

5  
Zij



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO**

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES  
"ZARAGOZA"**

**ESTUDIO TECNICO-ECONOMICO PARA LA  
SEPARACION DE SOLVENTES EN LA TORRE  
DE DESTILACION DE LA PLANTA PILOTO DE  
LA F.E.S. ZARAGOZA.**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:  
INGENIERO QUIMICO  
P R E S E N T A N I  
CARACHEO RANGEL JOSE JAIME  
ROJAS MARTINEZ CLAUDIA**

**U N A M  
F E S  
Z A R A G O Z A**



**10 DE MARZO DE 1996**

**ASESOR: ING. FERNANDO HERRERA JUAREZ**

**MEXICO, D. F.**

**1996**

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AVENIDA DE  
MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS  
SUPERIORES \*ZARAGOZA\*

JEFATURA DE LA CARRERA  
DE INGENIERIA QUIMICA

OF/IQ/JU/082/056/95

CLAUDIA ROJAS MARTINEZ Y  
JOSE JAIME CARACHEO RANGEL  
P R E S E N T E.

En respuesta a su solicitud de asignación de jurado para el Examen Profesional, les comunico que la Jefatura a mi cargo ha propuesto la siguiente designación:

PRESIDENTE: ING. ALEJANDRO ROGEL RAMIREZ  
VOCAL: ING. FERNANDO HERRERA JUAREZ  
SECRETARIO: ING. RAUL RAMON MORA HERNANDEZ  
SUPLENTE: ING. GABRIEL CRUZ ZEPEDA  
SUPLENTE: ING. MARTHA FLORES BECERRIL

A T E N T A M E N T E  
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"

México, D.F., 7 de diciembre 1995

ING. JOSE BENJAMIN RANGEL GRANADOS  
JEFE DE LA CARRERA

irm

**A LA FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA**

**AL ING. FERNANDO HERRERA JUAREZ  
POR SU VALIOSA DIRECCION**

**A NUESTROS PROFESORES**

**A NUESTROS PADRES Y HERMANOS**

**A NUESTROS FAMILIARES Y AMIGOS**

**A MAURICIO**

## **RESUMEN**

En el presente trabajo se lleva a cabo una simulación para la separación de la mezcla dimetilformamida-metanol-agua mediante el proceso de destilación, tomando como base los datos de la torre empacada de la FES Zaragoza, esto para determinar la factibilidad tanto técnica como económica de dicha separación.

Para lograr lo anterior, primeramente se estudia el funcionamiento de las torres tanto empacadas como de platos y se describen los métodos de cálculo para mezclas multicomponentes.

De igual forma, se presenta el balance de materia y energía del sistema propuesto para la destilación, así como un estudio de mercado de los componentes de la mezcla y una estimación de costos de separación, todo esto con la finalidad de tener los argumentos suficientes para poder determinar si es factible o no llevar a cabo este proceso.

# INDICE

## OBJETIVOS

INTRODUCCION 3

## I. GENERALIDADES

- 1.1 Ingeniería de procesos 7
- 1.2 Diseño de procesos 8
- 1.3 Simulación de procesos químicos. 11

## II. SIMULADORES DE PROCESOS.

- 2.1 Generalidades sobre los sistemas de simulación. 17
- 2.2 Enfoque de los sistemas de simulación. 22
- 2.3 Simuladores de procesos 29

## III. FUNDAMENTOS DE DESTILACION.

- 3.1 Destilación 33
- 3.2 Destilación binaria. 34
- 3.3 Destilación multicomponente. 38
- 3.4 Columnas de platos. 42
- 3.5 Columnas empacadas. 46

#### IV. PROPIEDADES DE LA MEZCLA.

4.1 Alcohol metílico.	51
4.2 Agua	54
4.3 Dimetilformamida	56
4.4 Mezcla	63

#### V. SECUENCIA DE CALCULO.

5.1 Métodos cortos de destilación.	65
5.2 Cálculos de columnas empacadas.	78
5.3 Balance de materia y energía.	90

#### VI. FACTIBILIDAD DE LA SEPARACION.

6.1 Estimación de costos de separación	103
6.2 Estudio de mercado (metanol y dimetilformamida).	105
6.3 Factibilidad de la separación.	114

#### ANALISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES.

Análisis de resultados.	118
Conclusiones.	119

#### BIBLIOGRAFIA.

## **OBJETIVOS**

Evaluar los costos de separación de la mezcla problema metanol-agua-dimetilformamida, para tratar de darle factibilidad económica a la utilización de la torre de destilación.

Hacer un planteamiento general de la operación de columnas empacadas y las diversas ventajas y desventajas que presentan este tipo de equipos de separación.

Proporcionar sugerencias y recomendaciones sobre la operación de columnas empacadas y los beneficios económicos que se pueden obtener del funcionamiento adecuado de las mismas.

## **INTRODUCCION.**

Hoy en día las compañías involucradas con la Industrias Químicas de proceso confían grandemente en la simulación de proceso para mantener y mejorar sus posiciones competitivas. Ya que integrando varios tipos de software de diferentes ramas como por ejemplo: estado constante, diagramas de flujo, simulación dinámica, energía, e integración, dinámica computacional de fluidos, la simulación de proceso puede desde luego servir como una herramienta potente.

