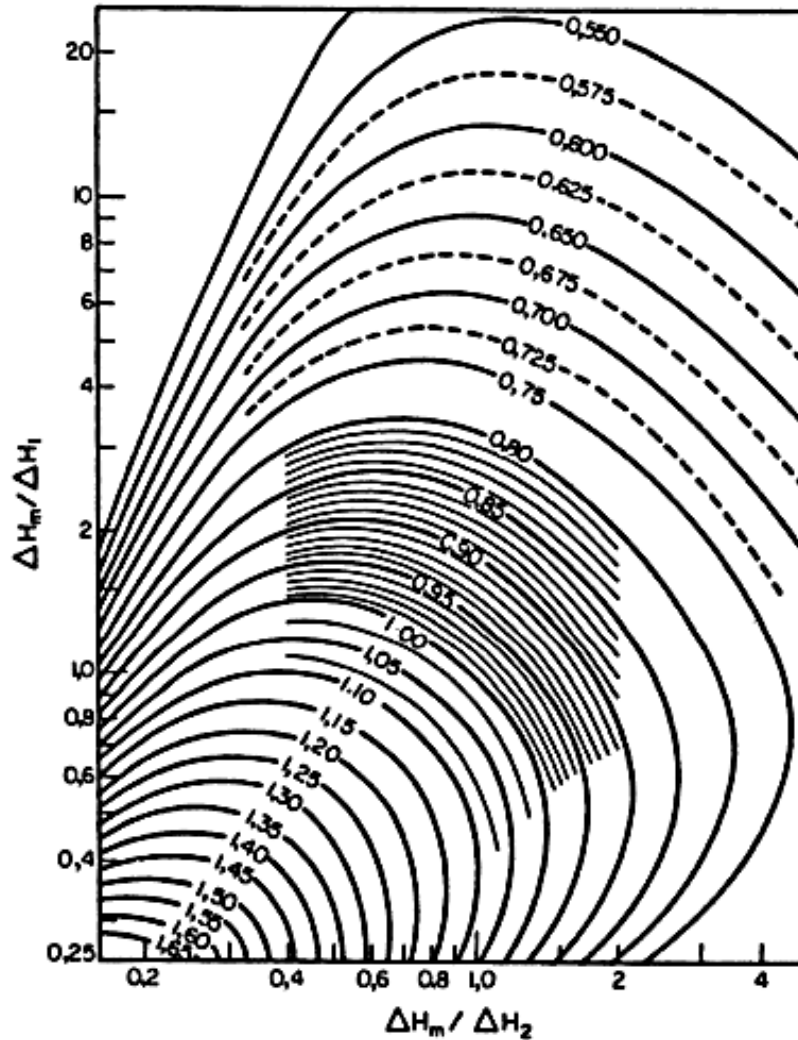


Figura 19: Factor de corrección f para obtener la fuerza impulsora media eficaz en la columna. (Coulson, 2004).

III. Método por el Nomograma de Woods y Betts (Perry 6ª edición, Fig. 12-13).

Es un método aproximado para estimaciones rápidas. En la escala de la izquierda se da el valor de $NTU = k_Y a_k z / L C_L$, conociendo t_{L1} , t_{L2} , t_{wb1} , L y G se calculan el rango y la aproximación.

Con el rango y t_{L1} se determina un punto; se traza una recta que pase por ese punto y t_{wb1} . Se traza una recta paralela a la anterior que pase por el valor de L/G . La intersección de ésta con la escala izquierda da el valor de NTU .

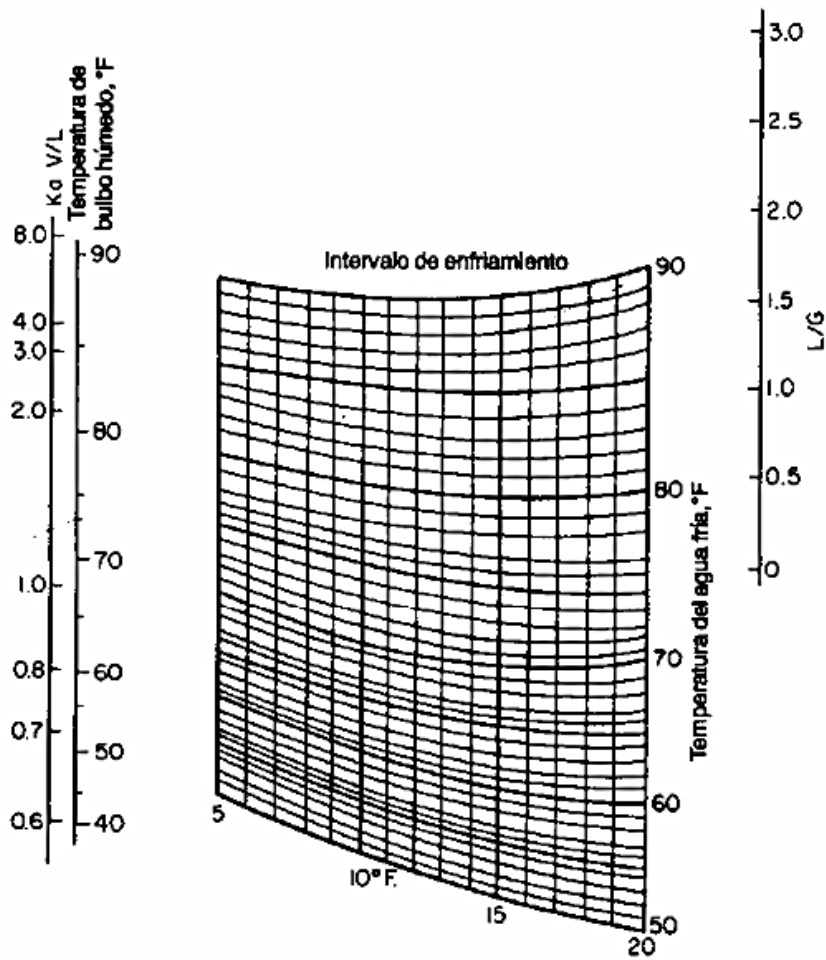


Figura 20: Nomograma de las características de una torre de enfriamiento para el cálculo de NTU. (Perry, 2001).

2.6.7 MÉTODO DE MICKLEY.

Mickley (1949) propuso un método para determinar los coeficientes individuales llevando a cabo un único experimento de interacción aire-agua en una columna con una altura conocida del relleno en estudio, sin recirculación de agua.

El método se basa en una ecuación deducida por Mickley a partir de la ecuación para la línea de potencial, conforme a la relación de Lewis:

$$\frac{dH}{dt_G} = \frac{H_i - H}{t_i - t_G} \quad (\text{ec. 2.91})$$

La ecuación anterior relaciona la temperatura y la entalpía del aire en una sección de la columna (H, t) con las condiciones en la interface en la misma sección (H_i, t_i), de modo que la recta que une ambos puntos representa la pendiente de la curva H-t representativa de las condiciones del aire véase figura 22.

La ecuación de Mickley permite:

- Conocidos los coeficientes de transporte, trazar la curva H-t representativa de las condiciones del aire a lo alto de la columna.
- Con los resultados de un ensayo en una columna de altura de relleno conocida, determinar los coeficientes individuales.

Para la construcción del método de Mickley es necesario seguir una serie de pasos los cuales se describen a continuación:

I. Trazado de la curva H -T.

En la figura 22, se muestran las líneas de operación, equilibrio y reparto para una operación de humidificación o enfriamiento de agua (coeficientes de transporte conocidos). A partir de la temperatura de entrada del aire, t_1 , conocida, puede trazarse la curva H - T del siguiente modo véase figura 21:

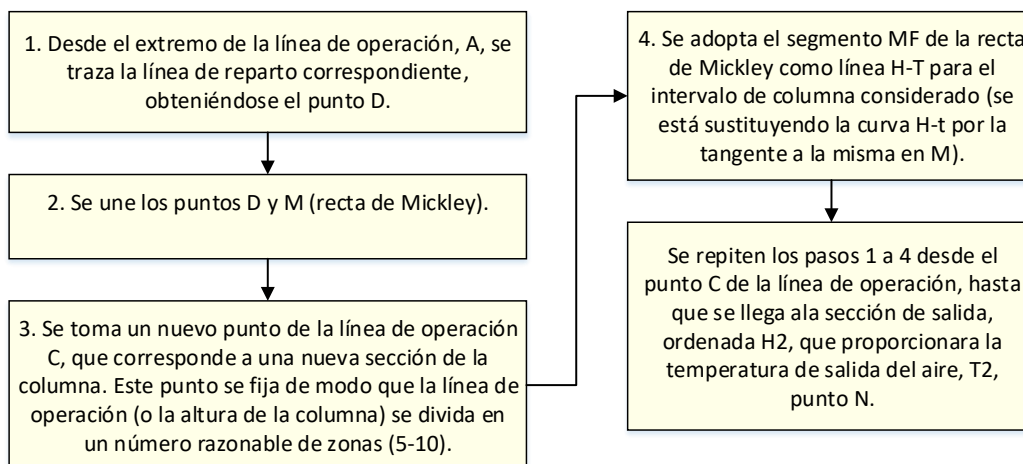


Figura 21: Pasos para el trazo de la curva H-T.

El conocimiento de la variación de temperatura del aire a lo alto de la columna tiene interés ya que puede comprobarse si en alguna zona el aire se satura (proximidad o superación de la curva de equilibrio) lo que puede dar lugar a la formación de nieblas dentro de la columna.

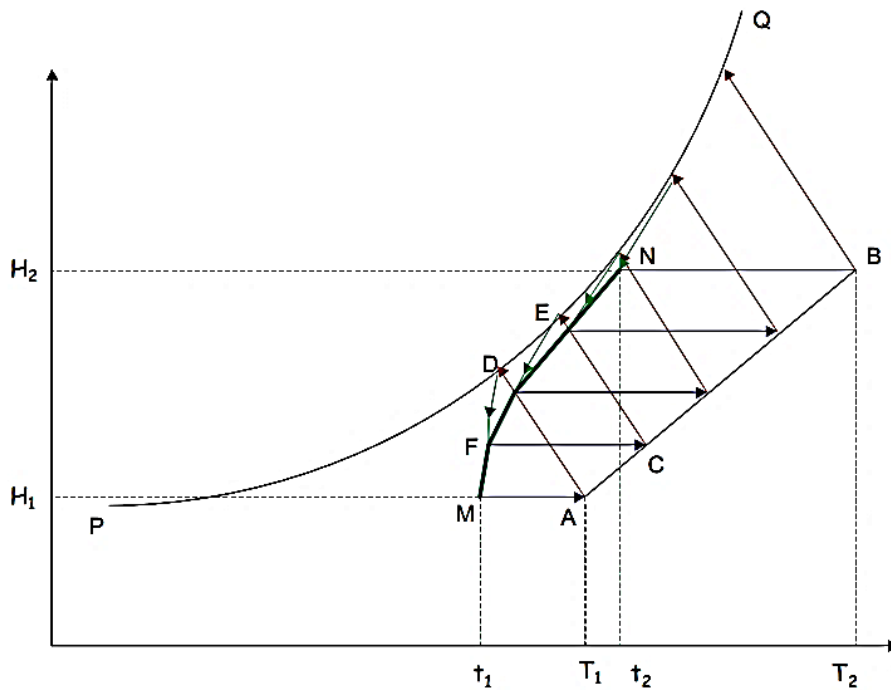


Figura 22: Ejemplo de un gráfico mostrando la construcción del método de Mickley.

II. Determinación de los coeficientes individuales.

Se realiza un ensayo en una columna de altura de relleno conocida, y se miden los caudales y temperaturas de entrada y salida de gas y líquido, y la humedad absoluta del aire a la entrada y a la salida de la columna.

Se supone un valor de la pendiente de la línea de reparto, $-h_L/k'$ y se traza la curva H-t, siguiendo el método de Mickley. Si la temperatura de salida del aire calculada coincide con la medida experimentalmente se da por bueno el valor de la pendiente de la línea de reparto. En caso contrario, se ensaya otro valor para la misma hasta conseguir la coincidencia.

Con el valor correcto de la citada pendiente se calcula el número de unidades de transferencia y con la altura conocida de relleno, la altura de una unidad de transferencia. A partir de ella y del caudal de gas o líquido se obtiene $k'a$.

De la pendiente de la línea de reparto se calcula h_{La} y, finalmente, de la relación de Lewis, h_{ca} .

2.6.8 INFLUENCIA DE LAS CONDICIONES DE PROCESO.

- a) Se analizan por medio del diagrama $H_G - t_L$: el área entre la línea de operación y la curva de equilibrio se considera proporcional al potencial total, por lo que todo cambio que tienda a disminuir esta área representa una disminución del potencial en la torre.
- b) Insaturación del aire de entrada: si el aire de entrada no está saturado a t_{wb1} su entalpía será menor que la del aire saturado, aunque la diferencia es pequeña, y la línea operatoria de la torre se desplaza levemente hacia abajo. Para torres de tiro mecánico se acostumbra a suponer, en forma conservativa, que el aire está saturado a t_{wb1} .
- c) Aproximación a temperatura de bulbo húmedo: si L/G es constante, al operar con menor aproximación (menor t_{L1}) la línea operatoria se acerca a la curva de equilibrio disminuyendo el potencial.
- d) Variaciones en la relación L/G : si el rango está fijo, el aumento de (L/G) por aumento de L a $G = \text{cte.}$ o por disminución de G a $L = \text{cte.}$ disminuye el potencial. Se trataría de enfriar más agua con igual caudal de aire o enfriar la misma cantidad de agua con menos aire. Las variaciones de L y G están limitadas (normalmente en $\pm 20\%$ de los valores de diseño).
- e) Ubicación del rango de operación: si el valor de R es constante, pero varía su posición (varían t_{L1} y t_{L2}), ocasiona variaciones en la aproximación. Si la aproximación disminuye (se trata de lograr menor t_{L1}), también lo hace el potencial. Si esa disminución hace que la línea operatoria corte la curva de equilibrio la operación sería imposible para ese valor de L/G . Se deberá disminuir L/G .
- f) Enfriamiento en etapas: el empalme de torres es una forma de obtener agua a menor t_{L1} sin el riesgo que se produzca la situación anterior. El enfriamiento se produce usando dos torres: la primera enfría el agua desde t_{L2} hasta t_{Lm} con aire ambiente de $HG1$. El agua de

la pileta de ésta torre se alimenta a la cabeza de la segunda donde se enfría desde t_{Lm} hasta t_{L1} con aire ambiente de H_{G1} .

Ambas torres operan con relaciones L/G (iguales o no) que impiden la disminución del potencial. Este sistema tiene mayores costos fijos y de operación.

- g) Presión atmosférica: al elevar la ubicación de la torre disminuye la presión atmosférica, por lo que la curva de equilibrio se desplaza hacia arriba, aumentando el potencial. Este efecto es pequeño.

2.7 ABSORCIÓN.

La absorción de gases es una operación en la cual una mezcla gaseosa se pone en contacto con un líquido, a fin de disolver de manera selectiva uno o más componentes del gas y de obtener una solución de éstos en el líquido. Por ejemplo, el gas obtenido como subproducto en los hornos de coque⁸, se lava con agua para eliminar el amoniaco; después se lava con un aceite, para eliminar los vapores de benceno y de tolueno. Donde los vapores del disolvente, son acarreados por una corriente gaseosa para recuperarlos y luego ser reutilizados.

Cuando la transferencia de masa sucede en la dirección opuesta, es decir, del líquido al gas, la operación se conoce como desorción. Los principios de la absorción y la desorción son básicamente los mismos, así que las dos operaciones pueden estudiarse al mismo tiempo. Generalmente, estas operaciones sólo se utilizan para la recuperación o eliminación del soluto (sustancia que se encuentra en menos proporción). Una buena separación de solutos entre sí, exige técnicas de destilación fraccionada.

La absorción se utiliza para recuperar productos de corrientes gaseosas con fines de producción.

- a) Producción industrial de disoluciones acidas o básicas en agua (ácido clorhídrico, ácido sulfúrico y ácido nítrico o hidróxido amonio).
- b) Recuperación de gases ácidos como H_2S , mercaptanos y CO_2 con disoluciones de aminas.

⁸ El coque es un combustible sólido formado por la destilación de carbón bituminoso calentado a temperaturas de 500 a 1100 °C sin contacto con el aire.

- c) Control de emisiones de contaminantes a la atmosfera, reteniendo las sustancias contaminantes (compuestos de azufre, clorados y fluoruros).
- d) Eliminación de SO₂ de gases de combustión con disoluciones de agentes oxidantes.

Es importante tener en cuenta que el diámetro de una torre empacada de absorción depende de las cantidades de gas y líquido tratadas, de sus propiedades, y de la relación de una corriente con otra. La altura de la torre, y por lo tanto el volumen total del empaque, depende de la magnitud de los cambios deseados en la concentración y de la velocidad de transferencia de masa por unidad de volumen empacado. Por lo tanto, los cálculos de la altura de la torre se basan en: balances de materia, balances de entalpía, estimaciones de la fuerza impulsora, así como de los coeficientes de transferencia de materia.

2.7.1 BALANCES DE MATERIA EN UNA TORRE DE ABSORCIÓN.

En una planta de contacto diferencial, tal como la torre empacada de absorción que se ilustra en la figura 23, las variaciones de composición son continuas de un extremo a otro del equipo. Los balances de materia para la sección de la columna por encima del marco de referencia seleccionado, tal como se representa con la línea de trazos discontinuos en la figura 23, son los siguientes:

- Balance total de material:

$$L_a + V = L + V_a \quad (ec. 2.92)$$

- Para el componente A:

$$L_a x_a + V y = L x + V_a y_a \quad (ec. 2.93)$$

Dónde: “V” es la velocidad del flujo molar de la fase gaseosa y “L” la de la fase líquida en el mismo punto de la torre. Las concentraciones “x” y “y” correspondientes a las fases líquida y vapor, respectivamente, se aplican para un punto dado. “V_a” la velocidad de flujo molar del componente “A” y “L_a” fase líquida del componente “A”.

Las ecuaciones de los balances globales de materia, con base en las corrientes extremas, son:

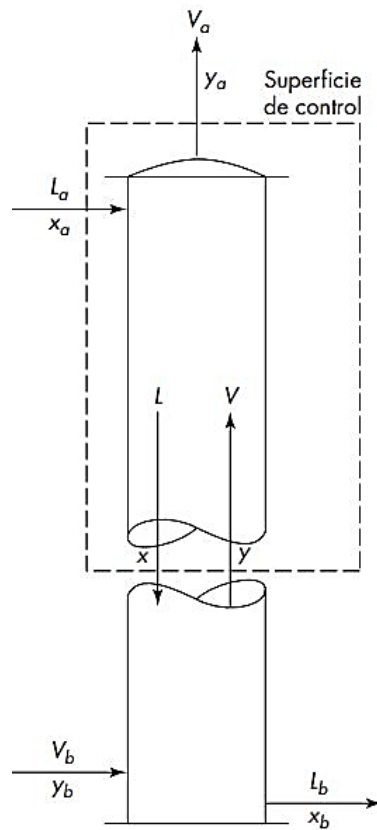


Figura 23: Diagrama del balance de materia para una columna empacada. (McCabe et al, 2007).

- Balance total de material:

$$L_a + V_b = L_b + V_a \quad (\text{ec. 2.94})$$

- Para el componente A:

$$L_a x_a + V_b y_b = L_b x_b + V_a y_a \quad (\text{ec. 2.95})$$

La relación entre “x” y “y” en cualquier punto de la columna, que se obtiene reordenando la ecuación (2.93), se llama ecuación de la línea de operación.

$$y = \frac{L}{V} x + \frac{V_a y_a - L_a x_a}{V} \quad (\text{ec. 2.96})$$

Es posible graficar la línea de operación⁹ sobre una gráfica aritmética a lo largo de la curva de equilibrio, tal como se muestra en la figura 24. La línea de operación debe estar por arriba de la línea de equilibrio para que la absorción tenga lugar, puesto que esto proporciona una fuerza impulsora positiva $y - y^*$ para la absorción.

En la ecuación (2.96), “x” y “y” representan las composiciones globales del líquido y del gas, respectivamente, en contacto entre sí en cualquier sección de la columna. Se supone que las composiciones para una altura determinada son independientes de la posición en el empaque.

La absorción de un componente soluble desde una mezcla gaseosa da lugar a una disminución de la velocidad total del gas (V) a medida que el gas pasa a través de la columna, mientras que el flujo del líquido “L” aumenta. Estos cambios provocan una ligera curvatura de la línea de equilibrio, tal como se observa en la figura 24. En el caso de las mezclas diluidas, que contienen menos de 10% de gas soluble, el efecto de las variaciones del flujo total generalmente se ignora y el diseño se basa en las velocidades de flujo promedio.

2.7.2 VELOCIDAD DE ABSORCIÓN.

Se expresa de cuatro formas diferentes utilizando coeficientes individuales o globales basados en las fases gaseosa o líquida. Para la mayor parte de los cálculos se utilizan coeficientes volumétricos debido a que es más difícil determinar los coeficientes por unidad de área, ya que el propósito del cálculo del diseño consiste por lo general en determinar el volumen total del absorbedor. En el tratamiento que sigue se omiten, para simplificar, los factores de corrección para la difusión en una sola dirección, y se desprecian las variaciones de las velocidades de flujo del gas y el líquido.

La velocidad de absorción por unidad de volumen de la columna empacada se determina por cualquiera de las siguientes ecuaciones, donde “y” y “x” se refieren a la fracción mol del componente que se absorbe:

$$r = k_y a (y - y_i) \quad (\text{ec. 2.97})$$

$$r = k_x a (x_i - x) \quad (\text{ec. 2.98})$$

⁹ La línea de operación representa la relación de las composiciones totales de líquido y gas en contacto.

$$r = K_y a(y - y^*) \quad (\text{ec. 2.99})$$

$$r = K_x a(x^* - x) \quad (\text{ec. 2.100})$$

La diferencia de presión parcial ($p - p_i$) se puede utilizar como la fuerza potencial para la fase gaseosa, puesto que es proporcional a $(y - y_i)$. Los diagramas basados en las relaciones molares¹⁰ “Y” y “X” se usan ciertas veces, pues la línea de operación es recta, pero esta aproximación no se recomienda porque ΔY y ΔX no son medidas válidas para la fuerza impulsora.

Los coeficientes individuales k_{ya} y k_{xa} están basados en una unidad de volumen, como lo están por lo general los coeficientes globales K_{ya} y K_{xa} . La “a” en todos los coeficientes es el área de la superficie de contacto por unidad de volumen de la columna empacada u otro aparato. Es difícil medir o predecir “a”, pero en la mayoría de los casos resulta innecesario conocer el valor real, puesto que los cálculos del diseño se basan en los coeficientes volumétricos.

La composición de la superficie de contacto (y_i, x_i) se obtiene a partir del diagrama de la línea de operación mediante las ecuaciones (2.97) y (2.98)

$$\frac{y - y_i}{x_i - x} = \frac{k_{xa}}{k_{ya}} \quad (\text{ec. 2.101})$$

Por lo tanto, una recta trazada desde la línea de operación con una pendiente $-k_{xa} / k_{ya}$ intersectará a la línea de equilibrio en el punto (y_i, x_i) , tal como se indica en la figura 24. Por lo general no se necesitan conocer las composiciones en la superficie de contacto, pero estos valores se utilizan para los cálculos cuando intervienen gases ricos o cuando la línea de equilibrio presenta una curvatura pronunciada. Las fuerzas impulsoras globales se determinan fácilmente como líneas verticales u horizontales en el diagrama $y-x$. Los

¹⁰ Una relación molar es un factor de conversión cuyo fin es convertir, en una reacción química, la cantidad de moles de una sustancia a la cantidad correspondiente de moles de otra sustancia.

coeficientes globales se obtienen a partir de k_{ya} y k_{xa} utilizando la pendiente local de la curva de equilibrio “m”.

$$\frac{1}{K_{ya}} = \frac{1}{k_{ya}} + \frac{m}{k_{xa}} \quad (\text{ec. 2.102})$$

$$\frac{1}{K_{xa}} = \frac{1}{k_{xa}} + \frac{1}{mk_{ya}} \quad (\text{ec. 2.103})$$

En la ecuación (2.102), los términos $1 / (k_{ya})$ y $m / (k_{xa})$ son las resistencias a la transferencia de masa en la película gaseosa y la película líquida, respectivamente. Cuando los coeficientes k_{ya} y k_{xa} son del mismo orden de magnitud, y “m” es mucho mayor que 1.0, se dice que la resistencia de la película líquida está controlada. Esto quiere decir que cualquier cambio en k_{xa} tiene un cercano efecto proporcional tanto en K_{ya} y K_{xa} como en la velocidad de absorción, mientras que un cambio en k_{ya} sólo tiene un pequeño efecto. Por ejemplo, el coeficiente de la ley de Henry para CO_2 en agua a 20°C es de 1 430 atm/fracción mol, lo cual corresponde a $m = 1\,430$ para la absorción a 1 atm y $m = 143$ para la absorción a 10 atm. Bajo estas condiciones, es evidente que la absorción de CO_2 en agua está controlada por la película líquida. Incrementar la velocidad del gas aumentará k_{ya} pero tendrá un efecto despreciable en K_{ya} . Al aumentar la velocidad del líquido aumentará el área de la superficie de contacto y probablemente también se incrementará k_x , lo cual lleva a un incremento en k_{xa} y K_{ya} .

Cuando la solubilidad del gas es muy alta, tal como ocurre con HCl en agua, “m” es muy pequeña y la resistencia de la película gaseosa controla la velocidad de absorción. Con gases de solubilidad intermedia, ambas resistencias son importantes, aunque el término resistencia controlada se utiliza a veces para resistencias muy grandes.

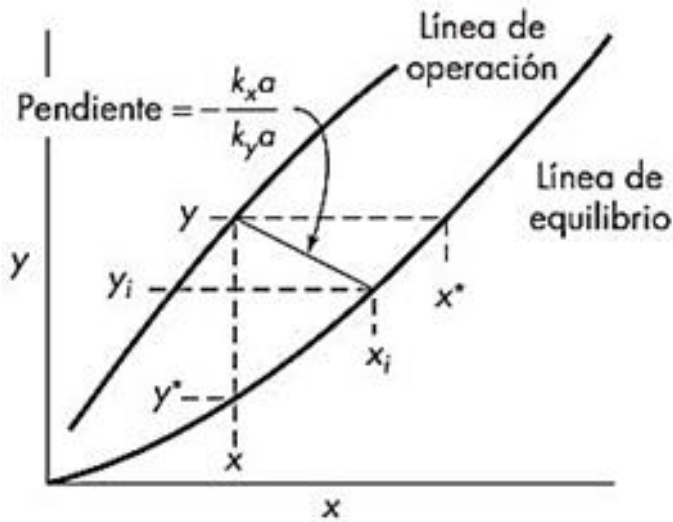


Figura 24: Identificación de las composiciones en la superficie de contacto en un fenómeno de absorción. (Welty et al, 2008).

2.7.3 CÁLCULO DE LA ALTURA DE LA TORRE.

Es factible diseñar un absorbedor utilizando cualquiera de las cuatro ecuaciones básicas de velocidad, pero a menudo se emplean los coeficientes de la película gaseosa, y aquí se enfatizará el uso de $K_y a$. Si se elige el coeficiente de la película gaseosa no se requiere hacer ninguna suposición acerca de la resistencia controlada. Aun si la película gaseosa es la que controla, un diseño basado en $K_y a$ es más simple y exacto que uno basado en $K_x a$ o $k_x a$.

Considere la columna empacada que se muestra en la figura 25. La sección transversal es “S”, y el volumen diferencial en la altura dZ es SdZ . Si el cambio en la velocidad del flujo molar “V” es despreciable, la cantidad absorbida en la sección dZ es $-Vdy$, que es igual a la velocidad de absorción multiplicada por el volumen diferencial:

$$-Vdy = K_y a(y - y^*)SdZ \quad (\text{ec. 2.104})$$

Esta ecuación se reordena para su integración, agrupando los factores constantes V, S y $K_y a$ con dZ e invirtiendo los límites de integración para eliminar el signo negativo:

$$\frac{K_y a S}{V} \int dZ = \frac{K_y a S Z_T}{V} = \int_a^b \frac{dy}{y - y^*} \quad (\text{ec. 2.105})$$

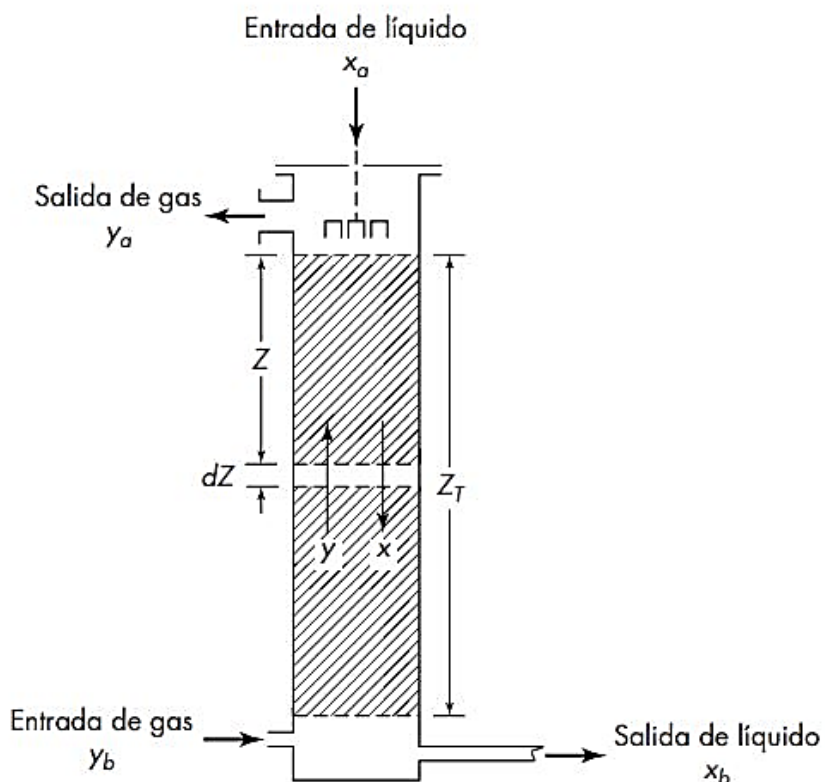


Figura 25: Diagrama de una torre de absorción empacada. (McCabe et al, 2007).

El lado derecho de la ecuación (2.105) puede integrarse directamente en algunos casos, o determinarse en forma numérica.

I. Absorción desde gases enriquecidos.

Cuando el soluto se absorbe en presencia de concentraciones moderadas o elevadas en el gas, es preciso considerar diversos factores adicionales en los cálculos de diseño. En el balance de materia es preciso tener en cuenta la disminución del flujo total de gas y el aumento del flujo de líquido, a la vez que deberá incluirse el factor de corrección para la difusión en un solo sentido. Por otra parte, los coeficientes de transferencia de masa no serán constantes debido a las variaciones de las velocidades de flujo y de un gradiente de temperatura apreciable en la columna, lo que dará lugar a un cambio en la línea de equilibrio. La cantidad de soluto absorbido en una altura diferencial dZ es $d(Vy)$, ya que tanto V como y disminuyen a medida que el gas pasa a través de la torre.

$$dN_A = d(Vy) = Vdy + ydV \quad (\text{ec. 2.106})$$

Si solamente se transfiere “A”, dN_A es igual a dV , de forma que la ecuación (2.106) se transforma en:

$$dN_A = Vdy + ydN_A \quad (\text{ec. 2.107})$$

$$dN_A = \frac{Vdy}{1-y} \quad (\text{ec. 2.108})$$

El efecto de la difusión en un solo sentido en la película gaseosa se traduce en un aumento en la velocidad de transferencia de masa por el factor $1/(1-y)_L$, de forma que el coeficiente global efectivo K'_{ya} es algo mayor que el valor normal de K_{ya} :

$$\frac{1}{K'_{ya}} = \frac{(1-y)_L}{k_y a} + \frac{m}{k_x a} \quad (\text{ec. 2.109})$$

En este tratamiento se ha despreciado el efecto de la difusión en un solo sentido en la película líquida. La ecuación básica de transferencia de masa es, por lo tanto:

$$dN_A = \frac{Vdy}{1-y} = K'_{ya} S dZ(y - y^*) \quad (\text{ec. 2.110})$$

La altura de la columna se obtiene por integración gráfica, teniendo en cuenta las variaciones de V , $1 - y$, $y - y^*$ y K'_{ya} :

$$Z_T = \frac{1}{S} \int_a^b \frac{Vdy}{(1-y)(y-y^*)(K'_{ya})} \quad (\text{ec. 2.111})$$

Si el proceso está controlado por la velocidad de transferencia de masa a través de la película gaseosa, se desarrolla una ecuación simplificada. El término $(1 - y)_L$, que sólo es estrictamente aplicable a la película gaseosa, tal como indica la ecuación (2.109), se aplica al coeficiente global debido a que la película gaseosa es controlante. El coeficiente K'_{ya} de la ecuación (2.111) se sustituye por $K_{ya}/(1 - y)_L$, lo que conduce a:

$$Z_T = \frac{1}{S} \int_a^b \frac{V(1-y)_L dy}{K_{ya}(1-y)(y-y^*)} \quad (\text{ec. 2.112})$$

Puesto que $k_y a$ varía con aproximadamente 0.7 veces el volumen (V), y $K_y a$ presentará casi la misma variación cuando controla la película gaseosa, la razón $V/K_y a$ no variará mucho. Este término se puede sacar de la integral y evaluarse para la velocidad de flujo promedio, o bien se promedian los valores correspondientes a la parte superior e inferior de la torre. El término $(1 - y)_L$ es la media logarítmica de $(1 - y)$ y $(1 - y_i)$ que, por lo general, sólo es ligeramente mayor que $(1 - y)$. Por consiguiente, se supone que los términos $(1 - y)_L$ y $(1 - y)$ se anulan, y la ecuación (2.112) adquiere la forma:

$$Z_T = \left(\frac{V}{S} \right) \int_a^b \frac{dy}{y - y^*} \quad (ec. 2.113)$$

$$Z_T = H_{Oy} N_{Oy} \quad (ec. 2.114)$$

Esta ecuación (2.114) es la misma que la ecuación (2.113) para gases diluidos, excepto que el primer término, H_{Oy} , es el valor de la altura de una unidad global de transferencia de masa y el segundo N_{Oy} es el número de unidades globales de transferencia de gas. Observe que en este caso ha de utilizarse $K_y a$ de la ecuación (2.102), y no $K'_y a$, puesto que el término $(1 - y)_L$ se introduce en la derivación. Si la película líquida es la resistencia que controla la transferencia de masa, se utilizan los coeficientes de la película gaseosa para cálculos de diseño de acuerdo con la ecuación (2.111). Si se utilizan los coeficientes de película líquida y si el factor $(1 - x)_L$ se introduce para permitir una difusión en una sola dirección en el líquido, se deriva una ecuación similar a la ecuación (2.113):

$$Z_T = \frac{L}{K_x a} \int_b^a \frac{dx}{x^* - x} \quad (ec. 2.115)$$

$$Z_T = H_{Ox} N_{Ox} \quad (ec. 2.116)$$

Cuando las resistencias de la película líquida y de la película gaseosa son de una magnitud comparable, no existe un método sencillo para el tratamiento de la absorción de un gas rico (enriquecido). El método recomendado consiste en basar el diseño en la fase gaseosa y utilizar la ecuación (2.111). Se eligen diferentes valores de y comprendidos entre y_a y y_b , además que se calculan los valores de V , $K'_y a$ y $(y - y^*)$. Como comprobación, deberá

compararse el valor de Z_T obtenido por integración con el que se basa en la fórmula sencilla de la ecuación (2.113), ya que la diferencia no debe ser grande.

II. Correlaciones de transferencia de masa.

Para predecir el coeficiente global de transferencia de masa, o la altura de una unidad de transferencia, se necesitan correlaciones separadas para la fase gaseosa y para la fase líquida.

Tales correlaciones se basan por lo general en datos experimentales para sistemas en los que una de las fases ofrece la resistencia que controla, puesto que resulta difícil separar exactamente las dos resistencias cuando son de magnitudes comparables. La resistencia de la fase líquida se determina a partir de la velocidad de desorción de oxígeno o bióxido de carbono contenido en el agua. La baja solubilidad de estos gases da lugar a que la resistencia de la película gaseosa sea despreciable, y los valores de H_{O_x} son esencialmente los mismos que los de H_x . A partir de medidas de desorción se obtienen valores de H_x más exactos que a partir de experimentos de absorción, ya que las líneas de operación para velocidades típicas de gas y líquido tienen pendientes mucho menores que la pendiente de la línea de equilibrio.

Para oxígeno en agua a 20 °C, la presión parcial de equilibrio es 4.01×10^4 atm por fracción mol, y L/V (valor de la pendiente) estará comprendida en el intervalo de 1 a 100. Para la absorción de oxígeno desde aire contenido en agua pura, se producirá un “acercamiento” en el fondo de la columna empacada, tal como se observa en la figura 26. Se necesitarían medidas muy exactas de x_b y de la temperatura (para determinar x_b^*) a fin de establecer la fuerza impulsora ($x_b - x_b^*$). Para la desorción de oxígeno desde una solución saturada de nitrógeno, la concentración x_b es pequeña, pero es posible determinar NO_x con una exactitud razonable toda vez que x_b^* es cero.

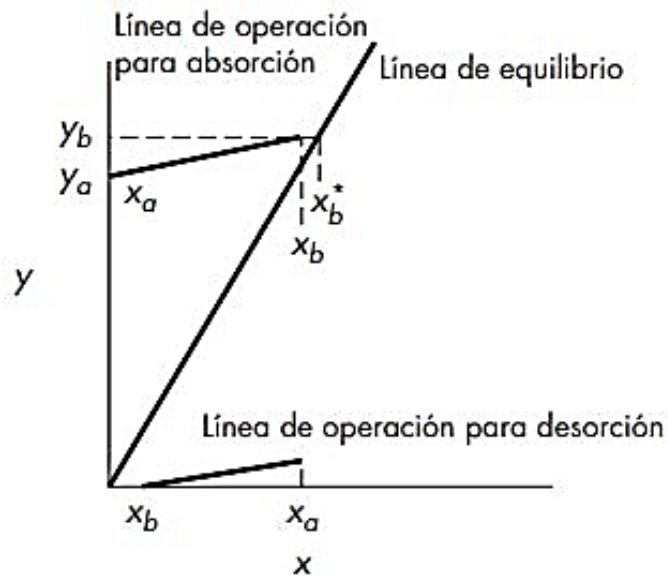


Figura 26: Líneas de operación típica para absorción o desorción de un gas ligeramente soluble. (Welty et al, 2008).

2.7.4 COEFICIENTES DE PELÍCULA LÍQUIDA.

En la figura 27 se encuentran los valores de H_x para el sistema Oxígeno – Agua, con anillos Raschig de cerámica. Para velocidades másicas de líquido comprendidas en el intervalo intermedio de 500 a $10\,000 \text{ lb/ft}^2 \cdot \text{h}$, H_x (Altura) aumenta con 0.4 veces G_x (Velocidad másica del líquido) para anillos de $\frac{1}{2}$ in. y con 0.2 veces G_x para los tamaños mayores. Por lo tanto, para anillos de 1 , $1\frac{1}{2}$ y 2 in., $k_L a$ varía con 0.8 veces G_x .

El aumento de $k_L a$ se debe en buena medida al aumento del área de la superficie de contacto “a”, el resto procede de un aumento de k_L . Para velocidades másicas elevadas, el empaque está casi completamente húmedo y sólo se produce un ligero aumento de $k_L a$ con G_x , lo que da lugar a que H_x sea aproximadamente proporcional a G_x . Por lo que se refiere a la transferencia de masa, los empaques pequeños son sólo ligeramente mejores que los grandes en el intervalo intermedio de flujos, aunque el área total varía en forma inversamente proporcional con el tamaño del empaque.

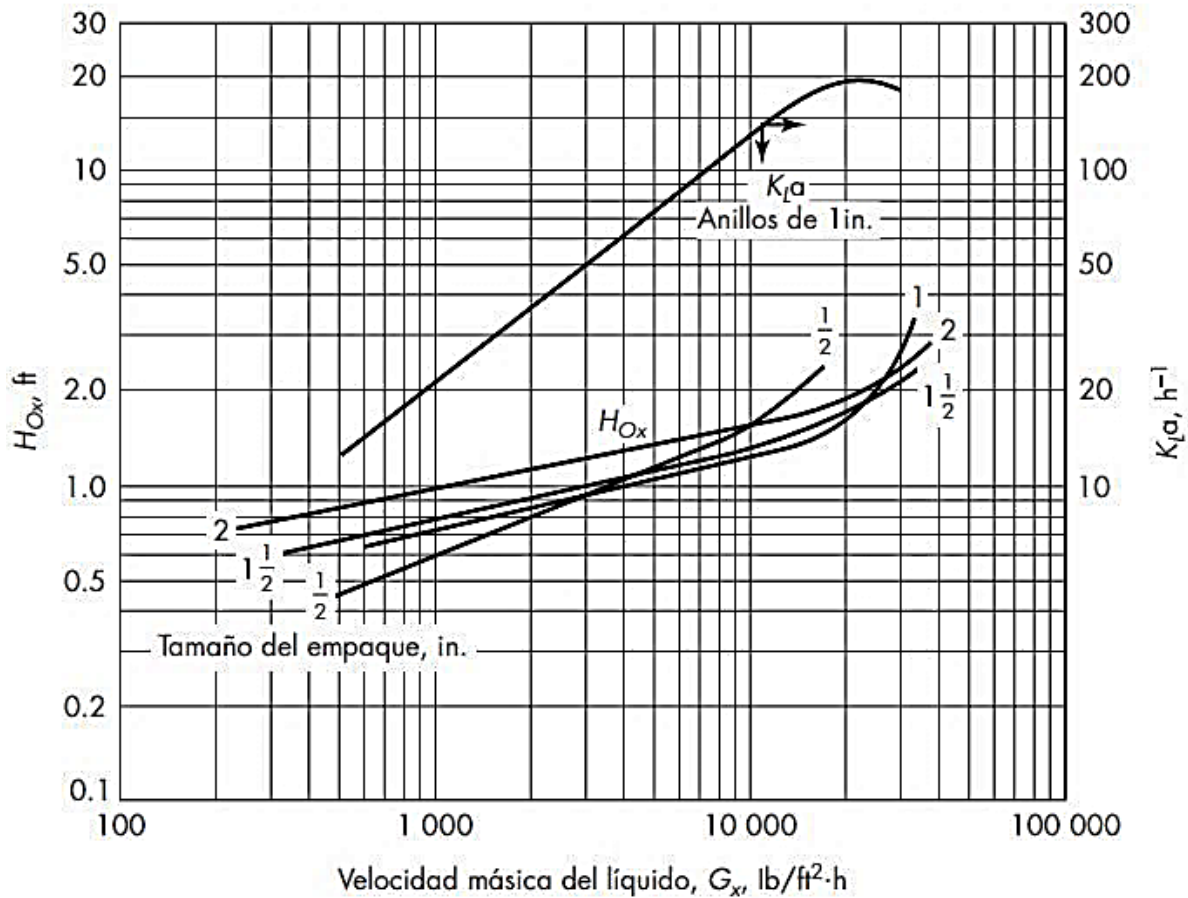


Figura 27: Altura de una unidad de transferencia para desorción de oxígeno a partir de agua a 25 °C con empaque de anillos Rasching. (Welty et al, 2008).

En las operaciones industriales son preferibles los empaques más grandes debido a que presentan una superior velocidad de inundación. Los datos de la figura 27 se obtuvieron con velocidades de flujo de gas de 100 a 230 $lb/ft^2 \cdot h$, y en este intervalo no hubo efecto de Gy.

Para velocidades de flujo de gas comprendidas entre el punto de carga y la velocidad de inundación, H_x es ligeramente menor debido al aumento de la retención del líquido. Sin embargo, para una columna diseñada para operar a la mitad de la velocidad de inundación, el efecto de Gy sobre H_x es despreciable.

La resistencia de película líquida para otros sistemas se obtiene a partir de los datos O_2 - H_2O corrigiendo de las diferencias entre difusividad y viscosidad (como referencia, a 25 °C, viscosidad para oxígeno en agua es $2.41 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/s$ y Sc es 381):

$$H_x = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{G_x}{\mu} \right)^n \left(\frac{\mu}{\rho D_v} \right)^{0.5} \quad (\text{ec. 2.117})$$

Donde α y n son constantes empíricas que están tabuladas para alguno de los antiguos tipos de empaque. El exponente de 0.5 en el número de Schmidt¹¹ es consistente con la teoría de la penetración, y es el que se esperaría aplicar al líquido fluyendo en distancias cortas sobre piezas de empaque. El exponente n varía con el tamaño y tipo del empaque, pero 0.3 se considera un valor típico.

La ecuación (2.117) debe utilizarse con precaución para otros líquidos diferentes al agua, puesto que los efectos de la densidad, tensión superficial y viscosidad son inciertos. Cuando un vapor es absorbido en un solvente de peso molecular alto, la velocidad de flujo molar del líquido será mucho menor que si el agua se usara a la misma velocidad másica. Sin embargo, el coeficiente $k_x a$, que está basado en una fuerza impulsora de fracción mol, varía en forma inversamente proporcional con respecto al peso molecular promedio del líquido, y no hay efecto neto de “M” en H_x .

$$k_x a = k_L a \frac{\rho_x}{M} \quad (\text{ec. 2.118})$$

$$H_x = \frac{\frac{G_x}{M}}{k_x a} = \frac{\frac{G_x}{\rho_x}}{k_L a} \quad (\text{ec. 2.119})$$

El coeficiente $k_L a$ depende principalmente de la velocidad de flujo volumétrico, difusividad y viscosidad, pero no del peso molecular, así que las correlaciones generales para $k_L a$ o H_x son más simples que en el caso de $k_x a$.

2.7.5 COEFICIENTES DE PELÍCULA GASEOSA.

La absorción de amoníaco en agua se ha utilizado para obtener datos sobre $k_g a$ o H_y , puesto que la resistencia de película líquida es sólo 10% de la resistencia total y es posible tomarla en cuenta con facilidad. Los datos para H_{Oy} y los valores corregidos de H_y para anillos Raschig de 1½ pulgadas, véase figura 28. En el caso de velocidades másicas hasta 600 lb/ft²

¹¹ Numero de Schmidt es un número adimensional definido como el cociente entre la difusión de cantidad de movimiento y la difusión de masa, y se utiliza para caracterizar flujos en los que hay procesos convectivos de cantidad de movimiento y masa.

· h, H_y varía con una potencia de alrededor de 0.3 a 0.4 veces de G_y , lo cual incrementa la media de $k_g a$ con 0.6-0.7 veces de G_y , que está en acuerdo razonable con los datos para transferencia de masa a partículas en lechos empacados.

Las pendientes de los puntos H_y decrecen en la región de carga a causa del incremento en el área de la superficie de contacto. Los valores de H_y varían con la potencia de -0.7 a -0.4 de la velocidad del líquido, lo que refleja el gran efecto de la velocidad del líquido sobre el área de contacto. La siguiente ecuación se recomienda para estimar H_y para absorción de otros gases en agua. El número de Schmidt para el sistema Amoniac – Aire – Agua, es 0.66 a 25 °C:

$$H_y = H_{y,NH_3} \left(\frac{Sc}{0.66} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (ec. 2.120)$$

Existen escasos datos que apoyan el uso del exponente $\frac{1}{2}$ para la difusividad o el número de Schmidt, y se ha sugerido un exponente de $\frac{2}{3}$ con base en la teoría de capas límite y los datos para lechos empacados. Sin embargo, los números de Schmidt (Sc) para gases no difieren de manera considerable, y el término de corrección es a menudo pequeño.

Hay más incertidumbre alrededor del efecto de las propiedades líquidas en H_y cuando líquidos diferentes al agua se emplean como solventes. En el caso de la vaporización de un líquido puro dentro de una corriente de gas, no hay resistencia de transferencia de masa en la fase líquida, y las pruebas de vaporización constituyen un buen método que permite desarrollar una correlación para la resistencia de película gaseosa.

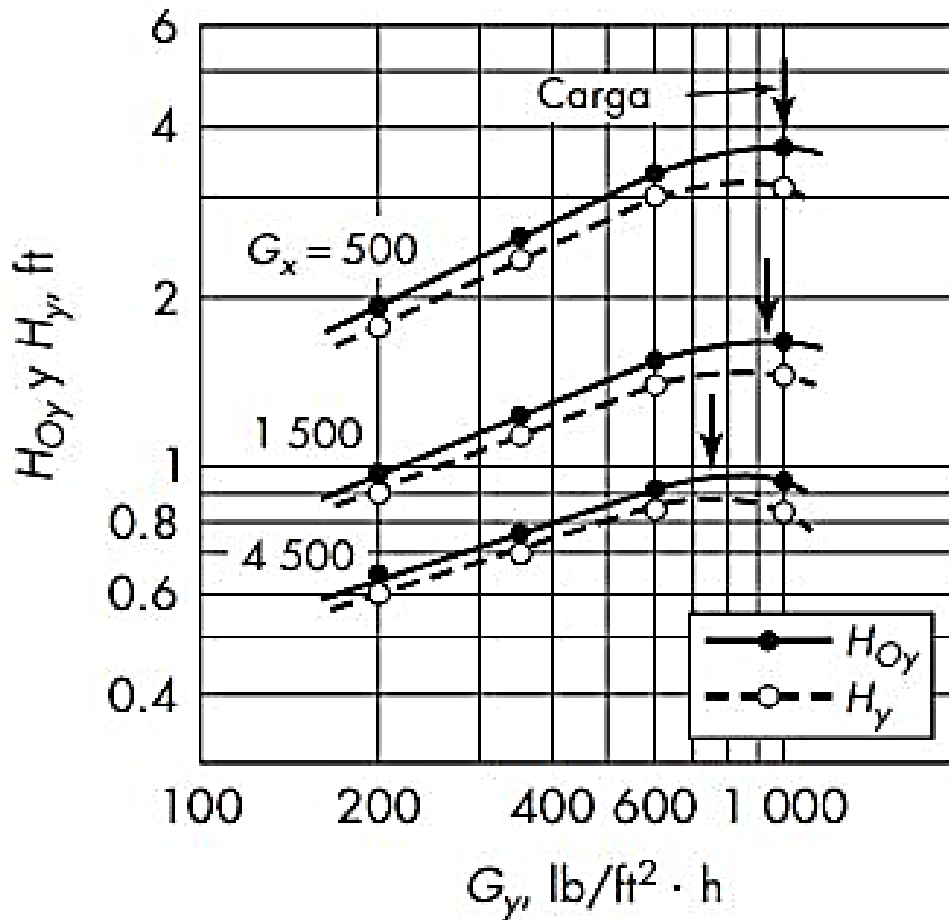


Figura 28: Altura de una unidad de transferencia para la absorción de amoníaco en agua con anillos Rasching de cerámica de 1 ½ pulgadas. (Welty et al, 2008).

Sin embargo, las pruebas con agua y otros líquidos arrojan valores de H_y que son alrededor de la mitad de los que se reportan en el caso del amoníaco a las mismas velocidades másicas. La diferencia se atribuye a bolsas de líquido casi estancado que contribuye de manera importante a la vaporización pero que se satura rápidamente en una prueba de absorción de gas. Las bolsas estancadas corresponden a la retención estática, es decir, el líquido que permanece en la columna mucho después de que el flujo es expulsado.

El resto del líquido constituye la retención dinámica, el cual se incrementa con la velocidad de flujo del líquido. Se han desarrollado correlaciones para la retención estática y dinámica y las correspondientes áreas de contacto y que conviene emplear para relacionar estrechamente los resultados de absorción y vaporización de gas.

2.7.6 ABSORCIÓN EN COLUMNAS DE PLATOS.

La absorción de gases puede realizarse en una columna equipada con platos perforados u otro tipo de platos que normalmente se utilizan en destilación. En ocasiones se elige una columna de platos perforados en vez de una columna empacada para evitar el problema de la distribución del líquido en una torre de un gran diámetro y disminuir la incertidumbre en el escalamiento.

- Equilibrios de absorción y arrastre.

En los sistemas de absorción y arrastre con tres componentes con frecuencia se supondrá que:

- El gas de arrastre, o portador, es insoluble.
- El solvente es no volátil.
- El sistema es isotérmico e isobárico. La regla de las fases de Gibbs en este caso es:

$$F=C-P+2= 3 \text{ (A, B y C)} - 2 \text{ (vapor y líquido)} + 2 = 3$$

Si hacemos que T y P sean constantes queda un grado de libertad. En general, los datos de equilibrio se representan con una gráfica de la concentración del soluto en el vapor en función de la concentración del soluto en el líquido, o indicando una constante de ley de Henry. La ley de Henry es:

$$\overline{P}_B = H_B x_B \quad (\text{ec. 2.121})$$

Donde H_B es la constante de ley de Henry en atm/fracción mol, $H = H(p, T, \text{composición})$; x_B es la fracción mol de B en el líquido, y P_B es la presión parcial de B en el vapor, La ley de Henry sólo es válida a bajas concentraciones de B, Como la presión parcial se define como:

$$y_B = \frac{\overline{P}_B}{P_{tot}} \quad (\text{ec. 2.122})$$

la ley de Henry queda:

$$y_B = \frac{H_B}{P_{tot}} x_B \quad (\text{ec. 2.123})$$

Esto produce una gráfica en forma de línea recta si H_B es constante. Si el componente es puro, $y_B = 1$ y $P_B = P_{Total}$. Por ejemplo, los valores indicados para CO_2 , CO y H_2S se ven en la tabla 2.5 (Perry et al., 1963). Los valores grandes de H en la Tabla 2.5 (Perry et al., 1963) indican que el CO_2 y el H_2S son muy poco solubles en agua. Como H es aproximadamente independiente de P_{Total} , esto quiere decir que se absorbe más gas a mayor presión. Este fenómeno se aprovecha para fabricar bebidas carbonatadas. Cuando se abre la botella o la lata, baja la presión y se disuelve el gas formando pequeñas burbujas. En la Tabla 2.6 (Yaws et al., 2005) se muestran valores seleccionados de constantes de ley de Henry, para compuestos clorados en agua a $25^\circ C$.

Esos valores son útiles para desarrollar procesos para eliminar estos compuestos de agua contaminada por medio de arrastre. Observe que esos compuestos son mucho más solubles que los gases que aparecen en la Tabla 2.5 (Perry et al., 1963). Las constantes de ley de Henry dependen de la temperatura y suelen apegarse a la ecuación de Arrhenius. Es decir:

$$H = H_B \frac{-E}{RT} \quad (ec. 2.124)$$

Una gráfica de $\log H$ en función de $1/T$ produce con frecuencia una línea recta.

El efecto de la concentración se muestra en la Tabla 2.7, donde se ilustra la absorción de amoníaco en agua (Perry et al., 1963). Observe que las solubilidades son no lineales y que P_{NH_3}/x no es constante. Este comportamiento es bastante común para gases solubles. Será necesario convertir los datos de equilibrio a las unidades de concentración que se requieren en los cálculos. Si se usan fracciones molares o de masa, deben convertirse los datos de equilibrio en relaciones molares.

Tabla 2.5: Constantes H de ley de Henry para CO_2 , CO y H_2S en agua. H esta en atm/fracción molar.

T °C	CO₂	CO	H₂S
0	728	32,200	26,800
5	876	39,600	31,500
10	1040	44,200	36,700
15	1220	48,900	42,300
20	1420	53,600	48,300
25	1640	58,000	54,500
30	1860	62,000	60,900
35	2090	65,900	67,600
40	2330	69,600	74,500
45	2570	72,900	81,400
50	2830	76,100	88,400
60	2410	82,100	103,000
70	-	84,500	119,000
80	-	84,500	135,000
90	-	84,600	144,000
100	-	84,600	148,000

Fuente: Perry et al. (1963), págs. 14-4 y 14-6.

Tabla 2.6: Constantes de la ley de Henry y solubilidad para compuesto clorados en agua a 25 °C y 1 atm.

Compuesto	Tetracloruro de carbono CCL₄	Cloroformo CHCl₃	Dicloro metano CH₂Cl₂	Cloruro de vinilo C₂H₂Cl	1, 2, 3 tricloro heptano C₃H₅Cl₃	1 cloro heptano C₇H₁₅Cl	1 cloro naftaleno C₁₀H₇Cl
H (atm/fracción molar)	1589.36	211.19	137	1243.8 4	23.78	2130.28	10.96
Solubilidad, ppm (molar)	93.68	1190.1	4175.4	778.9	213.99	1.8196	2.48

Fuente: Yaws et al. (2005).