La simulación puede proveer controles críticos y precisos a compañías en las industrias químicas de proceso. Por lo que no es sorprendente, que los controles computarizados puedan llegar a ser hoy en día mucho más comunes en operaciones de proceso. Desde luego los adelantos en ambos: software y equipo de computadora permiten el uso de herramientas poderosas de simulación directamente en sitios de planta. Con la ayuda de un fuerte, comercial y completo simulador, es posible construir un modelo confiable de simulación de planta que puede ser usado tanto en operaciones y mantenimiento preventivo, como también en estudios de reajuste.

Los simuladores de proceso están contruidos de manera que sea fácil y rápido su manejo. sin embargo para obtener resultados confiables, se requieren amplios conocimientos de termodinámica, operaciones unitarias y métodos numéricos.

Ya que la elección no adecuada de alguno de estos factores causa resultados alejados de la realidad y en consecuencia se pueden llegar a dar conclusiones erróneas.

La industria química, requiere una constante reconversión, debido a la necesidad de nuevos y mejores productos, así como restricciones en la cantidad de contaminantes emitidos. Por lo que para mantenerse competitiva dentro del mercado internacional, es necesario desarrollar procesos más eficientes, de tal manera de reducir los costos, aprovechar mejor las materias primas y reducir la contaminación al medio ambiente. Siendo el ingeniero químico el responsable de la solución de estos problemas.

En el presente trabajo se realiza la simulación de la planta piloto de la FES Zaragoza con el fin de conocer los consumos energéticos y de servicios para una operación más eficiente.

Se elaboró el soporte técnico para evaluar los costos de separación de la mezcla metanol, agua y dimetilformamida la cual es considerada mezcla de desecho; con el propósito de darle factibilidad económica a la recuperación de estos solventes.

Además se realizó un planteamiento general de el funcionamiento de columnas empacadas y las diversas ventajas y desventajas que presentan este tipo de equipos de separación.

Este trabajo se encuentra dividido en siete capítulos. En el primer capítulo se presenta en forma general un resumen acerca de qué es el Diseño e Ingeniería de procesos ubicando a la simulación de procesos dentro de dicha disciplina. En este capítulo además se habla de manera particular sobre la importancia y estrategias generales para la simulación de procesos químicos.

El capítulo dos consta de una explicación acerca de los sistemas de simulación existentes y sus enfoques, haciendo una descripción general del simulador de procesos MicroCHESS.

El capítulo tres se dedicó a exponer en forma general los fundamentos teóricos de la destilación binaria y multicomponente, así como una descripción general de las columnas de platos y columnas empacadas.

El capítulo cuatro se destinó a las principales propiedades de los componentes de la mezcla, haciéndose hincapie en la dimetilformamida ya que es el compuesto del cual se pretenden obtener mayores beneficios.

El capítulo cinco presenta la secuencia de cálculo del proceso, por lo que se describe detalladamente el método KUFEM que es el utilizado, así como la realización del balance de materia y energía del proceso.

En el capítulo seis se realizó el análisis económico del proceso, ya que se hizo la estimación de costos de separación, se analizó la rentabilidad de la separación y se elaboró un breve estudio de mercado del metanol y de la dimetilformamida.

El séptimo y último capítulo se destinó a presentar el análisis de resultados y conclusiones obtenidos del trabajo presentado.

Esta investigación pretende contribuir a la formación profesional de la población estudiantil de la FES Zaragoza, y muy en especial a los alumnos de la carrera de Ingeniería Química.

**CAPITULO I**  
**GENERALIDADES**

## 1.1 INGENIERIA DE PROCESOS.

La Ingeniería de procesos surge a partir de la segunda mitad de este siglo como resultado de los nuevos procedimientos, técnicas y de la necesidad de reordenar la cantidad de información existente fijando las pautas para el diseño de procesos.

El nacimiento de la ingeniería de procesos como una disciplina formal dentro de la Ingeniería Química va de la mano con el desarrollo de nuevas metodologías.

La Ingeniería de Procesos se define como la creación y cuantificación, o análisis de esquemas de procesos que formarán parte de una planta económica, fácilmente operable y segura. Dicha disciplina, por tanto exige la contribución de la ingeniería para el desarrollo diseño y mejoramiento de procesos.

El desarrollo de procesos está orientado a la conceptualización del diseño de procesos enfocándose hacia un estudio de factibilidad del mismo. Por tanto el desarrollo de un proyecto no solo implica reproducir resultados mediante programas de computadora, sino que debe de ser tratado como un sistema dinámico, susceptible de ser mejorado y con capacidad para ampliar sus habilidades mediante la incorporación de técnicas innovadoras.

Las continuas metas en la práctica de los ingenieros es encontrar nuevos procesos o mejorar los ya existentes, para satisfacer las demandas comerciales y financieras del ámbito de las empresas.

Mucha de la actividad profesional del ingeniero va encaminada a los procesos, y como se desarrollan en su tiempo de vida, desde su concepción en el laboratorio, su paso por la planta piloto, y su instalación en la planta industrial, hasta los días finales de esa planta química de proceso.

La evolución de un proceso pretende: concebir la idea, experimentar a nivel laboratorio, y finalmente realizar estudios de factibilidad económica con el fin de predecir si el producto en cuestión es comercialmente atractivo.

Hoy en día el significado de la ingeniería de procesos ha crecido hasta el punto de considerarse la rama encargada de planear, diseñar, operar y controlar cualquier clase de operación unitaria o proceso químico.

## 1.2 DISEÑO DE PROCESOS.

El propósito de la ingeniería es crear nuevos materiales. Nosotros intentamos llevar a cabo esta meta en Ingeniería Química vía transformaciones químicas (o biológicas) y/o separación de materiales. El diseño de procesos y plantas es una actividad creativa por medio de la cual se generan ideas para entonces trasladarlas a los equipos y procesos para así producir nuevos materiales o mejorar la calidad de los ya existentes.

Debemos de tratar de generar nuevas ideas para :

- Convertir productos de desecho en materiales reciclables.
- Crear materiales completamente nuevos como son fibras sintéticas, alimentos, etc.
- Encontrar nuevas rutas químicas y producir materiales ya existentes.
- Explotar nuevas tecnologías (ingeniería genética, ingeniería en alimentos, etc.)
- Explotar nuevos materiales de construcción (para altas temperaturas o presiones de operación elevadas, polímeros especiales, etc.)

Como un indicador del gran éxito que la ingeniería ha tenido, es de notarse que cerca del 50 % de los productos vendidos por la mayoría de las compañías dedicadas al ramo de la química, han sido desarrollados durante las dos últimas décadas.

A pesar de este excelente record de éxitos, debemos notar que muy pocas ideas nuevas ya sea para el mejoramiento de procesos existentes o para el desarrollo de nuevos procesos nos conducen a nuevas riquezas.

Por esto no es de sorprenderse que muy pocas ideas en el campo ingenieril demuestran ser siempre fructíferas teniendo los mismos patrones que cualquier otro tipo de idea o actividad creativa.

Desde que la experiencia indica que solamente un pequeño número de ideas siempre tendrán un pago, vemos entonces que la evaluación es uno de los componentes más significativos de cualquier metodología de diseño. En realidad, la síntesis de procesos, la selección de equipo y sus interconexiones, son una combinación tanto de la actividad de síntesis como de análisis.

Tal vez la principal característica que distingue a un problema de diseño de otro tipo de problemas ingenieriles es que estos son indefinidos, esto es, sólo una pequeña fracción de la información requerida para definir un problema de diseño está disponible. Por ejemplo, un químico podría descubrir una reacción química novedosa para hacer un producto existente o un catalizador nuevo para una reacción también existente, si queremos trasladar estos descubrimientos a un proceso nuevo vemos que para comenzar sólo contamos con la información que el químico obtuvo, además de la información disponible de las materias primas y productos.

Para suministrar la información faltante y poder definir el problema de diseño, tenemos que hacer suposiciones acerca de que tipo de unidades de proceso deberíamos usar, como las podríamos interconectar así como que temperatura, presión y flujo requeriremos, esta es por tanto la actividad de síntesis.

Esta actividad es sumamente difícil de realizar por la gran variedad de rutas químicas y de proceso que deben de considerarse para llevar a cabo la misma meta. De aquí que los problemas de diseño sean considerados como problemas abiertos.

Normalmente queremos encontrar procesos alternativos que tengan el menor costo, garantizando que sean seguros y fácilmente operables. En algunos casos podemos recurrir a las reglas heurísticas para descartar ciertos procesos alternativos, pero en muchos casos es necesario hacer comparaciones en base a costos para obtener la mejor alternativa.

A continuación se definen los tres subsistemas que conforman al diseño de procesos.

### **Síntesis de procesos.**

Durante un diseño de proceso, los puntos de vista y aspectos del proceso se van profundizando. En los niveles más altos, se trata de aspectos generales y abstractos. A medida que se va avanzando en el diseño, más y más detalles del proceso se van concretando. La manera de pasar de una representación abstracta a una más refinada, es realizada en la etapa de síntesis de procesos. Una definición de esta actividad podría ser la siguiente: la generación de alternativas de diseño y la selección de las mejores, en base a el análisis de información parcial o incompleta.

La síntesis es una actividad que aparece repetidamente debido al carácter recursivo del diseño. En el caso de la síntesis de un diagrama de procesos se generan otros subproblemas de síntesis como la red de intercambio de calor, o la secuencia de separación.

Los tres puntos más significativos en la síntesis son la representación, la búsqueda y la evaluación. Una representación adecuada permite algunas veces localizar rápidamente una solución o generar aquellas alternativas más competitivas, que de otra manera serían muy difíciles de resolver. La búsqueda debe darnos todas las posibilidades existentes, para después realizar una evaluación económica de cada situación.