Tabla 2.7: Absorción de amoníaco en agua. * valores extrapolados.

Peso de NH ₃ en 100 partes de H ₂ O en peso	Presión parcial de NH ₃ mm Hg						
	0 °C	10 °C	20 °C	30 °C	40 °C	50 °C	60 °C
H ₂ O							
100	947						
90	785						
80	636	987	1450	-	-	3300	
70	500	780	1170	-	-	2760	
60	380	600	945	-	-	2130	
50	275	439	686	-	-	1520	
40	190	301	470	-	719	1065	
30	119	190	298	-	454	692	
25	89.5	144	227	-	352	534	825
20	64	103.5	166	-	260	395	596
15	42.7	70.1	114	-	179	273	405
10	25.1	41.8	69.6	-	110	167	274
7.5	17.7	29.9	50	-	79.7	120	179
5	11.2	19.1	31.7	-	51	76.5	115
4	-	16.1	24.9	-	40.1	60.8	91.1
3	-	11.3	18.2	23.5	29.6	45	67.1
2.5	-	-	15	19.4	24.4	(37.6)*	(55.7)
2	-	-	12	15.3	19.3	(30.0)	(44.5)
1.6	-	-	-	12	15.3	(24.1)	(35.5)
1.2	-	-	-	9.1	11.5	(18.3)	(26.7)
1	-	-	-	7.4	-	(15.4)	(22.2)
0.5	-	-	-	3.4			

Fuente: Perry et al, 1963.

2.7.7 LÍNEAS DE OPERACIÓN PARA ABSORCIÓN.

El diagrama de McCabe-Thiele es muy útil cuando la línea de operación es una recta. Para eso se requiere que se satisfagan los balances de energía y que la relación de flujo de líquido/flujo de vapor sea constante. Para que los balances de energía queden satisfechos automáticamente, debemos suponer que:

- El calor de absorción es despreciable
- La operación es isotérmica.

Con estas dos hipótesis se garantiza la satisfacción de los balances de energía. Cuando las corrientes de gas y líquido son bastante diluidas, es probable que esas hipótesis queden satisfechas.

También se desea que la línea de operación sea una recta. Eso sucederá de manera automática si definimos que:

$$\frac{L}{G} = \frac{\frac{\text{moles de solvente no volátil}}{h}}{\frac{\text{moles de gas insoluble portador}}{h}} \quad (\text{ec. 2.125})$$

Y si además suponemos que:

- El solvente es no volátil.
- El gas portador es insoluble.

Es común que las hipótesis anteriores cumplan bien. Los resultados de estas dos últimas hipótesis son que el balance de masa para el solvente es:

$$L_N = L_j = L_0 = L = \text{constante} \quad (\text{ec. 2.126})$$

Mientras que el balance de masa para el gas portador es:

$$G_{N+l} = G_j = G_l = \text{constante} \quad (\text{ec. 2.127})$$

Se toma en cuenta que no se pueden usar flujos totales de gas y de líquido en mezclas concentradas, porque se puede absorber una cantidad apreciable de soluto y esto cambiaría

los flujos de gas y líquido, y la línea de operación será entonces una curva. Para soluciones muy diluidas (<1% de soluto), se pueden usar flujos totales y pueden usarse fracciones de masa o molares en las ecuaciones de operación y de equilibrio. Como se va utilizar L = moles de solvente no volátil (S)/h, y G = moles de gas portador insoluble (C)/h, se debe definir nuestras composiciones de tal manera que podamos formular un balance de masa para el soluto B.

Después de algunas manipulaciones se observa que la forma correcta de definir nuestras composiciones es como relaciones molares. Se definen:

$$Y = \frac{\text{moles de B en el gas}}{\text{moles de gas portador puro C}} \quad (\text{ec. 2.128})$$

$$X = \frac{\text{moles de B en líquido}}{\text{moles del solvente puro S}} \quad (\text{ec. 2.129})$$

Las relaciones molares “Y” y “X” se relacionan con las fracciones molares acostumbradas mediante:

$$Y = \frac{y}{1-y} \quad (\text{ec. 2.130})$$

$$X = \frac{x}{1-x} \quad (\text{ec. 2.131})$$

Se observa que “Y” y “X” pueden ser mayores que 1.0. Con las unidades de relaciones molares:

$$Y_j G = \left[\frac{\text{moles de B en la corriente de gas } j}{\text{moles de portador}} \right] \left[\frac{\text{moles de gas portador}}{h} \right] \quad (\text{ec. 2.132 a})$$

$$Y_j G = \frac{\text{moles de B en la corriente de gas } j}{h} \quad (\text{ec. 2.132 b})$$

$$X_j L = \left[\frac{\text{moles de B en la corriente líquida } j}{\text{moles de solvente}} \right] \left[\frac{\text{moles de solvente}}{h} \right] \quad (\text{ec. 2.133 a})$$

$$X_j L = \frac{\text{moles de B en la corriente de solvente } j}{h} \quad (\text{ec. 2.133 b})$$

Entonces, podemos escribir el balance de masa en estado estable, (Entradas = Salidas), en estas unidades anteriormente establecidas. El balance de masa en torno a la parte superior de la columna, con la envolvente de balance que muestra la figura 29 es.

$$Y_{j+1}G + X_0L = X_jL + Y_lG \quad (\text{ec. 2.134})$$

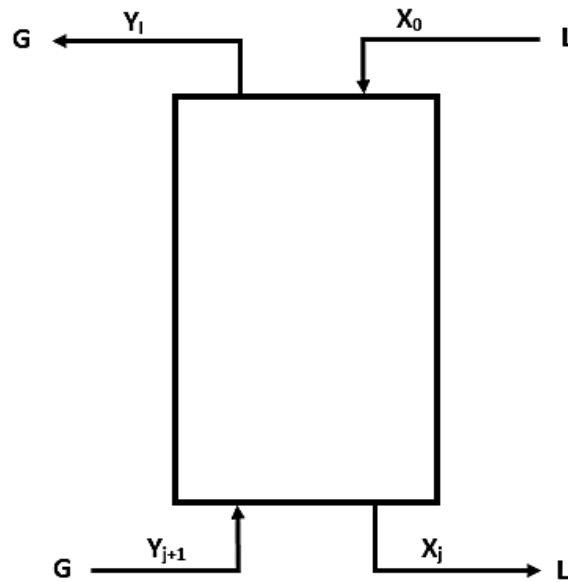


Figura 29: Columna de separación. (McCabe et al, 2007).

es decir:

$$\frac{\text{moles de B entrada}}{h} = \frac{\text{moles de B salida}}{h} \quad (\text{ec. 2.135})$$

Al despejar Y_{j+1} resulta:

$$Y_{j+1} = \frac{L}{G}X_j + \left[Y_l - \frac{L}{G}X_0 \right] \quad (\text{ec. 2.136})$$

Que es una recta con pendiente L/G y ordenada al origen $(Y_l - (L/G) X_0)$. Ésta es nuestra línea de operación para absorción. Así, si graficamos las relaciones de “Y” en función de

“X”, obtenemos una gráfica del tipo de McCabe-Thiele como se ve en la figura 30. Los pasos de este procedimiento se explican más adelante en la sección 2.9.7.

Tenga en cuenta que la línea de operación está arriba de la línea de equilibrio debido a que se transfiere soluto del gas al líquido. En destilación se tiene que el material (el componente más volátil) transferido del líquido al gas y la línea de operación estaba abajo de la curva de equilibrio.

Si se grafica el componente menos volátil, la línea de operación habría estado arriba de la curva de equilibrio en la destilación. Es necesario convertir los datos de equilibrio a unidades de relación “Y” contra “X”. Estos valores pueden ser mayores que 1.0, ya que $Y = y / (1 - y)$ y $X = x / (1 - x)$. La línea $Y = X$ no tiene significado en absorción.

Como de costumbre, las etapas se cuentan en la curva de equilibrio. Una relación mínima L/G se puede definir como se muestra en la figura 30. Si el sistema no es isotérmico, la línea de operación no se afectará, pero sí la curva de equilibrio. Entonces, se debe modificar el método de McCabe-Thiele para incluir curvas de equilibrio cambiantes.

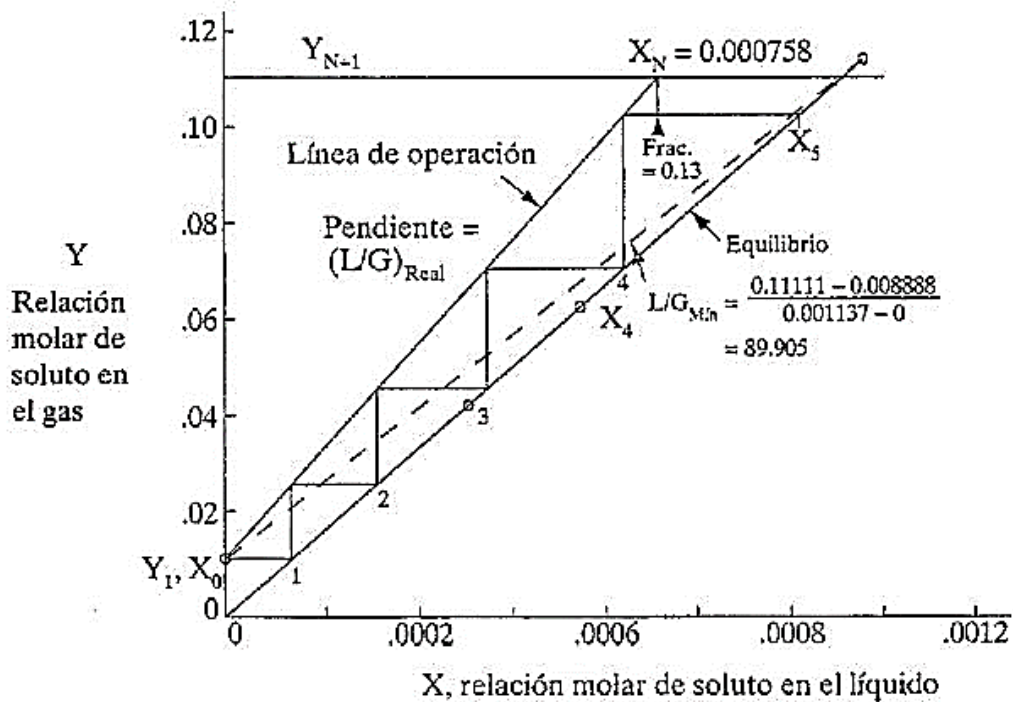


Figura 30: Ejemplo de diagrama McCabe-Thiele para absorción. (Perry et al, 1963).

2.7.8 ANÁLISIS DEL ARRASTRE.

Como el arrastre es muy parecido a la absorción, esperamos que el método sea similar. El balance de masa para la columna de la figura 31 es igual que para la absorción. La línea de operación sigue siendo:

$$Y_{j+1} = \frac{L}{G} X_j + \left[Y_1 - \frac{L}{G} X_0 \right] \quad (\text{ec. 2.137})$$

En el arrastre, conocemos X_0 , X_N , Y_{N+1} y L/G . Como (X_N, Y_{N+1}) es un punto de la línea de operación, esa línea se gráfica y se escalonan las etapas. Esto se ve en la figura 32. Observe que la línea de operación está abajo de la curva de equilibrio, porque se transfiere soluto del líquido al gas. Por consiguiente, eso es similar a la sección de agotamiento de una columna de destilación. Se puede definir una relación mínima L/G , que corresponde a la cantidad mínima de gas de arrastre. Se parte del punto conocido (Y_{N+1}, X_n) y se traza una línea que pase por la intersección de $X = X_0$ con la curva de equilibrio. Adicionalmente puede haber un punto de estricción tangente. Para una columna de arrastre, $Y_1 > Y_{N+1}$, mientras que en la absorción sucede lo contrario. Entonces, la parte superior de la columna está en el lado derecho en la figura 32, pero está en el lado izquierdo en la figura 30.

Con frecuencia, en el arrastre hay cambios considerables de temperatura, por lo que se pueden usar las eficiencias de Murphree en esos diagramas, se definen como para los sistemas diluidos, en donde la definición más común de eficiencia de Murphree se usa en fracciones molares.

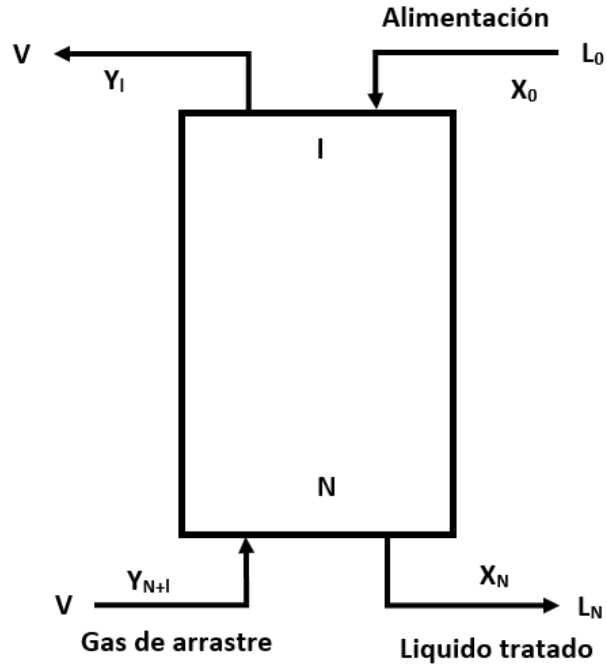


Figura 31: Columna de separación por arrastre. (McCabe et al, 2007).

Cuando no se cuenta con esos datos, se puede obtener una predicción gruesa de la eficiencia general E_0 con la correlación de O'Connell, que muestra la figura 33 (O'Connell, 1946).

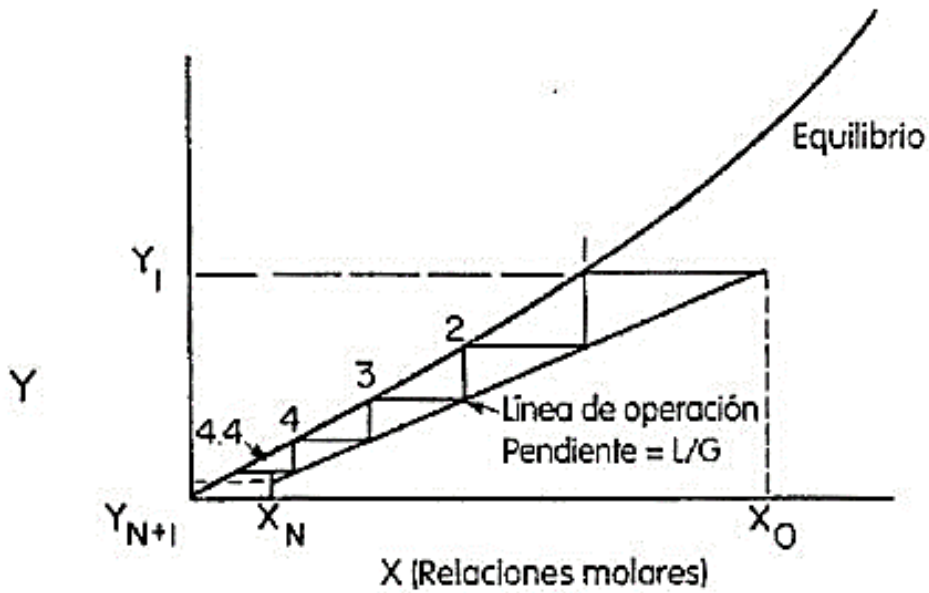


Figura 32: Diagrama de McCabe-Thiele para separación por arrastre. (McCabe et al, 2007).

En la figura 33, se puede observar la correlación de O'Connell para la eficiencia total de absorbedores, aunque se desarrolló originalmente para sistemas con tapas de burbujeo, los resultados se pueden usar para procesos donde es válida para $(Hp/\mu) > 0.000316$. La constante de ley de Henry, H, está en lb.mol/(atm-pie³), la presión (P) en atm, y la viscosidad del líquido (μ) en centipoises (cP).

$$\frac{Y_j - Y_{j+1}}{Y_j^* - Y_{j+1}} = E_{MV} \quad (\text{ec. 2.138})$$

$$F_0 = 0.37237 + 0.19339 \log\left(\frac{Hp}{\mu}\right) + 0.024816 \left(\log\left(\frac{Hp}{\mu}\right)\right)^2 \quad (\text{ec. 2.139})$$

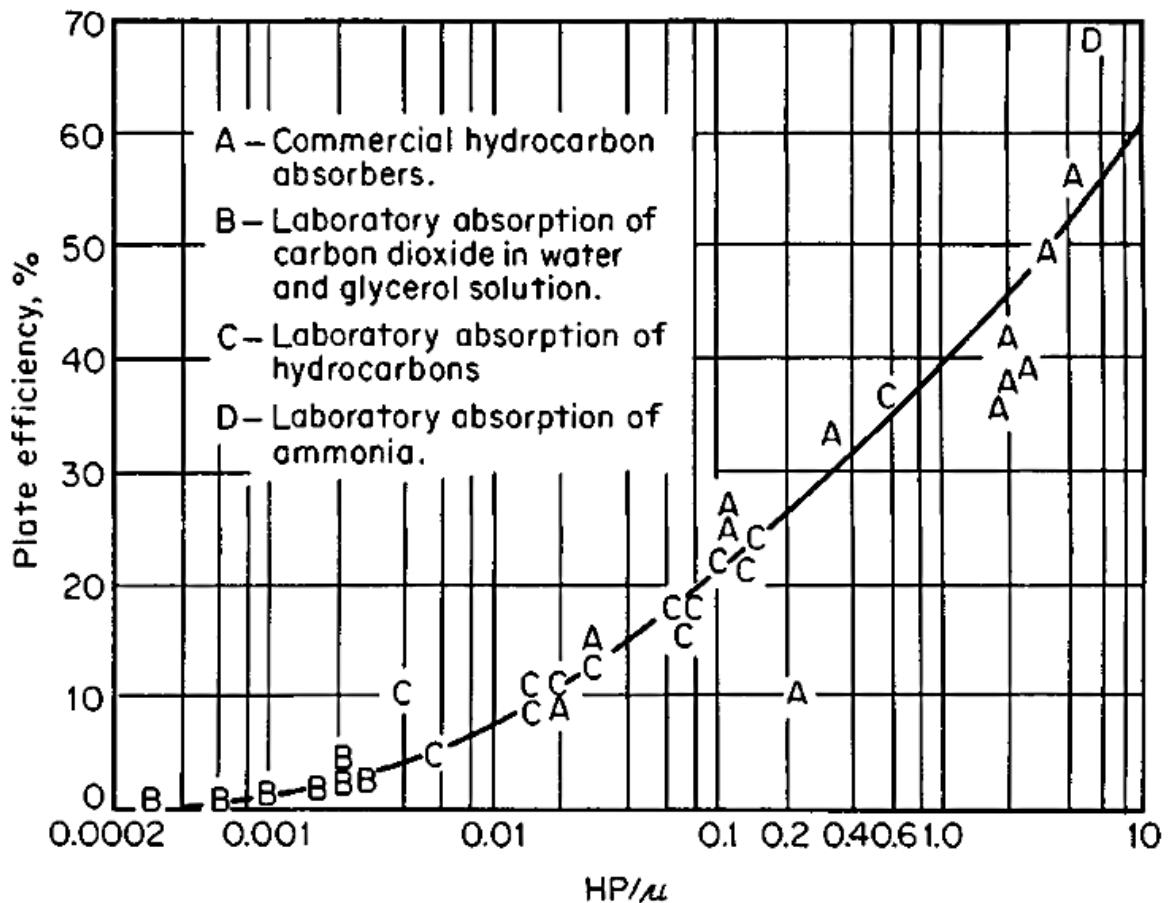


Figura 33: Correlación de O'Connell para eficiencia total de absorbedores de etapa de burbujeo. (Perry, 1968).

2.7.9 DISEÑO DE EMPAQUES Y TORRES EMPACADAS.

Un aparato que se utiliza con frecuencia en la absorción de gases y en otras operaciones es la torre empacada. Un ejemplo de dicho aparato se representa en la figura 34. El dispositivo consiste en una columna cilíndrica, o torre, equipada con una entrada de gas y un espacio de distribución en la parte inferior; una entrada de líquido y un distribuidor en la parte superior; salidas para el gas y el líquido por la parte superior e inferior, respectivamente; y una masa soportada de cuerpos sólidos inertes que recibe el nombre de torre empacada.

El soporte del empaque consiste por lo general en una criba o tamiz corrugado, para darle fuerza, con una gran fracción de área libre de forma que no se produzca inundación en el soporte. El líquido entrante, ya sea disolvente puro o una solución diluida del soluto en el solvente, y que recibe el nombre de licor débil o de muy baja concentración, se distribuye sobre la parte superior del empaque mediante un distribuidor y, en la operación ideal, moja de manera uniforme la superficie del empaque.

El distribuidor que se presenta en la figura 34, es una placa perforada con tubos instalados en cada perforación. En torres grandes, son más comunes las boquillas rociadoras o los platos distribuidores con un vertedero de desbordamiento. Para torres muy grandes, hasta de 9 m (30 ft) de diámetro, Nutter Engineering recomienda utilizar un plato distribuidor con tubos goteadores individuales.

El gas que contiene el soluto, o gas rico, entra en el espacio de distribución situado debajo del empaque y asciende a través de los intersticios del empaque en contracorriente con el flujo del líquido. El empaque proporciona una gran área de contacto entre el líquido y el gas, favoreciendo así un íntimo contacto entre las fases.

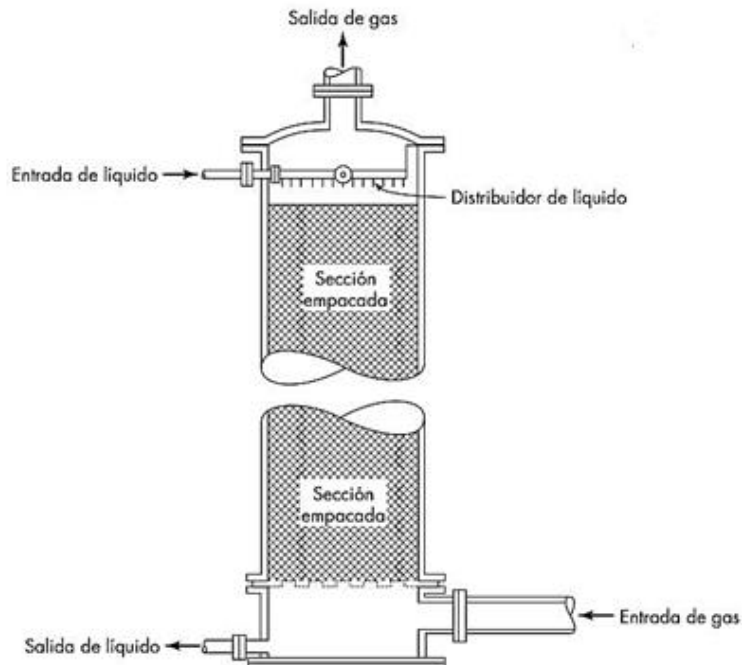


Figura 34: Diseño de una torre empacada. (McCabe et al, 2007).

El soluto contenido en el gas rico es absorbido por el líquido fresco que entra en la torre, y el gas diluido o agotado sale de la torre por la parte superior. El líquido se enriquece en soluto a medida que desciende por la torre y el líquido concentrado, llamado licor concentrado, sale por el fondo de la torre a través de la salida de líquido.

Los empaques de la torre se dividen en tres principales tipos: aquellos que son cargados de forma aleatoria en la torre, los que son colocados a mano, y aquellos que se conocen como empaques ordenados o estructurados. Los empaques aleatorios consisten en unidades de 6 a 75 mm (1/4 – o 3 in.) en su dimensión mayor; los empaques inferiores a 25 mm se utilizan principalmente en columnas de laboratorio o de plantas piloto. Las unidades de empaque ordenado son de tamaños comprendidos entre unidades de 50 a 200 mm (2 a 8 in.).

Éstos se ocupan mucho menos que los empaques aleatorios, pero no se estudiarán aquí. La mayoría de los empaques aleatorios de las torres se construyen con materiales baratos e inertes, tales como arcilla, porcelana o diferentes plásticos.

A veces se utilizan anillos metálicos de pared delgada, de acero o aluminio. Se alcanzan altos espacios vacíos (porosidad del lecho) y pasajes o pasos grandes para los fluidos haciendo las

unidades de empaque irregulares o huecas, de forma que se entrelazan para dar lugar a estructuras abiertas con una porosidad de 60 a 90%. En la figura 34 se ilustran empaques comunes de torres.

Las monturas de cerámicas Berl y los anillos Raschig son los tipos de empaque más antiguos y no son muy usados en la actualidad, aunque representaron una mejora importante respecto de las esferas de cerámica o la piedra triturada que se introdujeron primero. Las monturas Intalox son similares a las monturas Berl, pero la forma impide que las piezas queden demasiado juntas, y esto aumenta la porosidad del lecho. Las monturas de Super Intalox tienen una pequeña variación con respecto al borde escalonado; se encuentran disponibles en plástico o en cerámica. Los anillos Pall están hechos de metal delgado con porciones de la pared inclinada hacia dentro, o de plástico con ranuras en las paredes y costillas rígidas dentro.

Los empaques Hy-pak metálicos y Flexirings (no mostrados en la figura 35) son similares en forma y funcionamiento a los anillos metálicos Pall. Los lechos de anillos Pall tienen alrededor de 90% de fracción de huecos y una ligera caída de presión que otros empaques de tamaño nominal parecido. El nuevo IMTP de Norton (Instalox Metal Packing empaque de torres metálico Intalox), tiene una estructura muy abierta y una caída de presión más baja que la de los anillos Pall. Los factores de empaque adicionales de caída de presión para algunos empaques comerciales están dados en unidades del SI, por Perry. Los empaques estructurados con orden geométrico han evolucionado desde los empaques Stedman a finales de la década de 1930, pero se encontraron muy pocos usos industriales hasta que se desarrollaron los empaques de Sulzer alrededor de 1965.

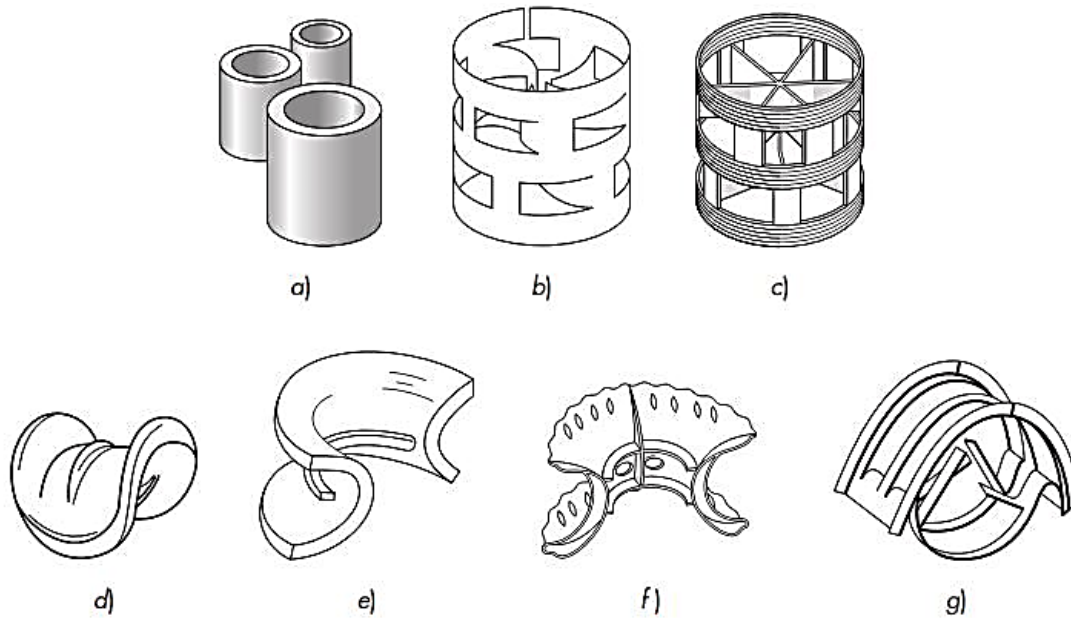


Figura 35: Empaques comunes en torres: a) anillos Rasching; b) anillo metálico Pall; c) anillo plástico Pall; d) muntura Berl; e) montura cerámica Intalox; f) montura plástica Super Intalox; g) montura metálica Intalox. (Welty et al, 2008).

Los primeros empaques estructurados se fabricaron de gasa alambre; los modelos más recientes están hechos de láminas perforadas de metal corrugado, con láminas adyacentes acomodadas de tal forma que el líquido se distribuye sobre sus superficies mientras que el vapor fluye a través de los canales formados por los corrugados. Los canales están colocados en ángulo de 45° respecto a la horizontal; el ángulo se alterna en dirección en las capas sucesivas, como se muestra en la figura 36. Cada capa tiene unas cuantas pulgadas de espesor. Varios empaques patentados difieren en el tamaño y distribución de los corrugados y el tratamiento de las superficies de empaque. En general, las corrugaciones triangulares tienen de 25 a 40 mm a lo largo de la base, de 17 a 25 mm de lado, y de 10 a 15 mm de altura. Los intervalos de porosidad van de 0.93 a 0.97, y el área específica de superficie de 60 a $76 \text{ ft}^2/\text{ft}^3$ (200 a $250 \text{ m}^2/\text{m}^3$). El empaque Sulzer BX, fabricado de alambre de metal, tiene un área específica de superficie de $152 \text{ ft}^2/\text{ft}^3$ ($500 \text{ m}^2/\text{m}^3$) con una porosidad de 0.9.

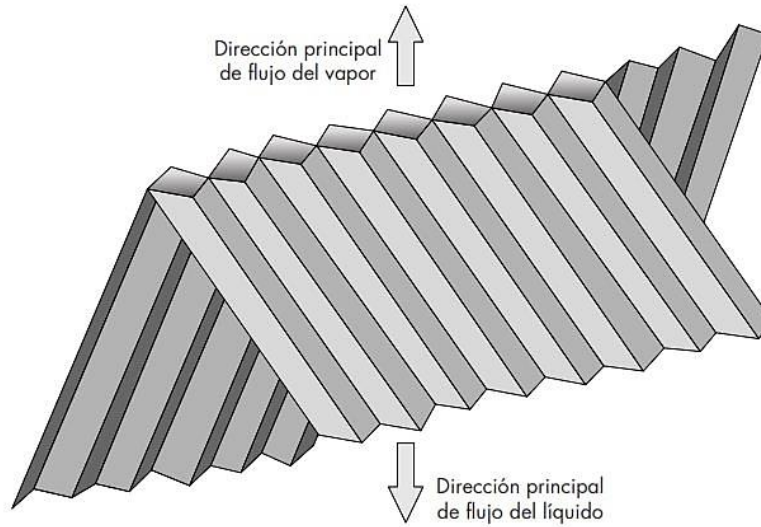


Figura 36: Trazado esquemático de un empaque estructurado. (Welty *et al*, 2008).

2.7.10 CONTACTO ENTRE EL LÍQUIDO Y EL GAS.

El requisito de un buen contacto entre el líquido y el gas es la condición más difícil de cumplir, sobre todo en torres grandes. De manera ideal, el líquido, una vez distribuido en la parte superior del empaque, fluye en forma de una película delgada sobre la superficie del mismo durante todo el recorrido de descenso a través de la torre. En la realidad, las películas tienden a aumentar de espesor en algunos lugares y a disminuir en otros, de forma que el líquido se agrupa en pequeñas corrientes y fluye a lo largo de trayectorias localizadas a través del empaque.

En especial cuando se registran bajas velocidades del líquido, una buena parte de la superficie del empaque puede estar seca, o con más frecuencia, recubierta por una película estacionaria de líquido. Este efecto se conoce con el nombre de canalización y es la principal razón del mal funcionamiento de las grandes torres empacadas. La canalización es más grave en torres con empaque ordenado; por ello casi no se utilizan.

La canalización es menos grave en empaques aleatorios. En torres de tamaño moderado, la canalización se minimiza si el diámetro de la torre es al menos ocho veces el diámetro del empaque. Si la relación entre el diámetro de la torre y el diámetro del empaque es inferior de

8 a 1, el líquido tiende a desplazarse hacia afuera del empaque y descender por la pared de la columna. Sin embargo, aun en columnas pequeñas con empaques que cumplen esta condición, la distribución del líquido y la canalización tienen un efecto importante sobre el funcionamiento de la columna. En torres grandes, la distribución inicial es especialmente importante, pero aun con una adecuada distribución inicial, por lo general se incluyen redistribuidores para el líquido cada 5 o 10 m de la torre, sobre todo inmediatamente por encima de cada sección empacada. La mejora en la distribución de líquido ha hecho posible el uso efectivo de las torres empacadas con diámetros mayores de 9 m (30 ft).

2.7.11 CAÍDA DE PRESIÓN Y VELOCIDADES LÍMITE DE FLUJO.

La figura 36, muestra datos típicos de la caída de presión en una torre empacada. La caída de presión por unidad de longitud (o profundidad) del empaque se debe a la fricción del fluido; se grafica en coordenadas logarítmicas frente a la velocidad de flujo del gas G_y , expresada en masa de gas por hora y por unidad de área de la sección transversal, considerando que la torre está vacía. Por lo tanto, G_y está relacionada con la velocidad superficial del gas por medio de la ecuación $G_y = u_0 \rho_y$, donde ρ_y es la densidad del gas. Cuando el empaque está seco, la línea que se obtiene es recta y tiene una pendiente del orden de 1.8. Por consiguiente, la caída de presión aumenta con la velocidad elevada a una potencia de 1.8.

Si el empaque está irrigado con un flujo constante de líquido, la relación entre la caída de presión y la velocidad de flujo del gas sigue al principio una línea paralela a la del empaque seco. La caída de presión es mayor que en el empaque seco, debido a que el líquido en la torre reduce el espacio disponible para el flujo de gas.

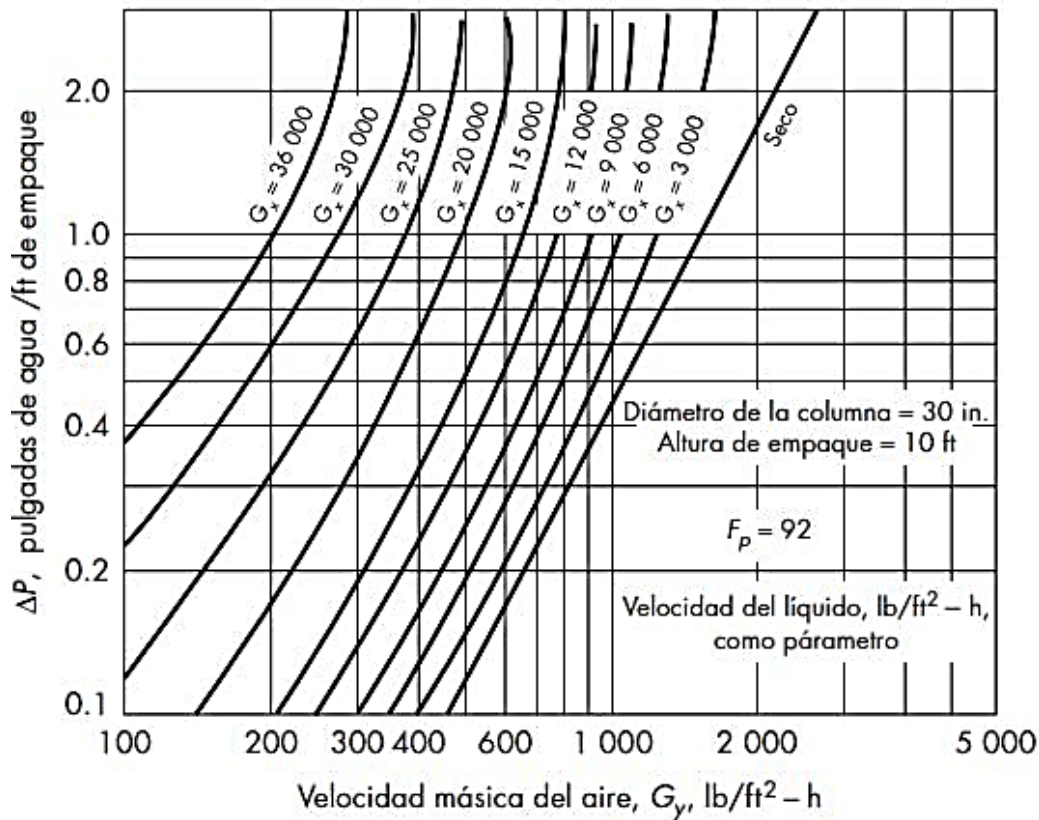


Figura 37: Caída de presión en una torre empacada para el sistema aire-agua con monturas, Intalox de 1 in. ($1000 \text{ lb/ft}^3 \cdot \text{h} \approx 1.356 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$; $1 \text{ in. H}_2\text{O/ft} \approx 817 \text{ Pa/m}$). (Welty et al, 2008).

Sin embargo, la fracción de huecos no varía con el flujo de gas. Para velocidades moderadas del gas, la línea para el empaque irrigado tiene una pendiente cada vez más pronunciada, debido a que el gas impide el flujo descendente del líquido de forma que aumenta la retención de éste con la velocidad de flujo del gas. El punto en el que la retención de líquido comienza a aumentar, hecho que se aprecia por un cambio de la pendiente de la línea de la caída de presión, recibe el nombre de punto de carga. Sin embargo, como se aprecia en la figura 37, no es fácil obtener un valor exacto para el punto de carga.

Al aumentar todavía más la velocidad del gas, la caída de presión se incrementa aún más rápido, y las líneas se hacen casi verticales cuando la caída de presión es del orden de 2 a 3 in. de agua por pie de empaque (150 a 250 mm de agua por metro). En determinadas regiones de la columna, el líquido se transforma en una fase continua y se dice que la columna está

inundada. Temporalmente se utilizan flujos de gas más elevados, pero el líquido se acumula con mayor rapidez, y la columna completa puede llenarse con líquido.

Es evidente que la velocidad del gas en la columna empacada en operación debe ser inferior a la velocidad de inundación. Sin embargo, a medida que se aproxima la inundación, la mayor parte o toda la superficie de empaque se humedece, aumentando el área de contacto entre el gas y el líquido. El diseñador debe escoger una velocidad suficientemente distante de la velocidad de inundación para garantizar una operación segura, pero no tan baja que se requiera de una columna mucho más grande. Bajar la velocidad del diseño hace que se incremente el diámetro de la torre sin mucho cambio en la altura requerida, a partir de que bajas velocidades de gas y líquido llevan a una reducción proporcional cercana a la velocidad de la transferencia de masa.

Uno de los beneficios de la baja velocidad del gas es el decremento de la caída de presión, pero el costo de la energía consumida no es por lo común un factor importante en la optimización del diseño. En algunas ocasiones, la velocidad del gas es escogida como la mitad de la velocidad de inundación que se predice a partir de una correlación generalizada. Esto quizá parezca muy conservador, pero hay una dispersión considerable en los datos publicados para la velocidad de inundación, y las correlaciones generalizadas no son muy exactas. Se emplea una aproximación más cercana a la velocidad de inundación si se dispone de los datos detallados de funcionamiento para la selección del empaque. También es posible diseñar torres empacadas con base en una caída de presión definida por unidad de altura del empaque.

La velocidad de inundación depende en forma importante del tipo y tamaño del empaque y la velocidad másica de líquido. La figura 38 muestra información para monturas Intalox tomados de la figura 37 y curvas similares para otros tamaños.

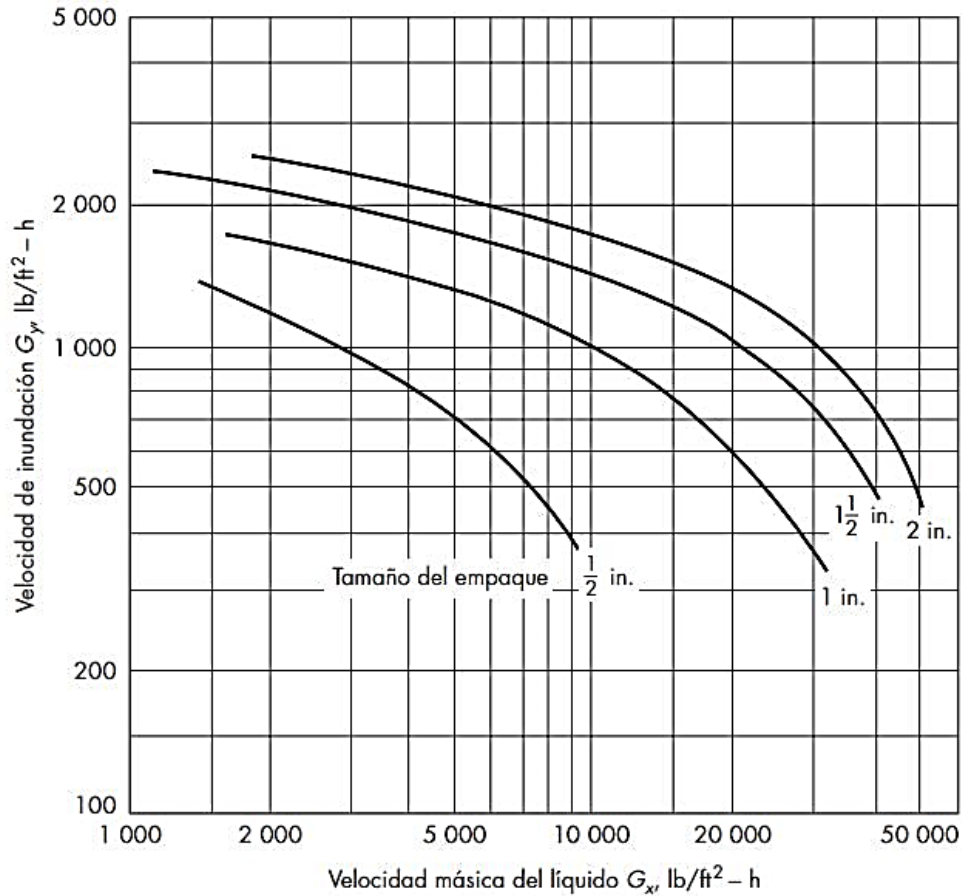


Figura 38: Velocidades de inundación en monturas cerámicas, Intalox en un sistema aire-agua. (1000 lb/ft³.h \approx 1.356 kg/m².s). (Welty et al, 2008).

Se supone que la velocidad de inundación ocurre a una caída de presión de 2.0 in. de H₂O/ft de empaque, puesto que las curvas de la caída de presión son verticales o cercanas a este punto. Para bajas velocidades de líquido, la velocidad de inundación varía con la velocidad del líquido elevado a la potencia de -0.2 a -0.3 y con el tamaño del empaque elevado a la potencia de 0.6 a 0.7.

Los efectos de la velocidad del líquido y el tamaño del empaque se vuelven más pronunciados en altas velocidades másicas del líquido. Se han propuesto varias correlaciones generalizadas para la caída de presión y la velocidad de inundación en columnas empacadas. Muchas de ellas utilizan una gráfica, log - log con $(G_x / G_y) (\rho_y / \rho_x)^{0.5}$ en la abscisa y una función que contiene G_y^2 en la ordenada. Por lo regular, la relación de flujo G_x/G_y se toma a partir del

equilibrio, G_y se determina directamente, mientras que se requiere de la solución por prueba y error si G_y y G_x están en ejes separados, como en la figura 39.

Las características del empaque están dadas por un factor de empaque (F_p), el cual disminuye si se aumenta el tamaño del empaque o la fracción de vacío (o fracción hueca). No es posible predecir los factores de empaque a partir de la teoría utilizando la ecuación de Ergun a causa de las formas complejas, y por eso se determinan en forma empírica. Desafortunadamente, no hay correlaciones únicas para caída de presión que den un buen ajuste para todos los empaques, y los valores de F_p basados en el ajuste de datos para bajas caídas de presión, que tal vez difieren significativamente de los valores obtenidos a partir del ajuste de datos para altas caídas de presión o por ajuste de datos de la velocidad de inundación. Una correlación muy utilizada para estimar caídas de presión en empaques colocados de manera aleatoria se presenta en la figura 38 donde G_x y G_y están en $\text{lb/ft}^2 \cdot \text{s}$, μ_x está en cP , ρ_x y ρ_y están en lb/ft^3 , y g_c es $32.174 \text{ lb} \cdot \text{ft/lbf} \cdot \text{s}^2$.

Las primeras versiones de esta correlación incluían una línea de inundación por encima de la línea para $\Delta P = 1.5 \text{ in. H}_2\text{O/ft}$ de empaque, pero estudios recientes estiman la inundación a caídas de presión de sólo 0.7 a 1.5 in. $\text{H}_2\text{O/ft}$ para empaques de 2 o 3 in. Una ecuación empírica para el límite de la caída de presión es:

$$\Delta P_{\text{inundación}} = 0.115 F_p^{0.7} \quad (\text{ec. 2.140})$$

Donde $\Delta P_{\text{inundación}}$ = caída de presión en la inundación, in. $\text{H}_2\text{O/ft}$ de empaque y F_p =factor de empaque, adimensional.

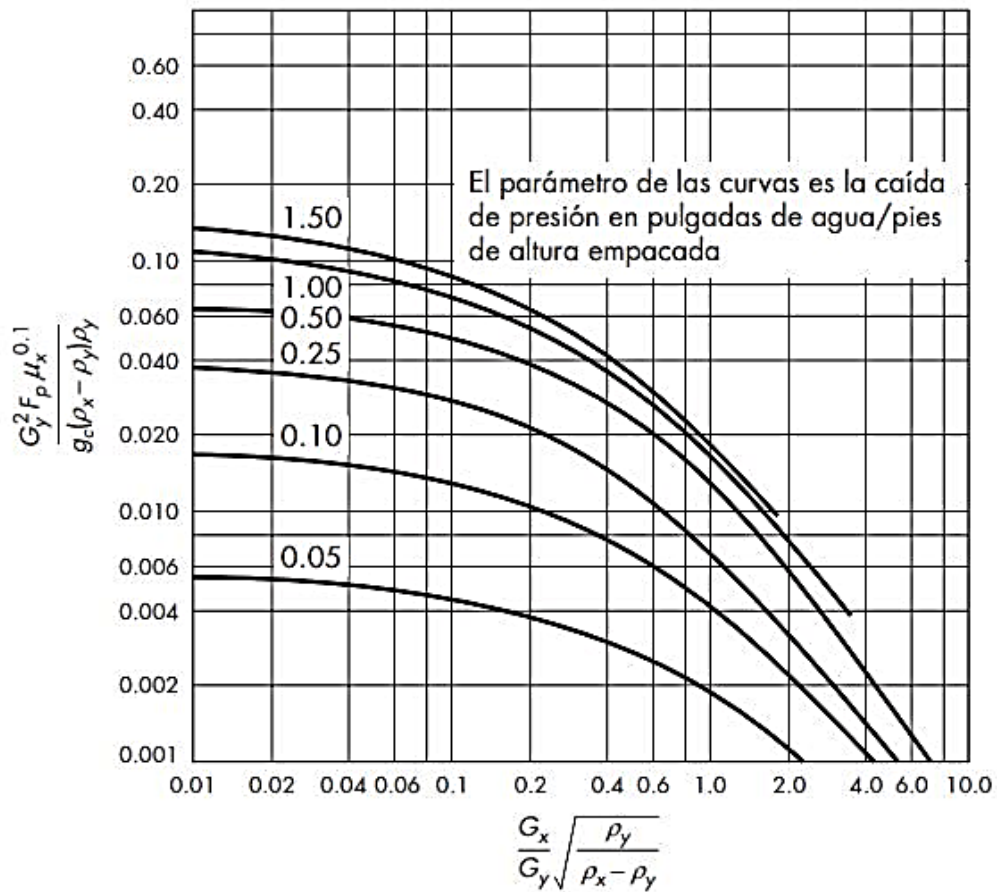


Figura 39: Correlación generalizada para la caída de presión en columnas empacadas. (1 in H₂O/ft ≈ 817 Pa/m) (según Eckert). (Welty et al, 2008).

La ecuación (2.140) se utiliza para factores de empaque desde 10 hasta 60. Para valores mayores de F_p , la caída de presión en la inundación se toma como 2.0 in. H₂O/ft. Una correlación alternativa para la caída de presión en columnas empacadas fue propuesta por Strigle y se presenta en la figura 40.

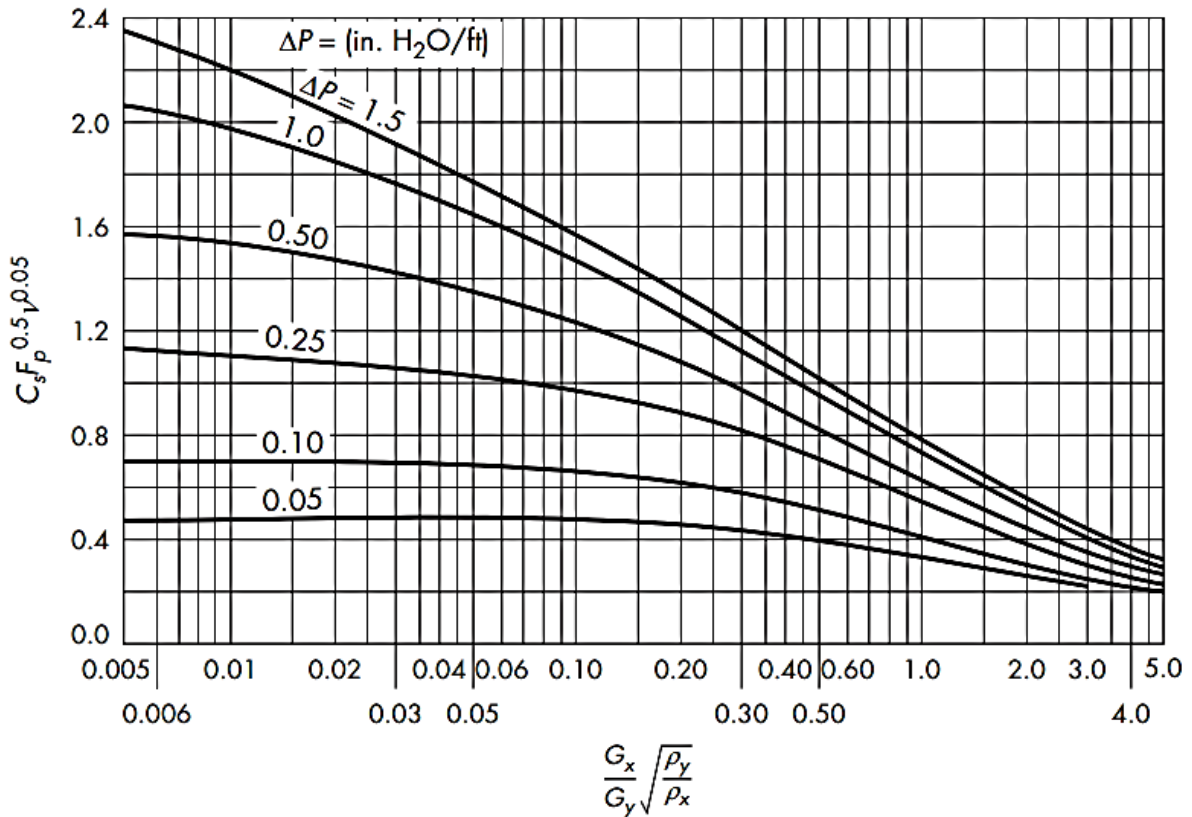


Figura 40: Correlación generalizada alternativa de la caída de presión. (1 in. H₂O/ft ≈ 817 Pa/m). (Welty et al, 2008).

2.7.12 DIÁMETRO DE LA COLUMNA.

Para absorción y arrastre, el diámetro de la columna se calcula en la misma forma que para una columna de destilación de platos o empacada. Sin embargo, se tiene en cuenta que la tasa de flujo de gas, “G”, debe convertirse ahora a tasa de flujo total de gas, “V”. La tasa de flujo de gas portador, G, es:

$$G \left(\frac{\text{moles de gas portador}}{h} \right) = (1 - y_j)V_j \quad (\text{ec. 2.141})$$

Donde:

$$y_j = \frac{Y_j}{1+Y_j} \quad (\text{ec. 2.142})$$

La tasa G es:

$$G = \left(\frac{Y_j}{1+Y_j} \right) V_j \quad (\text{ec. 2.143})$$

O bien:

$$(1 + Y_j)G = V_j \quad (\text{ec. 2.144})$$

La tasa total de flujo de líquido, “L” se puede calcular con un balance general de masa. Con la envolvente de balance que muestra la figura 41, resulta:

$$L_j - V_{j+l} = L_0 - V_l \quad (\text{ec. 2.145})$$

Observe que la diferencia entre los flujos totales de las corrientes en contacto es constante. Eso se ve en la figura 41. Los dos flujos totales, “V”, y “Lj” serán máximos cuando “Y” y “X” sean máximos. Eso sucede en el fondo de la columna en la absorción, por lo que se debe diseñar el diámetro en el fondo de la columna. En las columnas de arrastre, las tasas de flujo son máximas en la parte superior de la columna y el diseño del diámetro se hace para la parte superior de la columna. Zenz (1997) describe detalles específicos de diseño para absorbedores y separadores de arrastre. Con facilidad se puede tener una estimación de orden de magnitud para el diámetro de la columna (Reynolds et al, 2002), La velocidad superficial del gas (velocidad en una columna vacía) está entre los límites de 3 a 6 pie/s.

La tasa de flujo volumétrico del gas es V/ρ (ρ es la densidad molar del gas), el área transversal requerida es $A_c = V_1 / (\rho v)$ y el diámetro de la columna es $D = A_c^{1/2}$. Al sustituir una velocidad superficial promedio del gas igual a 4.5 pie/s, con otros valores adecuados, se obtiene una estimación del diámetro de la columna.

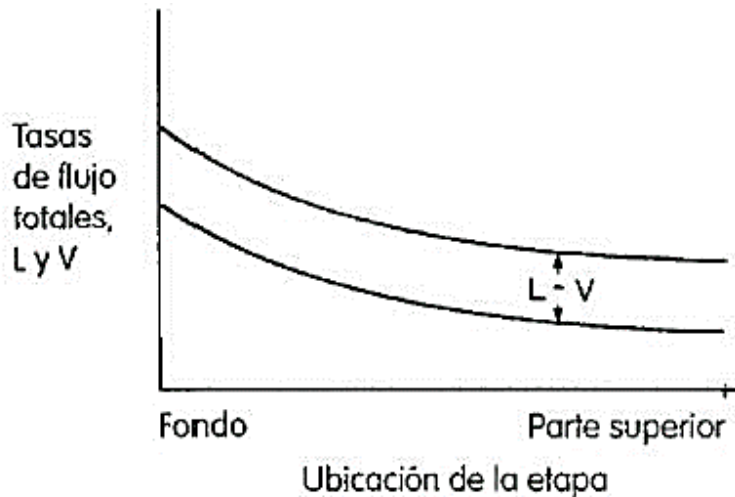


Figura 41: Tasas de flujo total en absorbedor. (McCabe et al, 2007).

2.7.13 SOLUCIÓN ANALÍTICA: LA ECUACIÓN DE KREMSER.

Cuando la solución es bastante diluida (menos de 1% de soluto, tanto en gas como en líquido), los flujos totales de líquido y gas no cambian de manera importante porque se transfiere poco soluto. Entonces todo el análisis se puede hacer con fracciones molares o de masa y tasas de flujo totales, En este caso, la columna de la figura 42, donde la ecuación de operación se deduce escribiendo un balance de masa en torno a la etapa j y despejando y_{j+1} .

$$Y_{j+1} = \frac{L}{V} X_j + \left[Y_1 - \frac{L}{V} X_0 \right] \quad (\text{ec. 2.146})$$

El resultado, que esencialmente es la misma ecuación (2.136), pero con unidades diferentes. Para usar la ecuación (2.146) en un diagrama de McCabe-Thiele, supondremos lo siguiente:

- I. L/V (flujos totales) es constante.
- II. El sistema es isotérmico.
- III. El sistema es isobárico.
- IV. El calor de absorción es despreciable.

Éstas son hipótesis razonables para absorbedores y separadores de arrastre con corrientes diluidas. En una gráfica de “ y ” en función de “ x ” (fracción molar o de masa), las soluciones

se verán como en la figura 41 para los separadores de arrastre. La pendiente de la línea de operación será L/V . Las figuras 43 y 44 muestran dos casos especiales de absorbedores. Si es válida la siguiente hipótesis adicional, el problema de etapa por etapa se puede resolver en forma analítica. Esta operación adicional es que, la línea de equilibrio es recta.

$$y_j = mx_j + b \quad (\text{ec. 2.147})$$

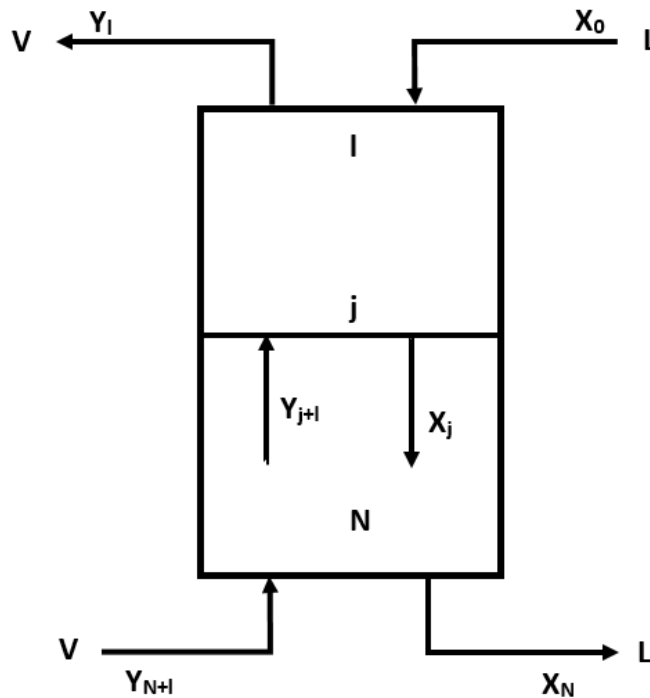


Figura 42: Absorbedor con fases diluidas. L y V son las tasas normales de flujo “ y ” y “ x ” son las fracciones de masa o molares. (McCabe et al, 2007).

Esta hipótesis es razonable para soluciones muy diluidas y concuerda con la ley de Henry, ecuación (2.123), si “ m ”, H_B/P_{to} , y $b = 0$. Se deduce con facilidad una solución analítica para la absorción, en el caso especial de la figura 43, donde las líneas de equilibrio y de operación son paralelas. Ahora, la distancia Δy entre esas líneas es constante. Para pasar de las concentraciones a la salida a las de la entrada, con “ N ” etapas.

$$N\Delta y = y_{N+1} - y_1 \quad (\text{ec. 2.148})$$

$$(\Delta y)_j = y_{j+1} - y_j = \left(\frac{L}{V} - m\right) x_j + \left(y_1 - \frac{L}{V} x_0 - b\right) \quad (\text{ec. 2.149})$$

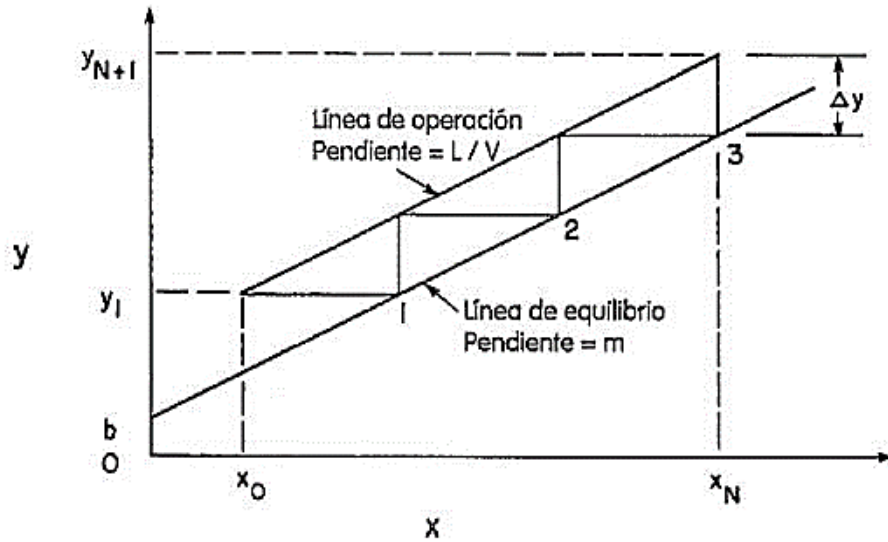


Figura 43: Diagrama de McCabe-Thiele para absorbedor con fases diluidas con líneas paralelas de equilibrio y de operación. (McCabe et al, 2007).

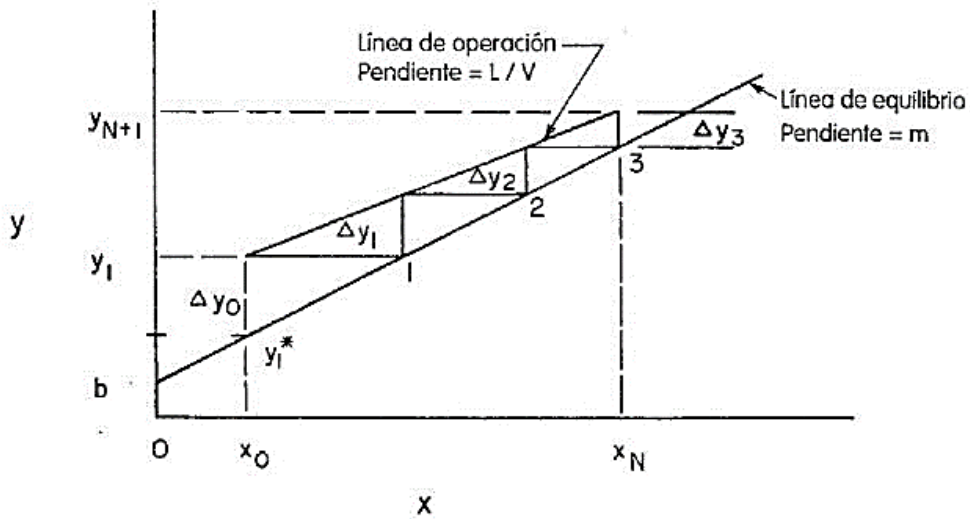


Figura 44: Diagrama de McCabe-Thiele para absorbedor con fases diluidas (L/V) < m. (McCabe et al, 2007).

Para el caso especial de la figura 43, $L/V = m$ (las líneas son paralelas), la ecuación (2.149) se transforma en:

$$\Delta y = (\Delta y)_j = y_j - \frac{L}{V} x_0 - b = \text{constante} \quad (\text{ec. 2.150})$$

Se combinan las ecuaciones (2.149) y (2.150) para obtener:

$$N = \frac{y_{N+l} - y_l}{\left(y_l - \frac{L}{V} x_0 - b\right)} \quad \text{para } \frac{L}{mV} = 1 \quad (\text{ec. 2.151})$$

La ecuación (2.151) es un caso especial de la ecuación de Kremser. Cuando se aplica esta ecuación, los problemas de absorción y arrastre se pueden resolver en forma bastante simple y exacta, sin necesidad de hacer cálculos de etapa por etapa. La figura 43 y la ecuación resultante (2.151) fueron para un caso especial. El caso más general se ve en la figura 44. Aquí, Δy varía de etapa a etapa. Se pueden determinar los valores de Δy , con la ecuación (2.149). Es más fácil de usar esa ecuación (2.148) si sustituimos a x con la ecuación de equilibrio (2.147).

$$x_j = \frac{y_j - b}{m} \quad (\text{ec. 2.152})$$

Entonces:

$$(\Delta y)_j = \left(\frac{L}{mV} - 1\right) y_j + \left(y_l - \frac{L}{mV} b - \frac{L}{V} x_0\right) \quad (\text{ec. 2.153})$$

$$(\Delta y)_{j+l} = \left(\frac{L}{mV} - 1\right) y_{j+l} + \left(y_l - \frac{L}{mV} b - \frac{L}{V} x_0\right) \quad (\text{ec. 2.154})$$

Restando la ecuación (2.153) de la ecuación (2.154), y despejando $(\Delta y)_{j+l}$.

$$(\Delta y)_{j+l} = \frac{L}{mV} (\Delta y)_j \quad (\text{ec. 2.155})$$

En la ecuación (2.155) se relaciona el cambio de composición del vapor de etapa a etapa con (L/mV) , que se conoce como factor de absorción. Si la línea de operación o la de equilibrio son curvas, ya no es válida esta relación y no hay solución analítica simple. La diferencia entre las concentraciones de gas en la entrada y la salida debe ser igual a la suma de los valores de Δy_j que muestra la figura 44, Así:

$$\Delta y_1 + \Delta y_2 + \dots + \Delta y_N = y_{N+1} - y_l \quad (\text{ec. 2.156})$$

Al aplicar la ecuación (2.155) queda:

$$\Delta y_1 \left(1 + \frac{L}{mV} + \left(\frac{L}{mV} \right)^2 + \dots + \left(\frac{L}{mV} \right)^{N-1} \right) = y_{N+1} - y_l \quad (\text{ec. 2.157})$$

Se puede calcular la suma en la ecuación (2.156). Entonces, la ecuación (2.157) es:

$$\frac{y_{N+1} - y_l}{\Delta y_1} = \frac{1 - \left(\frac{L}{mV} \right)^N}{1 - \left(\frac{L}{mV} \right)} \quad (\text{ec. 2.158})$$

Si $L/mV > 1$, entonces se dividen ambos lados de la ecuación (2.156) entre $(L/mV)^{N-1}$ y se hace la suma en función de mV/L . La ecuación que resulte seguirá siendo la ecuación (2.158). De acuerdo con la ecuación (12-23), $\Delta y_t = \Delta y_0 L/mV$, siendo $\Delta y_0 = -y_3^*$ lo que muestra la figura 44. La composición del vapor, y^* tiene el valor que estaría en equilibrio con el líquido a la entrada, x_0 . Entonces:

$$y_l^* = mx_0 + b \quad (\text{ec. 2.159})$$

Al eliminar Δy : de la ecuación (2.158) queda:

$$\frac{y_{N+1} - y_l}{y_l - y_l^*} = \frac{\frac{L}{mV} - \left(\frac{L}{mV} \right)^{N+1}}{1 - \left(\frac{L}{mV} \right)} \quad (\text{ec. 2.160})$$

La ecuación (2.160) es una forma de la ecuación de Kremser (Kremser, 1930; Souders y Brown, 1932). Se puede deducir una gran cantidad de formas alternativas con operaciones algebraicas. Por ejemplo, si sumamos 1 a ambos lados de la ecuación (2.160), y ordenamos, llegaremos a:

$$\frac{y_{N+1} - y_l^*}{y_l - y_l^*} = \frac{1 - \left(\frac{L}{mV} \right)^{N+1}}{1 - \left(\frac{L}{mV} \right)} \quad (\text{ec. 2.161})$$

De donde se puede despejar N. Después de las operaciones, este resultado es:

$$N = \frac{\ln\left[\left(1 - \frac{mV}{L}\right)\left(\frac{y_{N+l} - y_l^*}{y_l - y_l^*}\right) + \frac{mV}{L}\right]}{\ln\left(\frac{L}{mV}\right)} \quad (\text{ec. 2.162})$$

Las ecuaciones (2.161) y (2.162) también se conocen como formas de la ecuación de Kremser. Brian (1972) y King (1980) presentan deducciones alternativas de la ecuación de Kremser. Algunas formas alternativas, en función de la composición de la fase gaseosa, son:

$$\frac{y_{N+l} - y_l}{y_l - y_l^*} = \frac{\left(\frac{L}{mV}\right) - \left(\frac{L}{mV}\right)^{N+l}}{1 - \left(\frac{L}{mV}\right)^{N+l}} \quad (\text{ec. 2.163})$$

$$\frac{y_{N+l} - y_{N+l}^*}{y_l - y_l^*} = \left(\frac{L}{mV}\right)^N \quad (\text{ec. 2.164})$$

$$N = \frac{\ln\left[\frac{y_{N+l} - y_{N+l}^*}{y_l - y_l^*}\right]}{\ln\left(\frac{L}{mV}\right)} \quad (\text{ec. 2.165})$$

$$N = \frac{\ln\left[\frac{y_{N+l} - y_{N+l}^*}{y_l - y_l^*}\right]}{\ln\left[\frac{y_{N+l} - y_l}{y_{N+l}^* - y_l^*}\right]} \quad (\text{ec. 2.167})$$

Donde:

$$y_{N+l}^* = mx_N + b \quad y \quad y_l^* = mx_0 + b \quad (\text{ec. 2.168})$$

Algunas formas alternativas, en función de la composición de la fase líquida, son:

$$N = \frac{\ln\left[\left(1 - \frac{L}{mV}\right)\left(\frac{x_0 - x_N^*}{x_N - x_N^*}\right) + \frac{L}{mV}\right]}{\ln\left(\frac{L}{mV}\right)} \quad (\text{ec. 2.169})$$

$$N = \frac{\ln\left[\frac{x_N - x_N^*}{x_0 - x_0^*}\right]}{\ln\left(\frac{L}{mV}\right)} \quad (\text{ec. 2.170})$$

$$N = \frac{\ln \left[\frac{x_N - x_N^*}{x_0 - x_0^*} \right]}{\ln \left[\frac{x_0^* - x_N^*}{x_0 - x_N} \right]} \quad (\text{ec. 2.171})$$

$$\frac{x_N - x_N^*}{x_0 - x_N^*} = \frac{1 - \frac{mV}{L}}{1 - \left(\frac{mV}{L} \right)^{N+1}} \quad (\text{ec. 2.172})$$

$$\frac{x_N - x_N^*}{x_0 - x_0^*} = \left(\frac{L}{mV} \right)^N \quad (\text{ec. 2.173})$$

En donde:

$$x_N^* = \frac{y_{N+1} - b}{m} \quad y \quad x_0^* = \frac{y_l - b}{m} \quad (\text{ec. 2.174})$$

Wankat (1980) desarrolló formas para sistemas con tres fases, donde dos fases tienen flujo co - corriente y a contracorriente de la tercera. Brian (1972, cap. 3) y King (1980, págs. 371-376) desarrollaron formas de la ecuación de Kremser para columnas con varias secciones. Hwang et al. (1992) desarrolló formas para absorbedores con vaporizador.

Cuando son válidas las hipótesis necesarias para su deducción, la ecuación de Kremser tiene varias ventajas sobre el procedimiento de cálculo de etapa por etapa. Si la cantidad de etapas es grande, es mucho más cómodo el uso de la ecuación de Kremser y es fácil programarla en una computadora o en una calculadora. Cuando se especifica la cantidad de etapas, el procedimiento de McCabe-Thiele, de etapa por etapa, es por tanteos, pero no así el uso de la ecuación de Kremser. Como se pueden hacer los cálculos con más rapidez, es fácil determinar los efectos de variar y_v , x_0 , L/V , m , etc.

La desventaja principal de la ecuación de Kremser es que es exacta sólo para soluciones diluidas donde L/V es constante, el equilibrio es lineal y el sistema es isotérmico. La forma aproximada de la ecuación de Kremser depende del contexto del problema.

2.7.14 ABSORBEDORES Y SEPARADORES DE ARRASTRE CON VARIOS SOLUTOS DILUIDOS.

Hasta ahora nos hemos limitado a casos en los que hay un solo soluto por recuperar. Los procedimientos de McCabe-Thiele y la ecuación de Kremser pueden usarse para cálculos de absorción y arrastre si ciertas hipótesis son válidas. En el análisis de un solo soluto con ambos procedimientos se necesitaba que los sistemas:

- a) Fueran isotérmicos.
- b) Fueran isobáricos.
- c) Tuvieran un calor de absorción despreciable.
- d) Tuvieran flujos constantes.

Estas soluciones se vuelven a necesitar. Para ver qué otras hipótesis se requieren, observando la regla de las fases de Gibbs para un sistema con tres solutos, un solvente y un gas portador.

La regla de las fases es:

$$F = C - P + 2 = 5 - 2 + 2 = 5$$

Cinco grados de libertad es un número grande. Para representar al equilibrio con una sola curva, o en una forma lineal como la ecuación (2.147), es necesario especificar cuatro de esos grados de libertad. Con la temperatura y la presión constante se usan dos de ellos; los otros dos se pueden especificar asumiendo que: los solutos son independientes entre sí.

En otras palabras, para cualquier soluto, el equilibrio no depende de las cantidades de otros solutos que haya presentes. Para esta hipótesis se requiere que las soluciones sean diluidas. Además, se debe hacer el análisis en función de fracciones molares o de masa y tasas de flujo totales, para lo cual también se requieren soluciones diluidas.

$$Y_i = \frac{y_i}{1 - y_1 - y_2 - y_3} \quad (\text{ec. 2.175})$$

Un análisis que use unidades de relación no es adecuado, porque en el cálculo de la relación intervienen otras concentraciones de soluto que no se conocerán. El efecto práctico de esta hipótesis es que se puede resolver el problema de varios solutos una vez para cada uno,

considerando a cada problema como de un solo componente. Eso sucede para el método de solución de etapa por etapa y también para la ecuación de Kremser.

Entonces, para el absorbedor que muestra la figura 45, se resuelven tres problemas de un solo soluto. Cada soluto adicional aumenta en dos los grados de libertad para el absorbedor. Se requieren esos dos grados de libertad para especificar las composiciones del gas en la entrada y del líquido en la entrada. Para el problema normal de diseño, que se ve en la figura 45, se especifican las composiciones del gas y del líquido a la entrada, así como los flujos.

Con la temperatura y la presión especificadas, queda un grado de libertad, que se suele usar para especificar una de las concentraciones de soluto a la salida, como y_B . Ahora queda totalmente especificado el problema de diseño para el soluto B. Para calcular la cantidad de etapas, podremos graficar los datos de equilibrio, que tienen la forma:

$$y_B = f_B(x_B) \quad (\text{ec. 2.176})$$

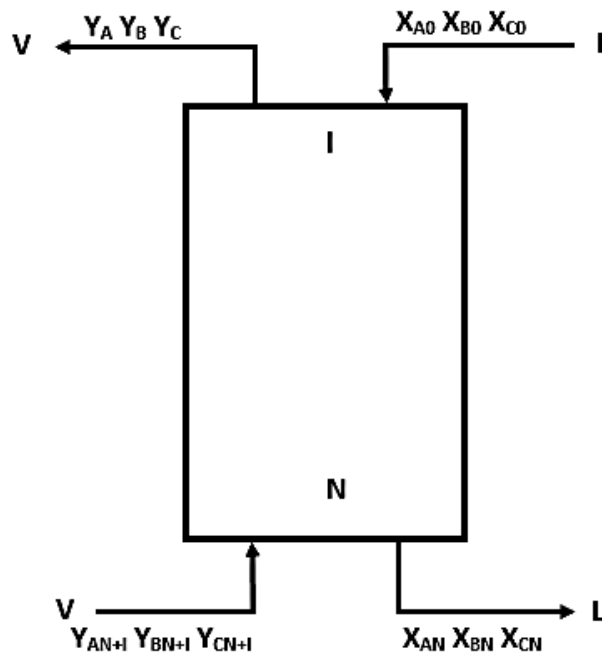


Figura 45: Absorbedor de varios solutos diluidos. (McCabe et al, 2007).

En un diagrama de McCabe-Thiele. Cuando se satisfacen las hipótesis, la ecuación de equilibrio será casi siempre lineal.

$$y_{Bj+1} = \frac{L}{V}x_{Bj} + \left(y_{B,l} - \frac{L}{V}x_{B,0} \right) \quad (ec. 2.177)$$

La ecuación de operación es la misma que la ecuación (2.146) y también se puede trazar en el diagrama de McCabe-Thiele. A continuación, se escalonan las etapas de la forma acostumbrada, eso se ve en la figura 48. Una vez determinada la cantidad de etapas con el cálculo del soluto “B”, es posible determinar las concentraciones de los solutos “A” y “C” resolviendo dos problemas de simulación totalmente especificados. Es decir, se conocen la cantidad de etapas y se debe calcular las composiciones a la salida. En los problemas de simulación se requiere un procedimiento de tanteos cuando se usa el cálculo de etapa por etapa. Una forma de hacer este cálculo para el componente A es:

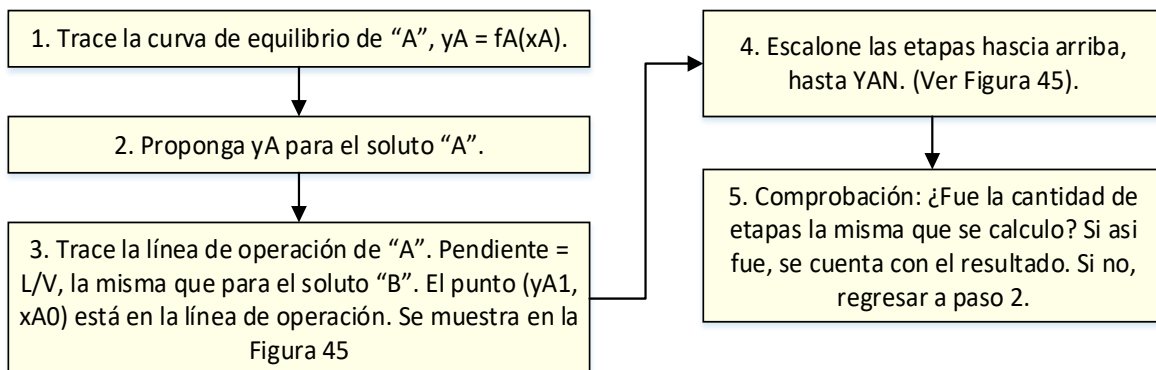


Figura 46: Esquema de etapas para la elaboración del diagrama de McCabe-Thiele para determinar la cantidad de etapas con el cálculo del soluto “B”.

$$y_{A j+1} = \frac{L}{V}x_{A,j} + \left(y_{A,l} - \frac{L}{V}x_{A,0} \right) \quad (ec. 2.178)$$

El procedimiento para el soluto “C” es el mismo. Con frecuencia, los tres diagramas que se ven en la figura 46 se trazan en el mismo papel. Así se ahorra papel, pero se tiende a la confusión. Si la función de equilibrio para cada soluto es lineal, como en la ecuación (2.147), se puede usar la ecuación de Kremser. Primero se resuelve el problema de diseño para el soluto B, con las ecuaciones (2.162), (2.165) o (2.166) para calcular N. Entonces, por

separado, se resuelven los dos problemas de simulación (para los solutos “A” y “C”) con ecuaciones como las (2.160), (2.161) o (2.164). Recuerde usar m_A y m_C al aplicar la ecuación de Kremser. Tenga en cuenta que cuando se pueda usar la ecuación de Kremser, los problemas de simulación no son de prueba y error.

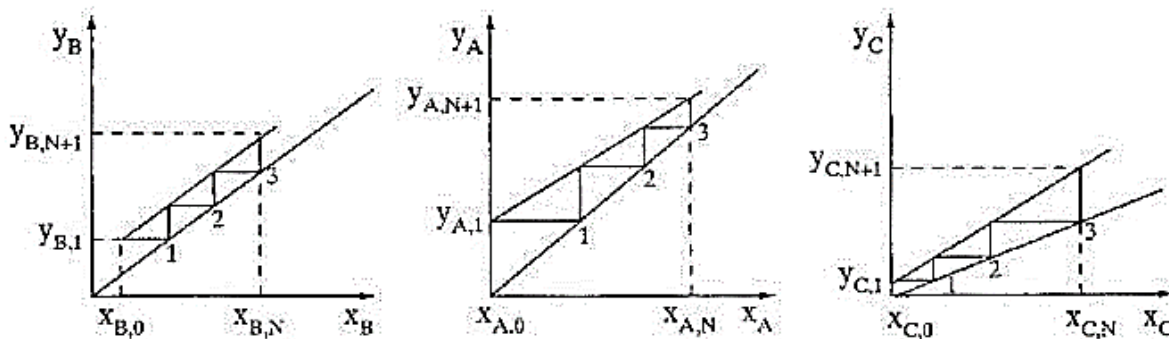


Figura 47: Solución para el absorbedor con fases diluidadas, con tres solutos donde se especifica el soluto B, y los solutos A y C se obtienen por tanteos. (McCabe et al, 2007).

Estos métodos de solución se restringen a soluciones muy diluidas. En las soluciones más concentradas, las tasas de flujo no son constantes, puede ser que los equilibrios de los solutos no sean independientes y los efectos térmicos se vuelvan importantes. Cuando eso sucede, se requiere el uso de métodos computarizados donde intervienen balances simultáneos de masa y energía y además los datos de equilibrio.

2.7.15 ABSORCIÓN IRREVERSIBLE.

Con frecuencia, en instalaciones pequeñas se usa la absorción con una reacción química irreversible para eliminar materiales perjudiciales. Por ejemplo, se usa NaOH para eliminar CO_2 y H_2S , que reacciona con el gas ácido en solución y forma una sal no volátil. Esto es adecuado para instalaciones pequeñas, porque el absorbedor suele ser pequeño y sencillo y no requiere instalaciones de regeneración. Sin embargo, el costo del reactivo (NaOH) puede hacer costosa la operación. Además, la sal formada debe desecharse de manera responsable.

En sistemas a gran escala, en general es menos costoso usar un solvente que se pueda regenerar. Veamos un absorbedor simple, en el que el gas a tratar contiene el gas portador “C” y el soluto “B”. El solvente contiene un componente no volátil “S” y un reactivo “R” que reacciona en forma irreversible con B, de acuerdo con la reacción irreversible:



El producto resultante “RB” no es volátil. En el equilibrio, x_B (en la forma libre) = 0, porque la reacción es irreversible y todo “B” que se disuelva formará el producto “RB”. Entonces, $y_B = 0$ en el equilibrio. Siempre que haya algo de reactivo R presente, la ecuación de equilibrio es $y_B = 0$. De acuerdo con la estequiometría de la reacción descrita por la ecuación (2.179), habrá disponible reactivo siempre que $Lx_{R0} > Vy_{B_{N+1}}$. Para un absorbedor a contracorriente y concentraciones diluidas, el balance de masa se describió en la ecuación (2.146), donde x es la fracción molar total de B en el líquido (como B libre y como RB combinado). Los diagramas de operación y de equilibrio se pueden graficar en un diagrama de McCabe-Thiele, como se ve en la figura 48, Una etapa de equilibrio dará $y_1 = 0$: más que suficiente. Desafortunadamente, la eficiencia de la etapa es muy baja, debido a las bajas velocidades de transferencia de masa del soluto al líquido. Si se usa la eficiencia de vapor de Murphree:

$$E_{MV} = \frac{y_{ent} - y_{sal}}{y_{ent} - y_{sal}^*} \quad (\text{ec. 2.180})$$

En la figura 48 se podrán escalonar las etapas reales. Son comunes las eficiencias de vapor Murphree menores que 30%. Como se requiere sólo una etapa de equilibrio, tal vez sean alternativas preferibles a las cascadas a contracorriente. En la figura 49 A, se ve una cascada concurrente. En el caso normal se usarían columnas empacadas para la cascada concurrente. La ventaja de la cascada concurrente es que no se puede inundar, de modo que es posible usar columnas de menor diámetro con mayores velocidades de vapor.

Al despejar y se obtiene la ecuación de operación:

$$y = -\frac{L}{V}x + \frac{y_0V - Lx_0}{V} \quad (\text{ec. 2.182})$$

Es una recta con pendiente $-L/V$ que se grafica en la figura 49 B. En el equilibrio, $y_N = 0$ y se puede calcular x_N con la ecuación de operación de la figura 49 B. Cuando no se alcanza el equilibrio. Los absorbedores concurrentes se usan comercialmente para absorción irreversible.

Para la absorción química reversible, las mayores tasas de flujo y la ausencia de inundación propias de los absorbedores concurrentes siguen siendo adecuadas, pero rara vez es suficiente un contacto de equilibrio. Si se conecta un absorbedor concurrente con uno a contracorriente, en serie o en paralelo, se puede lograr más flexibilidad en la operación (Isom y Rogers, 1994).

2.7.16 ABSORCIÓN CON REACCIÓN QUÍMICA.

La absorción seguida de reacción química en la fase líquida se utiliza con frecuencia para lograr una separación más completa de un soluto a partir de una mezcla gaseosa. Por ejemplo, a menudo se utiliza una solución ácida diluida para retirar NH_3 de corrientes gaseosas, y se emplean soluciones básicas para separar CO_2 y otros gases ácidos. La reacción en la fase líquida reduce la presión parcial de equilibrio del soluto sobre la solución, lo cual da lugar a un gran aumento de la fuerza impulsora de la transferencia de masa. Si la reacción es esencialmente irreversible para las condiciones de absorción, la presión parcial de equilibrio es cero y N_{Oy} se calcula a partir del cambio de la composición del gas. Para $y^* = 0$.

$$N_{Oy} = \int_a^b \frac{dy}{y} = \ln \left(\frac{y_b}{y_a} \right) \quad (\text{ec. 2.183})$$

Para ilustrar el efecto de una reacción química, se considera la absorción de NH_3 en HCl diluido con una reducción de 300 veces en la concentración del gas (6 a 0.02%). A partir de la ecuación (2.183), $N_{Oy} = \ln 300 = 5.7$, que es comparable con $N_{Oy} = 12$ para la misma variación de concentración utilizando agua en las condiciones del ejemplo.

Una ventaja adicional de la absorción con reacción es el aumento del coeficiente de transferencia de masa. Parte de este incremento viene dado por la mayor área de la superficie

de contacto efectiva, ya que la absorción puede ahora tener lugar en las regiones prácticamente estancadas (retención estática), lo mismo que en la retención dinámica del líquido. Para la absorción de NH_3 en soluciones de H_2SO_4 , K_{ga} fue de 1.5 a 2 veces el valor para la absorción en agua. Puesto que la resistencia de la película gaseosa está controlando, este efecto se deberá esencialmente a un aumento del área efectiva. Los valores de K_{ga} para la absorción del NH_3 en soluciones ácidas fueron los mismos que en el caso de la vaporización de agua, donde también se esperaba que toda el área de la superficie de contacto fuera efectiva. Los factores $K_{ga}(\text{vap}) / K_{ga}(\text{abs})$ y $K_{ga}(\text{reac}) / K_{ga}(\text{abs})$ disminuyen al aumentar el flujo de líquido y tienden hacia la unidad cuando la retención total es mucho mayor que la retención estática.

El factor $K_{ga}(\text{reac}) / K_{ga}(\text{abs})$ también depende de la concentración del reactante y es menor cuando sólo está presente un ligero exceso de reactivo en la solución de la alimentación de la columna. Se han publicado datos sobre la retención de líquido en relación con el área efectiva para anillos Raschig y monturas Berl, pero no se dispone de resultados similares para empaques más modernos.

Cuando la resistencia de la película líquida es dominante, como en la absorción de CO_2 o H_2S en soluciones acuosas, una reacción química rápida en el líquido puede conducir a un aumento muy grande del coeficiente de transferencia de masa. Los coeficientes que se representan en la figura 50 para el sistema Dióxido de Carbono - Agua - Hidróxido de Sodio están comprendidos entre 1 y 4 moles/ $\text{ft}^3 \cdot \text{atm} \cdot \text{h}$, en comparación con los valores típicos para CO_2 en agua de 0.05 a 0.2 moles/ $\text{ft}^3 \cdot \text{atm} \cdot \text{h}$. La reacción rápida consume una gran parte del CO_2 muy cerca de la superficie de contacto gas-líquido, lo que da lugar a que el gradiente para el CO_2 sea mayor, originando un aumento del proceso de transferencia de masa en el líquido. La relación entre el valor aparente de k_L y el correspondiente a la absorción física define un factor de avance ϕ , que varía desde 1 hasta 1 000 o más.

En libros especializados se describen métodos para predecir ϕ a partir de datos cinéticos y de transferencia de masa. Cuando el valor de ϕ es muy grande, la película gaseosa pasa a ser la resistencia que controla.

Aunque el CO_2 que se absorbe en una solución de NaOH a altas velocidades de transferencia de masa, los costos de los reactivos y los problemas para desecharla hacen que este enfoque sea impracticable para el uso a gran escala. En cambio, el CO_2 se extrae usando soluciones acuosas de aminas o de carbonato de potasio, donde la reacción química es reversible

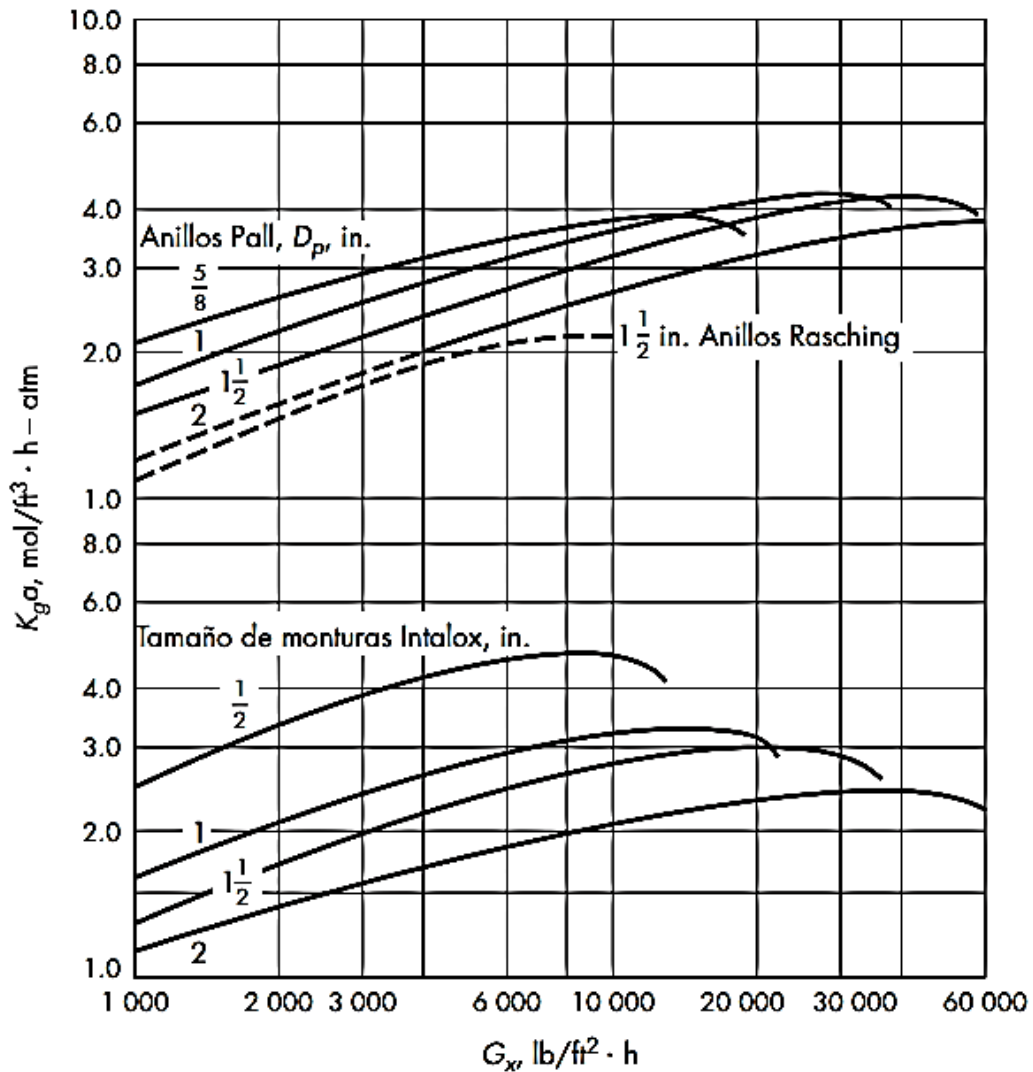


Figura 50: Coeficientes de transferencia de masa para la absorción de CO_2 en NaOH al 4% con anillos metálicos Pall o monturas cerámicas Intalox ($G_y = 500 \text{ lb/ft}^2 \cdot \text{h}$). (Welty et al, 2008).

La absorción en soluciones de aminas se puede llevar a cabo entre 20 y 50 °C y las soluciones agotadas se pueden regenerar con vapor entre 100 y 130 °C. La regeneración completa no es necesaria, puesto que la presión de equilibrio del CO_2 es muy baja hasta cuando casi 20% de

la amina ha reaccionado. La figura 51 muestra las líneas de equilibrio y operación para el caso de un estudio reciente de absorción de CO_2 en soluciones de monoetanolamina.

El módulo Rate Frac de Aspen Plus se combinó con datos termodinámicos y cinéticos para modelar el absorbedor y desorbedor empacados, y para ayudar a determinar las condiciones de operación óptimas. En la figura 51 se muestra sólo 85% de la extracción, pero a la misma relación L/G se puede obtener más de 95% de extracción con una columna más alta.

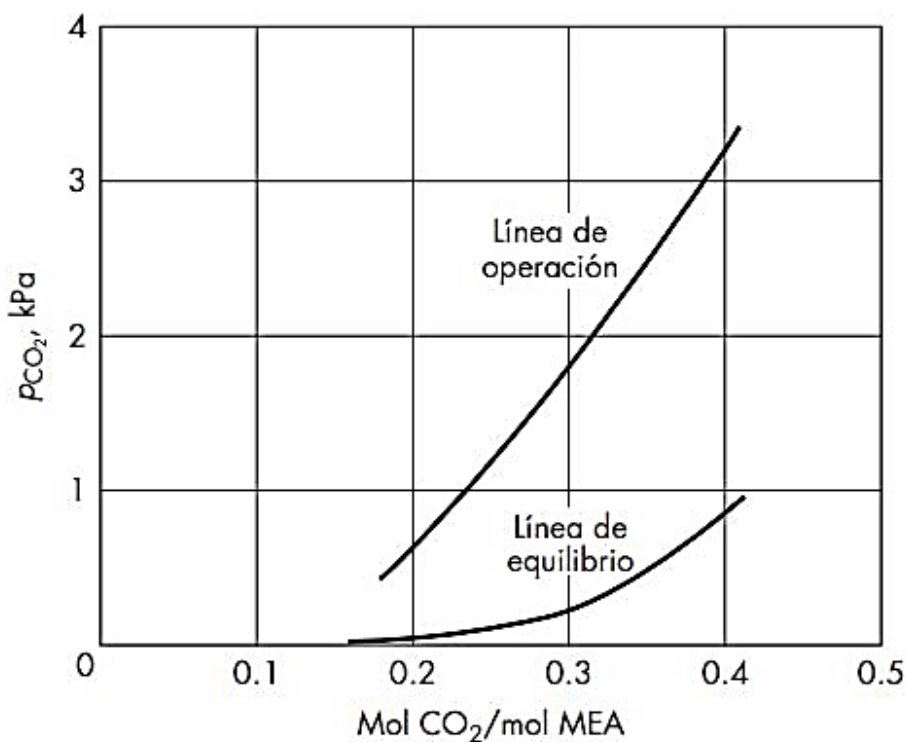


Figura 51: Absorción de CO_2 en una solución de monoetilamina (MEA). Según Freguia y Rochelle. (Welty et al, 2008).

Cuando la absorción va acompañada por una reacción muy lenta, los valores aparentes de K_{ga} pueden ser más bajos que con la absorción simple. Un ejemplo de esto lo constituye la absorción de Cl_2 en agua seguida por la hidrólisis del cloro disuelto. La lenta reacción de hidrólisis controla esencialmente la velocidad global de absorción.

2.7.17 OPERACIÓN CON FLUJO EN CORRIENTES PARALELAS.

Cuando la reacción química es esencialmente irreversible y la presión parcial de equilibrio del soluto es cero, el número de unidades de transferencia para una separación dada es el mismo para la operación en contracorriente o para flujo de corrientes paralelas de líquido y gas. Véase figura 52 muestra líneas de operación típicas para ambos casos. En este diagrama “x” es el soluto total absorbido y que ha reaccionado, y no la cantidad de soluto presente en la forma original. Cuando se opera en corrientes paralelas con alimentación por la parte superior, el gas que sale por el fondo está expuesto al líquido enriquecido, el que ha absorbido una gran cantidad de soluto; pero si $y^* = 0$, la fuerza impulsora es simplemente “y” y N_{Oy} se calcula de acuerdo con la ecuación (2.183), de igual manera que en el caso de flujo en contracorriente.

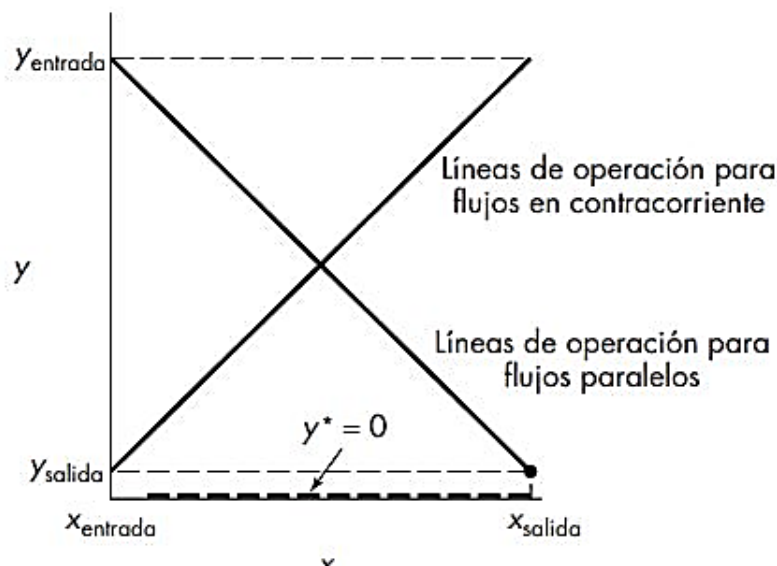


Figura 52: Líneas de operación para flujos paralelos y en contracorriente para la absorción con reacción química irreversible. (Welty et al, 2008).

La ventaja de la operación en paralelo es que no existe la inundación como una limitación, y es factible utilizar un flujo de gas muy superior al normal. Esto permite reducir el diámetro de columna requerido, y el correspondiente aumento de las velocidades másicas del líquido y del gas da lugar a elevados coeficientes de transferencia de masa. Es posible utilizar flujos

de líquido tan elevados como 50 000 a 100 000 lb/ft² · h (70 a 140 kg/m²). Los valores de $K_G a$ o H_{O_2} se pueden estimar, aproximadamente, extrapolando los datos de flujo en contracorriente para el mismo sistema a las velocidades másicas más elevadas.

2.7.18 ABSORCIÓN EN TANQUES.

Los procesos en los cuales la absorción gaseosa va acompañada por una reacción química normalmente se llevan a cabo en tanques donde las burbujas del gas se dispersan en la fase líquida. El líquido se mezcla con un agitador o por medio de las mismas burbujas del gas y también puede existir una apreciable mezcla del propio gas. Esto tiende a disminuir la conversión. Sin embargo, cuando el gas que no ha reaccionado se puede reciclar o casi no tiene costo (como el aire), no se requiere una alta conversión del gas.

Un importante ejemplo se da en el uso del aire para oxidar materia orgánica en aguas negras o lodo residual de alcantarillas. Uno de los métodos de aireación utiliza inyectores o difusores colocados cerca del fondo del tanque. Los cabezales de tubería con múltiples orificios se denominan difusores burdos y producen burbujas de 1 a 5 mm. Los tubos de cerámica porosa o de polímeros generan burbujas más finas, pero la coalescencia puede aumentar el tamaño de las burbujas.

Los tanques grandes pueden contener más de 100 difusores, cada uno dispersando de 5 a 20 ft³/min de aire y desahogando la mayoría del gas hacia la atmósfera. Otros dispositivos para dispersión de gases incluyen turbinas cerca del fondo del tanque con un inyector en la parte inferior e impulsores de flujo axial montados cerca de la superficie, para atrapar el gas del espacio del vapor, o para aspersar el líquido hacia el aire. En los equipos de reacción, la velocidad de transferencia de masa se controla por medio de la resistencia de la película del líquido, debido a la baja solubilidad del oxígeno. En un tanque de 15 ft de profundidad con difusores burdos, sólo se absorbe de 5 a 10% del oxígeno del aire. Con difusores de burbujas finas, es posible utilizar de 10 a 25% de oxígeno.¹² Sin embargo, incluso con burbujas finas, los valores de $K_L a$ son sólo de 5 a 20 h, mucho menores que los de una columna empacada típica véase figura 53.

Debido a que hay muchos tipos de aireadores, no existe una correlación general para $K_L a$ y las unidades generalmente se diseñan o seleccionan con base en los datos de comportamiento

proporcionados por el proveedor. La cantidad de oxígeno o el porcentaje de utilización de éste se da para condiciones estándar; se corrige para diferencias en la profundidad del líquido, el flujo de gas, la temperatura, el nivel de oxígeno disuelto y las propiedades de la solución.

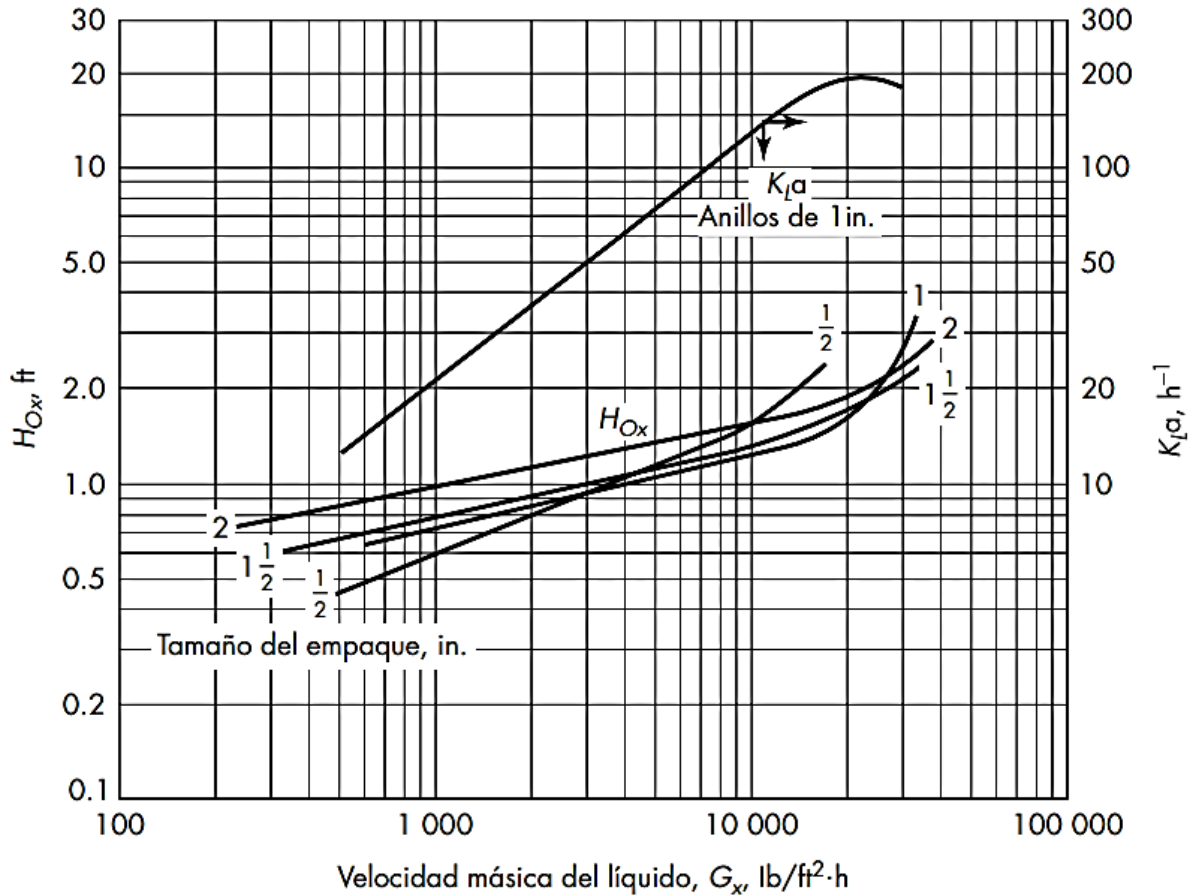


Figura 53: Altura de una unidad de transferencia para desorción de oxígeno a partir de agua a 25 °C con empaque de anillos Rasching. (Nota: en este sistema $H_{Ox} \approx H_X$). (Welty et al, 2008).

El oxígeno de alta pureza está hallando un creciente uso en el tratamiento de aguas negras y otro tipo de oxidaciones en fase líquida. A igual presión total, la solubilidad del oxígeno puro es cinco veces mayor que la del oxígeno del aire y la fracción molar de oxígeno es casi constante en la medida que éste se consume, a diferencia del caso del aire.

Además, las burbujas de oxígeno se elevan más lentamente a medida que se contraen, incrementando el tiempo de permanencia del gas. Con impulsores montados en la superficie, que extraen el gas del espacio de vapor y generan burbujas finas, se puede obtener una

utilización de oxígeno de hasta 90%. Comparado con un sistema que utiliza aire, el flujo de gas efluente se reduce cerca de 100 veces y la liberación de compuestos orgánicos volátiles casi se elimina.

2.8 SECADO DE SÓLIDOS.

El estudio de secado es una operación mediante la cual se puede separar total o parcialmente el líquido que contiene un sólido húmedo. Esta operación implica transporte de masa y de energía simultáneamente.

El secado difiere de la evaporación (fenómeno difusional de un solo componente) en donde la evaporación del líquido se elimina por ebullición, mientras que en el secado el líquido es arrastrado por el aire en forma de vapor, a una temperatura generalmente inferior a la de ebullición. Además, el secado usualmente infiere en la eliminación de relativamente pequeñas cantidades de agua de un sólido o de un material casi sólido; y la evaporación está limitado a la eliminación de cantidades selectivamente grandes de agua en soluciones.

A presión constante existe una relación entre la temperatura y la concentración de agua en la fase vapor, la misma que ocurre en las operaciones de contacto aire - agua. Si se trata de sólidos higroscópicos¹² o en materiales naturales tales como: madera o cuero, el agua puede estar contenido en el sólido de tal manera que no hay agua líquida en forma libre.

Por tanto, las variables que intervienen en un proceso de secado son: temperatura, presión y concentración del agua en el sólido y en el vapor. Normalmente la presión y temperatura son fijos lo cual permite expresar las concentraciones en curvas de equilibrio, así podemos representar las siguientes curvas, véase figura 54.

¹² Sustancia capaz de absorber humedad del medio, por tal propiedad las sustancias higroscópicas se utilizan como desecantes, ya que adsorben el agua de otros compuestos.

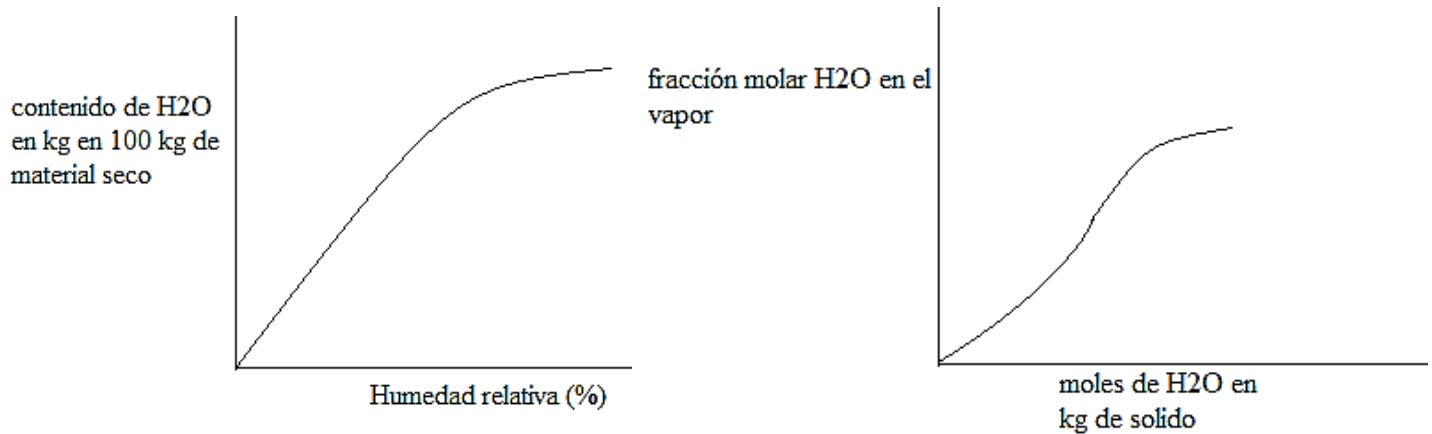


Figura 54: Comportamiento de la concentración de sólido en curvas de secado. (Hernandez, 2015).

La teoría del secado comprende dos aspectos fundamentales, las relaciones estáticas y las relaciones cinéticas, conocidas también como velocidad de operación física. Algunas razones por la que se aplica el secado es para satisfacer las siguientes finalidades.

- a) Facilitar el manejo posterior del producto.
- b) Permitir el empleo satisfactorio del producto.
- c) Reducir el costo del transporte.
- d) Aumentar la capacidad de los equipos.
- e) Preservar los productos durante el almacenamiento y el transporte.
- f) Aumentar el valor o la utilidad de los productos.

El contenido de humedad de un sólido se lo puede expresar referido a base seca o base húmeda, en los cálculos de secado es más conveniente referir la humedad a base seca, debido a que esta permanece constante a lo largo del fenómeno de secado.

Ejemplo: Cuerpo húmedo de 100Kg, los cuales son: 40kg de Sólido Seco y 60 Kg de H₂O.

- a) Base húmeda $\frac{60 \text{ Kg H}_2\text{O}}{100 \text{ Kg}} * 100 = 60\%$
- b) Base seca: $\frac{60 \text{ Kg H}_2\text{O}}{40 \text{ Kg SS}} * 100 = 150\%$

2.8.1 HUMEDAD DE EQUILIBRIO.

Cuando un sólido húmedo se pone en contacto durante un tiempo suficiente con aire a temperatura y humedad determinada (condiciones que permanecen constantes) se conseguirá un estado estable entre el aire y el sólido húmedo que viene a representar las condiciones de equilibrio. El vapor de agua que acompaña al aire ejerce una presión del vapor determinado y se alcanzará las condiciones de equilibrio cuando la presión parcial del agua que acompaña al sólido húmedo es igual a la presión del vapor de agua en el aire.

Se denomina humedad de equilibrio del sólido, a la alcanzada por éste en equilibrio con aire en condiciones dadas, por lo tanto, la humedad de equilibrio en el límite al que puede elevarse el contenido de humedad de una sustancia mediante contacto con aire de humedad y temperatura determinadas.

Si la humedad del sólido es mayor que la de equilibrio, el sólido se secará hasta alcanzar la humedad de equilibrio, mientras que su humedad es menor que la de equilibrio, el sólido captará humedad del aire hasta alcanzar las condiciones de equilibrio. Por lo tanto, el gradiente operara en sentido de la mayor concentración a la menor concentración, hasta llegar al equilibrio.

En un cuerpo higroscópico la tensión del vapor de agua depende de la temperatura, la naturaleza del cuerpo, el estado de su superficie y de la humedad. A temperatura constante la tensión del vapor de agua, aumenta continuamente hasta alcanzar el valor del agua pura a la misma temperatura, en este punto el cuerpo empieza a comportarse como húmedo, cualquiera que sea la humedad del cuerpo, la tensión de vapor se mantendrá constante. Los materiales fibrosos o coloidales de origen vegetal solo se comportan como húmedos cuando contienen una cantidad considerable de agua.

2.8.2 HUMEDAD LIBRE.

Se denomina humedad libre de un sólido con respecto al aire en condiciones determinadas a la diferencia entre la humedad del sólido y la humedad de equilibrio con aire en condiciones dadas, por consiguiente, es la humedad que puede perder el sólido después de un contacto suficiente y prolongado con aire en condiciones determinadas, las mismas que permanecen

constantes. Esta humedad depende de la humedad del sólido como de la humedad selectiva del aire.

2.8.3 HUMEDAD LIGADA.

Llamamos humedad ligada, a la humedad mínima necesaria para que el sólido deje de comportarse como higroscópico. Cuando la humedad es menor la tensión del vapor es inferior a la del líquido puro a la misma temperatura, luego la presencia del sólido influye sobre la volatilidad del agua; por esto hay que admitir que en estas condiciones el agua está ligada al sólido por cualquier tipo de fuerzas, mecánicas o fisicoquímicas. La separación de esta humedad por evaporación se sujetará a leyes diferentes a las de evaporación del agua en un recipiente abierto.