### **Análisis de procesos.**

Las herramientas para llevar a cabo el análisis, son las más desarrolladas, como ayuda para el diseño. En el análisis, se propone un modelo que describe los fenómenos en estudio. El modelo nos permite obtener valores para el dimensionamiento y la evaluación económica de un proceso y las consecuencias de posibles modificaciones. En caso de modelar un equipo en funcionamiento, nos permite evaluar la eficiencia del funcionamiento de éste. El nivel de detalle de este modelo depende de las necesidades y posibilidades que se dispongan.

Actualmente se pueden realizar balances de materia y energía de los procesos por medio de simuladores de proceso comerciales. Con estos datos se puede generar un dimensionamiento preliminar y estimados de costos.

En estos programas se pueden elegir diferentes métodos de cálculo y criterios de convergencia, según sea la necesidad y el tiempo de que se dispone. El proceso en análisis se puede descomponer en pequeños subsistemas. A mayor número de subsistemas mayor será el grado de rigurosidad, pero mayor será el tiempo consumido, por lo cual es determinante el grado de análisis requerido.

La síntesis es una actividad que aparece repetidamente debido al carácter recursivo del diseño. En el caso de la síntesis de un diagrama de procesos se generan otros subproblemas de síntesis como la red de intercambio de calor, o la secuencia de separación.

Los tres puntos más significativos en la síntesis son la representación, la búsqueda y la evaluación. Una representación adecuada permite algunas veces localizar rápidamente una solución o generar aquellas alternativas más competitivas, que de otra manera serían muy difíciles de resolver. La búsqueda debe darnos todas las posibilidades existentes, para después realizar una evaluación económica de cada situación.

### **Análisis de procesos.**

Las herramientas para llevar a cabo el análisis, son las más desarrolladas, como ayuda para el diseño. En el análisis, se propone un modelo que describe los fenómenos en estudio. El modelo nos permite obtener valores para el dimensionamiento y la evaluación económica de un proceso y las consecuencias de posibles modificaciones. En caso de modelar un equipo en funcionamiento, nos permite evaluar la eficiencia del funcionamiento de éste. El nivel de detalle de este modelo depende de las necesidades y posibilidades que se dispongan.

Actualmente se pueden realizar balances de materia y energía de los procesos por medio de simuladores de proceso comerciales. Con estos datos se puede generar un dimensionamiento preliminar y estimados de costos.

En estos programas se pueden elegir diferentes métodos de cálculo y criterios de convergencia, según sea la necesidad y el tiempo de que se dispone. El proceso en análisis se puede descomponer en pequeños subsistemas. A mayor número de subsistemas mayor será el grado de rigurosidad, pero mayor será el tiempo consumido, por lo cual es determinante el grado de análisis requerido.

## **Optimización de procesos.**

La optimización de procesos se basa en utilizar una función objetivo, que representa un criterio económico, como pueden ser los costos, gasto de energía, rendimiento de una columna, etc., en términos de las variables de un proceso. La finalidad de una optimización es la de encontrar las condiciones de las variables de un modelo, de tal manera que se obtengan los mayores beneficios de este.

Para realizar la optimización de un proceso se deben haber pasado las etapas de síntesis y análisis. Ya que la optimización está enfocada a las variables de diseño y operación. En el caso, en que después de una optimización el proceso no sea rentable, se tiene que volver necesariamente a la etapa de síntesis.

La optimización fue aplicable comercialmente en problemas a gran escala en los finales de 1950 con el desarrollo de la programación lineal. Para utilizar los métodos de optimización, todavía se requiere de un análisis de las variables de decisión del proceso, la elección de las funciones objetivo, y el uso de experiencias pasadas.

### **1.3 SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS.**

El modelado y simulación de procesos ha tenido gran éxito en la Ingeniería de procesos ya que se considera como una herramienta de gran utilidad para el diseño y optimización de procesos físicos, biológicos y químicos.

El uso de los simuladores de procesos se ha hecho cada vez más común, observándose un excesivo crecimiento en las dos últimas décadas ya que con ellos se obtienen mejores resultados en tiempos mínimos.

Debido al incremento en el uso de simuladores de proceso, se ha desarrollado una gran competencia en este campo, por lo cual se requiere que el ingeniero desarrolle las siguientes habilidades:

- Debe familiarizarse con sistemas físicos en orden de poder simular y evaluar inteligentemente procesos reales. El proceso no puede ser visto como una caja negra.

**-Ser capaz de desarrollar relaciones que describan el comportamiento del proceso.**

**-Tener la capacidad de elegir las herramientas adecuadas para resolver problemas reales.**

Los ingenieros descubrieron que ellos han sido capaces de hacer significantes contribuciones a la sociedad a través de acertadas simulaciones de sistemas biológicos y ambientales.

La simulación de procesos químicos ha investigado comportamientos tanto en estado estable como dinámico.