Podemos también definir a la humedad ligada como la humedad mínima de equilibrio con el aire saturado (cuando humedad relativa=100%).

2.8.4 HUMEDAD NO LIGADA.

Cuando la humedad es superior al valor de la humedad ligada, el sólido se comporta como húmedo; la diferencia entre ambas, es decir, la humedad del sólido y la humedad ligada, se conoce como humedad desligada. También podría definirse como la humedad libre del sólido en contacto con aire saturado.

El término libre aquí, nos puede llevar a la conclusión errónea de que el cuerpo perderá humedad, pero no es así, ya que éste se encuentra en equilibrio indiferente con el aire saturado. Además, el aire saturado no es capaz de aceptar más humedad.

A cada humedad del cuerpo corresponde en el equilibrio una humedad relativa del aire tomando estas variables forman coordenadas en el diagrama rectangular se construye la curva de equilibrio como se puede apreciar en la figura 55.

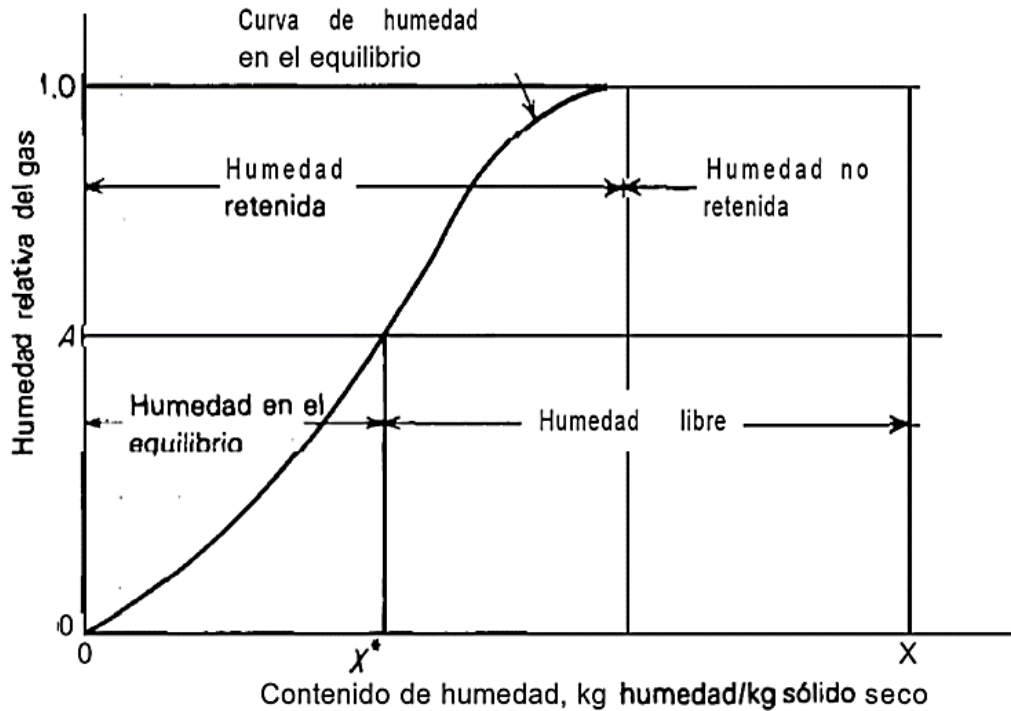


Figura 55: Curva de Equilibrio de humedad en el Diagrama de Fases, para un sólido insoluble. (Welty *et al*, 2008).

Con el diagrama podemos conocer el sentido que variará la humedad del cuerpo en contacto con aire húmedo; si el punto representativo está a la derecha de la curva de equilibrio la humedad “X” tiende a disminuir, ya que es superior a la humedad de X^* de equilibrio con el aire de la misma humedad relativa. Si el punto “P” estuviera a la izquierda de la humedad del cuerpo tendería a aumentar. Además, la humedad de equilibrio disminuye al aumentar la temperatura, luego para estudiar las condiciones de secado hemos de determinar las curvas de equilibrio a variar temperatura, dentro del intervalo de la proyectada operación.

2.8.5 SÓLIDO SOLUBLES.

El comportamiento de los sólidos solubles es diferente. Si la presión del vapor del agua en el aire es inferior a la tensión de vapor de la solución saturada del sólido, la humedad de equilibrio del sólido es muy pequeña, en este caso de la solución saturada precipitaría el sólido conforme se elimine el agua de la solución en contacto con aire.

En caso contrario, si la presión parcial del agua en el aire es mayor a la tensión del vapor de la solución saturada, el sólido absorbe la humedad del aire y se disuelve, formándose en primer lugar una solución saturada; la tensión de vapor de esta es inferior a la del líquido puro, de acuerdo con la ley de Raoult. Si la presión parcial del vapor en el aire permanece constante, el equilibrio solo se alcanzará cuando esta sea igualada a la tensión de vapor para ello es necesario que disminuya la concentración, ósea que la solución deje de estar saturada lo cual solo es posible cuando disuelto el sólido, la solución alcanza una determinada dilución, entonces se obtiene el equilibrio.

2.8.6 CINÉTICA DEL SECADO.

Se define como velocidad de secado a la pérdida de humedad del sólido en la unidad de tiempo, en términos diferenciales tendremos: $-\left(\frac{dx}{d\theta}\right)$ operando en condiciones constantes de secado. El término condiciones constantes se entiende que el aire, la temperatura, presión, humedad y velocidad permanecen constantes a lo largo del tiempo.

Atendiendo al mecanismo de secado, para definir cuantitativamente la velocidad es conveniente referir ésta a la unidad de área de superficie de secado, ósea:

$$W = \frac{S}{A} \left(-\frac{dx}{d\theta} \right) \quad (\text{ec. 2.184})$$

Dónde:

W: Velocidad de secado.

A: Área de superficie expuesta.

S: Peso del sólido seco.

$\frac{dx}{d\theta}$: Velocidad instantánea de secado.

Como A y S permanecen constantes a lo largo del fenómeno del secado, W es proporcional a $\left[\frac{dx}{d\theta} \right]$

2.8.7 CURVA DE RÉGIMEN DE SECADO.

Con los datos obtenidos experimentalmente durante el secado se puede construir una gráfica que relacione el contenido de Humedad vs Tiempo, véase figura 56. Se representa la curva Humedad vs Tiempo, de un sólido sometido a secado, se puede observar que la humedad disminuye continuamente desde el valor inicial, punto A, y finalmente se aproxima como límite a la humedad de equilibrio que corresponde a las condiciones constantes del aire.

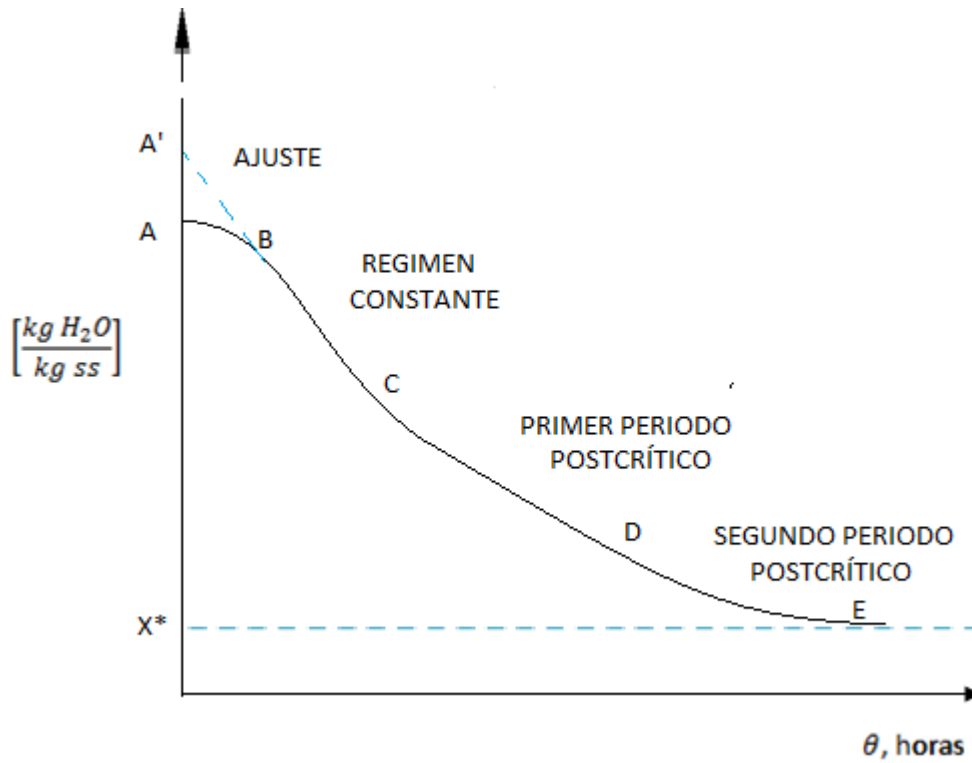


Figura 56: Curva de secado en condiciones constantes. (Navas, 2015).

Esta curva, véase figura 56 refleja el paso por distintos periodos a medida que la humedad del sólido se reduce desde un elevado valor inicial hasta el pequeño valor final, los cuales son los siguientes:

- Período Inicial (A-B).
- Período de velocidad constante (B-C).
- Primer período de velocidad descendente o periodo poscritico (C-D).
- Segundo período de velocidad descendente o periodo poscritico (D-E).

- e) Periodo inicial (A-B): La evaporación ocurre como desde una superficie libre y, usualmente, la temperatura incrementa desde su valor inicial (T_o) hasta la temperatura de bulbo húmedo del aire (T_{wb}). En algunos casos, cuando la temperatura del producto es mayor que la correspondiente temperatura de bulbo húmedo del aire, el producto disminuye su temperatura. Este período inicial dura pocos minutos. (X_o : contenido de humedad inicial).
- f) Periodo de velocidad constante o periodo poscritico (B-C): Durante este período el secado aún se lleva a cabo por evaporación de la humedad desde una superficie saturada (evaporación desde una superficie libre) y el material permanece a T_{wb} . La mayoría de los productos alimenticios no exhiben un período de velocidad de secado constante.
- g) Primer período de velocidad descendente o periodo poscritico (C-D): El contenido de humedad al final del período de velocidad constante es el contenido de humedad crítico (X_{cr}). En este punto la superficie del sólido ya no se encuentra saturada de agua, y la velocidad de secado disminuye con el decrecimiento en el contenido de humedad y el incremento en la temperatura. En el punto final de este período, el film de humedad superficial se ha evaporado completamente y, con el posterior decrecimiento en el contenido de humedad, la velocidad de secado es controlada por la velocidad de movimiento de la humedad dentro del sólido.
- h) Segundo período de velocidad descendente (D-E): Este período representa las condiciones correspondientes a una velocidad de secado totalmente independiente de las condiciones externas. La transferencia de humedad puede ocurrir por una combinación de difusión de líquido, movimiento capilar, y difusión de vapor. La temperatura del producto se acerca a la temperatura de bulbo seco (T_g) y el contenido de humedad se aproxima asintóticamente al valor de equilibrio (X_e).

Se puede obtener abundante información si se convierte los datos a regímenes de secado, expresando los datos obtenidos en una gráfica como se puede ver en la figura 55 de la siguiente manera:

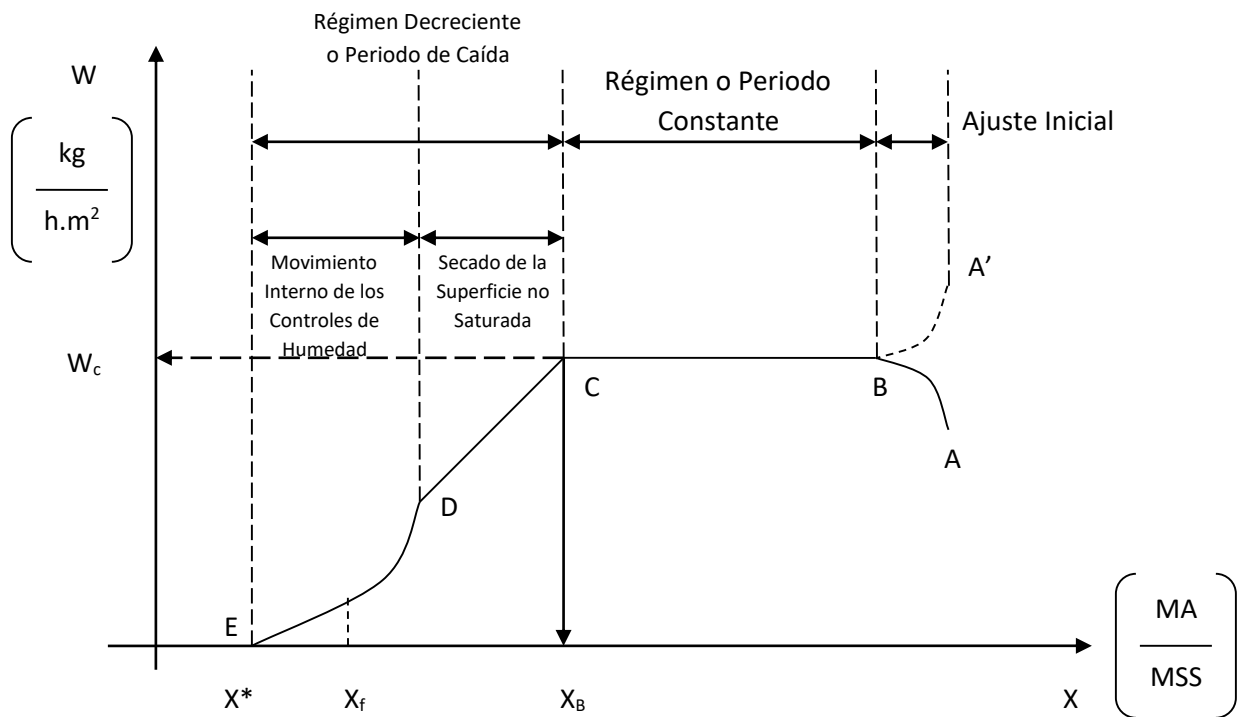


Figura 57: Curva de Régimen de Secado. (Navas, 2015).

En la figura 56, representamos la curva Humedad vs Tiempo, de un sólido sometido a secado, se puede observar que la humedad disminuye continuamente desde el valor inicial, punto A, y finalmente se aproxima como límite a la humedad de equilibrio que corresponde a las condiciones constantes del aire.

En la figura 57, o curva de velocidad de secado, aparecen varios tramos diferentes; en el tramo AB, que puede no existir o presentar varias formas, corresponde al llamado periodo de inducción, en el que el mecanismo de secado no ha llegado a estabilizarse; sigue después un periodo, tramo BC, que se caracteriza por la constancia de la velocidad de secado; al alcanzarse la llamada humedad crítica, X_c punto C, la velocidad de secado empieza a disminuir alcanzando prácticamente el valor 0 (cero) cuando la humedad libre se anula ó sea cuando la humedad del material es la de equilibrio.

Se distinguirán dos periodos bien definidos, y que corresponden al: periodo de velocidad constante y periodo de caída o velocidad decreciente.

El periodo de velocidad constante va desde la humedad inicial X_0 , hasta la humedad crítica X_c . El valor de la humedad crítica depende de las condiciones del aire de secado y del espesor del material a secar, este valor debe ser determinado experimentalmente.

El periodo de velocidad decreciente, está comprendido entre la humedad crítica X_c , hasta la humedad final del sólido X_f , rango valor límite es X^* . En nuestros casos pueden diferenciarse dos periodos dos periodos de velocidad decreciente: durante el primer periodo la velocidad varía linealmente con la humedad, tramo CD, y en el segundo se pierde esta relación, tramo DE.

Como es evidente, la presencia de los periodos anteriormente mencionados, depende del intervalo de humedades abarcado en el ensayo.

Se puede obtener curvas como las siguientes:

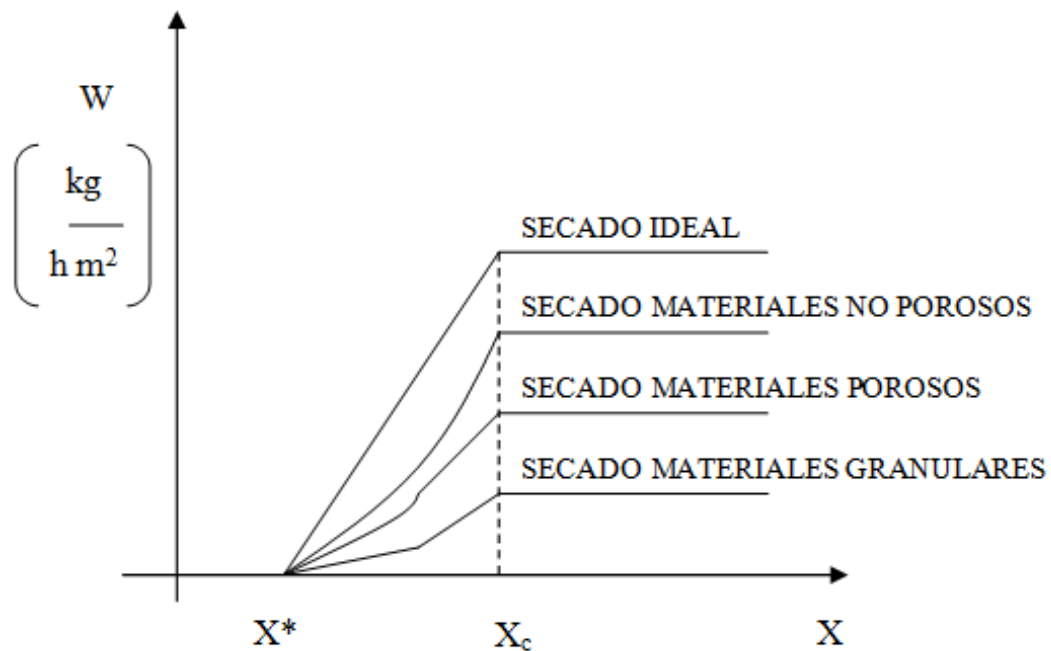


Figura 58: Diferentes tipos de curvas de secado. (Navas, 2015).

2.8.8 MECANISMOS DEL SECADO.

Durante el secado es necesario separar tanto la humedad que existe sobre la superficie del sólido como la del interior. Cuando la humedad es suficientemente grande, la evaporación transcurre sobre la superficie totalmente mojada, y el líquido se renueva continuamente por difusión rápida desde el interior; tenemos así un periodo en que la velocidad de secado es constante. Si el sólido no recibe calor por otros medios, la temperatura de la superficie permanecerá constante en un valor sensiblemente igual al de la temperatura húmeda del aire. Transcurre ante el secado hasta alcanzar la humedad crítica. Este razonamiento nos lleva a la conclusión que la velocidad de secado constante es la misma para cualquier sólido sometido a las mismas condiciones constantes del aire.

Cuando la humedad media del sólido es inferior a la humedad crítica X_c , la difusión desde el interior no puede suministrar todo el líquido que se evaporaría en la superficie; en consecuencia, la velocidad de evaporación disminuye, y aparecen sobre la superficie zonas secas, cada vez en mayor proporción. Transcurre entonces el primer período de velocidad decreciente: al no estar saturada la superficie la temperatura asciende, y tiende a aproximarse a la temperatura seca del aire. El primer período decreciente, que puede no existir según las condiciones de secado, concluye cuando la superficie del sólido queda libre de líquido; a pesar de ello, la humedad media puede tener todavía un valor apreciable.

Durante el segundo período pos crítico la velocidad de secado sigue descendiendo. En muchos casos la evaporación se efectúa en un plano interior, que va alejándose de la superficie del sólido a medida que progresa el secado.

2.8.9 CÁLCULO DEL TIEMPO DE SECADO.

El tiempo de secado debe ser determinado experimentalmente, ya que de hacerlo por procedimientos matemáticos se obtienen valores que, dependiendo del tipo de material, pueden discrepar notablemente de los valores reales, esta es la razón por la cual se recomienda que el tiempo sea determinado experimentalmente.

El tiempo de secado en condiciones constantes se puede calcular mediante la siguiente ecuación:

$$\theta = \frac{S}{A} \int_{X_f}^{X_i} \frac{dx}{w} \quad (\text{ec. 2.185})$$

Dónde:

X_i = humedad inicial

X_f = Humedad final

Necesitamos conocer $f(X)$, esto significa conocer infinito número de ecuaciones para cada material, por esto no es operacional. Pero si recordamos los periodos de secado podemos satisfacer esta ecuación en forma parcial.

2.8.10 PERÍODO DE SECADO CONSTANTE.

En este periodo sabemos que W es constante, por tanto, la integración de la ecuación genérica es:

$$\theta_c = \frac{S}{A} \left(\frac{X_i - X_c}{w_c} \right) \quad (\text{ec. 2.186})$$

Dónde:

θ_c = tiempo de secado crítico

W_c = velocidad de secado crítico

θ_c = es el tiempo de secado para que la humedad del sólido descienda desde su valor inicial hasta el crítico.

Naturalmente que si la humedad final X_f es mayor que la humedad crítica ha de substituirse X_c por X_f en la ecuación.

2.8.11 MÉTODOS ANALÍTICOS PARA EL CÁLCULO DE SECADO.

Existen dos tipos de métodos analíticos para el cálculo de secado los cuales se describen a continuación:

- a) Cuando la velocidad de secado van linealmente con la humedad, la interpretación nos conduce a la ecuación 2.187.

$$\theta_p = \frac{S}{A} \left(\frac{x_c - x_f}{w_c - w_f} \right) \ln \frac{w_c}{w_f} \quad (\text{ec. 2.187})$$

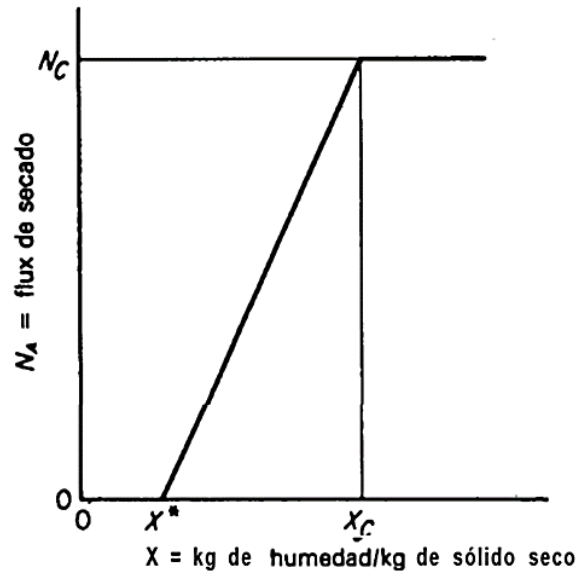


Figura 59: Representación de zona constante en curva de secado. (Welty et al, 2008).

- b) Si no se conoce la forma como varía la velocidad de secado en este periodo, se puede utilizar una expresión aproximada, la cual propone que la variación es lineal desde la humedad crítica hasta la humedad de equilibrio, con esta suposición se planteo la siguiente ecuación:

$$\theta_p = \frac{S}{A} \left(\frac{x_c - x^*}{w_c} \right) \ln \left(\frac{x_c - x^*}{x_f - x^*} \right) \quad (\text{ec. 2.188})$$

Con las ecuaciones se propone que la humedad inicial es mayor que la critica, en caso contrario ha de sustituir \$x_c\$ por \$x_i\$.

El tiempo total de secado se calcula:

$$\theta_T = \theta_c + \theta_p \quad (\text{ec. 2.189})$$

2.9 DESTILACIÓN.

La destilación es un proceso de separación que consiste en eliminar uno o más de los componentes de una mezcla. En donde para llevar a cabo la operación se aprovecha la diferencia de volatilidad de los constituyentes de la mezcla, separando o fraccionando estos en función de su temperatura de ebullición. Se usa por ejemplo concentrar mezclas alcohólicas y separar aceites esenciales, así como componentes de mezclas líquidas que se deseen purificar.

En la industria actual hay cuatro tipos de destilación: destilación por arrastre de vapor, destilación simple, destilación instantánea o flash y la destilación fraccionada o rectificación.

2.9.1 DESTILACIÓN POR ARRASTRE DE VAPOR.

En la destilación por arrastre de vapor, se emplea vapor vivo para provocar el arrastre de la sustancia volátil que se desea concentrar. Esta sustancia debe ser insoluble en el agua. Por este medio se abate la temperatura de ebullición y así, aquellos compuestos que pudieran descomponerse si se los llevara a su temperatura de ebullición, se logran separar con éxito. Se usa principalmente para obtener esencias aromáticas. En la figura 60, se muestra un diagrama de un equipo de destilación por arrastre con vapor discontinuo.

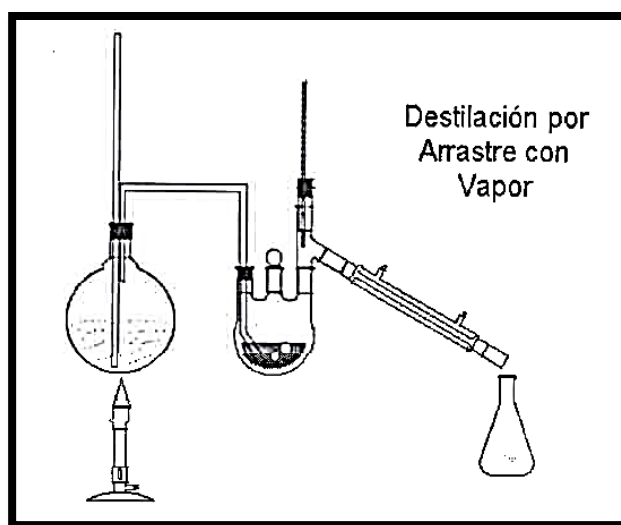


Figura 60: Esquema de un equipo de destilación por arrastre con vapor. (Contreras, 2014).

2.9.2 DESTILACIÓN SIMPLE.

En la destilación simple, la mezcla se hace hervir y el vapor generado se separa del líquido, condensándolo tan rápidamente como se genera. Los aparatos usados para este fin reciben el nombre de alambiques. En la figura 61, se muestra un diagrama esquemático de un aparato de destilación simple discontinuo.

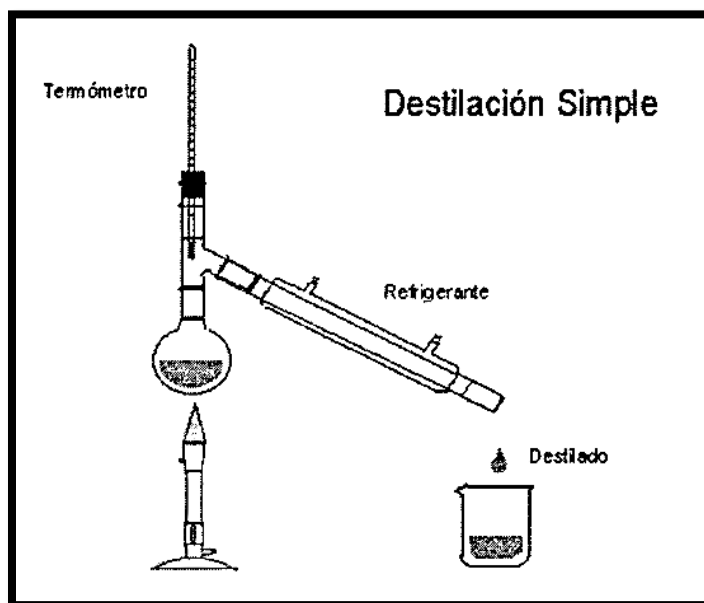


Figura 61: Esquema de un equipo de destilación simple. (Contreras, 2014).

2.9.3 DESTILACIÓN INSTANTÁNEA.

La destilación instantánea (flash), implica la evaporación de una fracción del líquido generalmente por calentamiento a alta presión, manteniendo al vapor y al líquido el tiempo necesario para que el vapor alcance el equilibrio con el líquido, separando ambos finalmente.

2.9.4 DESTILACIÓN FRACCIONADA.

La destilación fraccionada o rectificación es el método empleado actualmente para separar los componentes de una mezcla líquida. Incluye el retorno de una parte del vapor condensado al equipo, de tal manera que el líquido que se regresa entra en contacto íntimo a contracorriente con los vapores que se dirigen al condensador. También es llamada rectificación. Este tipo de destilación es continua y permite manipular grandes cantidades de

materiales y el reflujo hace posible alcanzar purezas elevadas en los productos destilados. En la figura 62, se muestra un diagrama de un equipo de destilación fraccionada.

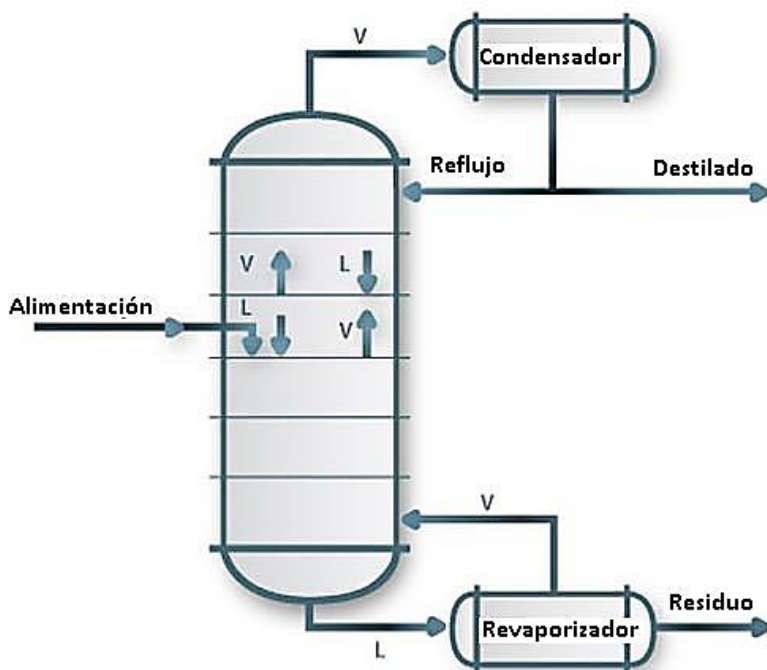


Figura 62: Esquema de un equipo de destilación fraccionada. (Palacios, 2016).

Aunque mediante destilaciones simples continuas o súbitas se pueden lograr separaciones útiles, generalmente debido a consideraciones económicas y especificaciones estrictas, se recurre a la destilación con enriquecimiento o rectificación.

La rectificación es una operación por lo que, a partir de una mezcla alimentada, se obtienen dos corrientes de productos (destilado y residuo) con las calidades deseadas. Los equipos más empleados son torres cilíndricas, que pueden ser de relleno o de pisos también conocido como platos.

Las torres de relleno, son columnas cilíndricas verticales, las cuales están rellenas con pequeñas piezas (anillos), que sirven para aumentar el área de contacto entre la fase gaseosa y la líquida. Las torres de pisos o platos son columnas cilíndricas que contienen en su interior una serie de pisos o platos perforados o con campanas de burbujeo que permiten el contacto íntimo de las fases líquida y gaseosa, véase figura 63.

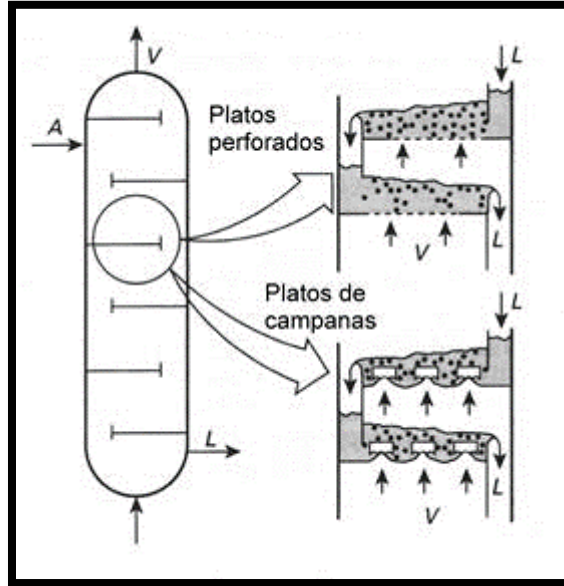


Figura 63: Esquema de columna y platos de destilación. (López, 2011).

Una columna de platos sencilla está compuesta por, véase figura 64:

- I. Caldera: Está situada en la base de la columna. Es la que suministra calor necesario para generar una corriente de vapor y esta provista de un dispositivo de entrada de la corriente líquida procedente del plato inferior. También posee una salida para la eliminación de la corriente de residuo.
- II. Condensador: Es el dispositivo de eliminación de calor situado en la parte superior de la columna. En él entra el vapor procedente del piso superior y salen las corrientes de líquido y vapor, o solamente líquida según éste sea parcial o total, respectivamente.
- III. Acumulador: Es un depósito situado junto al condensador, que recibe las corrientes de vapor y líquido procedentes de éste y que permite la salida del reflujo y el destilado.
- IV. Pisos o platos: Es el lugar donde se produce el contacto entre las dos fases. Uno de los pisos intermedios es el de alimentación, que divide a la columna en dos sectores: enriquecimiento y agotamiento.

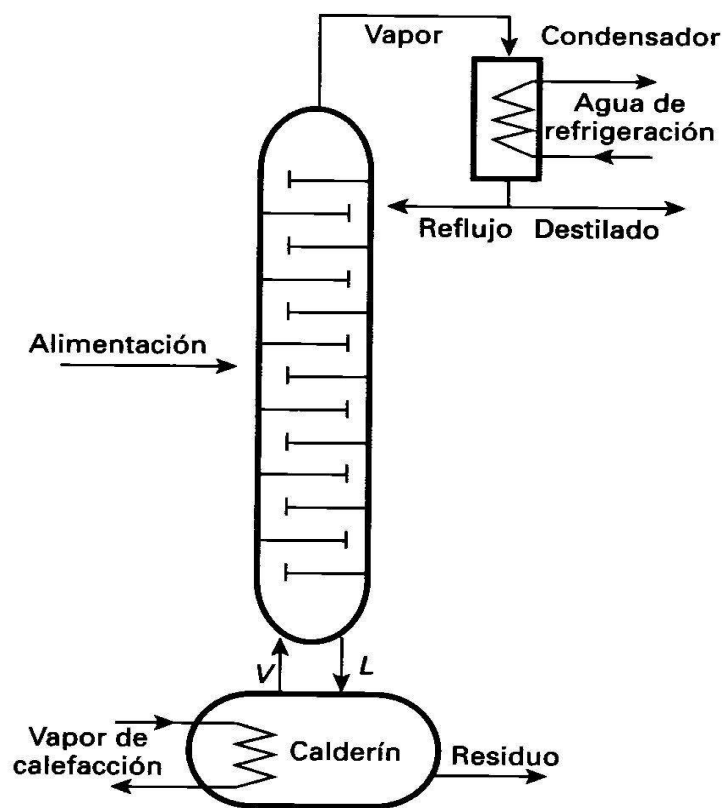


Figura 64: Esquema de columna de platos sencilla.(Palacios, 2016).

2.9.5 DISEÑO DE COLUMNAS DE PISOS O PLATOS.

Par dimensionar una columna de rectificación es necesario conocer:

- Diámetro de la columna, relacionado con los caudales de líquido y vapor que circulan por su interior.
- Altura de la columna, función del número de pisos y de la separación entre los mismos.
- Caudales y composiciones de todas las corrientes.
- Detalles constructivos, tales como el número y diámetro de agujeros de hombre, material de platos y válvulas, etc.

Dentro de esta temática nos centraremos en el cálculo del número de platos necesarios para una separación determinada, que es el cálculo ingenieril relacionado.

2.9.6 CÁLCULO DE LAS LÍNEAS DE OPERACIÓN PARA UN DIAGRAMA DE EQUILIBRIO.

Si llamamos “A” (Alimentación), “D” (Destilado) y “R” (Residuo) a los caudales de alimentación, destilados y residuo respectivamente (kmol/h) y X_A , X_D , y X_R a las fracciones molares del componente volátil de la mezcla en las mismas corrientes, un balance de materia global a la columna sería:

$$A = D + R \quad (\text{ec. 2.190})$$

Y un balance de componente volátil:

$$A X_A = D X_D + R X_R \quad (\text{ec. 2.191})$$

De donde fácilmente pueden deducirse los caudales de destilado y residuo producidos, suponiendo que conocemos el caudal de alimentación.

$$D = A \frac{X_A - X_R}{X_D - X_R} \quad (\text{ec. 2.192})$$

$$R = A \frac{X_D - X_A}{X_D - X_R} \quad (\text{ec. 2.193})$$

En la figura 65, se muestra la nomenclatura utilizada en los pisos o platos del sector de enriquecimiento. La del sector de agotamiento será la misma, pero utilizando el subíndice m.

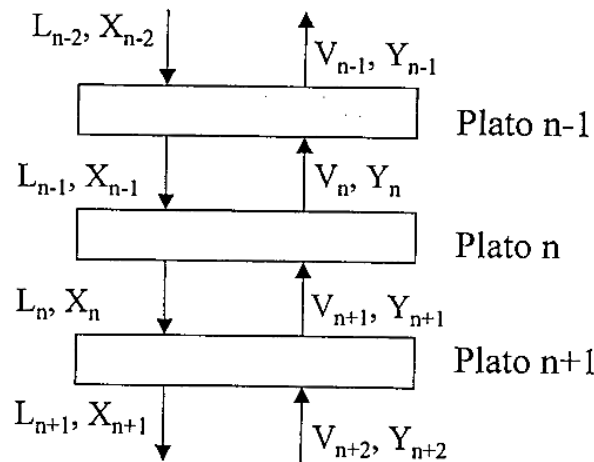


Figura 65: Nomenclatura utilizada en los pisos o platos del sector de enriquecimiento. (Lopez, 2011).

La figura 66, corresponde a un diagrama de equilibrio T-X-Y donde se observa cómo las corrientes que entran a un plato “n” no están en equilibrio, pero las que lo abandonan sí. De esta forma, tras sucesivos platos las corrientes de líquido y vapor se van enriqueciendo en el componente más pesado y más volátil respectivamente.

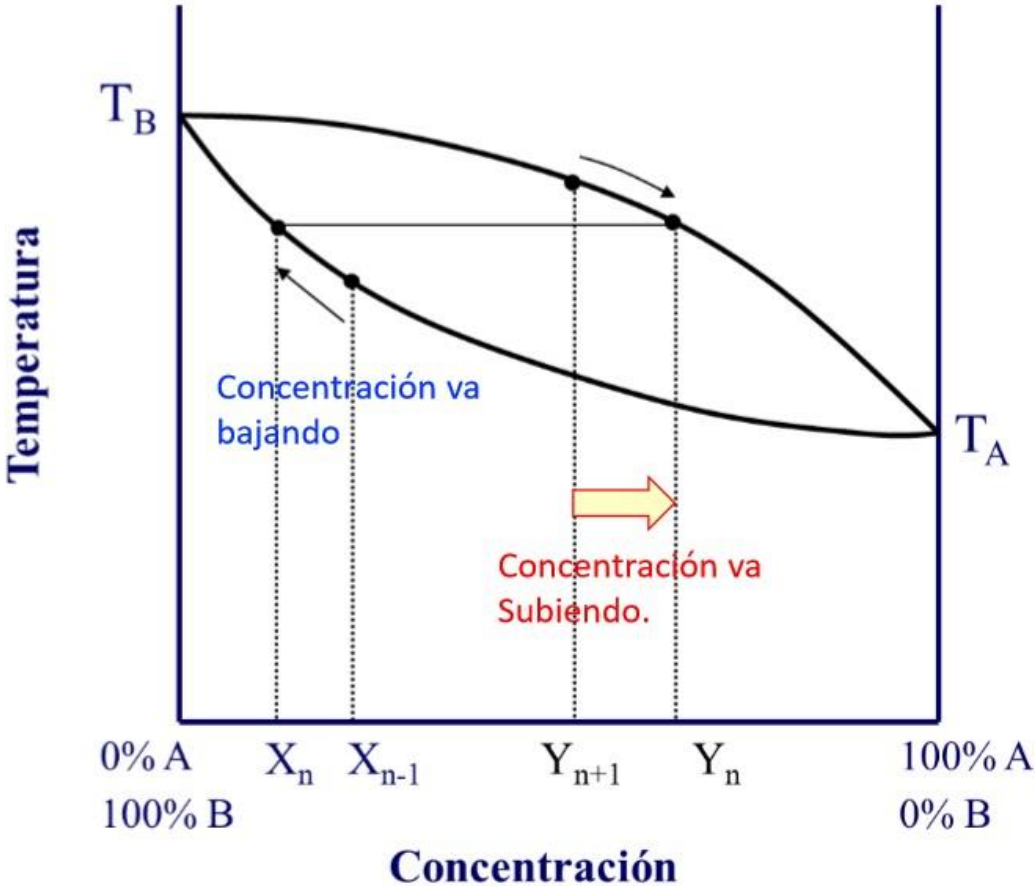


Figura 66: Representación de las corrientes que entran y abandonan el plato n en el diagrama de equilibrio T-X-Y. (Erazo, 2017).

Para realizar los siguientes cálculos, utilizaremos las superficies de control y nomenclatura empleada en la figura 67.

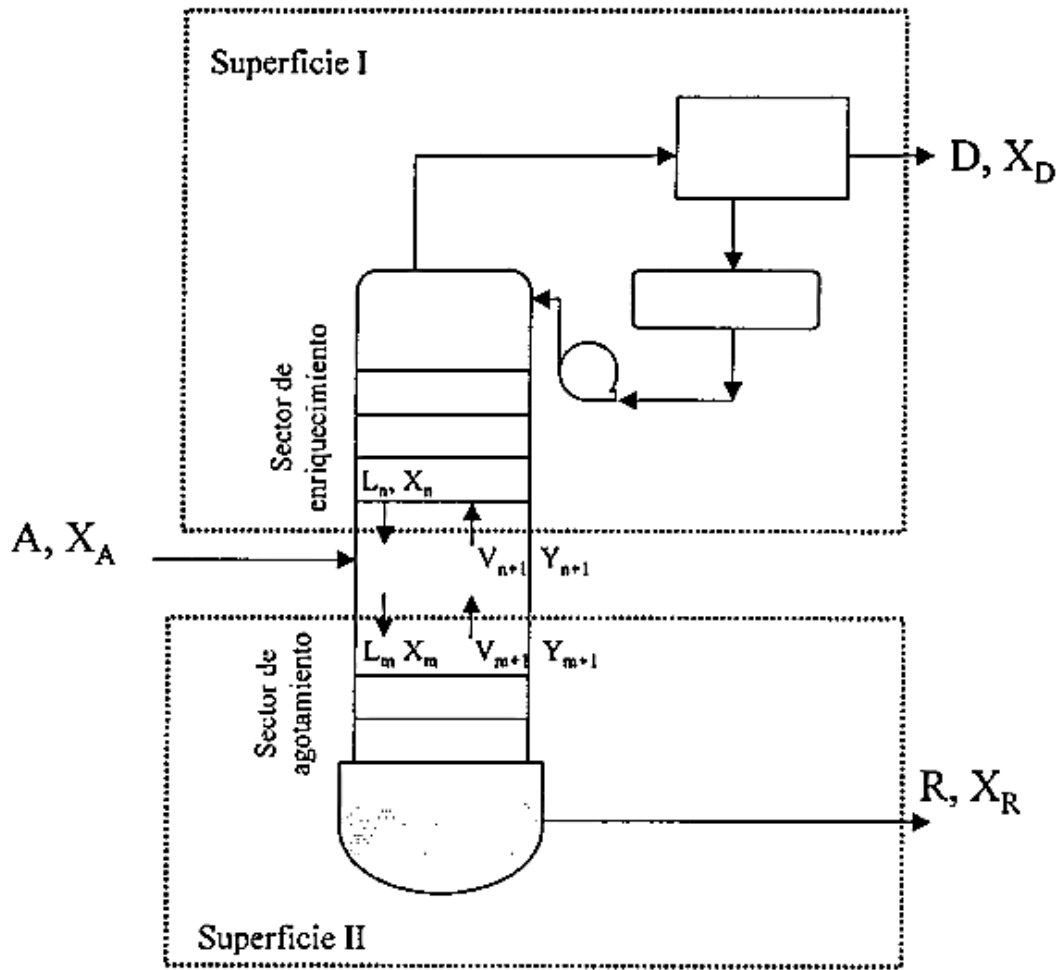


Figura 67: Esquema básico de una columna para realizar los balances de materia. (Welty et al, 2008).

Si realizamos un balance de materia total y de componente volátil a la superficie de control I (sector de enriquecimiento) de la figura 67, obtenemos:

$$\text{Global: } V_{n+1} = L_n + D \quad (\text{ec. 2.194})$$

$$\text{Componente volátil: } V_{n+1} Y_{n+1} = L_n X_n + D X_D \quad (\text{ec. 2.195})$$

Despejando:

$$Y_{n+1} = \frac{L_n X_n}{V_{n+1}} + \frac{D X_D}{V_{n+1}} = \frac{L_n X_n}{L_n + D} + \frac{D X_D}{L_n + D} \quad (\text{ec. 2.196})$$

Ecuación 2.196 representativa de la línea de operación del sector de enriquecimiento (L.O.S.E.).

Realizando un análisis similar para el sector II tenemos:

$$\text{Global: } V_{m+1} = L_m - R \quad (\text{ec. 2.197})$$

$$\text{Componente volátil: } V_{m+1} Y_{m+1} = L_m X_m - R X_R \quad (\text{ec. 2.198})$$

Despejado:

$$Y_{m+1} = \frac{L_m X_m}{V_{m+1}} - \frac{R X_R}{V_{m+1}} = \frac{L_m X_m}{L_m - R} - \frac{R X_R}{L_m - R} \quad (\text{ec. 2.199})$$

Ecuación 2.199 representativa de la línea de operación de sector de agotamiento (L.O.S.A.).

Si suponemos que los caudales molares de líquido y vapor en cada sector son constantes (Hipótesis de Mc Cabe), lo cual es razonable para mezclas con comportamiento ideal cuyos componentes tengan un calor latente de vaporización muy semejante:

$$\text{Sector enriquecimiento: } L_n = L_{n+1} = \dots = \text{cte} = L \quad V_{n+1} = V_n = \dots = \text{cte} = V \quad (\text{ec. 2.200})$$

$$\text{Sector agotamiento: } L_m = L_{m+1} = \dots = \text{cte} = \bar{L} \quad V_{m+1} = V_m = \dots = \text{cte} = \bar{V} \quad (\text{ec. 2.201})$$

Si definimos la razón de reflujo externa como el caudal de líquido que retorna a la columna desde el condensador con respecto al caudal de destilado obtenido, es decir:

$$R_D = \frac{L}{D} \quad (\text{ec. 2.202})$$

Y teniendo en cuenta la hipótesis de Mc Cabe, podemos reescribir la ecuación de la línea de operación del sector de enriquecimiento (L.O.S.E.) como:

$$Y_{n+1} = \frac{L}{L+D} X + \frac{D X_D}{L+D} = \frac{R_D}{R_D+1} X + \frac{D X_D}{R_D+1} \quad (\text{ec. 2.203})$$

Enfocándonos ahora en el plato de alimentación. La adición de un alimento a la columna provoca un cambio en los caudales de líquido y vapor de los sectores, dependiendo del tipo de alimentación. Así, si definimos “f” como la fracción de alimento que es vapor, tenemos:

- Si $f=0$, el alimento será líquido a su temperatura de ebullición.
- Si $f=1$, el alimento será vapor a su temperatura de condensación.
- Si $0 < f < 1$, el alimento será una mezcla de líquido vapor.

Así dependiendo del valor de “f” tendremos diferentes valores para los caudales de vapor y líquido como se indica en la, figura 68.

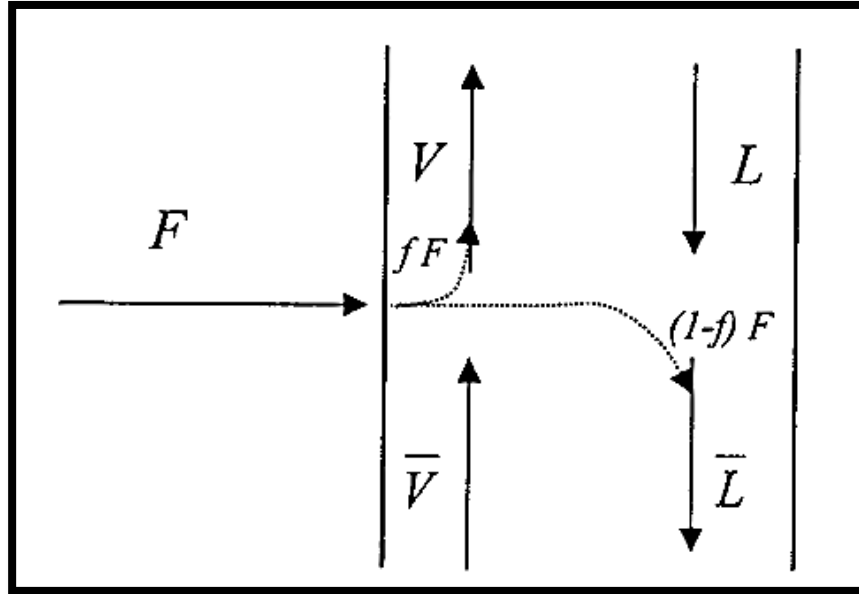


Figura 68: Esquema del plato de alimentación. (Welty et al, 2008).

Realizando un balance de materia a la sección de alimentación descrita en la figura 68, tendremos:

$$\bar{L} = L + (1 - f)F \quad (\text{ec. 2.204})$$

$$V = \bar{V} + f F \quad (\text{ec. 2.205})$$

Si suponemos que la alimentación sufre una destilación súbita al entrar en la columna, desdoblándose en una corriente de vapor (v) y otra de líquido (l), un sencillo balance de componente volátil nos llevaría a:

$$F X_F = v y + l x \quad (\text{ec. 2.206})$$

Dividiendo por F y teniendo en cuenta la definición de “f”:

$$\frac{F}{F}X_F = \frac{1}{F}x + \frac{1}{F}y = (1 - f)x + fy \quad (\text{ec. 2.207})$$

Despejando:

$$y = \frac{X_F}{f} - \frac{1-f}{f}x \quad (\text{ec. 2.208})$$

Ecuación 2.208 denominada línea de alimentación (L.A.).

2.9.7 PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO DE PISOS (MÉTODO DE MC CABE-THIELE).

Si analizamos las tres líneas de operación obtenidas, sector de enriquecimiento, sector de agotamiento y de alimentación, es fácilmente deducible que para $Y=X$ (diagonal), se cumple:

$$L. O. S. E. \quad Y = X = X_D \quad (\text{ec. 2.209})$$

$$L. O. S. A. \quad Y = X = X_R \quad (\text{ec. 2.210})$$

$$L. A. \quad Y = X = X_A \quad (\text{ec. 2.211})$$

Con estas tres ecuaciones y las relaciones de equilibrio, se puede calcular el número de pisos o platos teóricos de una columna, operando piso a piso. Conocidas la composición del vapor que entra en el piso 1 procedente de la caldera y su presión de funcionamiento, se puede calcular la composición del líquido que lo abandona mediante la recta operativa de agotamiento. Con los datos de equilibrio se puede calcular la composición de la corriente de vapor que abandona esta etapa y entra en la segunda. Operando así piso a piso se llegará al de alimentación. Una vez superado este se continúa el cálculo ascendente utilizando la línea operativa del sector de agotamiento.

Este método se puede realizar de forma sencilla mediante un procedimiento gráfico que resumimos a continuación, véase figura 69:

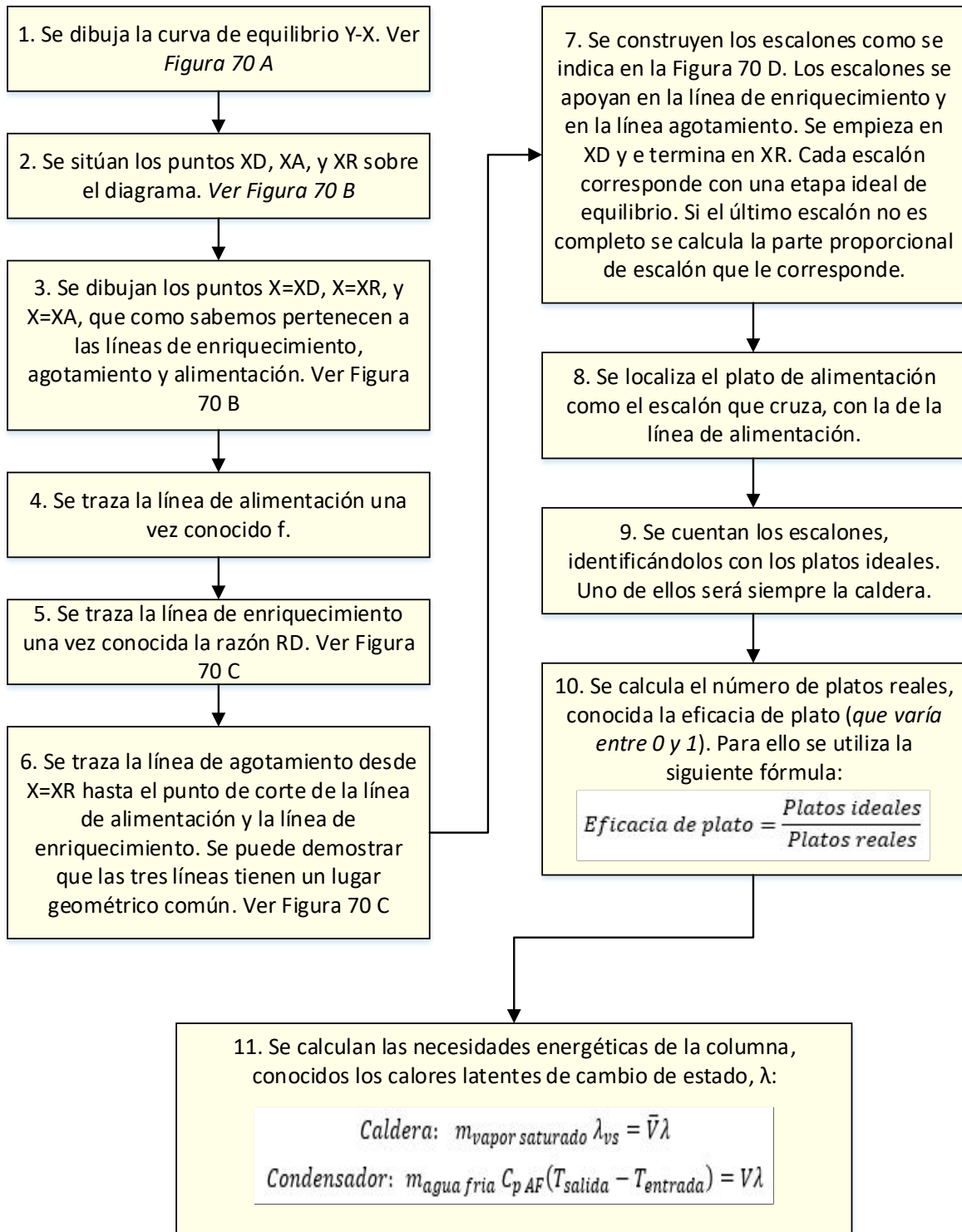


Figura 69: Pasos para la construcción de diagrama de McCabe-Thiele.

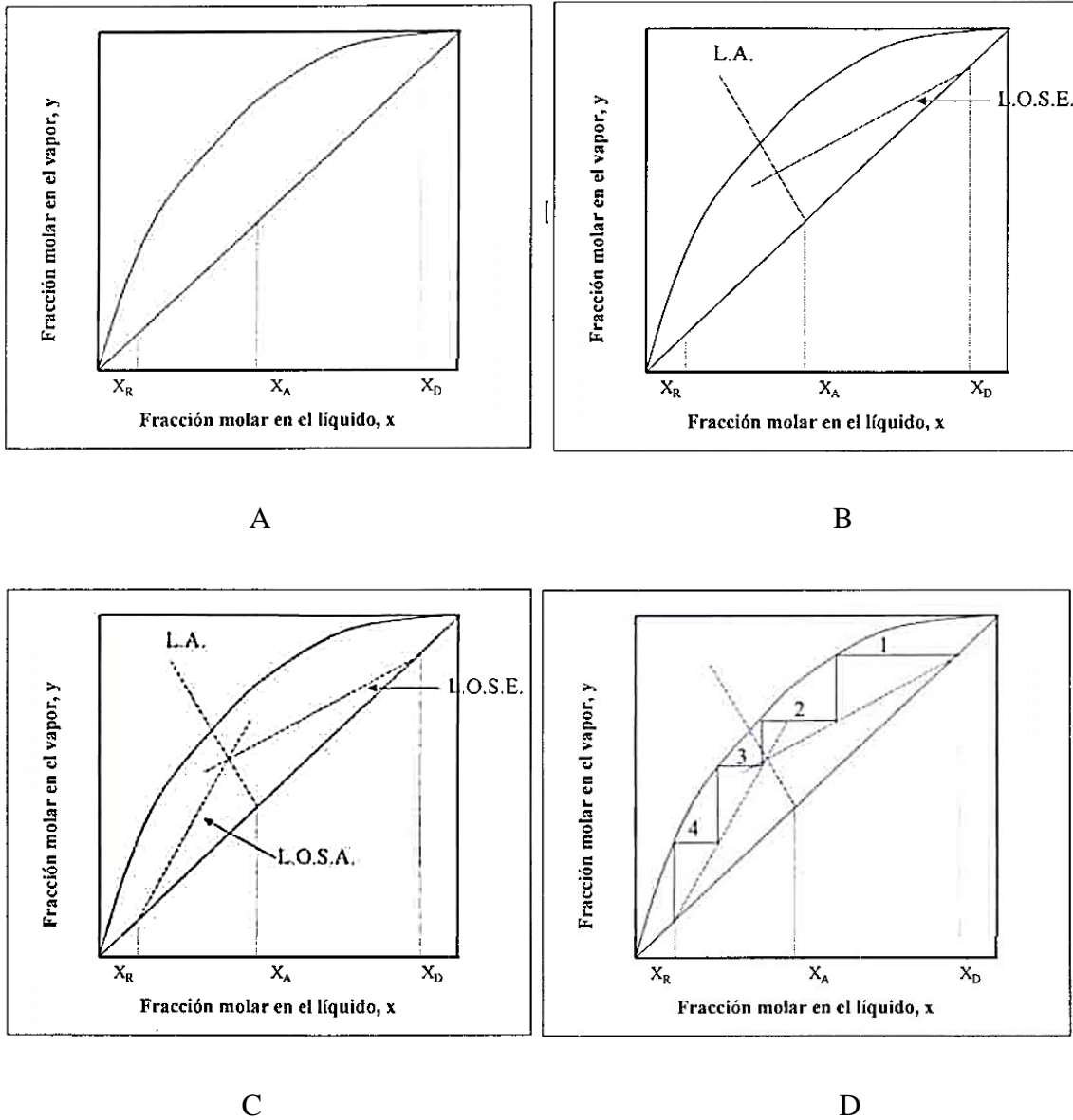


Figura 70: Cálculo de número de pisos teóricos según el método gráfico de McCabe-Thiele. (Treybal, 1986).

2.9.8 CONDICIONES LÍMITES DE OPERACIÓN.

Es fácil deducir que el número de etapas de equilibrio depende de la pendiente de la línea de enriquecimiento y por tanto de la razón de reflujo, R_D . Así al aumentar dicha razón, las rectas de operación se aproximan a la diagonal, lo que motiva que el número de pisos necesarios para una separación disminuya, véase figura 71 a. Por ejemplo, al disminuir esta razón de reflujo, las líneas de operación se alejan de la diagonal aumentando con ello el número de pisos necesarios, véase figura 71 b. De esa forma podemos definir dos límites de operación:

- **Reflujo total:** Todo el condensado se devuelve a la columna. Las líneas de operación coinciden con la diagonal, lo que se traduce en un número mínimo de pisos, véase figura 71 c. Esta situación no es real pues no recogería ningún destilado.
- **Reflujo mínimo:** Las líneas de operación cortan con la curva de equilibrio y la línea de alimentación, lo que conduce a un número de pisos infinito, véase figura 71 d.

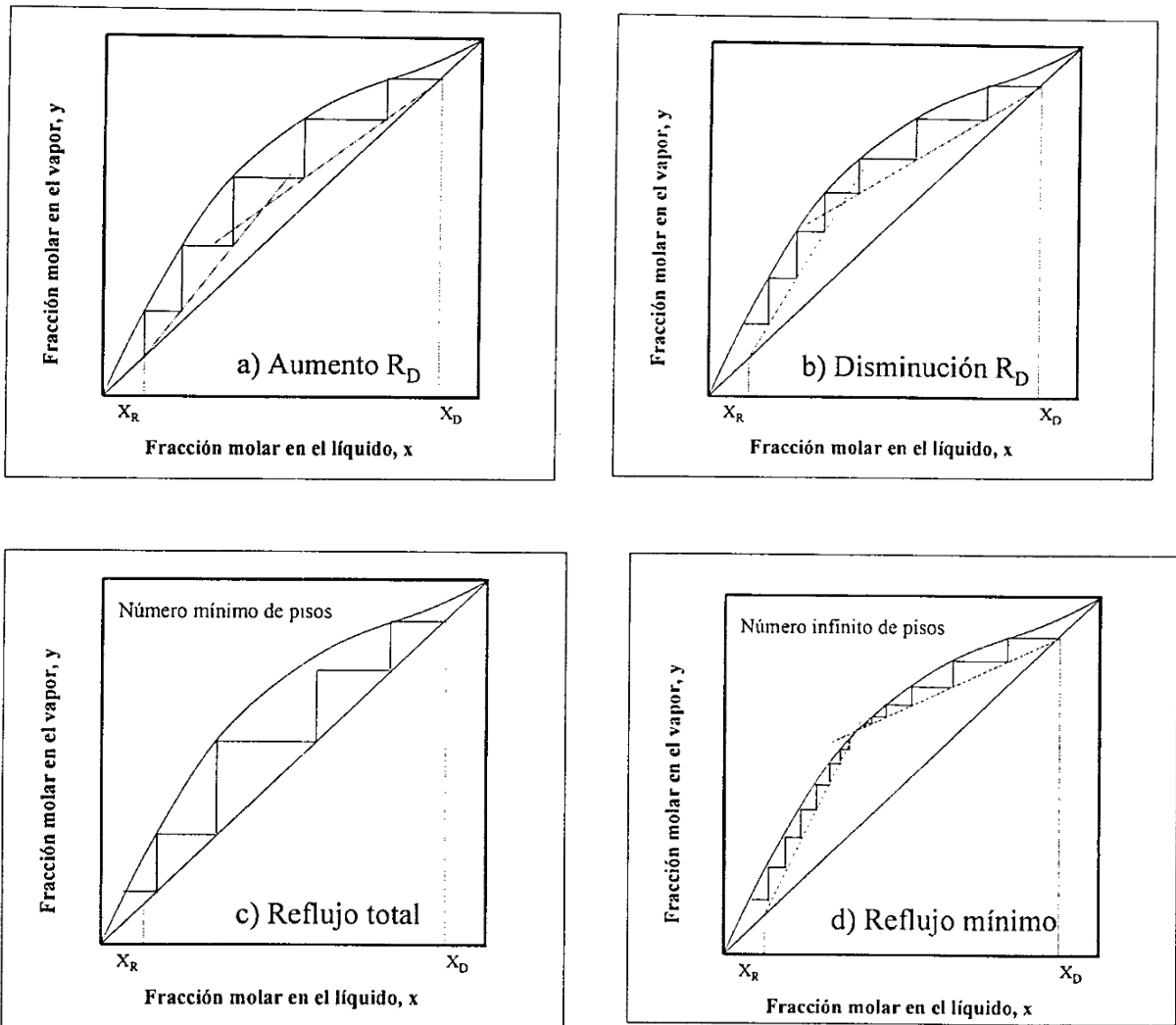


Figura 71: Influencia de la razón de reflujo en el número de platos. (Treybal, 1986).

Generalmente, la razón de reflujo de operación se encuentra comprendida entre 1.2 y 2 veces la razón de reflujo mínima. Su valor óptimo se determina con ayuda de un balance económico.

CAPITULO III.

SIMULACIÓN DE PROCESOS DE TRANSFERENCIA DE MASA.

La metodología para la simulación de problemas de cálculos se ha en base a una serie de criterios como:

- El problema de cálculo debe ser parte de la temática de la asignatura de Operaciones Unitarias III de la carrera de Ingeniera Química de la Universidad de El Salvador.
- El problema de cálculo seleccionado debe estar resuelto en libros de referencia utilizados en la asignatura.
- Debe ser posible resolver el problema de cálculo, utilizando los aplicativos elaborados.

3.1 SIMULACIÓN DE DIFUSIÓN.

3.1.2 SIMULACIÓN DE CÁLCULO DE COEFICIENTE DE DIFUSIÓN PARA GASES.

I. Cálculo de difusión mediante la ecuación de Hirschfelder.

$$D_{AB} = \frac{0.001858T^{\frac{3}{2}} \left[\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right]^{\frac{1}{2}}}{P\sigma_{AB}^2\Omega_D}$$

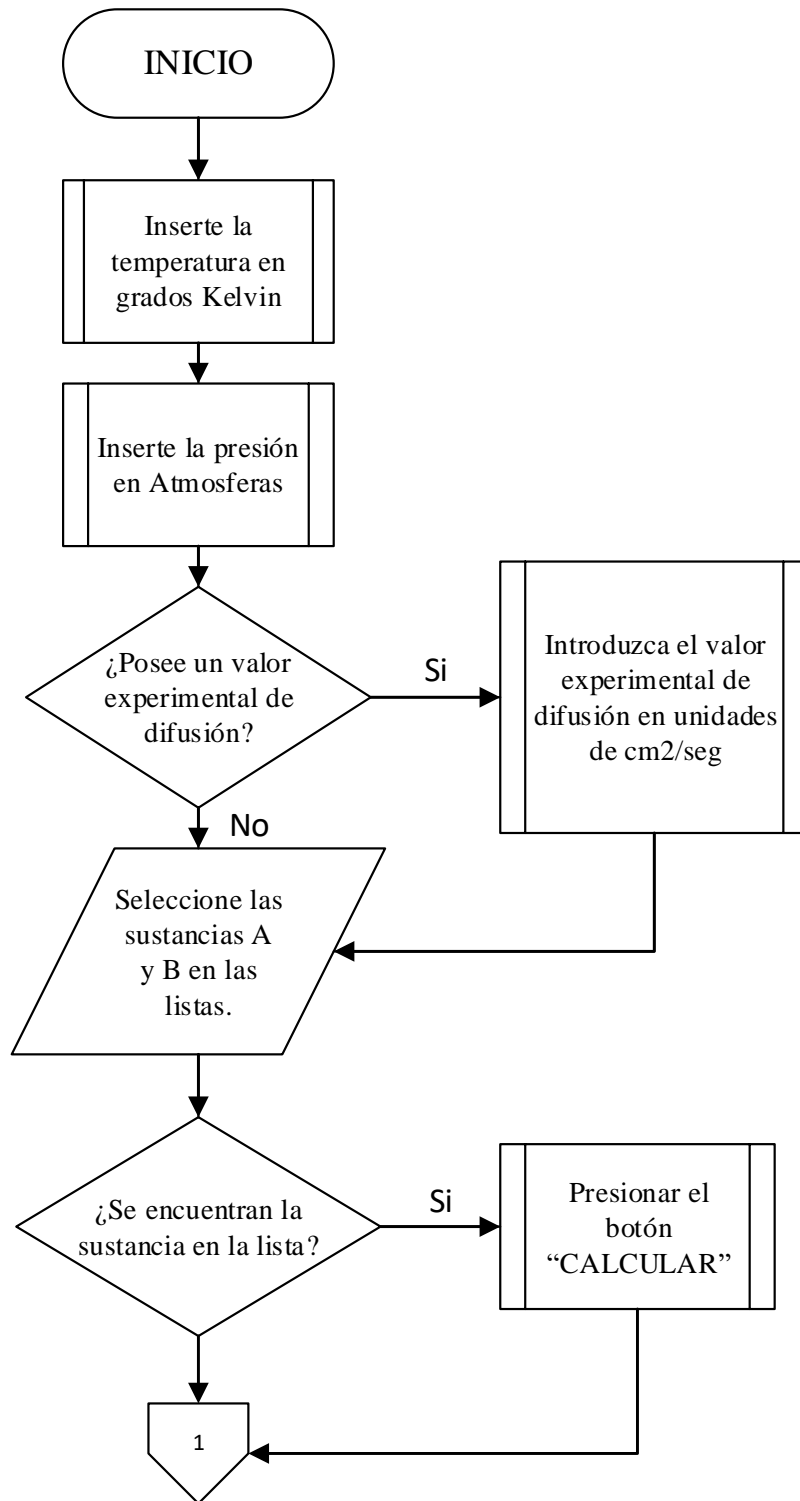
a) Descripción de variables utilizadas:

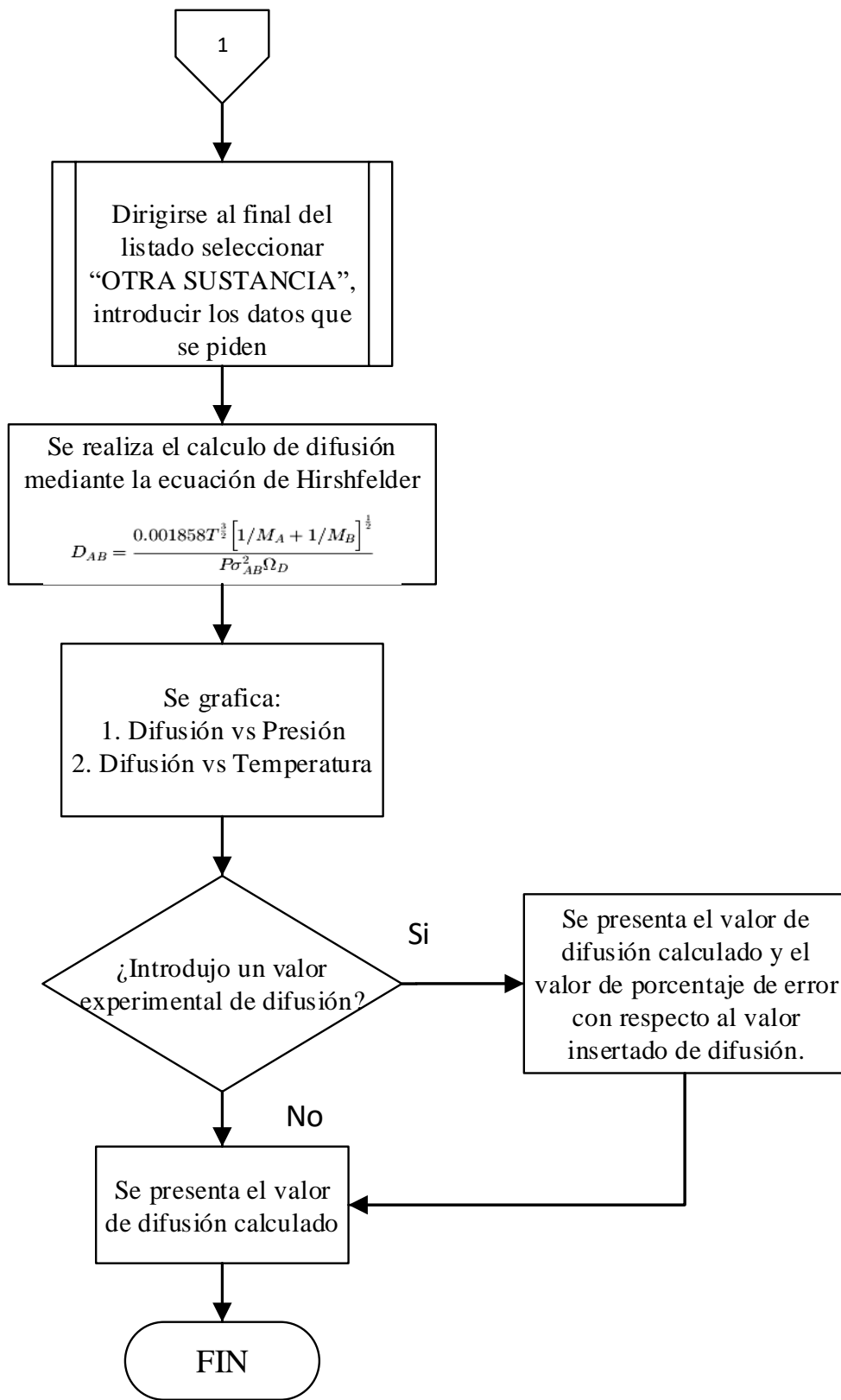
Tabla 3.1: Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 001.

VARIABLE	DESCRIPCIÓN
D_{AB}	Difusividad de A, que se difunde a través de B (cm ² /s)
T	Temperatura absoluta (K)
M_A y M_B	Pesos moleculares de A y B (g/mol)
P	Presión absoluta (atm)
σ	Diámetro de colisión A-B (Å)
Ω_D	Integral de colisión

b) Metodología utilizada para el cálculo de difusión:

Figura 72: Diagrama de flujo para el cálculo de difusión mediante la ecuación de Hirshfelder.





c) Prueba de cálculo:

Ejemplo de cálculo tomado del libro: Welty, J. R., Wicks, C. E., & Wilson, R. E. (2008). Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa (2a ed.). México D. F., (Ejemplo 2, Capítulo 24, p. 411).

Calcúlese el coeficiente de difusión del dióxido de carbono en aire a 20 °C y presión atmosférica utilizando la ecuación de Hirshfelder.

$$D_{AB} = \frac{0.001858 T^{\frac{3}{2}} (1/M_A + 1/M_B)^{1/2}}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_D}$$

$$D_{AB} = \frac{0.001858 (293.15)^{\frac{3}{2}} (1/44 + 1/29)^{1/2}}{(1) (3.806)^2 (1.047)}$$

$$D_{AB} = 0.147 \text{ cm}^2/\text{s}$$

Valores de σ y Ω_D tomados de Anexo A, Tabla A-1.

d) Ejecución con el aplicativo 001:

Ecuación de Hirschfelder (Código 001)

Ingrese temperature en grados Kelvin:

293.15

Ingrese presión en atmósferas

1

Ingrese valor experimental si se posee en $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

0.147

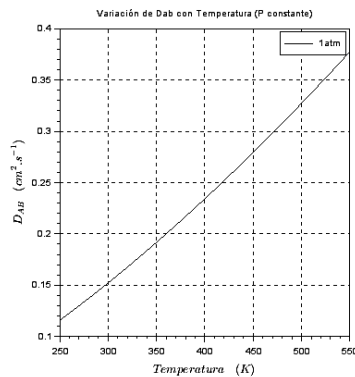
Seleccione las dos sustancias dando click sobre ellas:

Aire	Aire
C6H6 (Benceno)	C6H6 (Benceno)
CO2	CO2
CS2	CS2
CO	CO
CCH	CCH
O2	O2
C2H6	C2H6
C2H5OH (Etanol)	C2H5OH (Etanol)
C2H4 (Etileno)	C2H4 (Etileno)
He	He
H2	H2
HCl	HCl
CH4	CH4
CH3OH (Metanol)	CH3OH (Metanol)
NO	NO
<	<
>	>

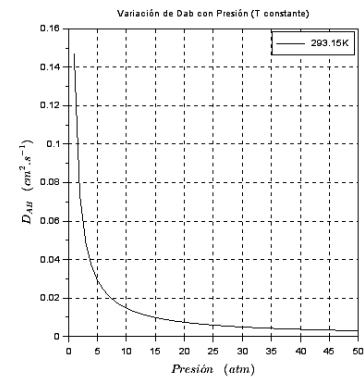
CALCULAR

$$D_{AB} = \frac{0.001858T^{\frac{3}{2}} \left[\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right]^{\frac{1}{2}}}{Pr_{AB}^2 \Omega_D}$$

Ecuación para el cálculo de coeficientes de difusividad en mezclas gaseosas binarias a baja presión



Respuesta: 0.1469639 $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$



% Error: -0.0245565

Diríjase a la pestaña Ayuda para mayor información sobre el uso del aplicativo.

Figura 73: Simulación efectuada con el aplicativo 001.

e) Cuadro comparativo:

Tabla 3.2: Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 001.

VALIDACION DE DATOS	RESPUESTAS
Ejemplo de libro	0.147 cm^2/s
Ejecución de aplicativo	0.1469639 cm^2/s
% Error	-0.0245565%

II. Cálculo de difusión mediante la ecuación de Fuller.

$$D_{AB} := \frac{0.00143 \cdot T^{1.75}}{P \cdot M_{AB}^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\left(\sum v \right)_A^{\frac{1}{3}} + \left(\sum v \right)_B^{\frac{1}{3}} \right)^2}$$

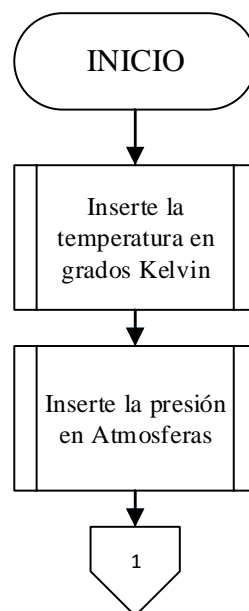
a) **Descripción de variables utilizadas:**

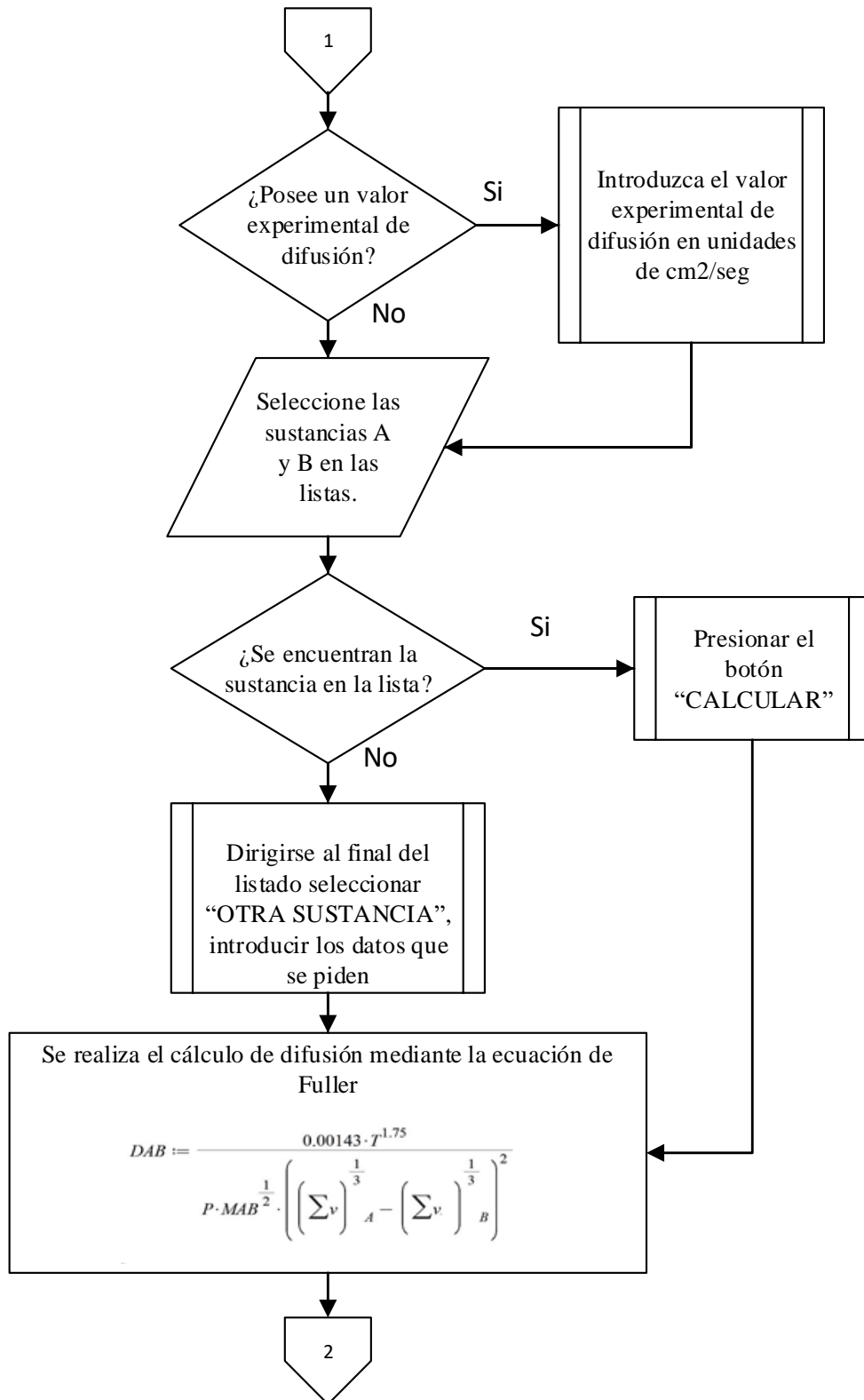
Tabla 3.3: Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 002.

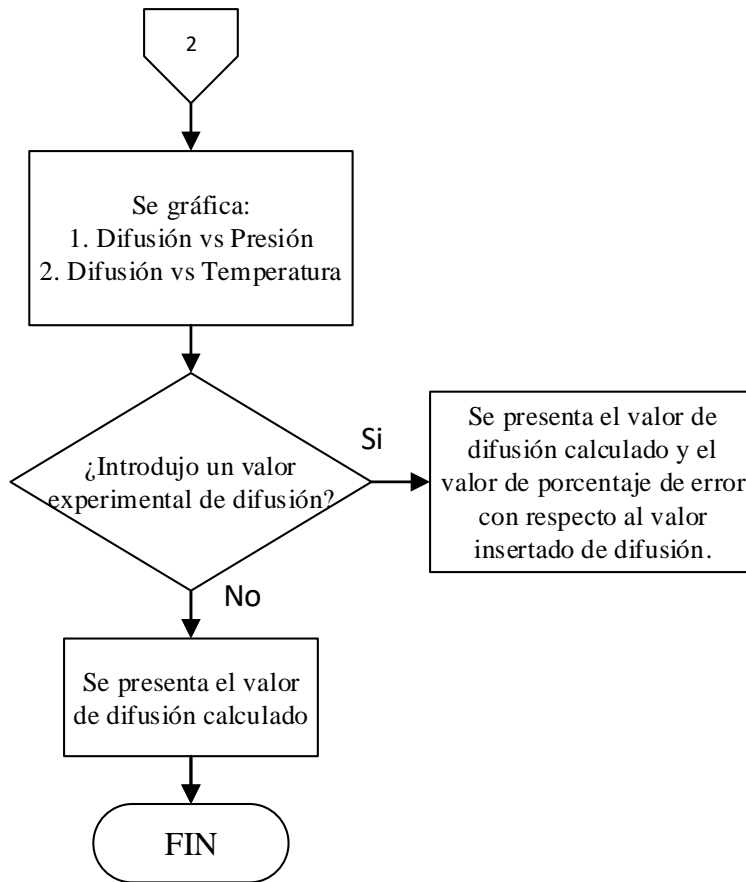
VARIABLE	DESCRIPCIÓN
D_{AB}	Difusividad de A, que se difunde a través de B (cm ² /s)
T	Temperatura absoluta (K)
M_A y M_B	Pesos moleculares de A y B (g/mol)
P	Presión absoluta (atm)
Σv	Volúmenes moleculares de difusión de cada especie

b) **Metodología utilizada para el cálculo de difusión:**

Figura 74: Diagrama de flujo para el cálculo de difusión mediante la ecuación de Fuller.







c) Prueba de cálculo:

Ejemplo de cálculo tomado del libro: Welty, J. R., Wicks, C. E., & Wilson, R. E. (2008). Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa, 5a ed. (Ejemplo 2, Capítulo 24, p. 411).

Calcúlese el coeficiente de difusión del dióxido de carbono en aire a 20 °C y presión atmosférica utilizando la ecuación de Hirshfelder.

$$D_{AB} = \frac{0.001858 T^{\frac{3}{2}} (1/M_A + 1/M_B)^{1/2}}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_D}$$

$$D_{AB} = \frac{0.001858 (293.15)^{\frac{3}{2}} (1/44 + 1/29)^{1/2}}{(1) (3.806)^2 (1.047)}$$

$$D_{AB} = 0.147 \text{ cm}^2/\text{s}$$

d) Ejecución con el aplicativo 002:

◆ Ecuación de Fuller. Cálculo de coeficientes de difusividad en gases

Ayuda

Calculo de Coeficiente de Difusividad para Gases: Ecuación Fuller (Código 002)

Ingrese temperature en grados Kelvin:

Ingrese presión en atmósferas

Ingrese valor experimental si se posee en $\text{cm}^2.\text{s}^{-1}$

Seleccione las dos sustancias dando click sobre ellas:

H2	H2
He	He
N2	N2
O2	O2
Aire	Aire
Ar	Ar
Kr	Kr
CO	CO
CO2	CO2
N2O	N2O
NH3	NH3
H2O	H2O
CClF2	CClF2
SF6	SF6
CL2	CL2
BR2	BR2
SO2	SO2

$$D_{AB} = \frac{10^{-3} T^{1.75} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{0.5}}{P \left[(\Sigma v_A)^{1/3} (\Sigma v_B)^{1/3} \right]}$$

Ecuación para el cálculo de coeficientes de difusividad en mezclas gaseosas binarias de gases no polares a bajas presiones

Respuesta: $\text{cm}^2.\text{s}^{-1}$

% Error:

Dirijase a la pestaña Ayuda para mayor información sobre el uso del aplicativo.

Figura 75: Simulación efectuada con el aplicativo 002.

e) Cuadro comparativo:

Tabla 3.4: Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 002.

VALIDACION DE DATOS	RESPUESTAS
Ejemplo de libro	0.147 cm^2/s
Ejecución de aplicativo	0.1520816 cm^2/s
% Error	3.4568587 %

III. Cálculo de difusión mediante la ecuación de Extrapolación de Hirschfelder.

$$D_{AB,2} = D_{AB,1} \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P_1}{P_2} \right)$$

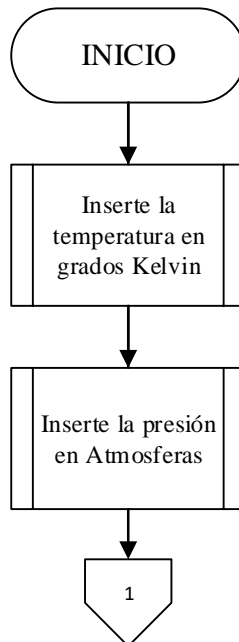
a) **Descripción de variables utilizadas:**

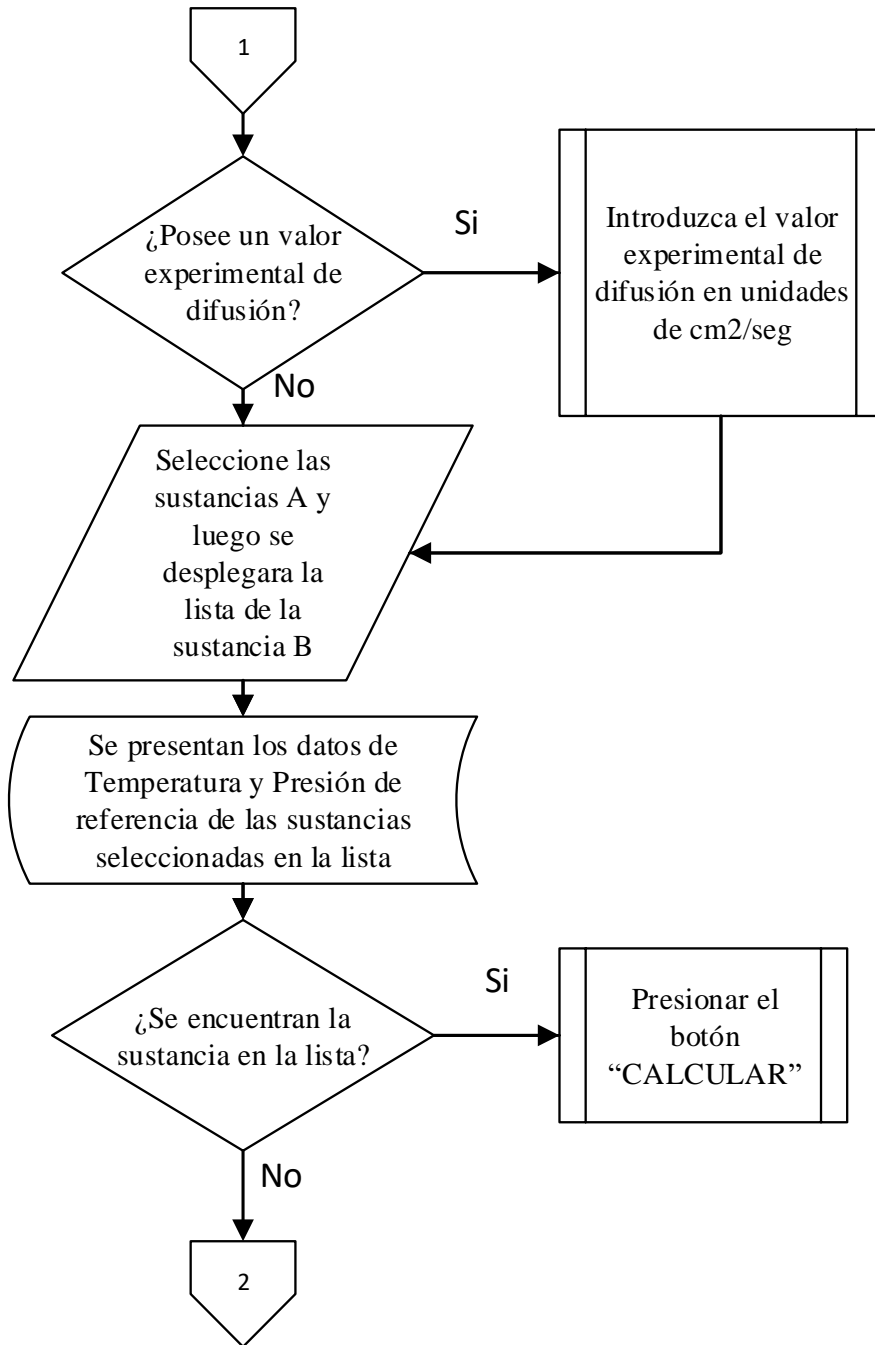
Tabla 3.5: Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 003.

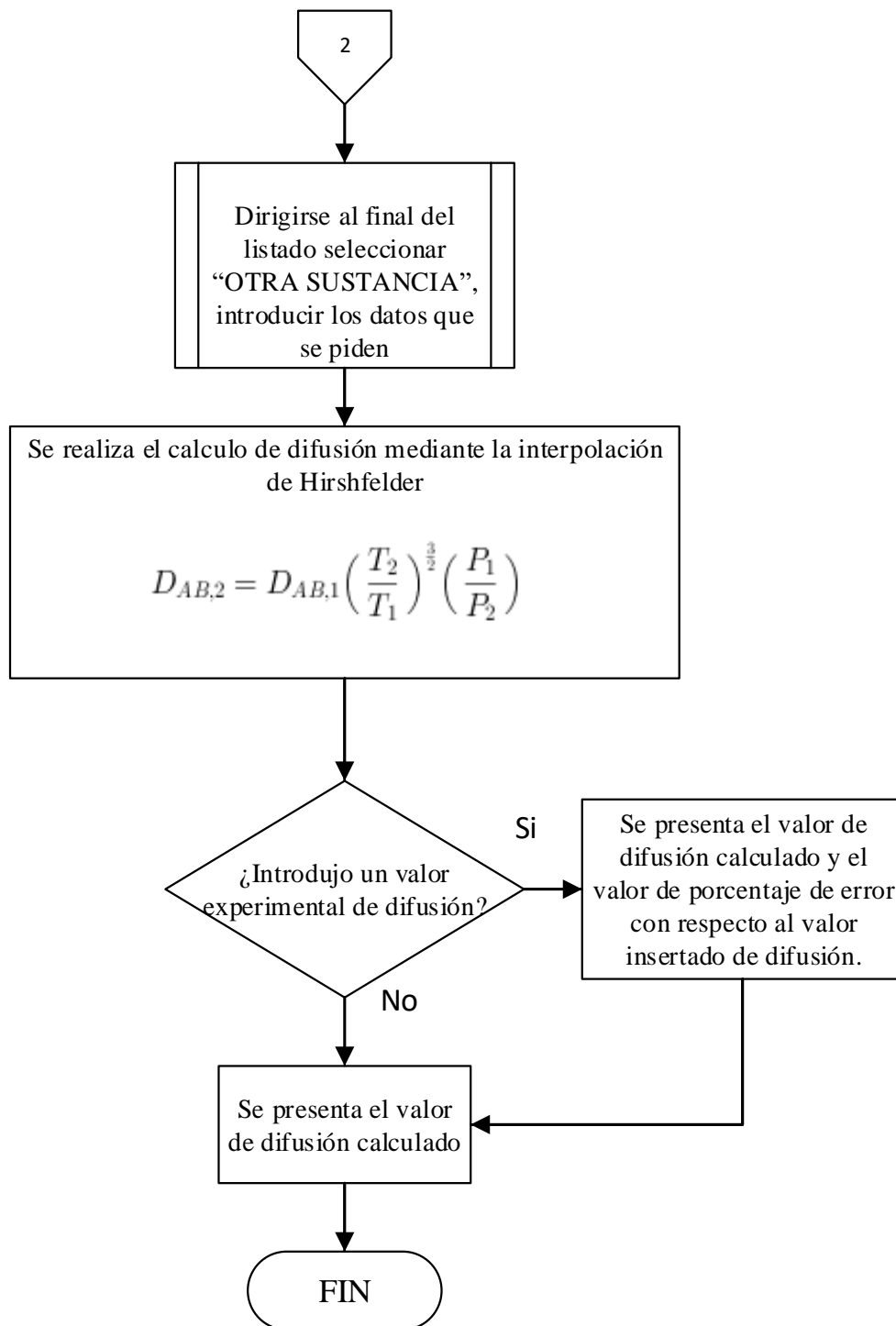
VARIABLE	DESCRIPCIÓN
$D_{AB,1}$	Difusividad de A, que se difunde a través de B (cm ² /s) a condiciones conocidas
$D_{AB,2}$	Difusividad de A, que se difunde a través de B (cm ² /s) a condiciones a evaluar
T	Temperatura absoluta (K)
P	Presión absoluta (atm)

b) **Metodología utilizada para el cálculo de difusión:**

Figura 76: Diagrama de flujo para el cálculo de difusión mediante la interpolación de Hirshfelder.







c) Prueba de cálculo:

Ejemplo de cálculo tomado del libro: Welty, J. R., Wicks, C. E., & Wilson, R. E. (2008). Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa, 2a ed. (Ejemplo 3, Capítulo 24, p. 554).

Determine la difusividad del monóxido de carbono en una mezcla de oxígeno, cuya mezcla gaseosa está a 298 K y a 2 atmosferas de presión total.

$$\frac{D_{AB} \text{ condición 1}}{D_{AB} \text{ condición 2}} = \left(\frac{T_1}{T_2}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P_2}{P_1}\right)$$

$$D_{CO-O_2} = \left(\frac{298}{288}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{1}{2}\right) \times (0.185 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s})$$

$$D_{CO-O_2} = 0.105 \times 10^{-4} \frac{m^2}{s}$$

$$D_{CO-O_2} = 0.105 \frac{cm^2}{s}$$

D_{AB} condición 2, tomado de Anexo B, Tabla B-1.

d) Ejecución con el aplicativo 003:

◆ Extrapolación Hirschfelder. Cálculo de coeficientes de difusividad en gases

Ayuda

Extrapolación Hirschfelder (Código 003)

Ingrese temperature en grados Kelvin:

Ingrese presión en atmósferas:

Ingrese valor experimental si se posee en $cm^2.s^{-1}$:

Seleccione la sustancia 1 dando click sobre la casilla de selección y luego seleccione la segunda sustancia

Resposta: $cm^2.s^{-1}$

% Error:

Aire

NH3

CO2

CO

He

H2

N2

O2

Etileno

H2

N2

O2

CALCULAR

Referencia de temperatura: K

Referencia de presión: atm

Dirijase a la pestaña Ayuda para mayor información sobre el uso del aplicativo.

Figura 77: Simulación efectuada con el aplicativo 003.

e) Cuadro comparativo:

Tabla 3.6: Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 003.

VALIDACION DE DATOS	RESPUESTAS
Ejemplo de libro	0.105 cm^2/s
Ejecución de aplicativo	0.1054926 cm^2/s
% Error	-0.4691804%

3.1.3 SIMULACIÓN DE CÁLCULO DE COEFICIENTE DE DIFUSIÓN PARA LÍQUIDOS.

Cálculo de difusión mediante la ecuación de Wilke-Chang.

$$D_{AB}^0 = 7.4 \times 10^{-11} \frac{(\phi M_B)^{0.5} \cdot T}{\mu \bar{V}_{b,A}^{0.6}}$$

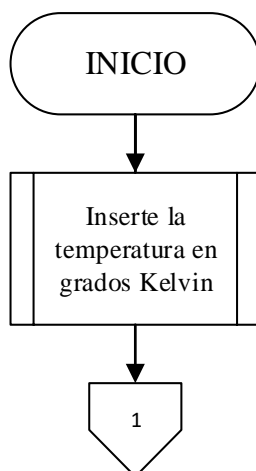
a) Descripción de variables utilizadas:

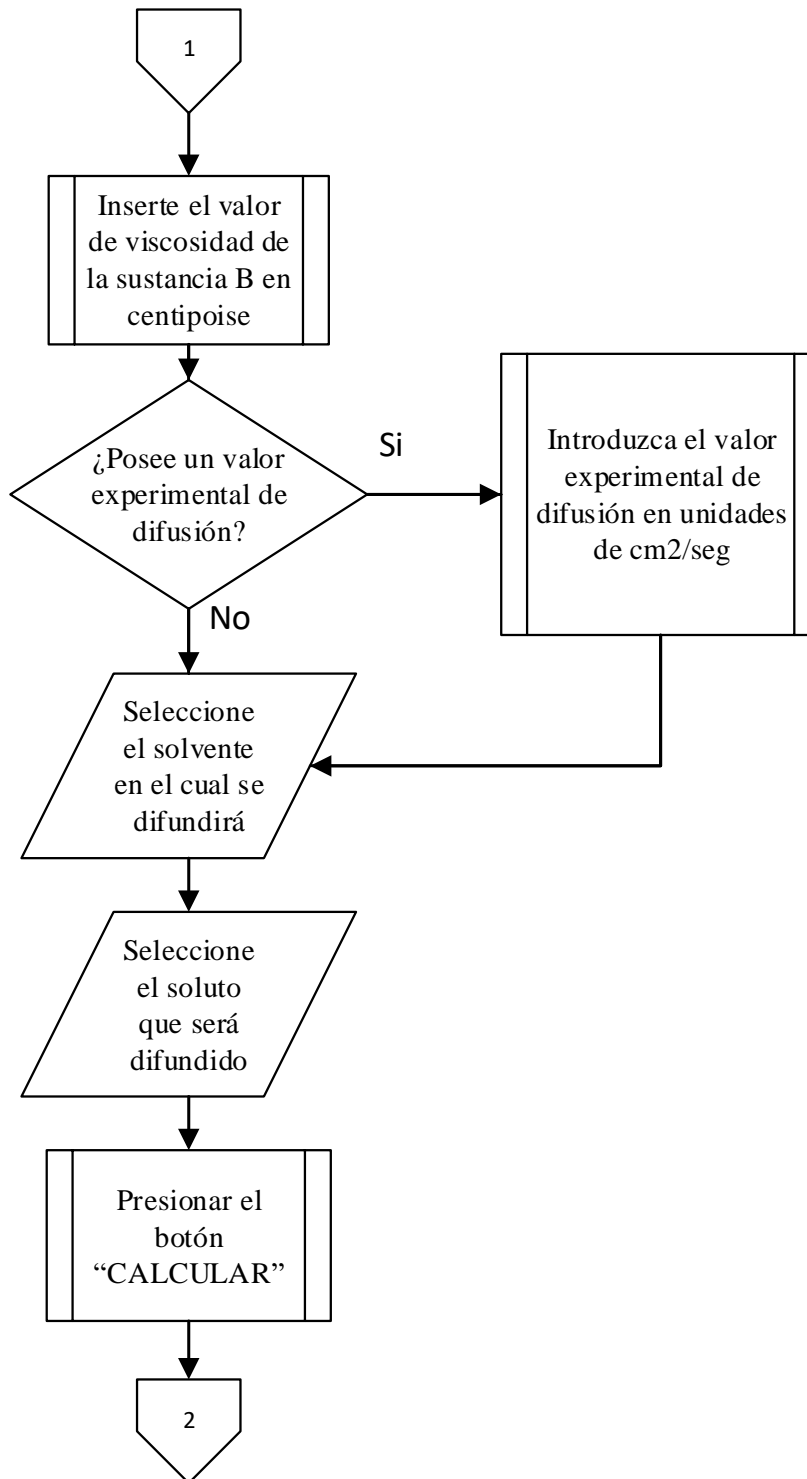
Tabla 3.7: Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 004.

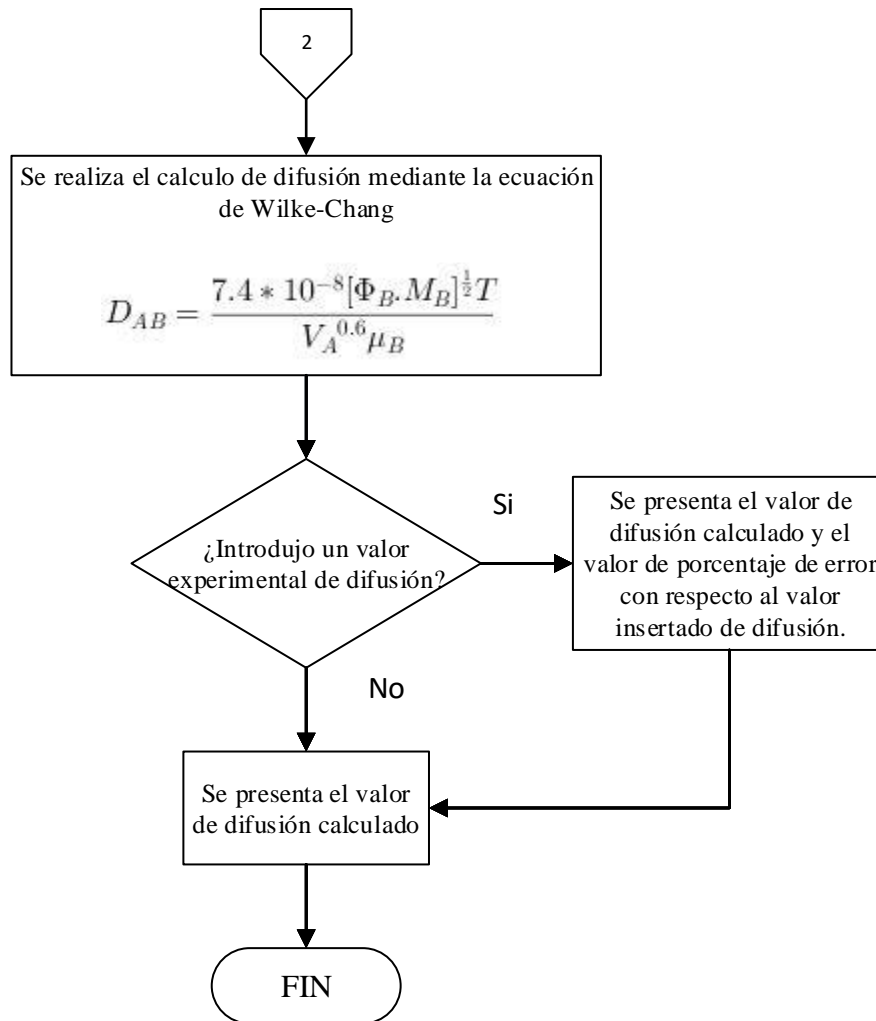
VARIABLE	DESCRIPCIÓN
D_{AB}^0	Difusividad de A en una solución diluida en el componente B (cm ² /s)
μ	Viscosidad cinemática (Cp)
T	Temperatura absoluta (K)
M_B	Peso molecular del disolvente (g/mol).
V_A	Volumen molar del soluto (cm ³ /mol).
Φ	Factor de asociación para el disolvente (adimensional).

b) Metodología utilizada para el cálculo de difusión:

Figura 78: Diagrama de flujo para el cálculo de difusión mediante la ecuación de Wilke-Chang.







c) Prueba de cálculo:

Ejemplo de cálculo tomado del libro: Welty, J. R., Wicks, C. E., & Wilson, R. E. (2008). Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa (2a ed.). México D. F., (Ejemplo 5, Capítulo 24, p. 418).

Estime el coeficiente de difusión de líquido de etanol, C₂H₅OH, en una solución diluida de agua a 10 ° C.

A 10°C, la viscosidad de una solución que contiene 0.05 moles de alcohol / litro de agua es 1.45 centipoises.

$$D_{AB} = \frac{7.4 * 10^{-8} [\Phi_B \cdot M_B]^{1/2} T}{V_A^{0.6} \mu_B}$$

$$D_{AB} = \left(\frac{7.4 \times 10^{-8} (2.26 \times 18)^{1/2}}{(59.2)^{0.6}} \right) \left(\frac{283}{1.45} \right)$$

$$D_{AB} = 7.96 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$$

d) Ejecución con el aplicativo 004:

Ecuación Wilke-Chang (Código 004)

Ingrese temperature en grados Kelvin:

Ingrese viscosidad en centipoise:

Ingrese valor experimental si se posee en $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$:

Seleccione el solvente en que se difundirá:

Agua Etanol
 Metanol

Seleccione el soluto que se difundirá:

Aire
CO
CO2
CO5
SO2
NO
N2O
NH3
Agua
H2S

CALCULAR

7.9650-06 $\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ % Error: 0.0609597

Diríjase a la pestaña Ayuda para mayor información sobre el uso del aplicativo.

Figura 79: Simulación efectuada con el aplicativo 004.

e) Cuadro comparativo:

Tabla 3.8: Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 004.

VALIDACION DE DATOS	RESPUESTAS
Ejemplo de libro	$7.96 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$
Ejecución de aplicativo	$7.965 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$
% Error	0.0609597 %

3.1 SIMULACIÓN DE OPERACIONES GAS-LÍQUIDO.

3.2.1 SIMULACIÓN DE COEFICIENTES INDIVIDUALES DE TRANSFERENCIA DE MASA.

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{Hk_G} + \frac{1}{k_L}; \frac{1}{K_L} = \frac{1}{k_G} + \frac{H}{k_L}$$

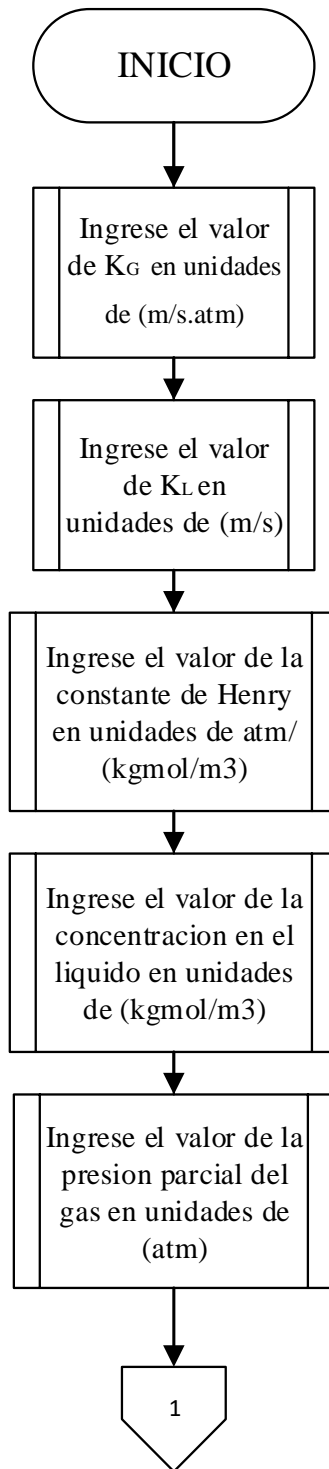
a) Descripción de variables utilizadas:

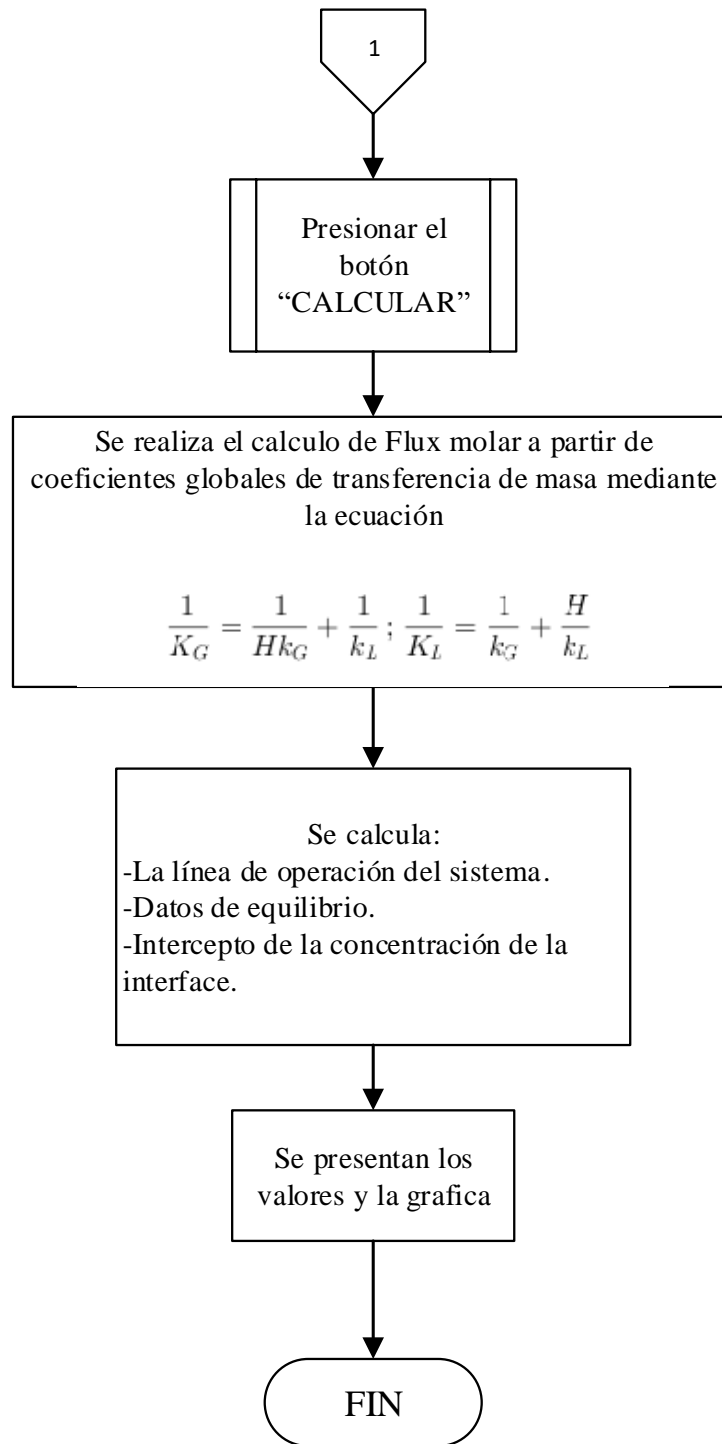
Tabla 3.9: Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 005.

VARIABLE	DESCRIPCIÓN
H	Constante de Ley de Henry ($\frac{atm}{kg\ mol/m^3}$)
k _G	Coefficiente de transferencia convectiva de masa en la fase gaseosa (m/s.atm)
k _L	Coefficiente de transferencia convectiva de masa en la fase líquida (m/s)
K _G	Coefficiente global de transferencia de masa en la fase gaseosa (m/s.atm)
K _L	Coefficiente global de transferencia de masa en la fase líquida (m/s)
N _A	Flujo de masa global (Kg mol/m ² .s)

b) Metodología utilizada para el cálculo de coeficientes globales:

Figura 80: Diagrama de flujo para el cálculo de coeficientes globales.





c) Prueba de cálculo:

Ejemplo de cálculo tomado del libro: Welty, J. R., Wicks, C. E., & Wilson, R. E. (2008). Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa, 5a ed. (Ejemplo 4, Capítulo 29, p. 562).