El gran impacto que la simulación ha tenido en la industria química es debido a los beneficios aportados entre los que se mencionen los siguientes:

**- Para propósitos de diseño, es usualmente más barato usar técnicas de simulación incorporadas a datos de laboratorio como modelos matemáticos con los cuales se construyen diferentes tamaños en plantas pilotos.**

**-Representa un camino conveniente para investigar los efectos de los parámetros de sistemas y desordenes en la operación de procesos. Es usualmente fácil de desarrollar operaciones alternativas y evaluarlas mediante modelos matemáticos en lugar de usar métodos experimentales. Para verificar los resultados de la simulación algunos experimentos son ejecutados, pero solamente algunos son verdaderamente críticos.**

**-La simulación es un camino razonable para ejecutar extrapolaciones y escalamiento de procesos. Incorporando mecanismos fundamentales dentro de la simulación de procesos, los sistemas ejecutados pueden ser predichos en condiciones de operación diferentes.**

**-Entendiendo el mecanismo y comportamiento de los procesos además de comprender los modelos matemáticos usados el ingeniero aprende mucho acerca del proceso que está simulando. Para obtener una simulación exitosa, el significado de los mecanismos del proceso deben de ser cuantitativamente descritos.**

Mediante la resolución de modelos, usualmente las relaciones entre las variables de proceso y de equipo pueden ser fácilmente observadas.

La estrategia general para la simulación de procesos complejos sigue un camino bien definido de pasos los cuales se dan a continuación:

#### *Definición del problema.*

Esta es una fase muy importante de la simulación, la cual es considerada de suma importancia, pero desafortunadamente hay muy pocas reglas precisas que se pueden aplicar.

La clave real para la definición del problema es un ingeniero imaginativo, por tanto, lo que se requiere es un pensamiento creativo basado sobre una buena capacitación en ingeniería.

El ingeniero tiene que dedicar el tiempo suficiente en este aspecto del problema. Una buena definición del problema se logra contestando preguntas tales como: qué se busca, qué consecuencias importantes tiene ese estudio, por qué debería hacerse ese trabajo, etc.

#### *Modelado del proceso.*

En este punto, el ingeniero está listo para escribir ecuaciones de balance apropiadas para el proceso. Experimentos en laboratorio deben ser diseñados y ejecutados para determinar mecanismos de parámetros desconocidos. En esta etapa se decide que efectos son importantes y cuales pueden ser ignorados. El orden de magnitud del análisis, ayuda a hacer buenas simplificaciones. Por tanto, es imperativo que el ingeniero este consciente y no pase por alto las suposiciones hechas a lo largo del desarrollo matemático del modelo.

#### *Organización de las ecuaciones.*

Una vez que las ecuaciones matemáticas han sido reunidas, tienen que ser arregladas en una estrategia de solución, esto es, se decidirá que variables van a ser resueltas en cada ecuación. Para problemas pequeños, usualmente se ejecutan estas rutinas sin problema.

Sin embargo, para problemas grandes se debe tener cuidado por lo que se recomienda arreglar a las ecuaciones en un diagrama de flujo. Estos diagramas son usados con propósitos organizacionales siendo la estrategia de solución paralela la lógica de causa y efecto. Este orden natural nos conduce a estrategias de solución estables y eficientes.

#### *Cálculos.*

Para obtener soluciones a los problemas de simulación de procesos, el ingeniero tiene disponible varios niveles de cómputo.

La complejidad y no linealidad de los problemas de simulación requieren de soluciones basadas en el uso de un sistema de cómputo.

Estos sistemas son particularmente usados para resolver problemas que involucran manipulaciones numéricas.

En la actualidad existen lenguajes de cómputo que han sido diseñados para ser usado primordialmente por personas dedicadas a áreas científicas, teniendo estos lenguajes excelentes capacidades lógicas, por lo que se programan fácilmente rutinas de métodos numéricos, los cuales son necesarios en la resolución de ecuaciones algebraicas, diferenciales ordinarias y diferenciales parciales.

#### *Interpretación de resultados.*

El principal beneficio que se obtiene de simular un proceso químico, está en la interpretación inteligente de los resultados hecha por el ingeniero, en este punto, el ingeniero debe averiguar si el modelo realmente representa al proceso o si este necesita actualizarse y revisarse, teniendo la seguridad de que los resultados son razonables.

#### *Limitaciones de la simulación de procesos.*

Existen ciertas limitaciones en la simulación de procesos, las cuales deben ser del conocimiento del ingeniero, enlistando a continuación las principales:

-La carencia de datos y conocimiento de los mecanismos del proceso. El éxito de la simulación de procesos depende en gran medida de la información que esté disponible al ingeniero.

-Las características de las herramientas en computación. Existen cierto tipo de ecuaciones que todavía son difíciles de resolver, estas incluyen algunas ecuaciones algebraicas no lineales así como algunas ecuaciones diferenciales parciales.

-El peligro de olvidar las suposiciones hechas durante el modelado de procesos.

#### *Utilidad de la simulación de procesos.*

La simulación permite comparar distintos diseños y procesos que todavía no están en operación y ensayar hipótesis sobre sistemas o procesos antes de llevarlos a la práctica. Además nos permite estudiar el efecto de la modificación de las variables y parámetros con resultados reproducibles. En el modelo matemático se puede introducir o retirar a voluntad un error, lo cual no es posible en la planta real. Podemos decir entonces que la simulación constituye una importante ayuda material para el estudio de los sistemas de control.

Por estas razones, y otras que se verán más adelante, se puede concluir que la simulación computarizada está jugando un papel muy importante en la solución de procesos químicos, biológicos, energéticos y ambientales.

## **CAPITULO II**

# **SIMULADORES DE PROCESO**

## 2.1 GENERALIDADES SOBRE LOS SISTEMAS DE SIMULACION.

A principios de 1950 las principales compañías dedicadas a los procesos químicos tuvieron la preocupación de aplicar todos sus conocimientos para desarrollar sistemas computacionales, que representen explícitamente el conocimiento necesario para que un programa determinado resuelva un problema específico, en el campo de la ingeniería de procesos.

Inicialmente estos sistemas computacionales eran operados en las corporaciones donde fueron desarrollados, así como las principales compañías ingenieriles. Más tarde el uso de estos sistemas se empezó a extender a otros sectores de la industria, siendo ahora normal el uso de los softwares en cualquier compañía.

Hoy en día los softwares están disponibles para ayudar a los ingenieros de procesos en las siguientes áreas:

- Datos de propiedades físicas.
- Simulación de procesos.
- Tecnología pinch.
- Diseño de equipo.

El uso extenso de estos programas varía enormemente. En algunas industrias como en las refinerías, estos programas forman parte esencial de las herramientas del ingeniero, mientras que en otros sectores como en la industria minera y procesamiento de alimentos su uso es restringido.

### *Información de propiedades físicas.*

Es importante conocer datos acerca de las propiedades físicas de las sustancias porque esta información establece, ¿qué puede ser alcanzado en el proceso?, por ejemplo, si una mezcla particular puede ser separada por medio de una destilación.

Estos datos pueden ser también críticos en la determinación de un diseño particular de un equipo, por ejemplo la elección del compresor apropiado varía dependiendo de las propiedades del gas que se le alimenta.

Desafortunadamente la información acerca de las propiedades físicas representa no solo un área fundamental importante sino también una parte complicada y difícil.

Los procesos químicos involucran mezclas complejas no ideales (como por ejemplo el crudo) las cuales operan en un amplio rango de presión y temperatura. Esto implica que un ingeniero de procesos no puede mejorar simplemente los datos de interés de una tabla.

Enormes esfuerzos de investigación han resultado en el desarrollo de métodos para predecir las propiedades de varios tipos de mezclas, estos métodos, junto con bancos de datos asociados de parámetros básicos acerca de componentes individuales han sido compilados dentro de un sistema de datos de propiedades físicas.

La gran mayoría de bases de datos de propiedades físicas han sido creadas debido al uso que tienen en los programas de simulación. Estos programas hacen muy pesada la demanda en datos termodinámicos (tales como equilibrio vaporlíquido y entalpías) y también en propiedades de transporte (como densidad, viscosidad y conductividad).

Los simuladores de proceso típicamente gastan más del 80% de tiempo requerido en la simulación de un equipo en el cálculo de propiedades físicas. Dichos simuladores ofrecen muchas ventajas para el cálculo de propiedades termodinámicas, ayudando significativamente a los ingenieros de procesos.

### *Simulación de procesos.*

El propósito de la simulación de un proceso es permitir al ingeniero modelar el comportamiento en estado estable de la planta o parte de ella, bajo condiciones definidas llevando a cabo así el balance de materia y energía para el proceso.

Para ello se requiere resolver un gran número de ecuaciones no lineales que representan a los equipos así como el comportamiento de los componentes químicos.

El surgimiento de los simuladores de proceso se debió a la temprana aplicación de las computadoras para solucionar problemas en Ingeniería Química. Los primeros programas modelaban equipos individuales; por los años 60 muchas compañías habían construido programas capaces de resolver los enormes sistemas de ecuaciones resultantes de la simulación del comportamiento de los equipos.

Fue evidente que si estos programas se incorporaban dentro de sistemas que pudieran resolver la gran cantidad de ecuaciones resultantes de una planta completa, entonces se podrían hacer ahorros tanto en dinero como en tiempo.

El resultado de ésta evolución se ha observado en muchos programas hechos para la simulación de procesos que emplean el enfoque modular secuencial, el cual se describe a continuación:

La filosofía básica de este enfoque es simple, las unidades de operación o equipos son representados mediante módulos, el programa ejecutivo llama a cada módulo en turno, usando los datos de las corrientes de salida de la unidad anterior como datos de entrada de la siguiente unidad, los módulos son resueltos en la misma secuencia en la que fueron suministrados según el diagrama de flujo. Las ventajas de este enfoque son su básica simplicidad, resultados robustos, y esfuerzos considerables que pueden ser dedicados independientemente para cada una de las tres áreas.

Consecuentemente el programa ejecutivo puede ser desarrollado para suministrar un medio de definición de problemas y para acelerar la convergencia en los cálculos de recirculaciones. Este enfoque modular secuencial es una herramienta efectiva y confiable para simulaciones en estado estable, aunque presenta ciertas desventajas cuando se quieren hacer simulaciones dinámicas y además cuando el ingeniero desea modelar la planta en el modo de diseño ya que requiere usar bloques de control por manipular parámetros durante el cálculo agregando así otro nivel a las iteraciones.