Una corriente de agua residual se introduce en la parte superior de una torre de transferencia de masa donde fluye aire a contracorriente. En un punto de la torre, la corriente de aguas residuales contiene 1×10^{-3} g mol A/m³ y el aire está esencialmente libre de A. En las condiciones de operación dentro de la torre, la transferencia de masa de la película, los coeficientes son $k_L = 5 \times 10^{-4}$ kg / mol / m². s (kg mol / m³) y $k_G = 0.01$ kg mol / m². s. atm.

las concentraciones están en la región de la ley de Henry donde $p_{A,i} = H c_{A,i}$ con $H = 10$ atm/(kgmol m³).

Determinar: a) El flujo de masa global N_A

b) Los coeficientes globales de transferencia de masa, K_L y K_G .

Cálculo de K_L :

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{H k_G} + \frac{1}{k_L}$$

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{\left(10 \frac{\text{atm}}{\text{kg mol/m}^3}\right) \left(0.01 \frac{\text{kgmol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{atm}}\right)} + \frac{1}{5 \times 10^{-4} \frac{\text{kg mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{kg mol/m}^3}}$$

$$K_L = 4.97 \times 10^{-4} \text{ m/s}$$

Cálculo de presión parcial:

$$P_A^* = H_{CA,L}$$

$$P_A^* = \left(10 \frac{\text{atm}}{\frac{\text{kg mol}}{\text{m}^3}} \right) \left(1 \times 10^{-6} \frac{\text{kg mol}}{\text{m}^3} \right)$$

$$P_A^* = 1 \times 10^{-5} \text{ atm}$$

Cálculo de flujo de masa global:

$$N_A = K_L (c_{A,L} - c_A^*)$$

$$N_A = (4.97 \times 10^{-4} \text{ m/s}) (1.0 \times 10^{-6} \text{ kg mol/m}^3)$$

$$N_A = 4.97 \times 10^{-10} \frac{\text{kg mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$$

Cálculo de K_G :

$$K_G = \frac{K_L}{H}$$

$$K_G = \frac{4.97 \times 10^{-4} \text{ m/s}}{10 \frac{\text{atm}}{\text{kg mol/m}^3}}$$

$$K_G = 4.97 \times 10^{-5} \frac{\text{kg mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{atm}}$$

d) Ejecución con el aplicativo 005:

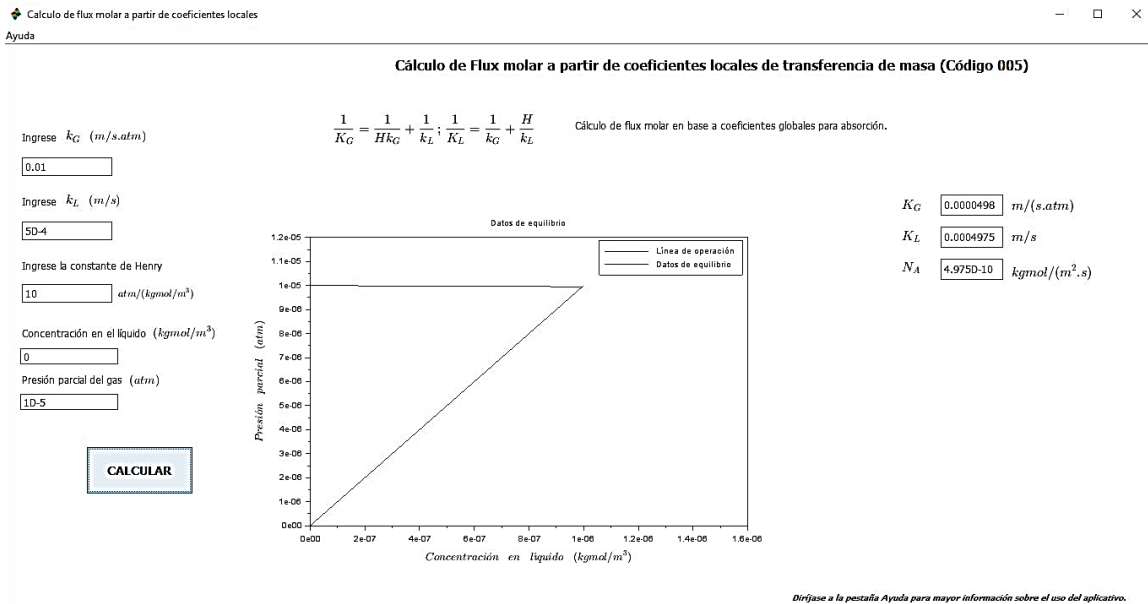


Figura 81: Simulación efectuada con el aplicativo 005.

e) Cuadro comparativo:

Tabla 3.10: Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 005.

VALIDACION DE DATOS	RESPUESTAS	
Ejemplo de libro	K_G	$4.97 \times 10^{-5} \frac{\text{kgmol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{atm}}$
	K_L	$4.97 \times 10^{-4} \text{ m/s}$
	N_A	$4.97 \times 10^{-10} \frac{\text{kg mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$
Ejecución de aplicativo	K_G	$0.0000498 \frac{\text{kgmol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{atm}}$
	K_L	0.000497 m/s
	N_A	$4.975 \times 10^{-10} \frac{\text{kg mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$
% Error	K_G	0.2008 %
	K_L	0 %
	N_A	0.1005 %

3.2.2 SIMULACIÓN OPERACIONES ABSORCIÓN DE GASES.

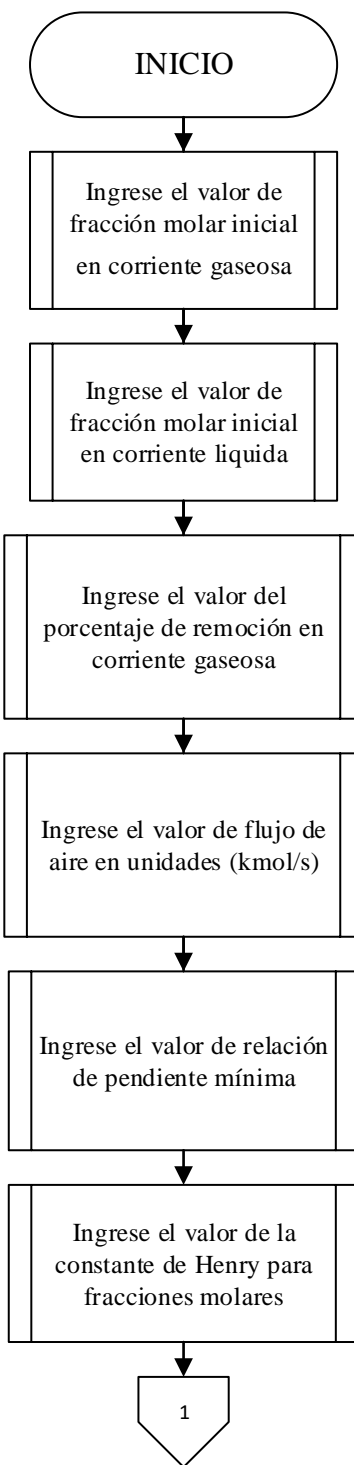
a) Descripción de variables utilizadas:

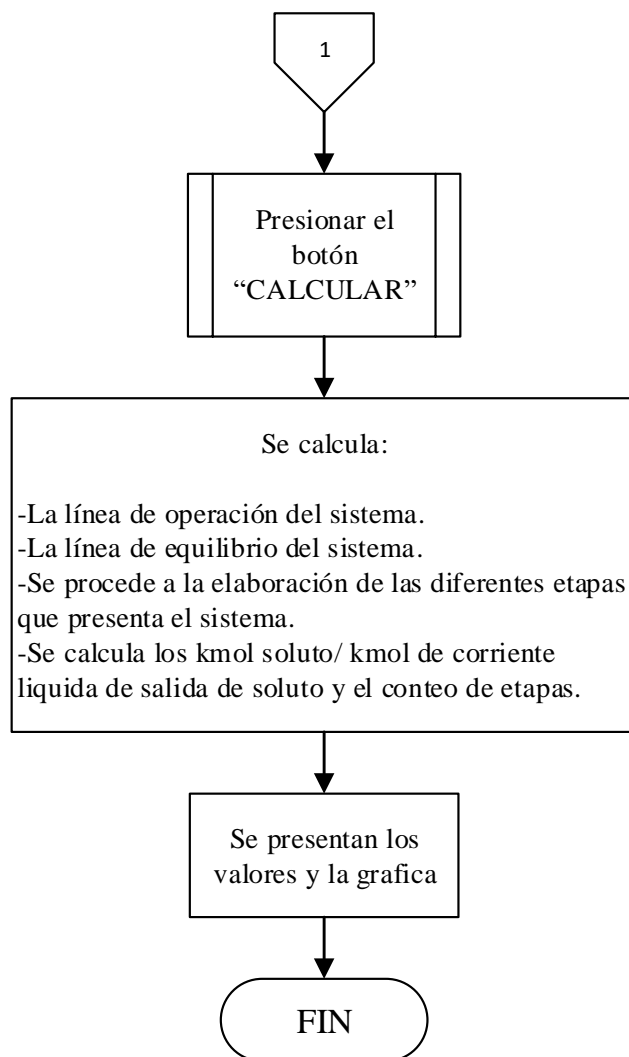
Tabla 3.11: Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 006.

VARIABLE	DESCRIPCIÓN
L_1	Corriente líquida saliendo (Lmin)
L_2	Corriente líquida entrante (Lmin)
T_1	Temperatura de gas entrante ($^{\circ}\text{C}$)
T_2	Temperatura de gas saliente ($^{\circ}\text{C}$)
P	Presión de gas
PM	Peso molecular del benceno
X_1	Fracción mol de líquido saliendo
X_2	Fracción mol de líquido entrante
Y_1	Fracción mol de gas saliendo
Y_2	Fracción mol de gas entrante
L_{smin}	Relación de pendiente mínima
L_s	Relación de pendiente
G_1	Flujo de gas entrante

b) Metodología utilizada para el cálculo de etapas en una operación de absorción:

Figura 82: Diagrama de flujo para el cálculo de etapas en una operación de absorción.





c) Prueba de cálculo:

Ejemplo de cálculo tomado del libro: Treybal, R. E. (1986). Operaciones de transferencia de masa (2a ed.). México D. F. (Ejemplo 8.2, Capítulo 8, p. 319).

Un gas de alumbrado se va a liberar del aceite ligero con un aceite de lavado como absorbente; el aceite ligero se va a recobrar por desorción de la solución resultante con vapor. Las condiciones son:

Gas entrante, 0.250 m³/s a 26 °C, contendrá 2.0% en volumen de aceite ligero. Se va a suponer que todo el aceite ligero es benceno y que se requiere un 95% de eliminación. El aceite de lavado va a entrar a 26 °C, contendrá 0.005 fracción mol de benceno y tendrá un

peso molecular promedio de 260. Se va utilizar un flujo de circulación del aceite de 1.5 veces la mínima, las condiciones de aceite lavado-benceno son ideales.

Calcular el flujo de circulación del aceite y el flujo de vapor que se necesita.

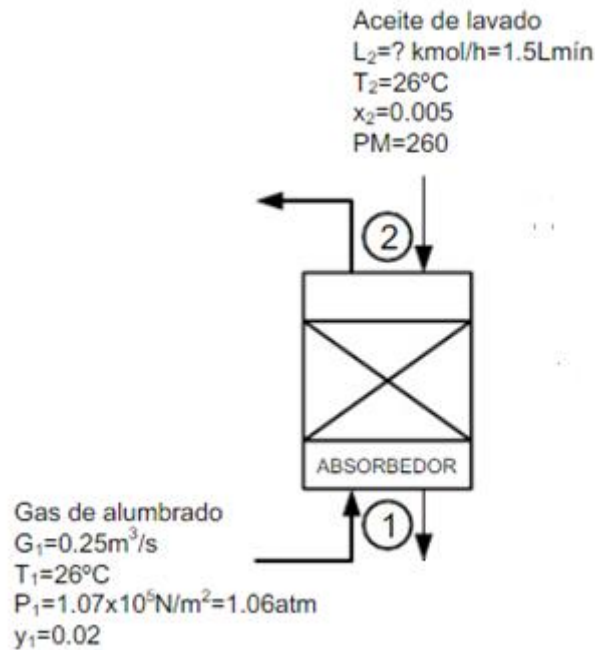


Figura 83: Figura ilustrativa para el problema 8.2. (Treybal, 1986).

Tomando la mezcla de gases como ideales tenemos:

$$G_1 = \frac{\left(8.3144598 \frac{\text{kPa m}^3}{\text{kmol K}}\right) (273.15 + 26) \text{K}}{(107 \text{ kPa}) \left(0.25 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right)} = 0.1075 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

Identificando el 2% de volumen de Benceno, sacamos la fracción de Benceno. $Y=0.02$

$$Y_1 = \frac{0.02}{1 - 0.02} = 0.02041 \frac{\text{kmol Benceno}}{\text{kmol gas seco}}$$

Con esto podemos calcular:

$$G_s = \left(0.1075 \frac{\text{kmol}}{\text{s}}\right) (1 - 0.02) = 0.01051 \frac{\text{kmol gas Seco}}{\text{s}}$$

Para el 95% de eliminación de Benceno.

$$Y_2 = (0.05) \left(0.02041 \frac{\text{kmol Benceno}}{\text{kmol gas seco}}\right) = 0.00102 \frac{\text{kmol Benceno}}{\text{kmol gas seco}}$$

Y con $x_2=0.005$, tenemos:

$$X_1 = \frac{0.005}{1 - 0.005} = 0.00503 \frac{\text{kmol Benceno}}{\text{kmol Aceite}}$$

Teniendo la Presión de vapor del Benceno a 26 °C podemos sacar la relación en el equilibrio:

$$y^* = \frac{\bar{P}^*}{P_t} = \frac{13.33 \text{ kPa}}{107 \text{ kPa}} = 0.1246$$

Ahora con la relación en el equilibrio de la fracción gas con la fracción líquido, podemos calcular diferentes presiones y fracciones líquidas a partir de fracciones gaseosas con:

$$\frac{y^*}{1 - y^*} = 0.1246 \frac{x^*}{1 + X}$$

Con esto se calcula X_1 , a partir de $Y_1=0.02041$; teniendo que $X_1=0.176$ kmol Benceno/kmol Aceite

A partir de conocer la fracción de Benceno en aceite inicial se puede calcular L_{smin} :

$$L_{smin} = \frac{G_s(Y_1 - Y_2)}{X_1 - X_2} = \frac{0.01051(0.02041 - 0.00102)}{0.176 - 0.00503} = 1.190 * 10^{-3} \frac{\text{kmol Aceite}}{\text{s}}$$

Para 1.5 L_s :

$$L_s = 1.5 \left(1.190 * 10^{-3} \frac{\text{kmol Aceite}}{\text{s}}\right) = 1.787 * 10^{-3} \frac{\text{kmol Aceite}}{\text{s}}$$

Entonces:

$$X = \frac{G_s(Y_1 - Y_2)}{L_{Smin}} = \frac{0.01051(0.02041 - 0.00102)}{1.787 * 10^{-3}} + 0.00503 = 0.1190 \frac{\text{kmol Benceno}}{\text{kmol Aceite}}$$

d) Ejecución con el aplicativo 006:

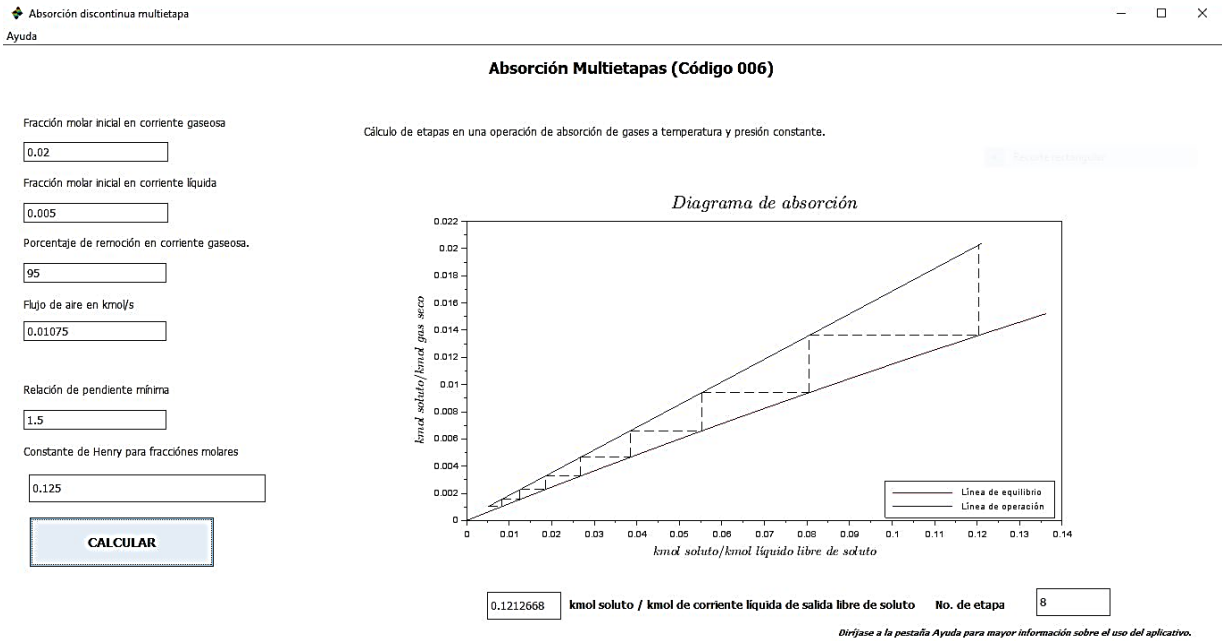


Figura 84: Simulación efectuada con el aplicativo 006.

e) Cuadro comparativo:

Tabla 3.12: Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 006.

VALIDACION DE DATOS	RESPUESTAS
Ejemplo de libro	0.1190 kmol Aceite/s
Ejecución de aplicativo	0.1212 kmol Aceite/s
% Error	1.8487 %

3.2.3 SIMULACIÓN OPERACIONES DE HUMIDIFICACIÓN.

$$Z = N_{tG} \cdot H_{tG}$$

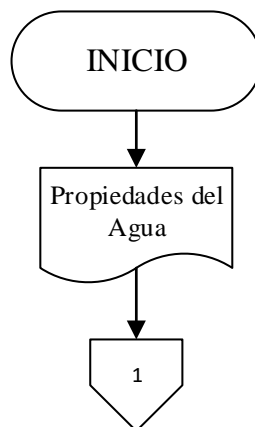
a) Descripción de variables utilizadas:

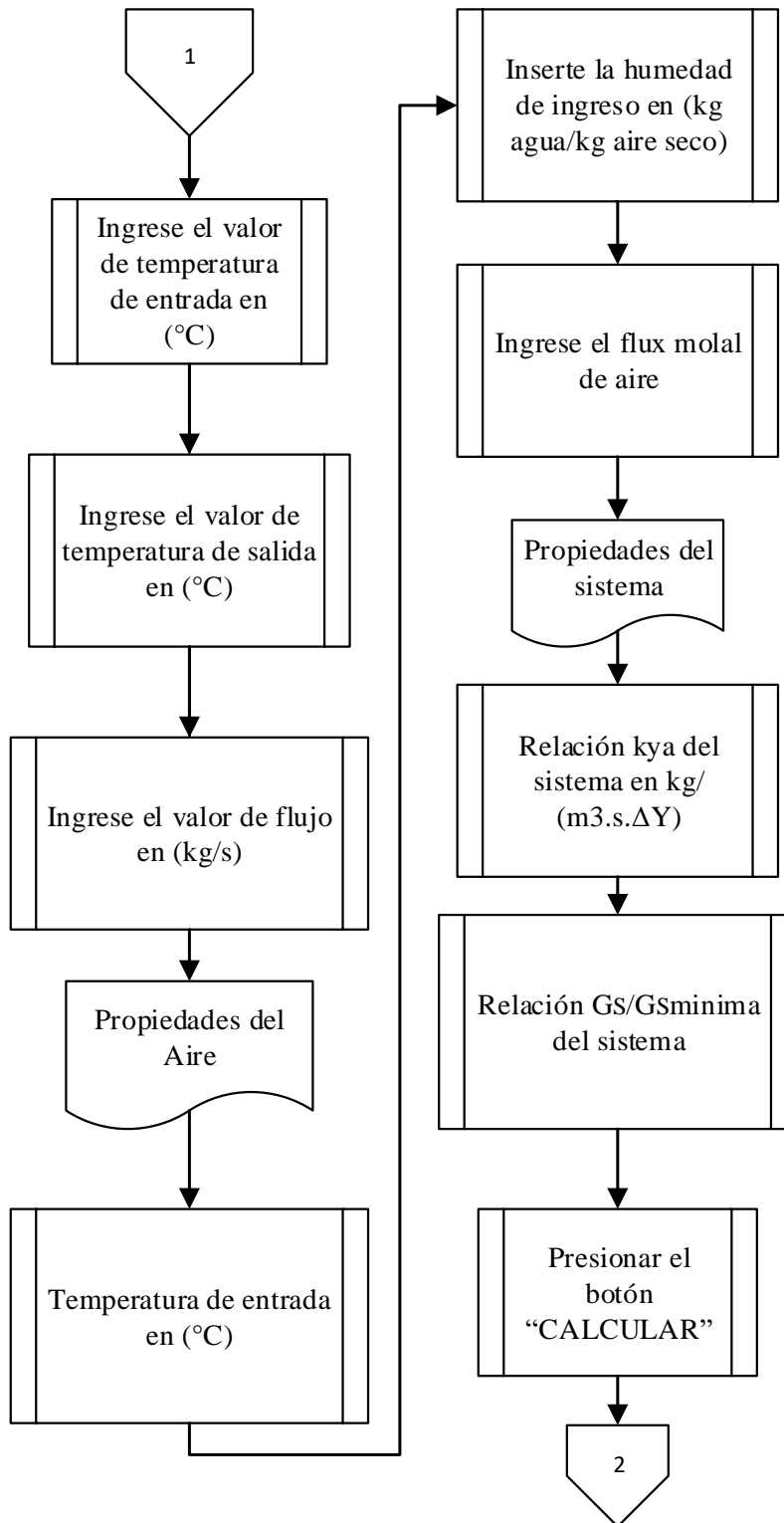
Tabla 3.13: Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 007.

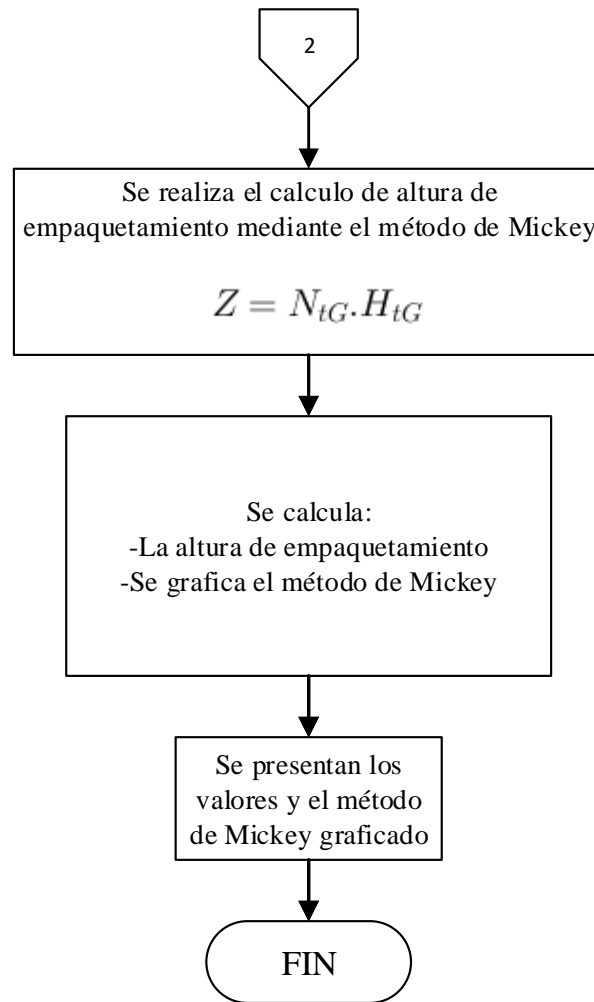
VARIABLE	DESCRIPCIÓN
Z	Altura de torre (m)
N_{tG}	Número de unidades de transferencia del gas
H_{tG}	Altura de una unidad de transferencia de gas (m)
k_{ya}	Coefficiente de capacidad individual de transferencia de masa en la fase gaseosa $kg/m^3 \cdot s(AY)$
$G' s/Gs \text{ mínima}$	Razón mínima de transferencia de masa
H^*	Valores de entalpía de la curva de equilibrio (J/kg)
\hat{H}	Valores de entalpía de la curva de operación (J/kg)
T_L	Valores de temperatura del líquido ($^{\circ} C$)

b) Metodología utilizada para el cálculo de altura de empaquetamiento de una torre de humidificación:

Figura 85: Diagrama de flujo para el cálculo de altura de empaquetamiento de una torre de humidificación.







c) Prueba de cálculo:

Ejemplo de cálculo tomado del libro: Treybal, R. E. (1986). Operaciones de transferencia de masa (2a ed.). México D. F. (Ejemplo 7.11, Capítulo 7, p. 278).

Una plata requiere 15 kg/s de agua refrigerante fluya a través del equipo de condensación para la destilación. El agua sale de los condensadores a 45 °C, para volver a utilizar el agua se plantea enfriarla mediante contacto con el aire en una torre de enfriamiento de tiro inducido. Las condiciones del diseño son: aire entrante a 30 °C temperatura de bulbo seco, 24 °C temperatura de bulbo húmedo del aire entrante, ósea, a 29 °C; una relación de aire/vapor de agua de 1.5 veces el mínimo. El agua de compensación va a entrar de una represa a 10 °C. respecto al empaque que se va a utilizar, se espera que K_{ya} sea de 0.90

$\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}(\Delta Y)$, para una rapidez del líquido como mínimo de $2.7 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$ y una rapidez del gas de $2.0 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$. Calcular las dimensiones de la sección empacada.

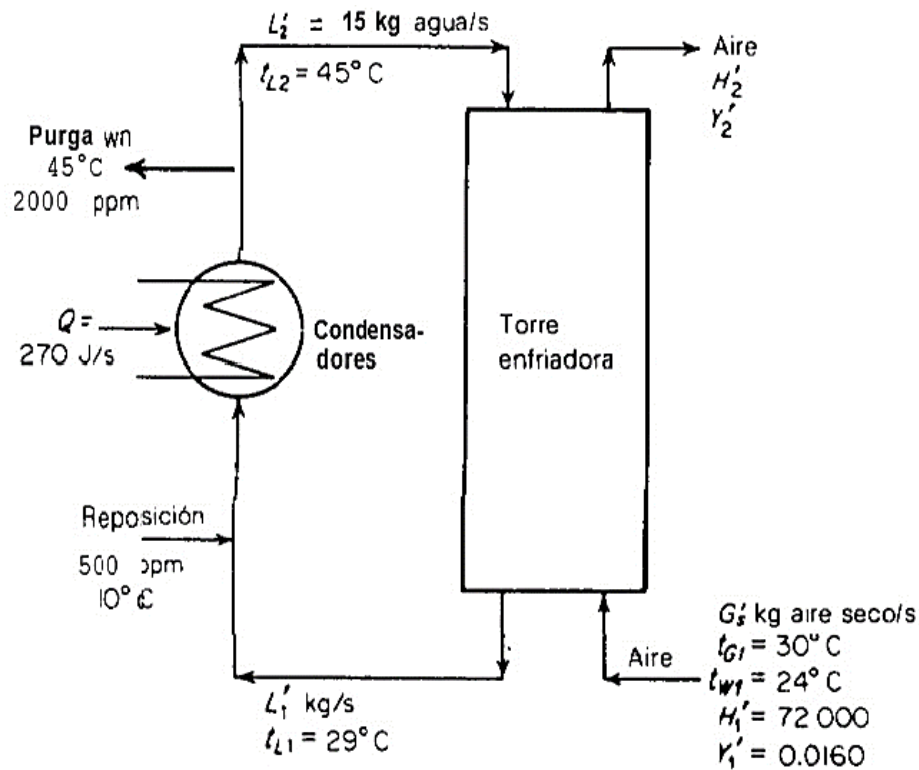


Figura 86: Figura ilustrativa del problema de cálculo 7.11. (Treybal, 1986).

$$Z = H_{tG} N_{tG}$$

$$Z = \frac{G'_S}{k_{ya}}$$

Para calcular G'_S se hace uso de las cartas psicométricas véase Anexo C, para el valor mínimo de G'_S la línea de operación tendrá la pendiente mínima que haga que toque la curva de equilibrio.

$$\frac{L'' C_{AL}}{G'_S \text{ minimo}} = \frac{15(4187)}{G'_S \text{ minimo}}$$

$$G'_S \text{ minimo} = 7.31 \text{ kg aire seco/s}$$

Tabla 3.14: Cuadro ilustrativo del problema de cálculo 7.11.

T_L °C	H^* curva de equilibrio (J/kg)	H' curva de operación (J/kg)	$\frac{10^5}{H^* - H'}$
29	100000	72000	3.571
32.5	114000	92000	4.545
35	129800	106500	4.292
37.5	147000	121000	3.846
40	166800	135500	3.195
42.5	191000	149500	2.410
45	216000	163500	1.905

Fuente: Treybal, 1986.

Los datos en las dos últimas columnas se grafican uno contra el otro, con H' como abscisa; y se calcula el valor del área bajo la curva.

$$\frac{k_{ya}Z}{Gs} = \int_{t_1}^{t_2} \frac{dt}{H^* - H'}$$

$$\frac{k_{ya}Z}{Gs} = 3.25$$

$$\frac{0.90 Z}{2.0} = 3.25$$

$$Z = 7.22 \text{ m}$$

d) Ejecución con el aplicativo 007:

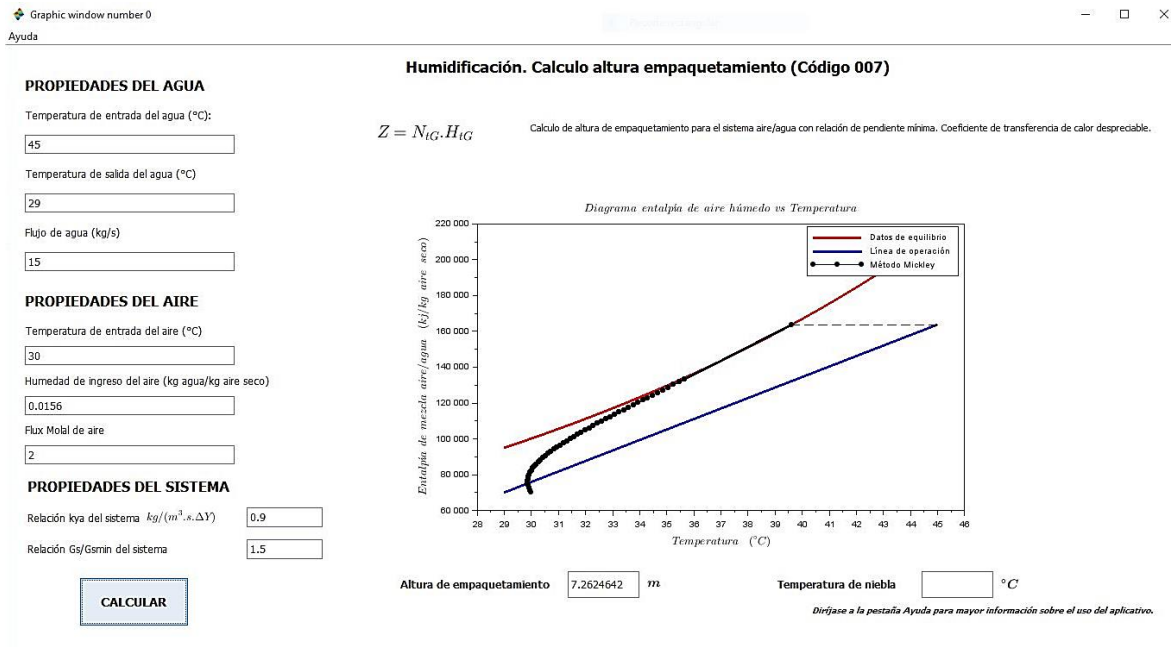


Figura 87: Simulación efectuada con el aplicativo 007.

e) Cuadro comparativo:

Tabla 3.15: Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 007.

VALIDACION DE DATOS	RESPUESTAS
Ejemplo de libro	7.22 m
Ejecución de aplicativo	7.2624642 m
% Error	0.584650 %

3.2.4 SIMULACIÓN OPERACIONES DE DESTILACIÓN.

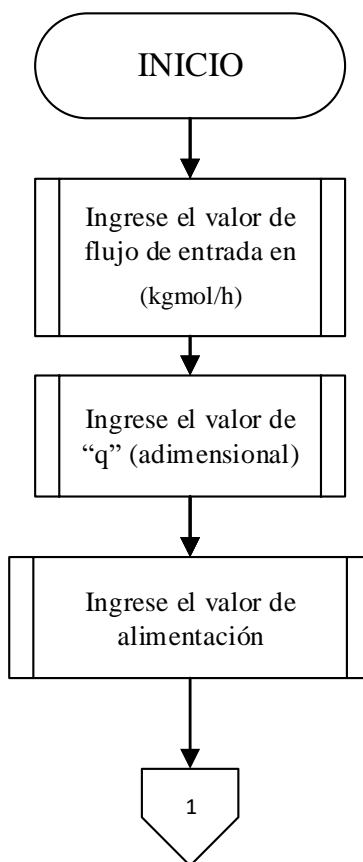
a) Descripción de variables utilizadas:

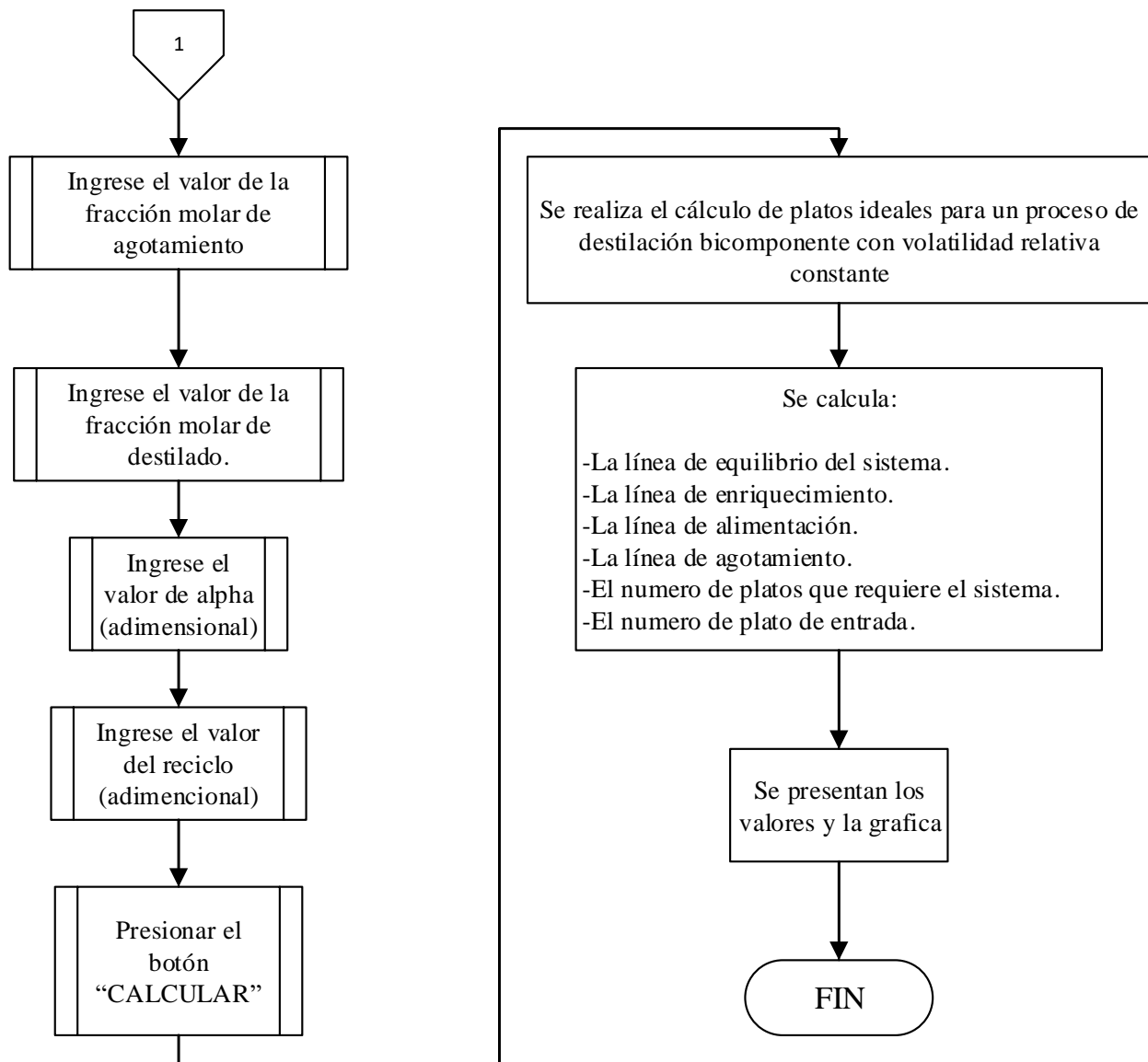
Tabla 3.16: Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 008.

VARIABLE	DESCRIPCIÓN
X_F	Concentración de alimentación.
X_D	Concentración de destilado.
X_B	Concentración de residuo.
λ	Calor latente de vaporización (cal/g)
q	Factor de la fracción de líquido de alimentación.

b) Metodología utilizada para el cálculo de platos para un proceso de destilación:

Figura 88: Diagrama de flujo para el cálculo de platos para un proceso de destilación.





c) Prueba de cálculo:

Ejemplo de cálculo tomado del libro: McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriott, P. (2007). Operaciones unitarias en ingeniería química (7a ed.). México D. F. (Ejemplo 21.2, Capítulo 2, p. 715)

Se va a diseñar una columna de fraccionamiento continuo para separar 30000 kg/h de una mezcla de 40% de benceno y 60% de tolueno en un producto destilado que contiene 97% de benceno y un producto residual de 98% de tolueno. Estos porcentajes están expresados en peso. Se utiliza una relación de reflujo de 3.5 moles por 1 mol de producto. Los calores latentes molares del benceno y del tolueno son 7360 y 7960 cal/gmol, respectivamente. El

benceno y el tolueno forman un sistema ideal con una volatilidad relativa del orden de 2.5. La alimentación tiene una temperatura de ebullición de 95°C a la presión de 1 atm. Determine el número de platos ideales y la posición del plato de alimentación.

Tomando como base el peso molecular del Benceno como 78 kg/kmol y el peso molecular del Tolueno como 92 kg/kmol; partimos para conocer las concentraciones de Alimentación (X_F), Destilado (X_D) y Residuo (X_B); así tenemos:

$$X_F = \frac{\frac{40\%}{78 \frac{\text{kg Benceno}}{\text{kmol}}}}{\frac{40\%}{78 \frac{\text{kg Benceno}}{\text{kmol}}} + \frac{60\%}{92 \frac{\text{kg Tolueno}}{\text{kmol}}}} = 0.440$$

$$X_D = \frac{\frac{97\%}{78 \frac{\text{kg Benceno}}{\text{kmol}}}}{\frac{97\%}{78 \frac{\text{kg Benceno}}{\text{kmol}}} + \frac{3\%}{92 \frac{\text{kg Tolueno}}{\text{kmol}}}} = 0.974$$

$$X_B = \frac{\frac{2\%}{78 \frac{\text{kg Benceno}}{\text{kmol}}}}{\frac{2\%}{78 \frac{\text{kg Benceno}}{\text{kmol}}} + \frac{98\%}{92 \frac{\text{kg Tolueno}}{\text{kmol}}}} = 0.0235$$

El primer paso consiste en representar en forma gráfica el diagrama de equilibrio y sobre él trazar verticales por X_D , X_F y X_B , prolongándolas hasta la diagonal del diagrama, tal como se representa en la figura 18.

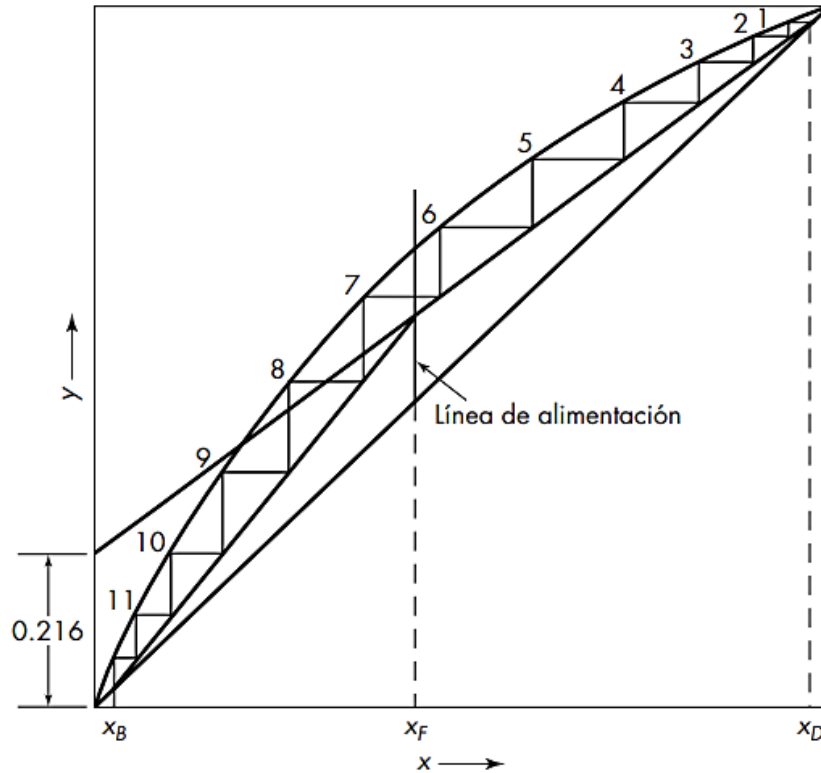


Figura 89: Figura ilustrativa del problema de cálculo 21.2. (McCabe et al, 2007).

El segundo paso consiste en trazar la línea de alimentación. En este caso $f = 0$ y la línea de alimentación es vertical y es una continuación de la línea $X = X_F$. El tercer paso es representar en forma gráfica las líneas de operación. La intersección de la línea de rectificación con el eje y , de acuerdo con la pendiente de rectificación $m = X_D/RD + 1$, es $0.974 / (3.5 + 1) = 0.216$. Este punto se conecta con el punto X_D en la línea de referencia YX . A partir de la intersección de esta línea de operación de la rectificación con la línea de alimentación se traza la línea de agotamiento.

El cuarto paso consiste en trazar los escalones (pasos) rectangulares entre las dos líneas de operación y la curva de equilibrio. Al trazar los pasos, el traslado de la línea de rectificación a la línea de agotamiento se produce en el escalón (paso) número siete. Continuando el trazado e escalones se encuentra que, además del hervidor, se necesitan 11 platos ideales y que la alimentación deberá introducirse en el séptimo plato contando desde la parte superior.

El calor latente de vaporización de la alimentación λ es $7\ 696 / 858.8 = 89.7$ cal/g. Sustituyendo en la ecuación tenemos:

$$q = 1 + \frac{C_{pL}(T_b - T_f)}{\lambda} = 1 + \frac{0.44 \frac{\text{cal}}{\text{°C}} (95 \text{ °C} - 20 \text{ °C})}{89.7 \text{ cal}} = 1.37$$

A partir de la ecuación de la pendiente de la línea de alimentación $-q / 1 - q$ es $-1.37 / (1 - 1.37) = 3.70$. Al trazar los escalones para este caso, tal como se muestra en la figura 90, se encuentra que se requieren un hervidor y 11 platos ideales, y que la alimentación deberá introducirse en el sexto plato.

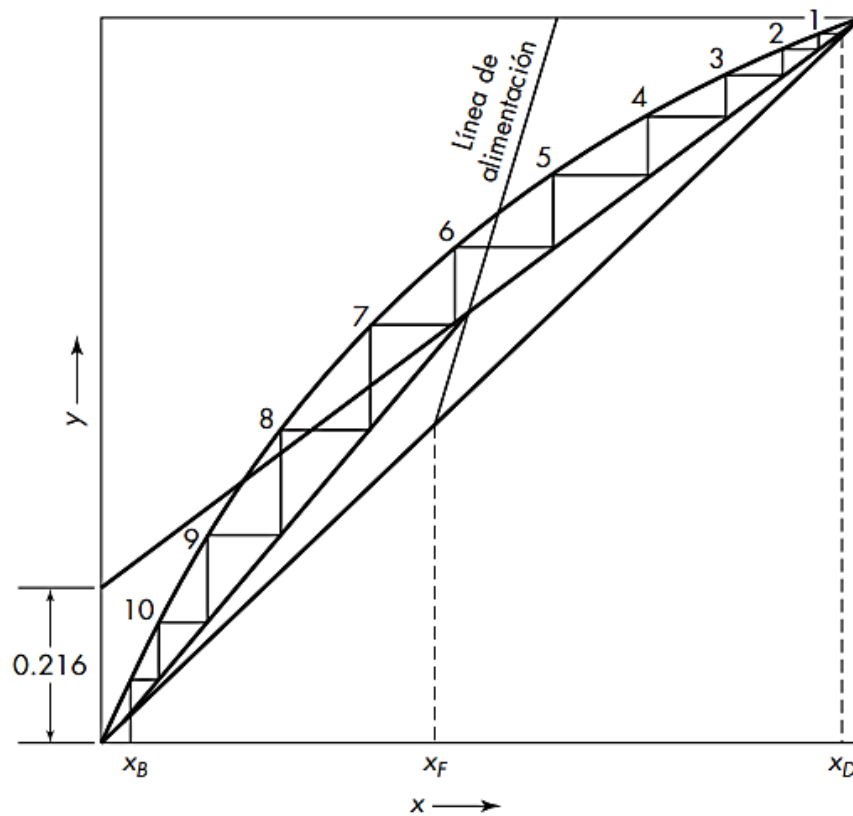


Figura 90: Figura ilustrativa del problema de cálculo 21.2. (McCabe et al, 2007).

d) Ejecución con el aplicativo 008:

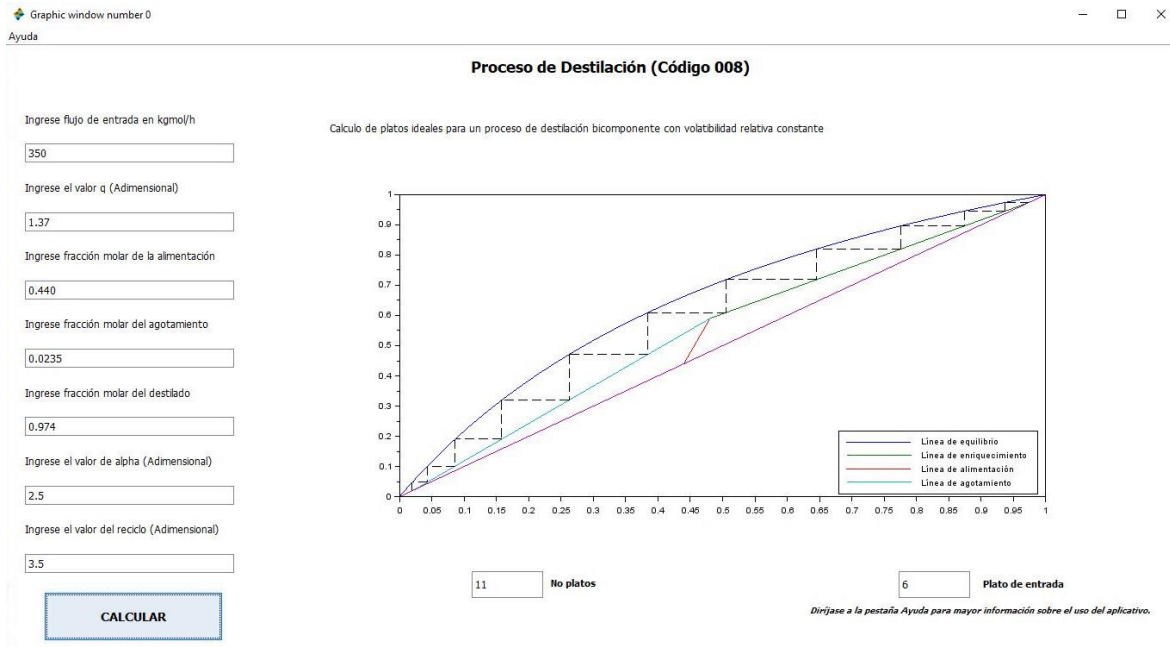


Figura 91: Simulación efectuada con el aplicativo 008.

e) Cuadro comparativo:

Tabla 3.17: Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 008.

VALIDACION DE DATOS	RESPUESTAS
Ejemplo de libro	11 platos
Ejecución de aplicativo	11 platos
% Error	0%

3.3 SIMULACIÓN OPERACIONES SÓLIDO-FLUIDO.

3.3.1 SIMULACIÓN OPERACIONES DE SECADO.

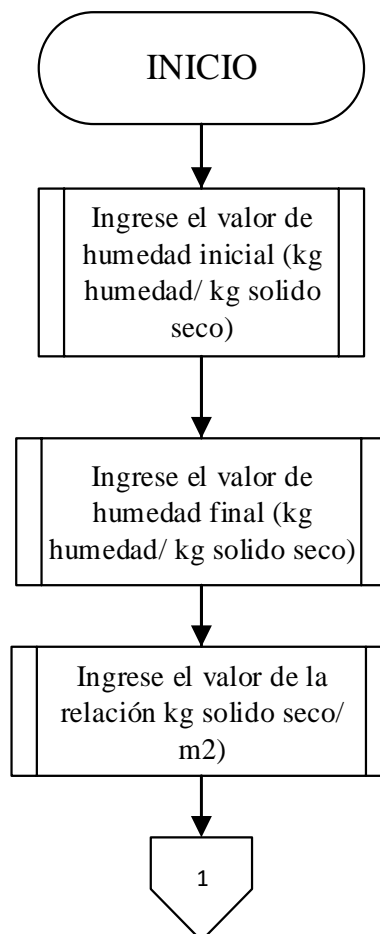
a) Descripción de variables utilizadas:

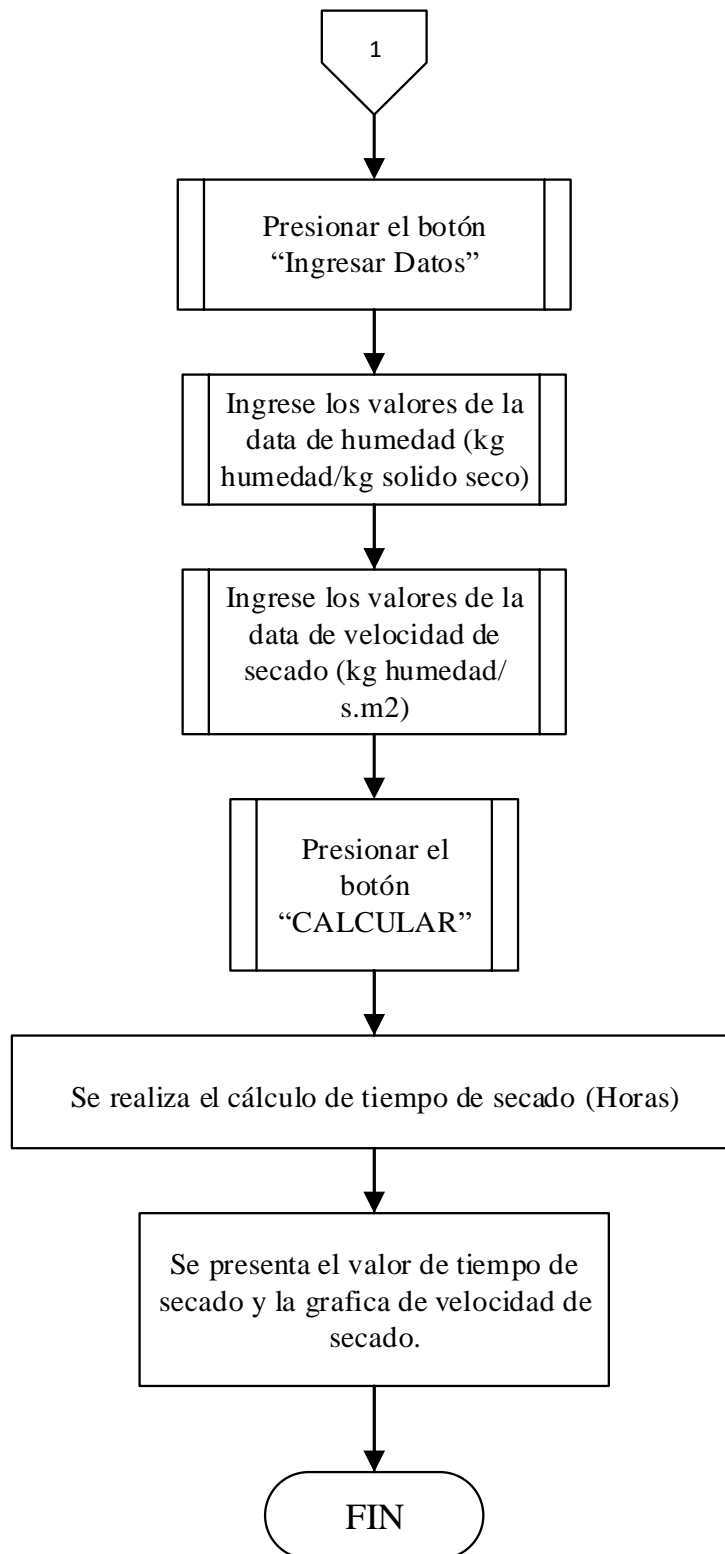
Tabla 3.18: Descripción de variables utilizadas en el aplicativo 009.

VARIABLE	DESCRIPCIÓN
x	Humedad (kg de humedad/kg de solido seco)
N	Velocidad de secado (kg de humedad/ s.m ²)
θ	Tiempo de secado (Horas)

b) Metodología utilizada para el cálculo de tiempo de secado:

Figura 92: Diagrama de flujo para el cálculo de tiempo de secado.





c) Prueba de cálculo:

Ejemplo de cálculo tomado del libro: Treybal, R. E. (1986). Operaciones de transferencia de masa (2a ed.). México D. F. (Ejemplo 12.3, Capítulo 12, p. 741).

Un lote de solido se va a secar de 25 a 6% de humedad en condiciones constantes. El peso inicial del solido húmedo es de 160 kg la superficie que se va a secar es 1 m²/40 kg. Calcular el tiempo para el secado.

Tomando que a 25% de Humedad:

$$X_1 = \frac{0.25}{1 - 0.25} = 0.333 \frac{\text{kg Humedad}}{\text{kg Solido Seco}}$$

Podemos observar según la figura 22. Que se toma en cuenta para el cálculo del tiempo de secado el período de rapidez constante y el decreciente.

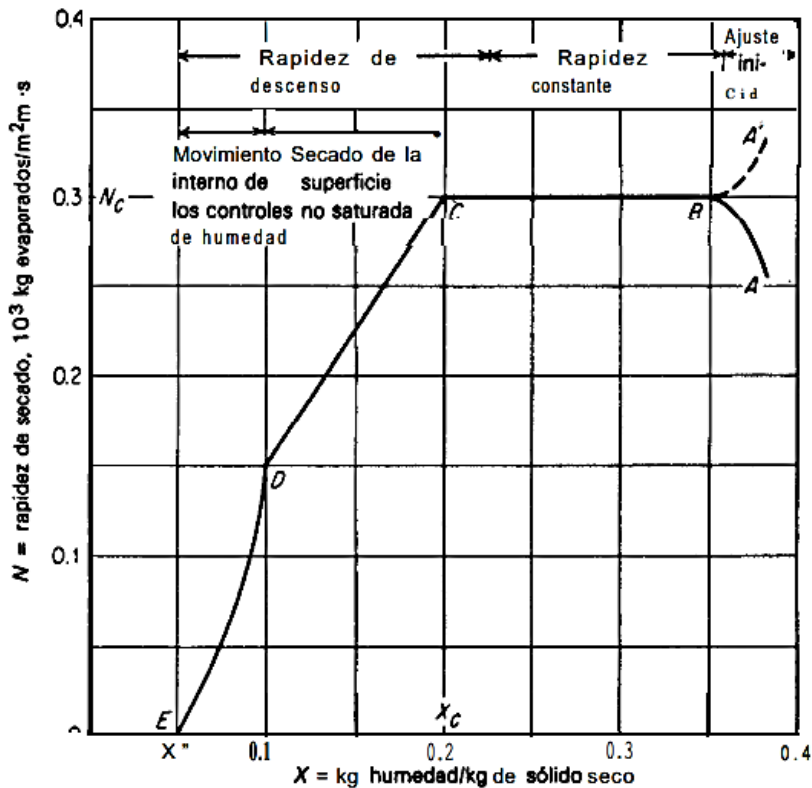


Figura 93: Figura ilustrativa de una Curva típica de rapidez de secado. Condiciones de secado constantes. (Treybal, 1986).

Los límites respectivamente quedan de la siguiente manera:

De $X_1=0.333$ a $X_C= 0.200$. Período Constante.

$$\theta_1 = \frac{Ss(X_1 - X_C)}{A Nc} = \frac{40 \text{ kg}(0.333 - 0.200)}{1 \text{ m}^2(0.30 * 10^{-3} \text{ kg} * \text{s}/\text{m}^2)} = 17,730 \text{ s}$$

De $X_C=0.200$ a $X_2=0.064$. Período Decreciente.

A partir de la tabla 3.19, tenemos los valores de X y N, para poder calcular $1/N$.

Tabla 3.19: Cuadro ilustrativo del problema de cálculo 12.3.

X	0.20	0.18	0.16	0.14	0.12	0.10	0.09	0.08	0.07	0.064
10^3 N	0.300	0.266	0.239	0.208	0.180	0.150	0.097	0.070	0.043	0.025
$1/N * 10^{-3}$	3.33	3.76	4.18	4.80	5.55	6.67	10.3	14.3	23.3	40.0

Fuente: Treybal, 1986.

Se grafica de la siguiente manera:

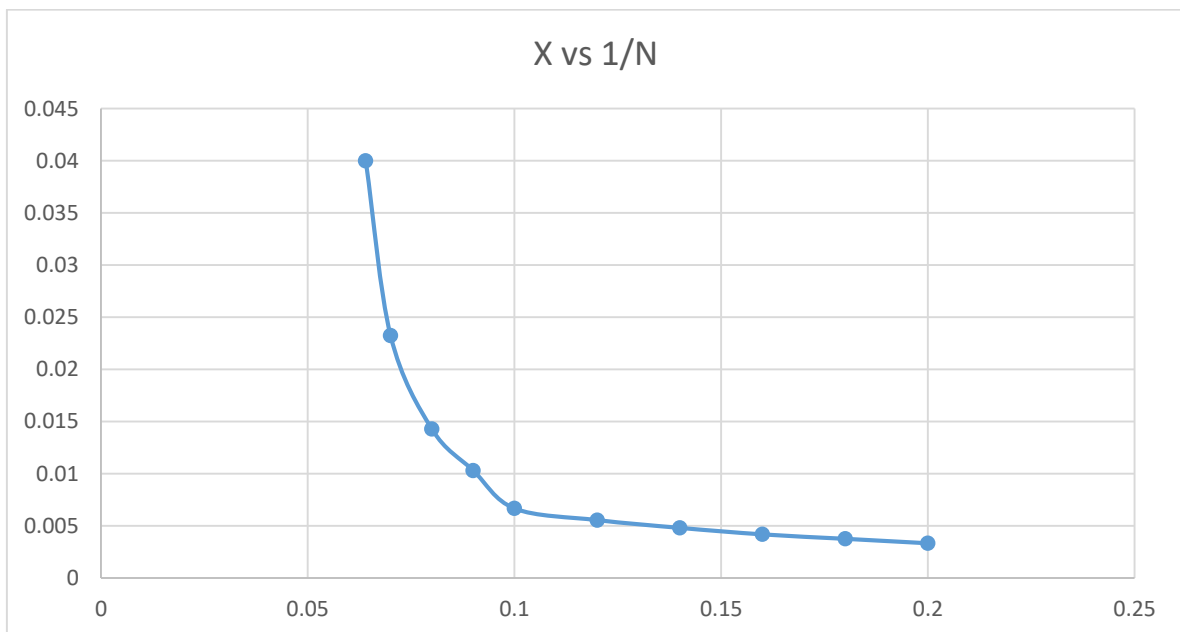


Figura 94: Figura ilustrativa del problema de cálculo 12.3, Grafica X1. Relación de X vs $1/N$.

Se calcula el área bajo la curva de la figura 23 y obtenemos el resultado de 1,060; luego calculamos el tiempo de la parte decreciente:

$$\theta_2 = 40(1060) = 42,400 \text{ s}$$

El tiempo de secado es:

$$\theta = \theta_1 + \theta_2 = 17,730 \text{ s} + 42,400 \text{ s} = 60,130 \text{ s} = 16.7 \text{ h}$$

d) Ejecución con el aplicativo 009:

Graphic window number 0

Ayuda

Determinación de tiempo de secado (Código 009)

Ingrese humedad inicial en *kg humedad/kg sólido seco*

Ingrese humedad final en *kg humedad/kg sólido seco*

Ingrese relación *kg sólido seco/m³*

$$\theta = \frac{S_s}{A} \int_{X_1}^{X_2} \frac{dX}{N}$$

Cálculo de tiempo de secado entre dos condiciones de humedad.

Ingresar Datos

CALCULAR

Respuesta: h

Diríjase a la pestaña Ayuda para mayor información sobre el uso del aplicativo.

Figura 95: Simulación efectuada con el aplicativo 009.

Determinación de tiempo de secado (Código 009)

Ingrese humedad inicial en *kg humedad/kg sólido*

Ingrese humedad final en *kg humedad/kg sólido*

Ingrese relación *kg sólido seco/m²*

Scilab Multiple Values Request

Ingrese la data de humedad

kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text"/>

Respuesta: h

Diríjase a la pestaña Ayuda para mayor información sobre el uso del aplicativo.

Figura 96: Simulación efectuada con el aplicativo 009.

Determinación de tiempo de secado (Código 009)

Ingrese humedad inicial en *kg humedad/kg sólido*

Ingrese humedad final en *kg humedad/kg sólido*

Ingrese relación *kg sólido seco/m²*

Scilab Multiple Values Request

Ingrese la data de humedad

kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.35"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.30"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.20"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.18"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.16"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.14"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.12"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.10"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.09"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.08"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.07"/>
kg humedad/kg sólido seco	<input type="text" value="0.064"/>

Respuesta: h

Diríjase a la pestaña Ayuda para mayor información sobre el uso del aplicativo.

Figura 97: Simulación efectuada con el aplicativo 009.

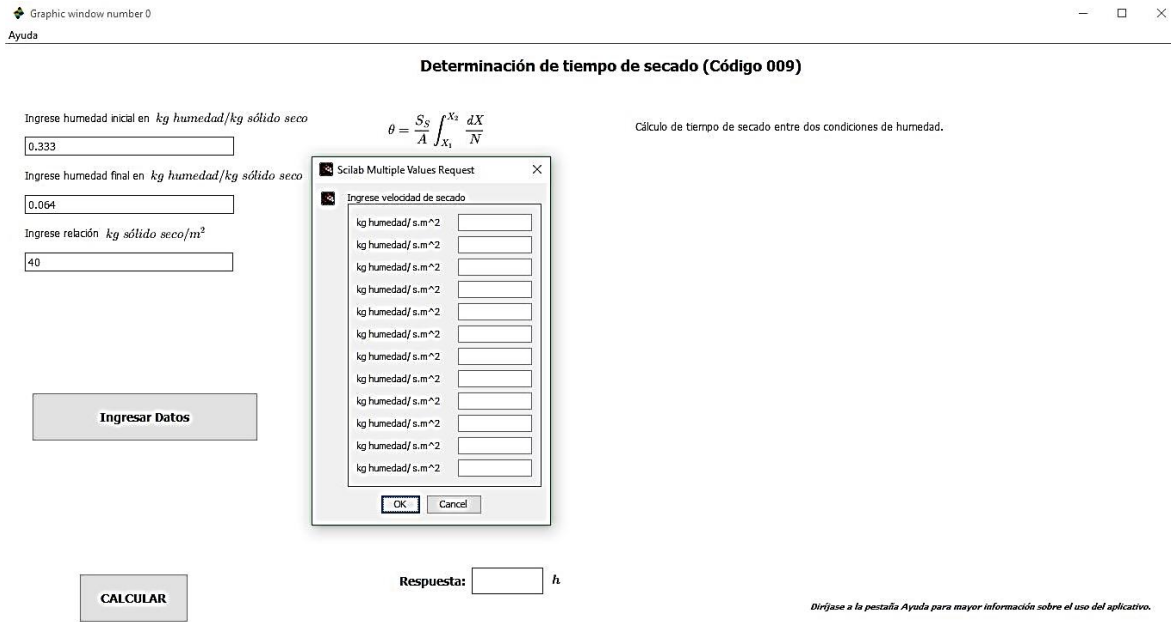


Figura 98: Simulación efectuada con el aplicativo 009.

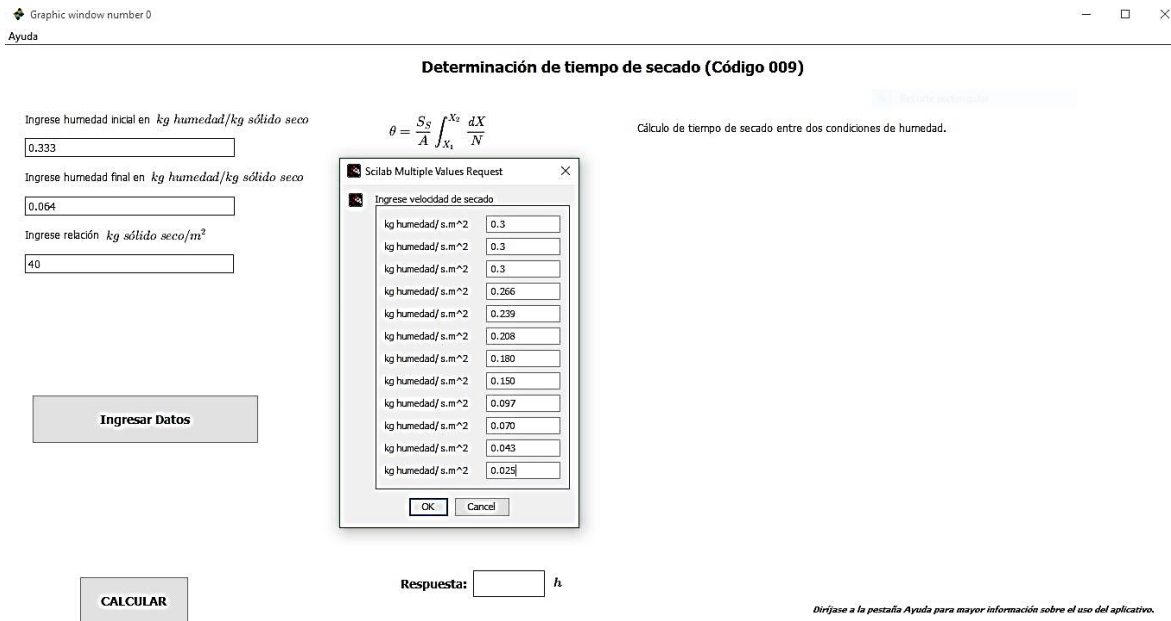


Figura 99: Simulación efectuada con el aplicativo 009.

Determinación de tiempo de secado (Código 009)

Ingrese humedad inicial en *kg humedad/kg sólido seco*

Ingrese humedad final en *kg humedad/kg sólido seco*

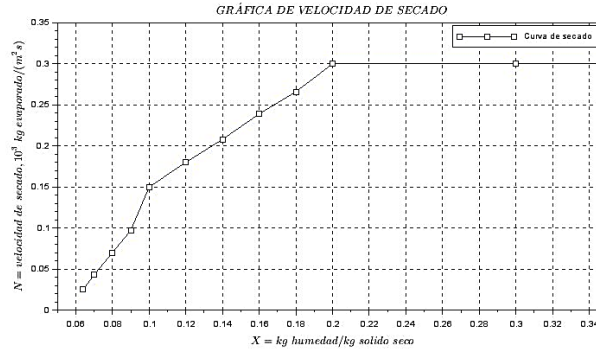
Ingrese relación *kg sólido seco/m²*

Ingresar Datos

CALCULAR

$$\theta = \frac{S_S}{A} \int_{X_1}^{X_2} \frac{dX}{N}$$

Cálculo de tiempo de secado entre dos condiciones de humedad.



Respuesta: h

Diríjase a la pestaña Ayuda para mayor información sobre el uso del aplicativo.

Figura 100: Simulación efectuada con el aplicativo 009.

e) Cuadro comparativo:

Tabla 3.20: Cuadro comparativo para la verificación del aplicativo 009.

VALIDACION DE DATOS	RESPUESTAS
Ejemplo de libro	16.7 Horas
Ejecución de aplicativo	16.608867 Horas
% Error	0.5491%

CONCLUSIONES

- I. La simulación de procesos como aplicación en Ingeniería Química, resulta ser una importante herramienta complementaria en la comprensión, de los temas impartidos dentro de la cátedra de Operaciones Unitarias III, impartida en la carrera de Ingeniería Química de la Universidad de El Salvador, así como también en proyectos de investigación, proceso de enseñanza aprendizaje, etc.
- II. El uso de Scilab como herramienta de recurso didáctico permite abarcar temáticas complejas y extensas, mediante una comprensión del fenómeno en estudio, simulando diversas condiciones y casos que puedan presentarse, que por razones de tiempo en muchas ocasiones no es posible lograrlo en la forma tradicional del aprendizaje, siendo además una forma de motivación hacia la investigación.
- III. La metodología del aprendizaje basado en problemas permite desarrollar habilidades y destrezas de análisis en el estudiante y un trabajo en equipo junto con el docente guiador, comparado con la metodología tradicional basada sólo en la teoría.
- IV. La comprensión de un fenómeno o proceso, mediante una construcción estructurada del mismo, permite la comprensión y aplicación de la teoría en casos particulares y experiencias de campo que puedan presentarse en nuestro desenvolvimiento profesional.
- V. Tomando en cuenta todas las experiencias, se desarrolló un manual que permite a los estudiantes de Ingeniería Química una aproximación simple y efectiva a la simulación de procesos industriales relacionados con la asignatura de Operaciones Unitarias III, impartida en la carrera de Ingeniería Química de la Universidad de El Salvador en el software de código libre Scilab.

RECOMENDACIONES

- I. Hacer uso de la herramienta de interfaz para la resolución de problemas relacionados al modelado de procesos de transferencia de masa en estado inestable, con esto poder ampliar los conocimientos impartidos en la cátedra de Operaciones Unitarias III, de la carrera de Ingeniería Química en la Universidad de El Salvador y lograr beneficiar una mejor comprensión de los fenómenos antes mencionados.

- II. Hacer uso de todos los paquetes programables que se encuentran inmersos en la herramienta de computación numérica Scilab como lo es Xcos; con esto logrando un completo dominio de los procesos de simulación con bloques gráficos facilitando el desarrollo por programación convencional en Scilab, beneficiando a los futuros estudiantes que deberán aplicar su conocimiento en su entorno laboral y abarcar temáticas más complejas que no pudieron ser abordados en este trabajo de graduación.

- III. Fomentar el uso y la investigación de entornos de simulación para el desarrollo de otras opciones de código abierto para la resolución de problemas de injerencia del ingeniero químico y así impulsar el código libre dentro de la comunidad estudiantil de la Escuela de Ingeniería química e Ingeniería de Alimentos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Carlson, Eric C., “Don’t Gamble With Physical Properties For Simulations”, (octubre, 1996), Chemical Engineering Progress.
- Coulson, J. M., y Richardson, J. F. (2003). Ingeniería Química: operaciones básicas (unidades SI) (3° edición). Barcelona: Editorial Reverté, S.A.
- Felder Richard M., Rousseau Ronald W. (2004). Principios Elementales de los Procesos Químicos (3a ed.). México D.F., México: Limusa Wiley
- Foust, A. S., Wenzel, L. A., Clump, C. W., Maus, L., y Andersen, L. B. (2006). Principios de Operaciones Unitarias (2a ed.). México, México D. F.: Compañía Editorial Continental.
- Geankoplis, C. J. (1998). Procesos de transporte y operaciones unitarias (3a ed.). México: Compañía Editorial Continental.
- Gil, I. D., Guevara, J. R., García, J. L., Leguizamón, A. & Rodríguez, G. (2016). Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering. ISBN 978-3-31914812-0.
- Glasscock, David, “Process Simulation: The Art and Science of Modeling”, (noviembre, 1994), Chemical Engineering.
- Martínez Sifuentes, Victor Hugo, y col “Simulación de Procesos en Ingeniería Química” (2000); Plaza y Valdés Editores, México, Tamaulipas.
- McCabe, W. L., Smith, J. C., y Harriott, P. (2007). Operaciones unitarias en ingeniería química (7a ed.). México D. F., México: McGraw-Hill/Interamericana Editores.

- Scenna, J. Nicolás. “Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos”, (1999), 2ª edición, Editorial de la Universidad Tecnológica Nacional, Buenos Aires Argentina.
- Scenna, N. J. y col. (1999). Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos. ISBN: 950-42-0022-2.
- Scilab Enterprises. (2015). Scilab (Versión 5.5.2) [Software]. Recuperado a partir de <http://www.scilab.org/download/latest>.
- Scilab.org. (2016). CAPE-OPEN to CAPE-OPEN simulator. Recuperado el 25 de Julio de 2018, de <http://www.scilab.org/index.html>.
- SciPy developers. (2016). NumPy Reference. Recuperado el 25 de Julio de 2018, de <https://docs.scipy.org/doc/numPy/reference/?v=20161029141446>.
- Scodelaro, F. (2012). 10 Aplicaciones gratuitas (y legales) para Ingeniería Química. Recuperado de <http://www.ingenieriaquimica.org/software/10aplicaciones-gratuitas>.
- Soni, A. (2008). An analysis of scientific computing environments: a consumer’s view (Tesis inédita de maestría en Ciencias de la Computación para el Diseño y la Optimización). Massachussets Institute of Technology, United States of America.
- Treybal, R. E. (1986). Operaciones de transferencia de masa (2a ed.). México D. F., México: McGraw-Hill de México.
- Universidad de El Salvador. (1998). Plan de Estudio de 1998 Carrera de Ingeniería Química. San Salvador, El Salvador.
- Welty, J. R., Wicks, C. E., y Wilson, R. E. (2008). Fundamentos de Transferencia de Momento, Calor y Masa (2a ed.). México D. F., México: Limusa.

ANEXO A: CONSTANTES DE LENNARD – JONES.

Tabla A-1: Extraído del apéndice K.1, Operaciones Unitarias en Ingeniería Química. México D. F., año 2007.

The collision integrals, Ω_μ and Ω_D based on the Lennard–Jones potential¹

$\kappa T/\epsilon$	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (for viscosity and thermal conductivity)	Ω_D (for mass diffusivity)	kT/ϵ	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (for viscosity and thermal conductivity)	Ω_D (for mass diffusivity)
			1.75	1.234	1.128
0.30	2.785	2.662	1.80	1.221	1.116
0.35	2.628	2.476	1.85	1.209	1.105
0.40	2.492	2.318	1.90	1.197	1.094
0.45	2.368	2.184	1.95	1.186	1.084
0.50	2.257	2.066	2.00	1.175	1.075
0.55	2.156	1.966	2.10	1.156	1.057
0.60	2.065	1.877	2.20	1.138	1.041
0.65	1.982	1.798	2.30	1.122	1.026
0.70	1.908	1.729	2.40	1.107	1.012
0.75	1.841	1.667	2.50	1.093	0.9996
0.80	1.780	1.612	2.60	1.081	0.9878
0.85	1.725	1.562	2.70	1.069	0.9770
0.90	1.675	1.517	2.80	1.058	0.9672
0.95	1.629	1.476	2.90	1.048	0.9576
1.00	1.587	1.439	3.00	1.039	0.9490
1.05	1.549	1.406	3.10	1.030	0.9406
1.10	1.514	1.375	3.20	1.022	0.9328
1.15	1.482	1.346	3.30	1.014	0.9256
1.20	1.452	1.320	3.40	1.007	0.9186
1.25	1.424	1.296	3.50	0.9999	0.9120
1.30	1.399	1.273	3.60	0.9932	0.9058
1.35	1.375	1.253	3.70	0.9870	0.8998
1.40	1.353	1.233	3.80	0.9811	0.8942
1.45	1.333	1.215	3.90	0.9755	0.8888
1.50	1.314	1.198	4.00	0.9700	0.8836
1.55	1.296	1.182	4.10	0.9649	0.8788
1.60	1.279	1.167	4.20	0.9600	0.8740
1.65	1.264	1.153	4.30	0.9553	0.8694

(continued)

(continued)

$\kappa T / \epsilon$	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (for viscosity and thermal conductivity)	Ω_D (for mass diffusivity)	kT / ϵ	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (for viscosity and thermal conductivity)	Ω_D (for mass diffusivity)
1.70	1.248	1.140	4.40	0.9507	0.8652
4.50	0.9464	0.8610	10.0	0.8242	0.7424
4.60	0.9422	0.8568	20.0	0.7432	0.6640
4.70	0.9382	0.8530	30.0	0.7005	0.6232
4.80	0.9343	0.8492	40.0	0.6718	0.5960
4.90	0.9305	0.8456	50.0	0.6504	0.5756
5.0	0.9269	0.8422	60.0	0.6335	0.5596
6.0	0.8963	0.8124	70.0	0.6194	0.5464
7.0	0.8727	0.7896	80.0	0.6076	0.5352
8.0	0.8538	0.7712	90.0	0.5973	0.5256

Tabla A-2: Extraído del apéndice K.2, Operaciones Unitarias en Ingeniería Química. México D. F., año 2007.

Lennard–Jones force constants calculated from viscosity data [†]			
Compound	Formula	ϵ_A/κ , in (K)	σ , in Å
Acetylene	C ₂ H ₂	185	4.221
Air		97	3.617
Argon	A	124	3.418
Arsine	AsH ₃	281	4.06
Benzene	C ₆ H ₆	440	5.270
Bromine	Br ₂	520	4.268
<i>i</i> -Butane	C ₄ H ₁₀	313	5.341
<i>n</i> -Butane	C ₄ H ₁₀	410	4.997
Carbon dioxide	CO ₂	190	3.996
Carbon disulfide	CS ₂	488	4.438
Carbon monoxide	CO	110	3.590
Carbon tetrachloride	CCl ₄	327	5.881
Carbonyl sulfide	COS	335	4.13
Chlorine	Cl ₂	357	4.115
Chloroform	CHCl ₃	327	5.430
Cyanogen	C ₂ N ₂	339	4.38
Cyclohexane	C ₆ H ₁₂	324	6.093
Ethane	C ₂ H ₆	230	4.418
Ethanol	C ₂ H ₅ OH	391	4.455
Ethylene	C ₂ H ₄	205	4.232
Fluorine	F ₂	112	3.653
Helium	He	10.22	2.576
<i>n</i> -Heptane	C ₇ H ₁₆	282 [‡]	8.88 ³
<i>n</i> -Hexane	C ₆ H ₁₄	413	5.909
Hydrogen	H ₂	33.3	2.968
Hydrogen chloride	HCl	360	3.305

[†] R. C. Reid and T. K. Sherwood, *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill, New York, 1958.

[‡] Calculated from virial coefficients.¹

(continued)

Compound	Formula	ϵ_A/k , in (K)	σ , in Å
Hydrogen iodide	HI	324	4.123
Iodine	I ₂	550	4.982
Krypton	Kr	190	3.60
Methane	CH ₄	136.5	3.822
Methanol	CH ₃ OH	507	3.585
Methylene chloride	CH ₂ Cl ₂	406	4.759
Methyl chloride	CH ₃ Cl	855	3.375
Mercuric iodide	HgI ₂	691	5.625
Mercury	Hg	851	2.898
Neon	Ne	35.7	2.789
Nitric oxide	NO	119	3.470
Nitrogen	N ₂	91.5	3.681
Nitrous oxide	N ₂ O	220	3.879
<i>n</i> -Nonane	C ₉ H ₂₀	240	8.448
<i>n</i> -Octane	C ₈ H ₁₈	320	7.451
Oxygen	O ₂	113	3.433
<i>n</i> -Pentane	C ₅ H ₁₂	345	5.769
Propane	C ₃ H ₈	254	5.061
Silane	SiH ₄	207.6	4.08
Silicon tetrachloride	SiCl ₄	358	5.08
Sulfur dioxide	SO ₂	252	4.290
Water	H ₂ O	356	2.649
Xenon	Xe	229	4.055

ANEXO B: COEFICIENTES DE DIFUSIÓN DE TRANSFERENCIA DE MASA EN SISTEMAS BINARIOS.

Tabla B-1: Extraído del apéndice J.1, Operaciones Unitarias en Ingeniería Química. México D. F., año 2007.

Binary mass diffusivities in gases ¹			
System	T (K)	$D_{AB}P$ (cm ² atm/s)	$D_{AB}P$ (m ² Pa/s)
Air			
Ammonia	273	0.198	2.006
Aniline	298	0.0726	0.735
Benzene	298	0.0962	0.974
Bromine	293	0.091	0.923
Carbon dioxide	273	0.136	1.378
Carbon disulfide	273	0.0883	0.894
Chlorine	273	0.124	1.256
Diphenyl	491	0.160	1.621
Ethyl acetate	273	0.0709	0.718
Ethanol	298	0.132	1.337
Ethyl ether	293	0.0896	0.908
Iodine	298	0.0834	0.845
Methanol	298	0.162	1.641
Mercury	614	0.473	4.791
Naphthalene	298	0.0611	0.619
Nitrobenzene	298	0.0868	0.879
<i>n</i> -Octane	298	0.0602	0.610
Oxygen	273	0.175	1.773
Propyl acetate	315	0.092	0.932
Sulfur dioxide	273	0.122	1.236
Toluene	298	0.0844	0.855
Water	298	0.260	2.634
Ammonia			
Ethylene	293	0.177	1.793
Argon			
Neon	293	0.329	3.333
Carbon dioxide			
Benzene	318	0.0715	0.724
Carbon disulfide	318	0.0715	0.724
Ethyl acetate	319	0.0666	0.675

(continued)

(Continued)

System	T (K)	$D_{AB}P$ (cm ² atm/s)	$D_{AB}P$ (m ² Pa/s)
Ethanol	273	0.0693	0.702
Ethyl ether	273	0.0541	0.548
Hydrogen	273	0.550	5.572
Methane	273	0.153	1.550
Methanol	298.6	0.105	1.064
Nitrogen	298	0.165	1.672
Nitrous oxide	298	0.117	1.185
Propane	298	0.0863	0.874
Water	298	0.164	1.661
Carbon monoxide			
Ethylene	273	0.151	1.530
Hydrogen	273	0.651	6.595
Nitrogen	288	0.192	1.945
Oxygen	273	0.185	1.874
Helium			
Argon	273	0.641	6.493
Benzene	298	0.384	3.890
Ethanol	298	0.494	5.004
Hydrogen	293	1.64	16.613
Neon	293	1.23	12.460
Water	298	0.908	9.198
Hydrogen			
Ammonia	293	0.849	8.600
Argon	293	0.770	7.800
Benzene	273	0.317	3.211
Ethane	273	0.439	4.447
Methane	273	0.625	6.331
Oxygen	273	0.697	7.061
Water	293	0.850	8.611
Nitrogen			
Ammonia	293	0.241	2.441
Ethylene	298	0.163	1.651
Hydrogen	288	0.743	7.527
Iodine	273	0.070	0.709
Oxygen	273	0.181	1.834
Oxygen			
Ammonia	293	0.253	2.563
Benzene	296	0.0939	0.951
Ethylene	293	0.182	1.844

¹R. C. Reid and T. K. Sherwood, *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill, New York, 1958, Chapter. 8.

ANEXO C: CARTAS PSICOMÉTRICAS.

Figura C-1: Extraído del capítulo 8.4, Principios Elementales de los Procesos Químicos. México D.F., año 2004.

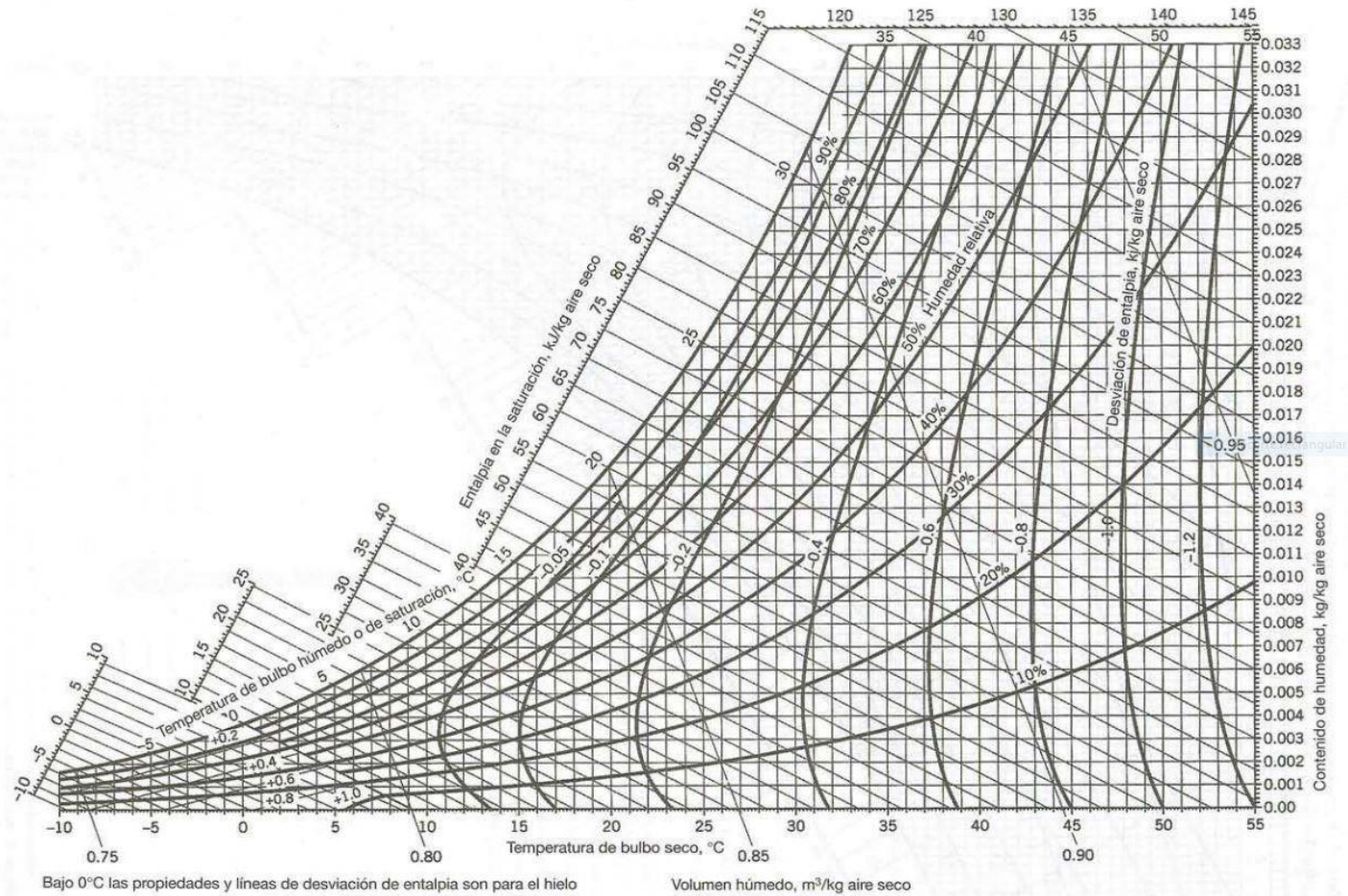
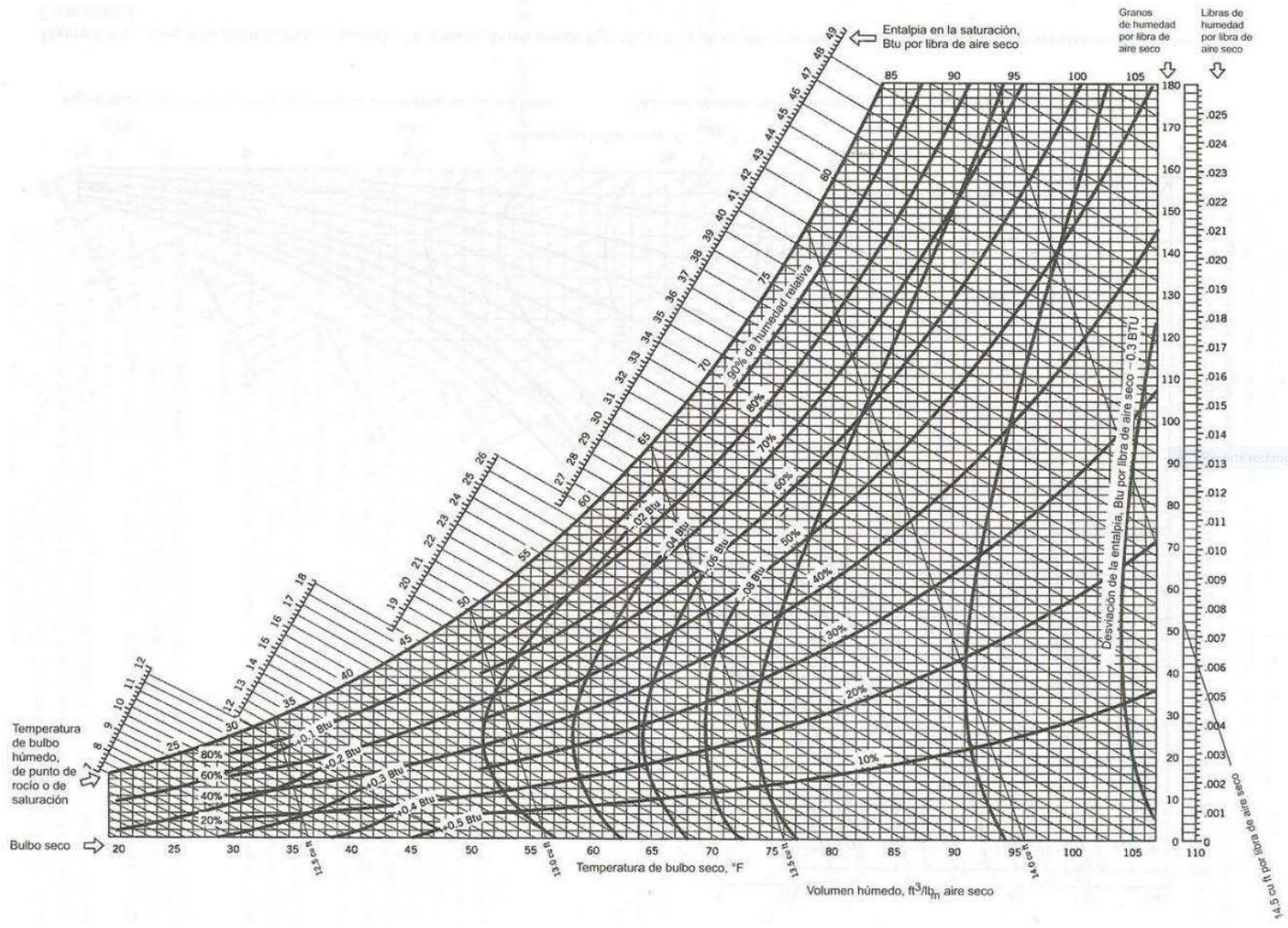


Figura C-2: Extraído del capítulo 8.4, Principios Elementales de los Procesos Químicos. México D.F., año 2004.



Manual Técnico de Operación Para el Uso de Aplicativos Guiado al Usuario.

Oswaldo E. Castillo, Fausto J. Ramírez, Pedro R. Sigüenza, José A. Erazo.

Este manual presenta diversos conceptos y métodos de amplia utilización en el análisis de los procesos impartidos en la cátedra de Operaciones Unitarias III, de la carrera de Ingeniería Química en la Universidad de El Salvador. Su comprensión requiere conocimientos básicos de los temas que relacionan este campo en la Ingeniería Química, el estudiante que desee una discusión más amplia o profunda de los temas que se analizan deberá recurrir a unas referencias relacionadas con este tema.

Los aplicativos descritos a continuación son el resultado del trabajo de graduación: “Modelación y Simulación de Procesos de Tránsito de Masa en Ingeniería Química”. Dichos programas piden al usuario un conjunto determinado de datos para la realización de cálculos. Estos datos de ingreso se detallarán para cada programa, como también la descripción de la metodología utilizada en cada aplicativo.

Descarga e Instalación de Scilab 6.0.1

Paso 1. Accedemos a la página web de Scilab en <http://www.scilab.org/>.

Paso 2. Seleccionamos el archivo de instalación de acuerdo al Sistema Operativo y a la arquitectura de nuestra máquina (por ejemplo, Windows 10 64 bits).

Paso 3. Descargamos los instaladores y seguimos las instrucciones de los asistentes de instalación respectivos.

Ejecución de aplicativos de transferencia de masa en Scilab.

Los aplicativos de transferencia de masa pueden ser ejecutados solamente desde el CD que acompaña a este documento de tesis, el cual se puede encontrar en la Escuela de Ingeniería Química e Ingeniería de Alimentos, de la Facultad de Ingeniería y Arquitectura de la Universidad de El Salvador.

Paso 1. Inserte el CD a su computadora.

Paso 2. Hacer doble clic en la Unidad de CD de su equipo.

Paso 3. Hacer doble clic en la carpeta, “Aplicativos de Transferencia de Masa, CastilloRamirezSigüenza”.

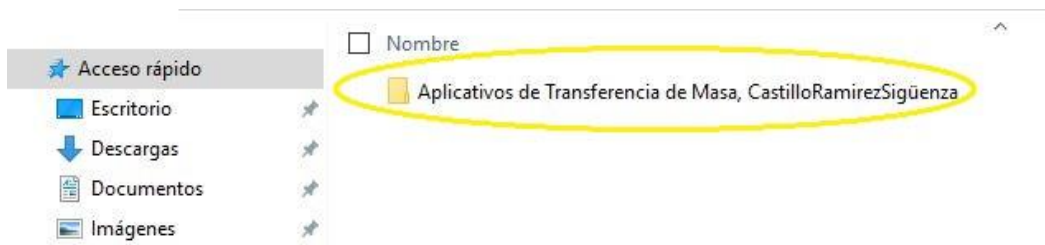


Figura D-1: Imagen ilustrativa para la ejecución adecuado de los aplicativos de transferencia de masa.

Paso 4. Dar doble clic a la carpeta del aplicativo a utilizar. Ejemplo: Cálculo de Tiempo de Secado.



Figura D-2: Imagen ilustrativa para la ejecución adecuado de los aplicativos de transferencia de mas

Paso 5. Hacer doble clic en el archivo de Scilab y el programa se ejecutará automáticamente.



Figura D-3: Imagen ilustrativa para la ejecución adecuado de los aplicativos de transferencia de masa.

Paso 6. Dar clic en el botón “Execute” para ejecutar el aplicativo.

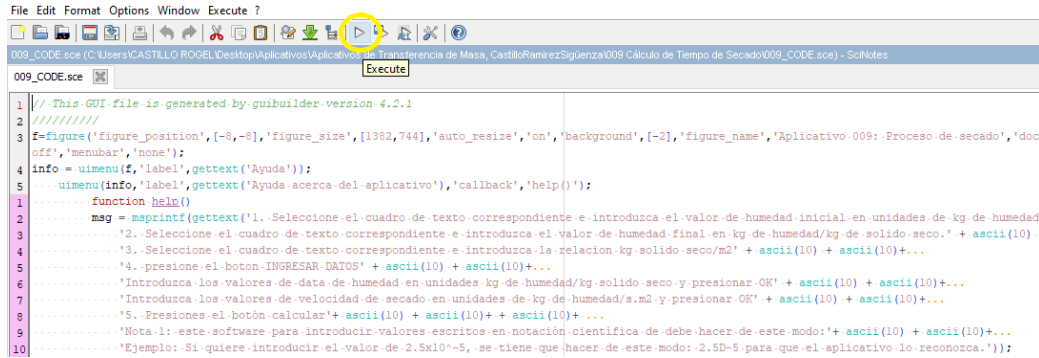


Figura D-4: Imagen ilustrativa para la ejecución adecuado de los aplicativos de transferencia de masa.

Paso 7. Introducir los datos que el aplicativo solicita en sus respectivas unidades y dar clic en el botón “CALCULAR”. Los datos introducidos deben ser lógicos y coherentes, analizados previamente, ya que puede darse un error de ejecución o convergencia de los aplicativos, se dispone de información en el botón de acción “Ayuda”, para solventar las dudas más comunes.

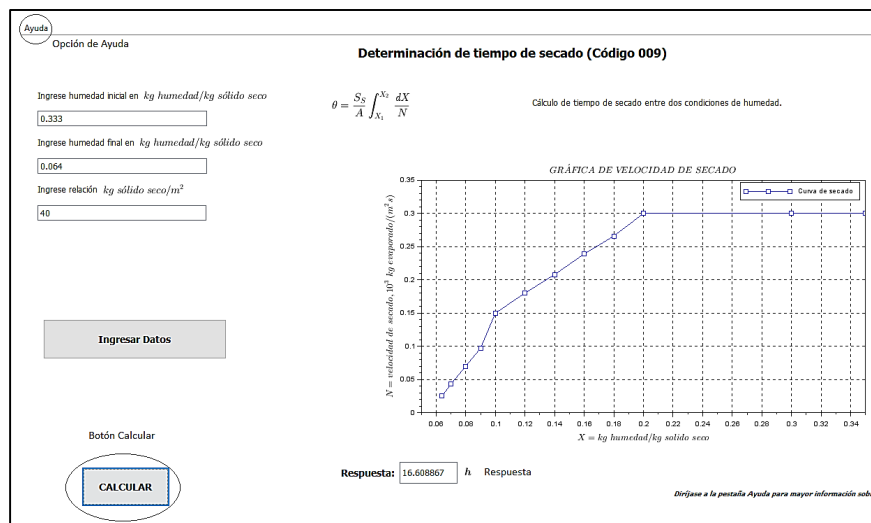


Figura D-5: Imagen ilustrativa para la ejecución adecuado de los aplicativos de transferencia de masa

TEMA: COEFICIENTES DE DIFUSIVIDAD MOLECULAR

SUBTEMA: COEFICIENTES DE DIFUSIVIDAD MOLECULAR EN GASES.

ECUACIÓN: ECUACIÓN DE HIRSCHFELDER

CÓDIGO DE APLICATIVO: 001

DESCRIPCIÓN DE LA ECUACIÓN DE HIRSCHFELDER.

La ecuación de Hirschfelder es la más ocupada para el cálculo de difusividades la cual es aplicable para:

- Sistemas binarios gaseosos.
- Presiones menores a 25 atmosferas.
- Cualquier temperatura.

Donde:

The diagram shows the Hirschfelder equation for the diffusion coefficient D_{AB} enclosed in a blue box. The equation is:

$$D_{AB} = \frac{0.001858 T^{3/2} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2}}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_D}$$


Arrows point from descriptive labels to the variables in the equation:

- A red arrow points from "T abs (K)" to the temperature T in the numerator.
- A black arrow points from "Pesos moleculares de A y B (g/mol)" to the molecular weights M_A and M_B in the numerator.
- A blue arrow points from "Difusividad de A, que se difunde a través de B (cm²/s)" to the D_{AB} on the left side of the equation.
- An orange arrow points from "P abs (atm)" to the pressure P in the denominator.
- A teal arrow points from "Diámetro de colisión A-B (Å)" to the collision diameter σ_{AB} in the denominator.
- A yellow arrow points from "Integral de colisión" to the collision integral Ω_D in the denominator.

Figura D-6: Descripción de las variables de la ecuación de Hirschfelder con sus respectivas unidades.

DESCRIPCIÓN PARA EL USO DEL APLICATIVO.

1. Ingrese la temperatura en el recuadro en unidades según se indica, véase figura D-7.

 Ecuación de Hirschfelder. Cálculo de coeficientes de difusividad en gases
Ayuda

Ecuación de Hirschfelder (Código 001)

Ingrese temperature en grados Kelvin:

$$D_{AB} = \frac{0.001858T^{\frac{3}{2}} \left[\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right]^{\frac{1}{2}}}{Pv_{AB}^2 \Omega_D}$$

Ecuación para el cálculo de coeficientes de difusividad en mezclas gaseosas binarias a baja presión

Figura D-7: Cuadro de texto para el ingreso de la temperatura.

2. Ingrese la presión en el recuadro en unidades según se indica, véase figura D-8.

Ingrese presión en atm

Figura D-8: Cuadro de texto para el ingreso de la presión.

3. Si posee un dato experimental de las dos sustancias a evaluar para comprar el porcentaje de error se inserta en el recuadro según la muestra véase figura D-9.

Ingrese valor experimental en cm²/s

Figura D-9: Cuadro de texto para el ingreso de algún valor experimental de las sustancias a evaluar.

4. Seleccione en los listados la dos sustancias a evaluar y haga clic sobre cada una de ellas.
Si desea evaluar sustancias ausentes en el listado trasládese al paso 6.

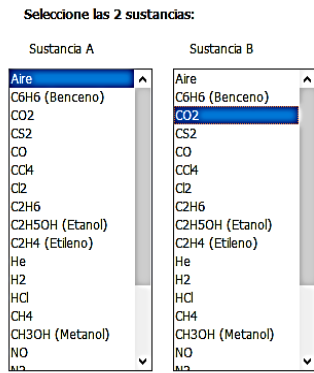


Figura D-10: Selección de las dos sustancias a ser evaluadas.

- Una vez ingresado los datos anteriores haga clic en el botón calcular y vera en el recuadro de resultado la respuesta junto con sus unidades, el aplicativo también mostrara un recuadro con el porcentaje de error respecto al valor conocido si este fue ingresado y también presentará el comportamiento con la temperatura y presión del sistema.

Calculo de coeficientes de difusión para mezclas gaseosas binarias por la Ecuación Hirschfelder

rchivo Ayuda

Ingrese temperatura en grados K

Ingrese presión en atm

Ingrese valor experimental en cm²/s

Seleccione las 2 sustancias:

Sustancia A	Sustancia B
Aire	Aire
C6H6 (Benceno)	C6H6 (Benceno)
CO2	CO2
CS2	CS2
CO	CO
CCl4	CCl4
Cl2	Cl2
C2H6	C2H6
C2H5OH (Etanol)	C2H5OH (Etanol)
C2H4 (Etileno)	C2H4 (Etileno)
He	He
H2	H2
HCl	HCl
CH4	CH4
CH3OH (Metanol)	CH3OH (Metanol)
NO	NO
N2	N2

Ecuación Hirschfelder $D_{AB} = \frac{0.001858T^3 \left[\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right]^{\frac{1}{2}}}{P\sigma_{AB}^2\Omega_D}$

Comportamiento gráfico del coeficiente de difusión con la temperatura y presión

Variación de D_{ab} con Temperatura (P constante)

Variación de D_{ab} con Presión (T constante)

CALCULAR

Botón Calcular

Respuesta: cm².s⁻¹ % error

Respuestas

Figura D-11: Aplicativo ejecutado al presionar el botón de calcular.

6. Si desea evaluar alguna sustancia que, no esté en el listado predeterminado proceda como sigue:
- Dirigirse al final del listado de sustancias.
 - Dar clic sobre (OTRA SUSTANCIA).
 - Se desplegará un cuadro para introducir las constantes de la sustancia que no se encuentra.
 - Dar clic en “Ok”, véase figura D-12.

Seleccione las dos sustancias dando click sobre ellas:

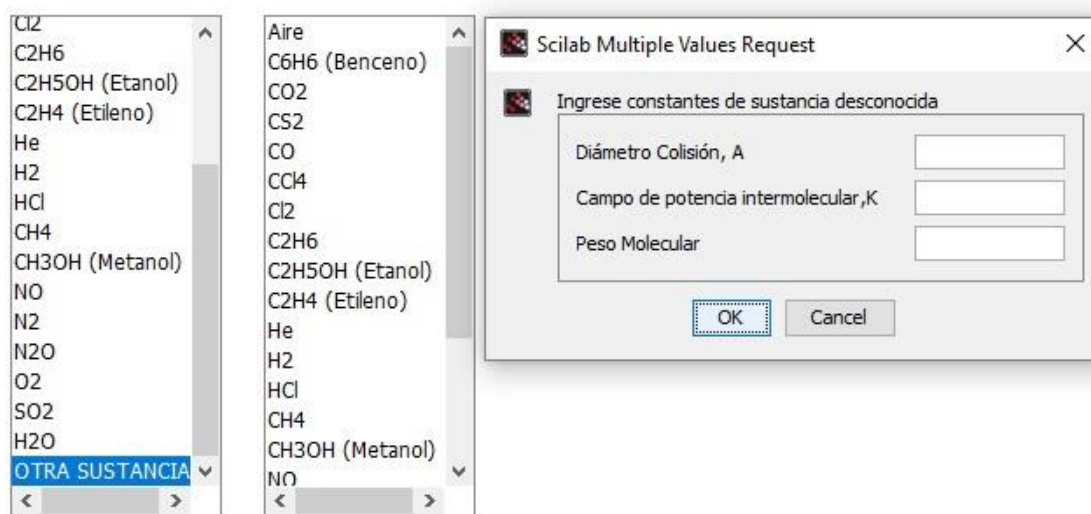


Figura D-12: Insertar constantes de una sustancia que no se encuentre en el listado predeterminado.

TEMA: COEFICIENTES DE DIFUSIVIDAD MOLECULAR

SUBTEMA: COEFICIENTES DE DIFUSIVIDAD MOLECULAR EN GASES.

ECUACIÓN: ECUACIÓN DE FULLER

CÓDIGO DE APLICATIVO: 002

DESCRIPCIÓN DE LA ECUACIÓN DE FULLER.

La ecuación de Fuller es un método para calcular difusividad a bajas presiones (10 bar).

Donde:

$$D_{AB} := \frac{0.00143 \cdot T^{1.75}}{P \cdot M_{AB}^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\left(\sum v \right)_A^{\frac{1}{3}} - \left(\sum v \right)_B^{\frac{1}{3}} \right)^2}$$

Figura D-13: Descripción de las variables de la ecuación de Fuller con sus respectivas unidades.

- I. D_{AB} : Difusividad de A, que se difunde a través de B (cm^2/s).
- II. P: Presión absoluta (atm).
- III. T: Temperatura absoluta (K).
- IV. M_{AB} : $M_{AB} = \frac{2}{\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)}$ M_A y M_B : Pesos moleculares de las especies.
- V. Σv : Volúmenes moleculares de difusión de cada especie.

DESCRIPCIÓN PARA EL USO DEL APLICATIVO.

1. Ingrese la temperatura en el recuadro en unidades según se indica, véase figura D-14.

◆ Ecuación de Fuller. Cálculo de coeficientes de difusividad en gases
Ayuda

Cálculo de Coeficiente de Difusividad para Gases: Ecuación Fuller (Código 002)

Ingrese temperature en grados Kelvin:

$$D_{AB} = \frac{10^{-3} T^{1.75} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{0.5}}{P \left[(\Sigma v)_A^{1/3} + (\Sigma v)_B^{1/3} \right]}$$

Ecuación para el cálculo de coeficientes de difusividad en mezclas gaseosas binarias de gases no polares a bajas presiones

Figura D-14: Cuadro de texto para el ingreso de la temperatura.

2. Ingrese la presión en el recuadro en unidades según se indica, véase figura D-15.

Ingrese presión en atm

Figura D-15: Cuadro de texto para el ingreso de la presión.

3. Si posee un dato experimental de las dos sustancias a evaluar para comprar el porcentaje de error se inserta en el recuadro según la muestra la figura D-16.

Ingrese valor experimental en cm²/s

Figura D-16: Cuadro de texto para el ingreso de algún valor experimental de las sustancias a evaluar.

4. Seleccione en los listados la dos sustancias a evaluar y haga clic sobre cada una de ellas.
Si desea evaluar sustancias ausentes en el listado trasládese al paso 6.

Seleccione las dos sustancias dando click sobre ellas:

H2	H2
He	He
N2	N2
O2	O2
Aire	Aire
Ar	Ar
Kr	Kr
CO	CO
CO2	CO2
N2O	N2O
NH3	NH3
H2O	H2O
CClF2	CClF2
SF6	SF6
CL2	CL2
BR2	BR2
SO2	SO2

Figura D-17: Selección de las dos sustancias a ser evaluadas.

5. Una vez ingresado los datos anteriores haga clic en el botón calcular y vera en el recuadro de resultado la respuesta junto con sus unidades, el aplicativo también mostrara un recuadro con el porcentaje de error respecto al valor conocido si este fue ingresado y también presentará el comportamiento con la temperatura y presión del sistema.

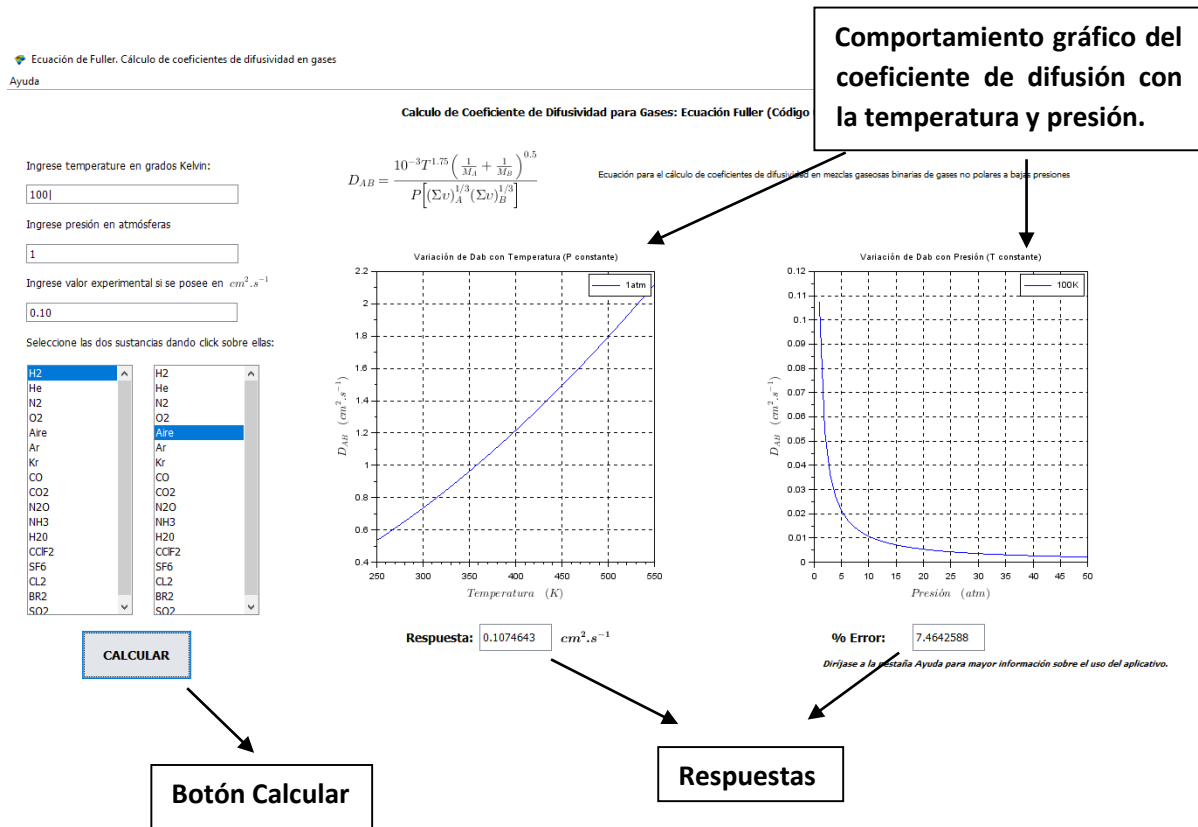


Figura D-18: Aplicativo ejecutado al presionar el botón de calcular.

6. Si desea evaluar alguna sustancia que, no esté en el listado predeterminado proceda como sigue:
- Dirigirse al final del listado de sustancias.
 - Dar clic sobre (OTRA SUSTANCIA).
 - Se desplegará un cuadro para introducir las constantes de la sustancia que no se encuentra.
 - Dar clic en “Ok”, véase figura D-19.