Debido a estas y otras razones el desarrollo de sistemas modulares secuenciales a sido paralelo a un enfoque alternativo basado en la solución de sistemas de ecuaciones que representan al proceso. En este enfoque, el requerimiento para resolver cada unidad de operación o módulo en turno es eliminado. En su lugar, todas las ecuaciones no lineales que representan cada bloque y las conexiones entre ellos son resueltos simultáneamente. Siempre que exista un balance entre el número de ecuaciones y el número de incógnitas será posible resolver el problema formulado.

Sin embargo, si se agregan métodos para resolver ecuaciones diferenciales, este enfoque se presta para simulaciones dinámicas. Este enfoque por tanto es mas flexible, presenta como ventajas la habilidad de emprender el diseño o estudios dinámicos, siendo además más rápido y fácil de desarrollar nuevos modelos con propósitos especiales porque no hay la necesidad de crear algoritmos asociados para resolverlos.

Por estas razones, la mayoría de los desarrollos se han enfocado en los sistemas modulares secuenciales. Durante los últimos años con el desarrollo de nuevas técnicas y métodos matemáticos además de la disponibilidad de computadoras más poderosas, el enfoque hacia las ecuaciones ha tenido un amplio desarrollo comercial.

#### *Aplicaciones.*

##### Simulaciones en estado estable.

Hasta la fecha la mayoría de las aplicaciones de los simuladores se encuentra en la determinación del funcionamiento de las plantas en estado estable. Originalmente los simuladores tenían un propósito de diseño, pero estos sistemas encontraron amplias aplicaciones para estudios operacionales de las plantas.

El alcance de las aplicaciones de estos sistemas se determina por el contenido de los modelos y la aplicabilidad de los sistemas de propiedades físicas.

Las capacidades de los algoritmos de destilación son de gran interés para muchos ingenieros, los cuales son el resultado de años de investigación y desarrollo. Las principales aplicaciones se encuentran en las áreas de refinación además de tener gran aplicación en la industria de los petroquímicos, químicos y criogénica.

Los modelos manejados por los simuladores se basan en principios teóricos, existe una clase de simuladores, sin embargo donde los modelos son de naturaleza predominantemente empírica. En estos casos, los modelos son derivados de la observación del comportamiento de ciertas unidades, tales simuladores son ocupados principalmente en estudios de procesos específicos, especialmente en la industria de la refinación.

##### Optimización.

En los últimos 25 años los simuladores han llegado a ser más sofisticados debido a la gran demanda existente. Muchos de los sistemas modulares secuenciales ahora tienen la capacidad de ofrecer este tipo de tecnologías que todavía está en desarrollo.

En adición, los nuevos sistemas con enfoque hacia las ecuaciones ofrecen mayor flexibilidad y rapidez para estos propósitos. La optimización puede ser aplicada tanto a la etapa de diseño como a la de operación.

#### Simulación dinámica.

Aunque los simuladores en estado estable han sido ampliamente desarrollados, sin embargo se pueden obtener grandes beneficios de las simulaciones dinámicas. Sus aplicaciones son extensas e incluyen:

- Análisis de arranque y paro.
- Estudios de riesgos y seguridad.
- Diseño de sistemas de alivio.
- Análisis de sistemas de control y
- Entrenamiento de operadores, obteniéndose como beneficio:
  - Mejores diseños y plantas seguras.
  - Mejoramiento en la operación y control.

#### Tecnología pinch.

De los programas recientemente desarrollados en ingeniería de procesos que ha tenido gran impacto, es el referente al mejoramiento de la eficiencia térmica de procesos, conocido como tecnología pinch, el cual tiene como objetivo minimizar el gasto de energía a base de optimizar el intercambio de energía entre las corrientes de procesos y minimizar servicios de enfriamiento y calentamiento.

#### Diseño de equipo.

Tiene gran aplicabilidad en los simuladores de proceso para determinar como deberían de ser configurados los procesos y como deberían operar estos, los procesos necesitan de detalles de los equipos para verificar los esquemas más que de detalles de modelado.

El simulador por sí mismo es prometedor para emprender modelados rigurosos de destilación. Para estos detalles se requieren cálculos adicionales para que las dimensiones finales pueden ser determinadas.

Las unidades más comunes de equipos de proceso sin embargo son los intercambiadores de calor. Para estos, una gran cantidad de análisis rigurosos de las operaciones son requeridos.

Para el diseño de otros equipos, la profundidad de análisis para la ingeniería de procesos es más limitada, ésta necesidad es normalmente solucionada por pequeños programas desarrollados por las compañías. Una excepción a la regla es el caso de los reactores donde muchas firmas de ingeniería han desarrollado programas complejos especiales.

## **2.2 ENFOQUE DE LOS SISTEMAS DE SIMULACION.**

La orientación de un sistema de simulación se refiere a la forma de manejar y resolver los sistemas de ecuaciones que conforman el proceso, ya que el número y tipo de ecuaciones son básicamente las mismas en cualquier orientación.