Seleccione las dos sustancias dando click sobre ellas:

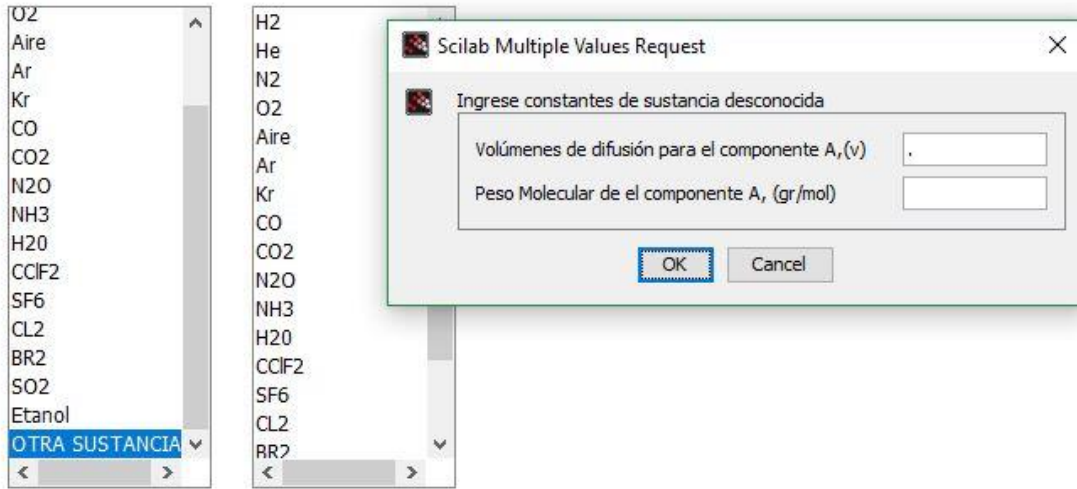


Figura D-19: Insertar constantes de una sustancia que no se encuentre en el listado predeterminado.

TEMA: COEFICIENTES DE DIFUSIVIDAD MOLECULAR

SUBTEMA: COEFICIENTES DE DIFUSIVIDAD MOLECULAR EN GASES

ECUACIÓN: EXTRAPOLACION DE HIRSCHFELDER

CÓDIGO DE APLICATIVO: 003

DESCRIPCIÓN DE LA EXTRAPOLACION DE HIRSCHFELDER.

Permite conocer la difusividad a una Temperatura conociendo la difusividad a una temperatura o presión conocida.

$$D_{AB,2} = D_{AB,1} \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P_1}{P_2} \right)$$

Figura D-20: Descripción de las variables de la ecuación de Extrapolación de Hirschfelder con sus respectivas unidades.

Donde:

- I. $D_{AB,1}$: Difusividad de A, que se difunde a través de B (cm^2/s) a condiciones conocidas.
- II. $D_{AB,2}$: Difusividad de A, que se difunde a través de B (cm^2/s) a condiciones a evaluar.
- III. P: Presión absoluta (atm).
- IV. T: Temperatura absoluta (K).

DESCRIPCIÓN PARA EL USO DEL APLICATIVO.

1. Ingrese la temperatura en el recuadro en unidades según se indica, véase figura D-21.

Interpolación Hirschfelder. Cálculo de coeficientes de difusividad en gases
Ayuda

Interpolación Hirschfelder (Código 003)

Ingrese temperature en grados Kelvin:

$$D_{AB,2} = D_{AB,1} \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P_1}{P_2} \right)$$

Interpolación para mezclas de gases binarios, aplicable a cambios de temperatura pequeños

Figura D-21: Cuadro de texto para el ingreso de la temperatura.

2. Ingrese la presión en el recuadro en unidades según se indica, véase figura D-22.

Ingrese presión en atm

Figura D-22: Cuadro de texto para el ingreso de la presión.

3. Si posee un dato experimental de las dos sustancias a evaluar para comprar el porcentaje de error se inserta en el recuadro según la muestra la figura D-23.

Ingrese valor experimental en cm²/s

Figura D-23: Cuadro de texto para el ingreso de algún valor experimental de las sustancias a evaluar.

4. Seleccione en los listados la dos sustancias a evaluar y haga clic sobre la sustancia del lado derecho donde según su selección aparecerá el listado de sustancias del lado izquierdo cada una de ellas.

Seleccione la sustancia 1 dando click sobre la casilla de selección y luego seleccione la segunda sustancia

Aire
NH3
CO2
CO
He
H2
N2
O2

Seleccione la sustancia 1 dando click sobre la casilla de selección y luego seleccione la segunda sustancia

Aire
NH3
CO2
CO
He
H2
N2
O2

NH3
Anilina
Benceno
Br2
CO2
CS2
C2
Difenil
Etil acetato
Etanol
Etil eter
I2
Metanol
Hg

Figura D-24: Selección de las dos sustancias a ser evaluadas.

- Una vez ingresado los datos anteriores haga clic en el botón calcular y vera en el recuadro de resultado la respuesta junto con sus unidades, el aplicativo también mostrara un recuadro con el porcentaje de error respecto al valor conocido si este fue ingresado y también presentará el comportamiento con la temperatura y presión del sistema.

Interpolación Hirschfelder (Código 003)

$D_{AB,2} = D_{AB,1} \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P_1}{P_2} \right)$ Interpolación para mezclas de gases binarios, aplicable a cambios de temperatura pequeños

Ingrese temperature en grados Kelvin:

Ingrese presión en atmósferas

Ingrese valor experimental si se posee en $cm^2.s^{-1}$

Seleccione la sustancia 1 dando click sobre la casilla de selección y luego seleccione la segunda sustancia

Aire	Benceno
NH3	CS2
CO2	Etil acetato
CO	Etanol
He	Etil eter
H2	H2
N2	CH4
O2	Metanol
	N2
	NO
	Propano
	Agua

Referencia de temperatura: K

Referencia de presión: atm

Respuestas

Respuesta: $cm^2.s^{-1}$

% Error:

CALCULAR

↓

Botón Calcular

Condiciones de Temperatura y Presión a la que han sido tomados los datos.

Dirijase a la pestaña Ayuda para mayor información sobre e

Figura D-25: Aplicativo ejecutado al presionar el botón de calcular.

TEMA: COEFICIENTES DE DIFUSIVIDAD MOLECULAR

SUBTEMA: COEFICIENTES DE DIFUSIVIDAD MOLECULAR EN LÍQUIDOS

ECUACIÓN: WILKE-CHANG

CÓDIGO DE APLICATIVO: 004

DESCRIPCIÓN DE LA ECUACIÓN DE WILKE-CHANG.

El modelo de Wilke-Chang es bastante usado, pero en algunos casos puede llegar a tener errores elevados. Este método no debe emplearse cuando el soluto es de volumen molar pequeño como el agua.

$$D_{AB} = \frac{7.4 * 10^{-3} [\Phi_B \cdot M_B]^{\frac{1}{2}} T}{V_A^{0.6} \mu_B}$$

Figura D-26: Descripción de las variables de la ecuación de Wilke-Chang con sus respectivas unidades.

Donde:

- I. D_{AB} : Difusividad de A en una solución diluida en el componente B (cm^2/s).
- II. T: Temperatura absoluta (K)
- III. M_B : Peso molecular del disolvente (g/mol).
- IV. V_A : Volumen molar del soluto (cm^3/mol).
- V. Φ : Factor de asociación para el disolvente (adimensional).
- VI. μ : Viscosidad cinemática (Cp).

DESCRIPCIÓN PARA EL USO DEL APLICATIVO.

1. Ingrese la temperatura en el recuadro en unidades según se indica, véase figura D-27.

Ecuación Wilke-Chang. Cálculo de coeficientes de difusión en líquidos
Ayuda

Ingrese temperature en grados Kelvin:

Ecuación Wilke-Chang (Código 004)

$$D_{AB} = \frac{7.4 \times 10^{-3} [\Phi_B M_B]^{1/2} T}{V_A^{0.5} \mu_B}$$

Ecuación para cálculo de coeficientes de difusividad para no electrolitos a dilución infinita

Figura D-27: Cuadro de texto para el ingreso de la temperatura.

2. Ingrese la viscosidad en el recuadro en unidades según se indica, véase figura D-28.

Ingrese viscosidad en centipoise:

Figura D-28: Cuadro de texto para el ingreso de la viscosidad.

3. Si posee un dato experimental de las dos sustancias a evaluar para comprar el porcentaje de error se inserta en el recuadro según la muestra la figura D-29.

Ingrese valor experimental en cm²/s

Figura D-29: Cuadro de texto para el ingreso de algún valor experimental de las sustancias a evaluar.

4. Seleccione en los listados la dos sustancias a evaluar y haga clic sobre el círculo en blanco del solvente en que se será la difusión posteriormente hacer clic sobre la sustancia que actuara como soluto en la lista que se encuentra debajo, si quiere agregar una sustancia que no se encuentre en la lista de solutos pase al paso 6.

Seleccione el solvente en que se difundirá:

- Agua Etanol
- Metanol

Seleccione el soluto que se difundirá:

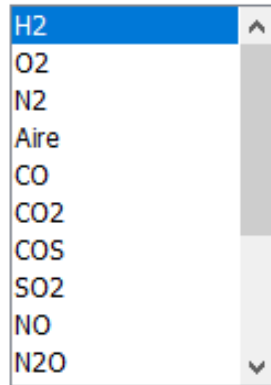


Figura D-30: Selección de las dos sustancias a ser evaluadas.

- Una vez ingresado los datos anteriores haga clic en el botón calcular y vera en el recuadro de resultado la respuesta junto con sus unidades, el aplicativo también mostrara un recuadro con el porcentaje de error respecto al valor conocido si este fue ingresado y también presentará el comportamiento con la temperatura y presión del sistema.

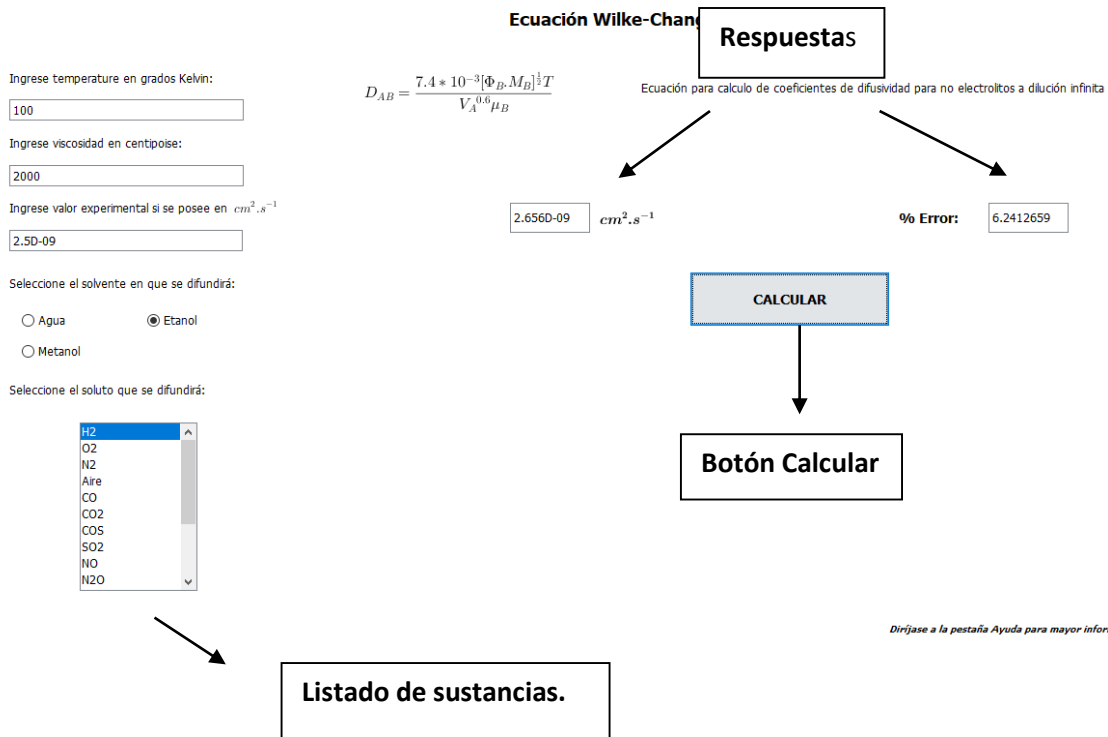


Figura D-31: Aplicativo ejecutado al presionar el botón de calcular.

7. Si desea evaluar alguna sustancia que, no esté en el listado predeterminado proceda como sigue:
 - a) Dirigirse al final del listado de sustancias.
 - b) Dar clic sobre (OTRA SUSTANCIA).
 - c) Se desplegará un cuadro para introducir las constantes de la sustancia que no se encuentra.
 - d) Dar clic en “Ok”, véase figura D-32.

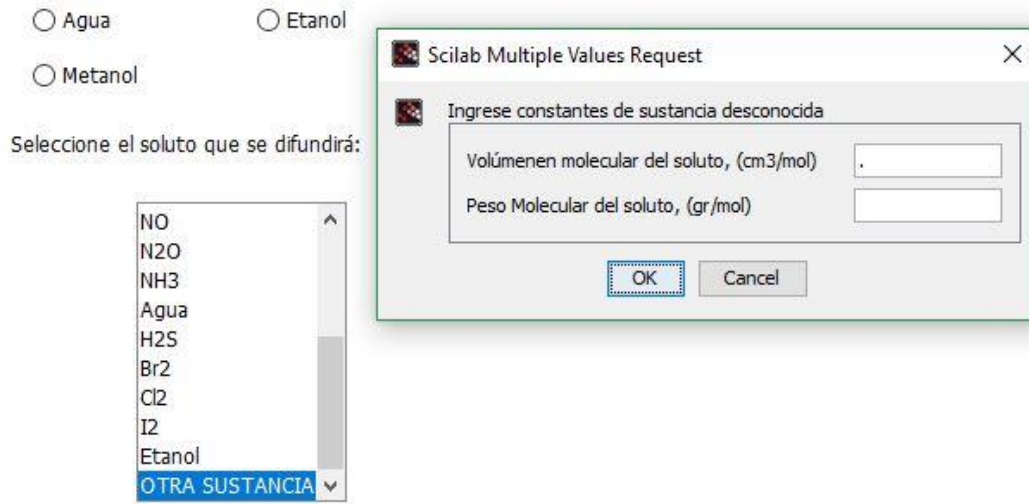


Figura D-32: Insertar constantes de una sustancia que no se encuentre en el listado predeterminado.

TEMA: COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA.

SUBTEMA: COEFICIENTES GLOBALES DE TRANSFERENCIA DE MASA.

CÓDIGO DE APLICATIVO: 005

DESCRIPCIÓN DEL FLUX MOLAR.

A partir de la relación entre los coeficientes de transferencia para cada fase por separado; el coeficiente global tendrá la forma de una suma de resistencias, con lo que se parte para el cálculo de los coeficientes globales de la siguiente forma:

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{m}{k_L}$$

$$\frac{1}{K_y} = \frac{1}{k_y} + \frac{m}{k_x}$$

Con esto a partir de las propiedades en el equilibrio, y los coeficientes globales que llevan inmersos los efectos generales de la masa principal se puede calcular el flux molar, siendo este el flujo de materia en movimiento por el efecto difusivo, y se calcula a partir de las siguientes relaciones:

$$N_{A,z} = K_G(\overline{P_{A,G}} - \overline{P_A^*}) = K_y(y_{A,G} - y_A^*)$$

$$N_{A,z} = K_L(C_A^* - C_{A,L}) = K_x(x_A^* - x_{A,L})$$

DESCRIPCIÓN PARA EL USO DEL APLICATIVO.

1. Ingrese el coeficiente individual de la fase gaseosa dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-33.

Ingrese k_G (m/s.atm)

Figura D-33: Cuadro de texto para ingreso de k_G .

- Ingrese el coeficiente individual de la fase líquida dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-36.

Ingrese k_L (m/s)

Figura D-34: Cuadro de texto para ingreso de k_L .

- Ingrese la constante de ley de Henry para la mezcla de sustancias dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-35.

Ingrese la constante de Henry

 atm/(kgmol/m³)

Figura D-35: Cuadro de texto para ingreso de la constante de Henry.

- Ingrese la concentración de líquido dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-36.

Concentración en el líquido (kgmol/m³)

Figura D-36: Cuadro de texto para ingreso de la concentración en el líquido.

- ingrese la presión parcial del gas dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-37.

Presión parcial del gas (atm)

Figura D-37: Cuadro de texto para ingreso de la presión parcial del gas.

6. Una vez ingresado los datos anteriores haga clic en el botón calcular y verá en el recuadro de resultado la respuesta junto con sus unidades, también presentará el comportamiento de la línea de operación y los datos de equilibrio en un diagrama Concentración de líquido vs. Presión parcial. De igual manera se cuenta con la opción de ayuda en la parte superior izquierda, donde se encontrarán los pasos a seguir para el uso del aplicativo.

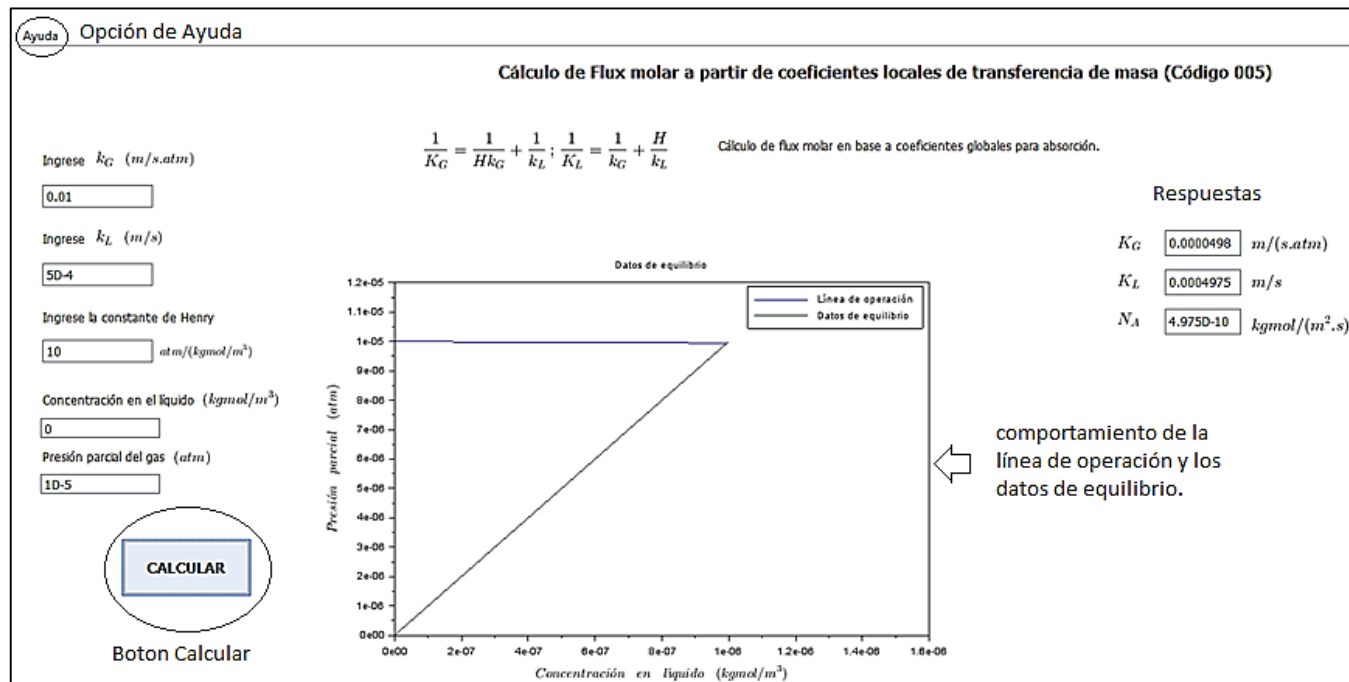


Figura D-38: Aplicativo 005 ejecutado.

TEMA: ABSORCIÓN.

SUBTEMA: ABSORCIÓN MULTIETAPAS.

CÓDIGO DE APLICATIVO: 006

DESCRIPCIÓN DE LA ABSORCIÓN MULTIETAPAS.

A partir de la aplicación de la metodología utilizando un diagrama McCabe-Thiele, realizando balances de energía y haciendo constante la relación de flujo líquido/vapor podemos llegar a la relación:

$$Y_{j+1} = \frac{L}{G} X_j + \left[Y_1 - \frac{L}{G} X_0 \right]$$

Denominada línea de operación y con la cual podemos crear el diagrama, se toma en cuenta que la línea de operación está arriba de la línea de equilibrio debido a que se transfiere soluto del gas al líquido. En destilación se tiene que el material (el componente más volátil) transferido del líquido al gas y la línea de operación estaba abajo de la curva de equilibrio.

las etapas se cuentan en la curva de equilibrio. Una relación mínima L/G se puede definir como se muestra, véase figura D-39. Si el sistema no es isotérmico, la línea de operación no se afectará, pero sí la curva de equilibrio. Entonces, se debe modificar el método de McCabe-Thiele para incluir curvas de equilibrio cambiantes.

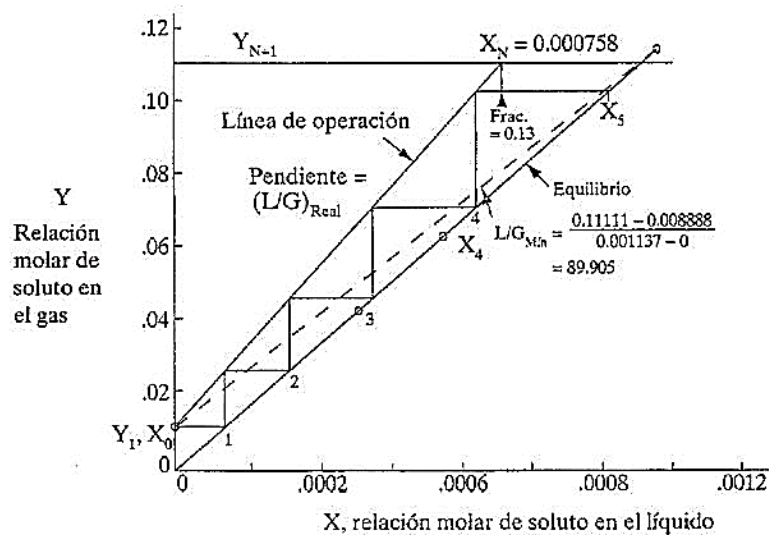


Figura D-39: Ejemplo de diagrama McCabe-Thiele para absorción. (Perry et al, 1963).

DESCRIPCIÓN PARA EL USO DEL APLICATIVO.

1. Ingrese la fracción molar inicial en la corriente gaseosa dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-40.

Fración molar inicial en corriente gaseosa <input type="text"/>
--

Figura D-40: Cuadro de texto para ingreso de fracción molar inicial en corriente gaseosa.

2. Ingrese la fracción molar inicial en la corriente líquida dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-41.

Fración molar inicial en corriente líquida <input type="text"/>
--

Figura D-41: Cuadro de texto para ingreso de fracción molar inicial en corriente líquida.

3. Ingrese el porcentaje de remoción en la corriente gaseosa dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-42.

Porcentaje de remoción en corriente gaseosa. <input type="text"/>
--

Figura D-42: Cuadro de texto para ingreso de remoción en corriente gaseosa.

4. Ingrese el flujo de aire dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-43.

Flujo de aire en kmol/s <input type="text"/>

Figura D-43: Cuadro de texto para ingreso de flujo de aire.

5. Ingrese la relación de pendiente mínima (L_{smin}) dentro del recuadro, véase figura D-44.

Relación de pendiente mínima <input type="text"/>
--

Figura D-44: Cuadro de texto para ingreso de relación de pendiente mínima L_{smin} .

6. Ingrese la constante de Henry para fracciones molares dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-45.

Constante de Henry para fracciones molares

Figura D-45: Cuadro de texto para ingreso de la constante de Henry para fracciones molares.

7. Una vez ingresado los datos anteriores haga clic en el botón calcular y vera en el recuadro de resultado la respuesta junto con sus unidades, también presentará el comportamiento de la línea de operación y los datos de equilibrio, junto con las etapas respectivas del proceso en un diagrama Fracción mol líquido vs. Fracción mol gas. De igual manera se cuenta con la opción de ayuda en la parte superior izquierda, donde se encontrarán los pasos a seguir para el uso del aplicativo, véase figura D-46.

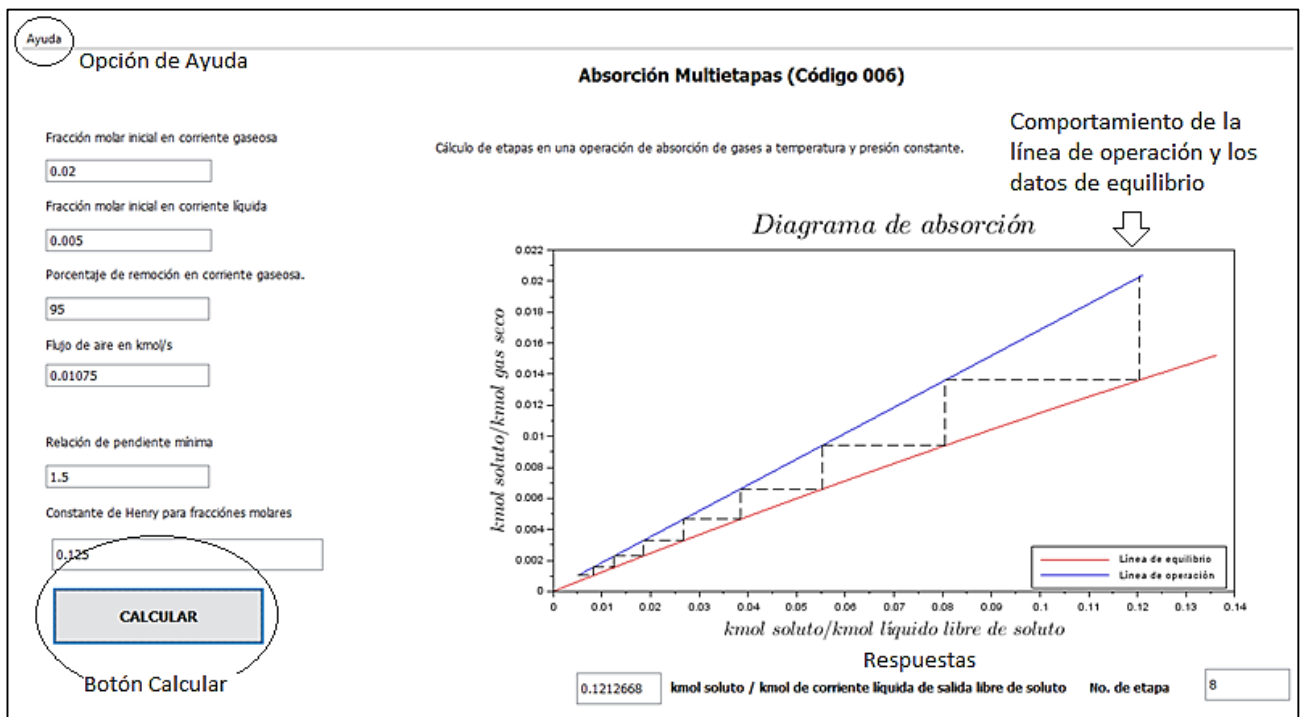


Figura D-46: Aplicativo 006 ejecutado.

TEMA: HUMIDIFICACIÓN.

SUBTEMA: CÁLCULO DE ALTURA DE EMPAQUETAMIENTO.

CÓDIGO DE APLICATIVO: 007

DESCRIPCIÓN DEL METODO DE MICKLEY.

El método se basa en una ecuación deducida por Mickley a partir de la ecuación para la línea de potencial, conforme a la relación de Lewis:

$$\frac{dH}{dt_G} = \frac{H_i - H}{t_i - t_G}$$

La ecuación anterior relaciona la temperatura y la entalpía del aire en una sección de la columna (H, t) con las condiciones en la interface en la misma sección (H_i, t_i), de modo que la recta que une ambos puntos representa la pendiente de la curva H-t representativa de las condiciones del aire, véase figura D-47.

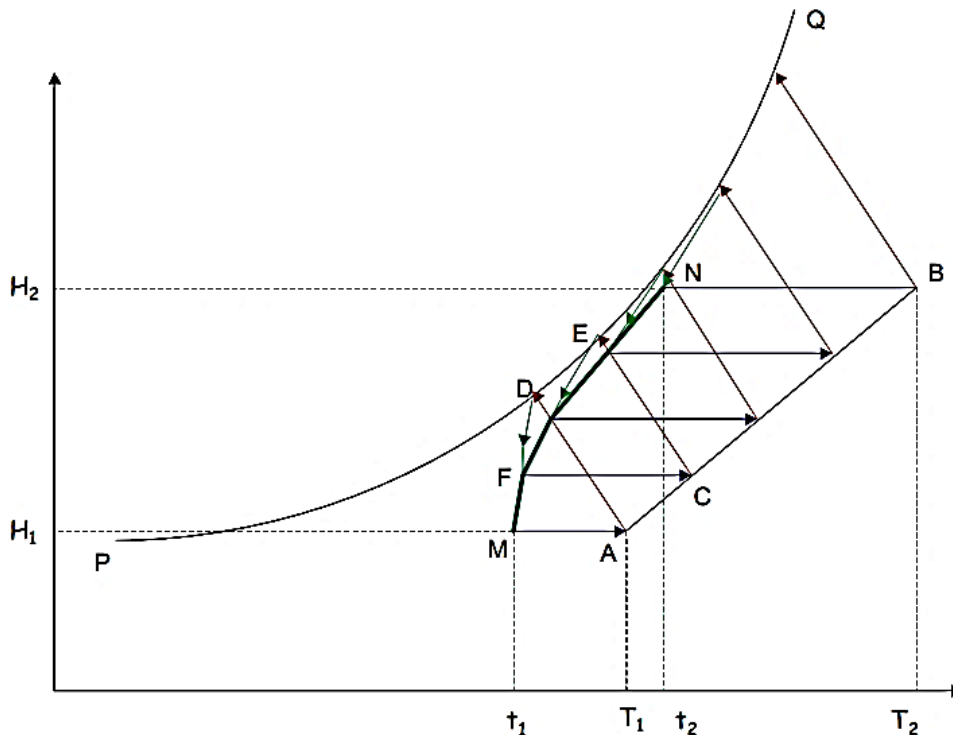


Figura D-47: Ejemplo de un gráfico mostrando la construcción del método de Mickley.

La ecuación de Mickley permite:

- Conocidos los coeficientes de transporte, trazar la curva H-t representativa de las condiciones del aire a lo alto de la columna.
- Con los resultados de un ensayo en una columna de altura de relleno conocida, determinar los coeficientes individuales.

DESCRIPCIÓN PARA EL USO DEL APLICATIVO.

ZONA DE PROPIEDADES DEL AGUA.

1. Ingrese la temperatura de entrada de agua dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-48.

Temperatura de entrada del agua (°C): <input type="text"/>

Figura D-48: Cuadro de texto para ingreso de temperatura de entrada de agua.

2. Ingrese el valor de la temperatura de salida de agua dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-49.

Temperatura de salida del agua (°C) <input type="text"/>

Figura D-49: Cuadro de texto para ingreso de temperatura de salida de agua.

3. Ingrese el flujo de agua dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-50.

Flujo de agua (kg/s) <input type="text"/>
--

Figura D-50: Cuadro de texto para ingreso de flujo de agua.

ZONA DE PROPIEDADES DEL AIRE.

4. Ingrese la temperatura de entrada de aire dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-51.

Temperatura de entrada del aire (°C)
<input type="text"/>

Figura D-51: Cuadro de texto para ingreso de temperatura de entrada de aire.

5. Ingrese la humedad de ingreso del aire dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-52.

Humedad de ingreso del aire (kg agua/kg aire seco)
<input type="text"/>

Figura D-52: Cuadro de texto para ingreso de Humedad de ingreso de aire.

6. Ingrese el flux molar del aire dentro del recuadro, véase figura D-53.

Flux Molar de aire
<input type="text"/>

Figura D-53: Cuadro de texto para ingreso de flux molar de aire.

PROPIEDADES DEL SISTEMA

7. Ingrese la relación $k_y a$ del sistema dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-54.

Relación $k_y a$ del sistema $kg/(m^3 \cdot s \cdot \Delta Y)$	<input type="text"/>
--	----------------------

Figura D-54: Cuadro de texto para ingreso de la relación $k_y a$.

8. Ingrese la relación G_s/G_{smin} del sistema dentro del recuadro, véase figura D-55.

Relación G_s/G_{smin} del sistema	<input type="text"/>
-------------------------------------	----------------------

Figura D-55: Cuadro de texto para ingreso de la relación G_s/G_{smin} .

9. Una vez ingresado los datos anteriores haga clic en el botón calcular y verá en el recuadro de resultado la respuesta junto con sus unidades, también presentará el comportamiento de la línea de operación y los datos de equilibrio en un diagrama, Temperatura vs. Entalpía, junto con los puntos tomados en el método de Mickley. De igual manera se cuenta con la opción de ayuda en la parte superior izquierda, donde se encontrarán los pasos a seguir para el uso del aplicativo, véase figura D-56.

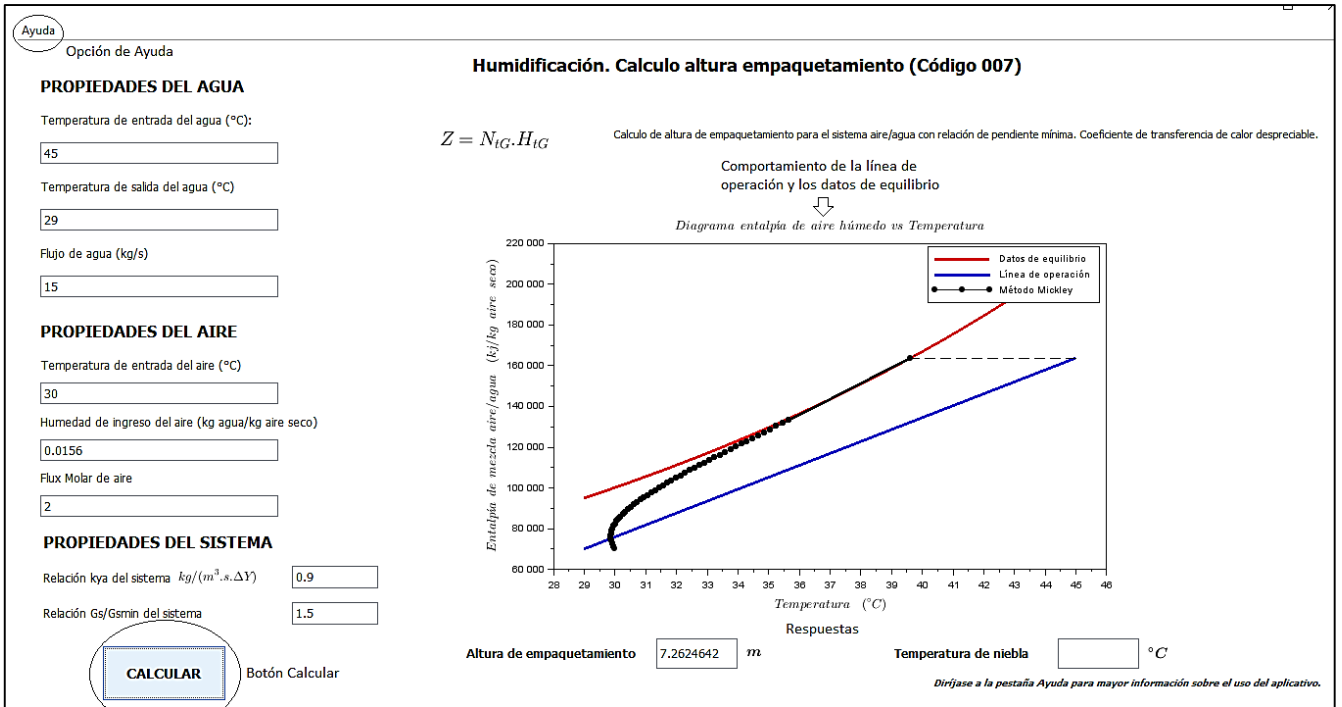


Figura D-56: Aplicativo 007 ejecutado.

TEMA: DESTILACIÓN.

SUBTEMA: CÁLCULO DE NUMERO DE PLATOS DE DESTILACIÓN.

CÓDIGO DE APLICATIVO: 008

DESCRIPCIÓN DEL METODO DE MC CABE-THIELE.

La destilación fraccionada o rectificación es el método empleado actualmente para separar los componentes de una mezcla líquida. Incluye el retorno de una parte del vapor condensado al equipo, de tal manera que el líquido que se regresa entra en contacto íntimo a contracorriente con los vapores que se dirigen al condensador. También es llamada rectificación. Este tipo de destilación es continua y permite manipular grandes cantidades de materiales y el reflujo hace posible alcanzar purzas elevadas en los productos destilados.

Par dimensionar una columna de rectificación es necesario conocer:

- I. Diámetro de la columna, relacionado con los caudales de líquido y vapor que circulan por su interior.
- II. Altura de la columna, función del número de pisos y de la separación entre los mismos.
- III. Caudales y composiciones de todas las corrientes.
- IV. Detalles constructivos, tales como el número y diámetro de agujeros de hombre, material de platos y válvulas, etc.

Dentro de esta temática nos centramos en el cálculo del número de platos necesarios para una separación determinada, que es el cálculo ingenieril relacionado.

Conocidas la composición del vapor que entra en el piso 1 procedente de la caldera y su presión de funcionamiento, se puede calcular la composición del líquido que lo abandona mediante la recta operativa de agotamiento. Con los datos de equilibrio se puede calcular la composición de la corriente de vapor que abandona esta etapa y entra en la segunda. Operando así piso a piso se llegará al de alimentación. Una vez superado este se continúa el cálculo ascendente utilizando la línea operativa del sector de agotamiento.

El procedimiento a seguir se resume a continuación en la figura D-57.

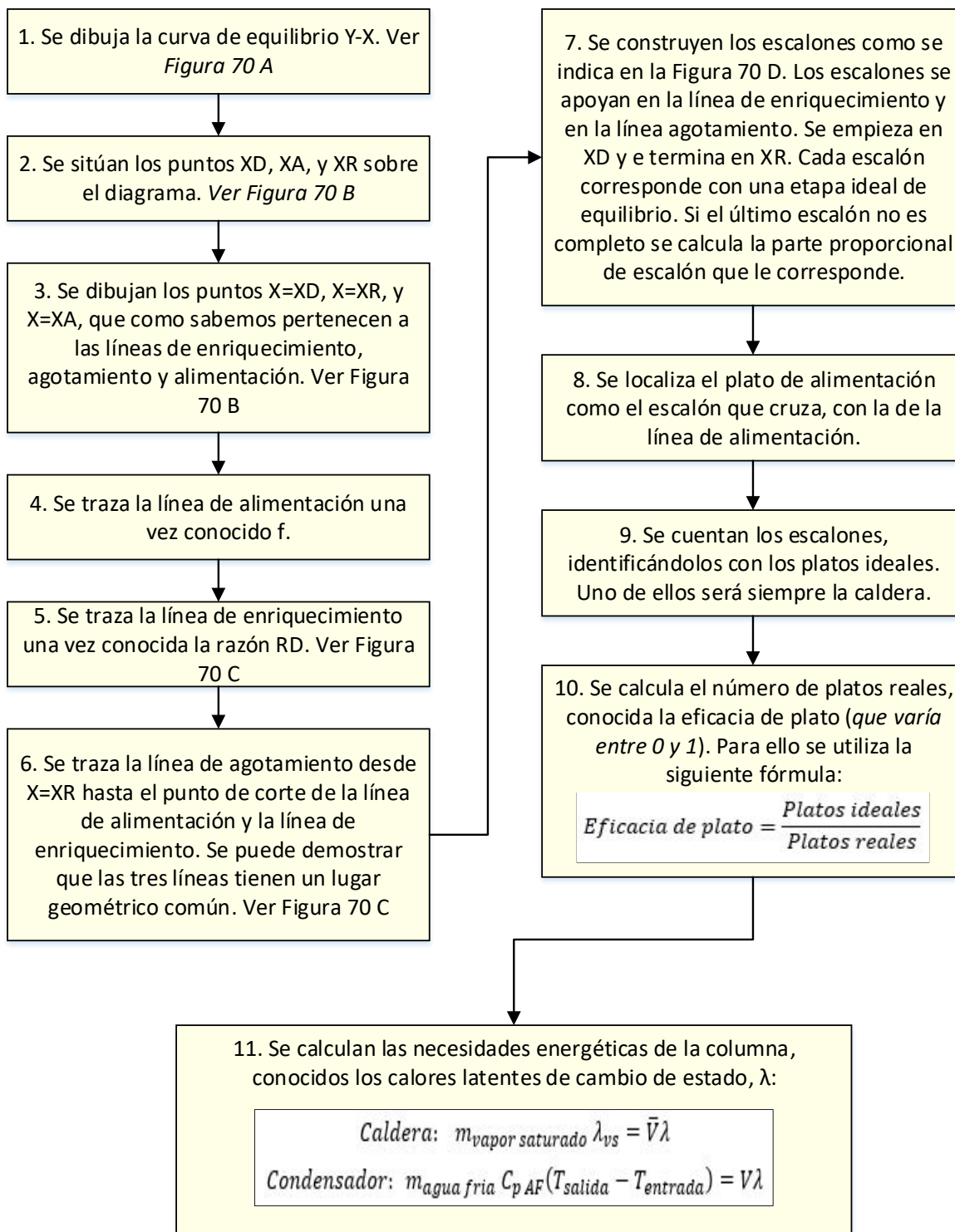


Figura D-57: Pasos para la construcción de diagrama de Mc Cabe-Thiele.

DESCRIPCIÓN PARA EL USO DEL APLICATIVO.

1. Ingrese el flujo de entrada dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-58.

Ingrese flujo de entrada en kgmol/h

Figura D-58: Cuadro de texto para ingreso de flujo de entrada.

2. Ingrese el factor la fracción del líquido de alimentación (q) dentro del recuadro, véase figura D-59.

Ingrese el valor q (Adimensional)

Figura D-59: Cuadro de texto para ingreso del factor la fracción del líquido de alimentación.

3. Ingrese la fracción molar de alimentación dentro del recuadro, véase figura D-60.

Ingrese fracción molar de la alimentación

Figura D-60: Cuadro de texto para ingreso de la fracción molar de alimentación.

4. Ingrese la fracción molar de agotamiento dentro del recuadro, véase figura D-61.

Ingrese fracción molar del agotamiento

Figura D-61: Cuadro de texto para ingreso de la fracción molar de agotamiento.

5. Ingrese la fracción molar de destilado, véase figura D-62.

Ingrese fracción molar del destilado

Figura D-62: Cuadro de texto para el ingreso de la fracción molar de destilado.

6. Ingrese el valor del orden de la volatilidad relativa (α), véase figura D-63.

Ingrese el valor de alpha (Adimensional)

Figura D-63: Cuadro de texto para el ingreso del valor del orden de la volatilidad relativa (α).

7. Ingrese el valor del reciclo, véase figura D-64.

Ingrese el valor del reciclo (Adimensional)

Figura D-64: Cuadro de texto para el ingreso del valor del reciclo.

8. Una vez ingresado los datos anteriores haga clic en el botón calcular y vera en el recuadro de resultado la respuesta junto con sus unidades, también presentará el comportamiento de la línea de enriquecimiento, la línea de agotamiento, la línea de alimentación y los valores de equilibrio. De igual manera se cuenta con la opción de ayuda en la parte superior izquierda, donde se encontrarán los pasos a seguir para el uso del aplicativo, véase figura D-65.

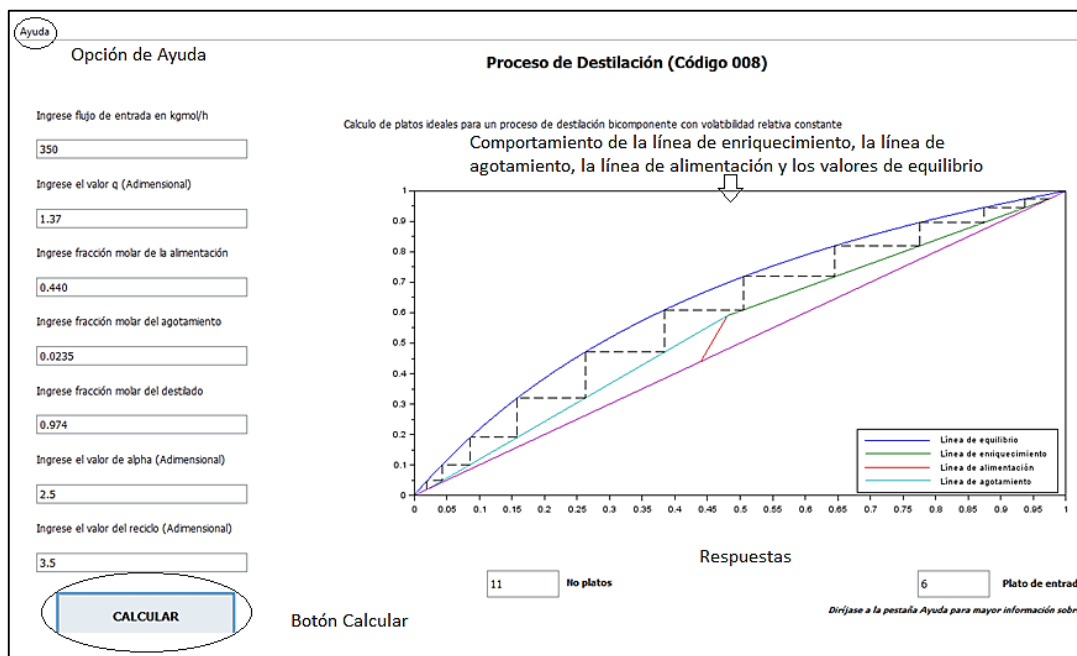


Figura D-65: Aplicativo008 ejecutado.

TEMA: SECADO.

SUBTEMA: CÁLCULO DE TIEPO DE SECADO.

CÓDIGO DE APLICATIVO: 009

DESCRIPCIÓN DEL CÁLCULO DE TIEMPO DE SECADO.

Se define como velocidad de secado a la pérdida de humedad del sólido en la unidad de tiempo, en términos diferenciales tendremos: $-\left(\frac{dx}{d\theta}\right)$ operando en condiciones constantes de secado. El termino condiciones constantes se entiende que el aire, la temperatura, presión, humedad y velocidad permanecen constantes a lo largo del tiempo.

El tiempo de secado debe ser determinado experimentalmente, ya que de hacerlo por procedimientos matemáticos se obtienen valores que, dependiendo del tipo de material, pueden discrepar notablemente de los valores reales, esta es la razón por la cual se recomienda que el tiempo sea determinado experimentalmente.

El tiempo de secado en condiciones constantes se puede calcular mediante la siguiente ecuación:

$$\theta = \frac{S}{A} \int_{X_f}^{X_i} \frac{dx}{w}$$

Dónde:

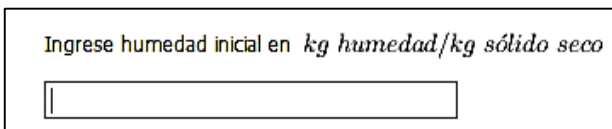
X_i = humedad inicial

X_f = Humedad final

Necesitamos conocer $f(X)$, esto significa conocer infinito número de ecuaciones para cada material, por esto no es operacional. Pero si recordamos los periodos de secado podemos satisfacer esta ecuación en forma parcial.

DESCRIPCIÓN PARA EL USO DEL APLICATIVO.

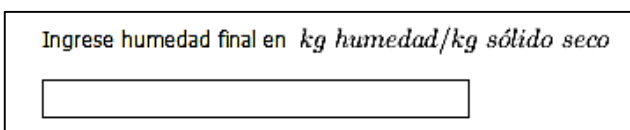
1. Ingrese el valor de humedad inicial dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-66.



Ingrese humedad inicial en *kg humedad/kg sólido seco*

Figura D-66: Cuadro de texto para el ingreso de la Humedad inicial.

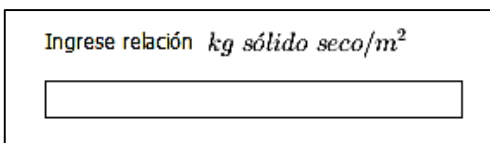
2. Ingrese el valor de humedad final dentro del recuadro en las unidades indicadas, véase figura D-67.



Ingrese humedad final en *kg humedad/kg sólido seco*

Figura D-67: Cuadro de texto para el ingreso de la Humedad final.

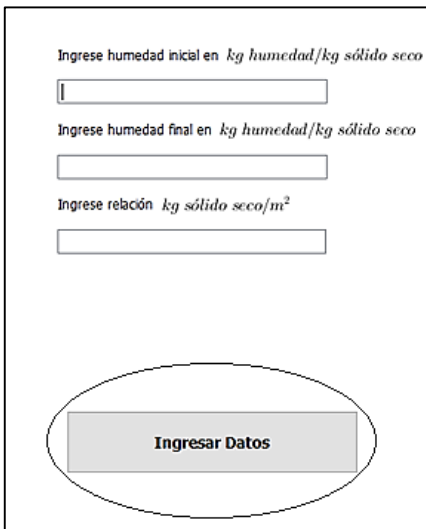
3. Ingrese la relación kilogramo de solido seco por metro cuadrado, véase figura D-68.



Ingrese relación *kg sólido seco/m²*

Figura D-68: Cuadro de texto para el ingreso de la relación de kilogramo de solido seco por metro cuadrado.

4. Presione el botón INGRESAR DATOS, véase figura D-69.



Ingrese humedad inicial en *kg humedad/kg sólido seco*

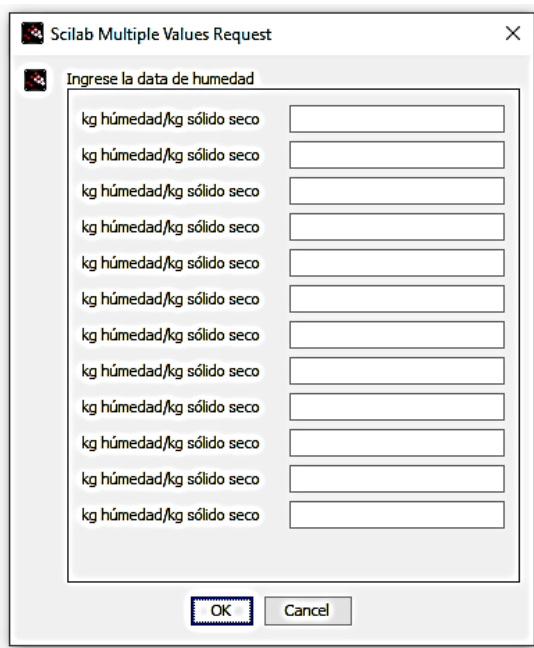
Ingrese humedad final en *kg humedad/kg sólido seco*

Ingrese relación *kg sólido seco/m²*

Ingresar Datos

Figura D-69: Botón ingresar datos.

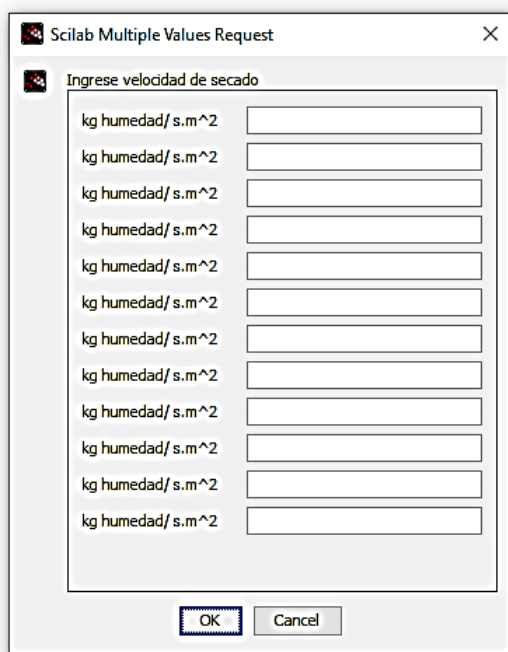
5. Ingrese los valores de data de humedad en las unidades indicadas, luego presionar OK, véase figura D-70.



The dialog box is titled "Scilab Multiple Values Request" and contains a sub-dialog titled "Ingrese la data de humedad". It features 12 input fields, each with the label "kg humedad/kg sólido seco". At the bottom, there are "OK" and "Cancel" buttons.

Figura D-70: Cuadro para el ingreso de data de humedad.

6. Ingrese los valores de velocidad de secado en las unidades indicadas, luego presionar OK, véase figura D-71.



The dialog box is titled "Scilab Multiple Values Request" and contains a sub-dialog titled "Ingrese velocidad de secado". It features 12 input fields, each with the label "kg humedad/ s.m^2". At the bottom, there are "OK" and "Cancel" buttons.

Figura D-71: Cuadro para el ingreso de velocidad de secado.

7. Una vez ingresado los datos anteriores haga clic en el botón calcular y verá en el recuadro de resultado la respuesta junto con sus unidades, también presentará la gráfica de velocidad de secado. De igual manera se cuenta con la opción de ayuda en la parte superior izquierda, donde se encontrarán los pasos a seguir para el uso del aplicativo, véase figura D-72.

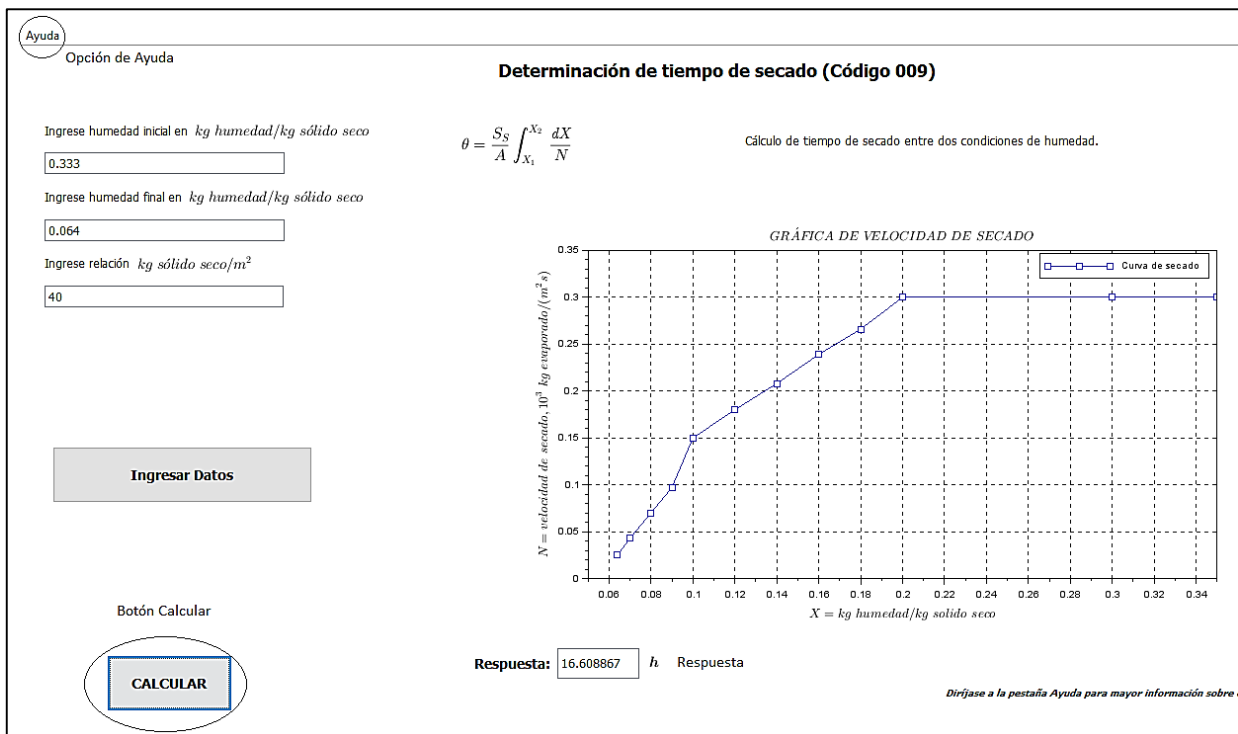


Figura D-72: Aplicativo 009 ejecutado.