Debido a que las dimensiones de estos sistemas de ecuaciones pueden variar desde unos cientos hasta más de cien mil las técnicas convencionales de solución ya no son aplicables a estos sistemas. Es por esto que se ha impulsado el desarrollo de técnicas de solución de matrices dispersas, mediante las cuales, se pueden solucionar estos sistemas de ecuaciones.

Las diferentes orientaciones surgen de las diversas formas de explotar la estructura de los sistemas para resolver los problemas de simulación y diseño de procesos. Existen principalmente dos orientaciones, las cuales a su vez se subdividen en dos enfoques cada una:

-Orientación modular.

\*Modular secuencial

\*Modular simultáneo

-Orientación basada en las ecuaciones:

\*Con rompimiento

\*Con linealización simultánea.

## **ORIENTACION MODULAR.**

Por medio de la orientación de un conjunto de módulos que describan individualmente una operación unitaria se puede representar un proceso químico.

Este proceso puede describirse por medio de una serie de ecuaciones no lineales cuyos cálculos son comprendidos tanto a nivel de diagrama de flujo como a nivel de cada módulo.

A partir de los valores conocidos de las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de los equipos pueden resolverse las ecuaciones de cada módulo con el objeto de calcular los valores de las variables de las corrientes de salida de éstos, mientras que a nivel de diagrama de flujo las ecuaciones que describen la conexión entre cada módulo así como las especificaciones de diseño deben ser resueltas.

Este modelo es visualizado fácilmente debido a su gran similitud con el diagrama de flujo de proceso.

Para resolver las ecuaciones de cada módulo se pueden utilizar más de un algoritmo además de que cada módulo puede generar sus propios valores iniciales.

Los módulos se pueden incorporar con facilidad al sistema ya que cada uno representa una operación unitaria.

Este enfoque tiene la desventaja que, debido a los múltiples ciclos que presenta así como al tamaño de las matrices de proceso, la convergencia es sumamente lenta, además de presentar ciertos problemas con el flujo de información.

### ***Orientación Modular Secuencial.***

El enfoque modular consta de un conjunto de ecuaciones y constantes para cada unidad de proceso dentro de subrutinas separadas, calculando valores para las corrientes de salida.

La parte secuencial del enfoque lleva a cabo cálculos de módulo a módulo comenzando con la corriente de alimentación hasta obtener los productos. Siendo necesario identificar previamente los ciclos de recirculación del proceso para poder asignar valores a las corrientes de corte.

Esto se hace con el objeto de que a partir de procedimientos iterativos se llegue a la convergencia de las corrientes de recirculación con las demás corrientes del módulo unitario.

Se dice que es secuencial porque los módulos son resueltos en la misma secuencia en la que aparecen en el diagrama de flujo, lo que implica una fuerte dependencia con la topología.

Las ecuaciones de conexión entre los módulos son manejadas en forma implícita, el programa ejecutivo transfiere los valores de entrada de acuerdo al diagrama. Las especificaciones que afecten directamente a las variables de las corrientes de salida como son las de diseño no se pueden introducir directamente al sistema ya que se requiere del uso de ciclos de control, en tanto que las especificaciones simples si son fácilmente incorporadas a dichos sistemas.

Un problema de diseño se resuelve de manera iterativa haciendo converger las variables de proceso hasta que satisfagan las especificaciones de diseño a base de ciclos iterativos de control, lo que implica que una especificación de diseño es tratada como una recirculación adicional.

La incorporación de módulos nuevos o más complejos se lleva a cabo fácilmente sin necesidad de cambiar la estrategia de solución de proceso. Sin embargo, cuando un sistema cuenta con una gran cantidad de módulos además de corrientes de conexión y de corte, el sistema se vuelve ineficiente debido a la presencia de ciclos múltiples.

Un simulador modular secuencial llega a la convergencia de sus ciclos a través de suposiciones en los valores de las corrientes de recirculación (corrientes de corte), iterando a base de métodos de convergencia adecuados hasta que los valores supuestos sean iguales a los calculados, dentro de cierta tolerancia. Cada iteración implica el cálculo secuencial de cada uno de los módulos involucrados en el ciclo.

Cuando existen múltiples corrientes de corte, cada una se hace converger en forma separada.

Existe una estructura jerárquica para la resolución de ciclos anidados la cual tiene una seria repercusión en la eficiencia numérica del sistema. Los ciclos mediante los cuales se logra la convergencia de las especificaciones de diseño (ciclos de control) se localiza en la parte más externa, dentro de éstos, se encuentran los ciclos necesarios para lograr la convergencia de las corrientes de corte.

A su vez dentro de ellos se localizan los ciclos propios de cada operación unitaria y por último se encuentran los ciclos que estiman las propiedades termodinámicas.

A pesar de no ser tan eficientes en sistemas que contiene múltiples corrientes de recirculación, este enfoque es el que más se utiliza en procesos comerciales.

Un programa con estructura secuencial modular cuenta con los siguientes componentes estructurales:

- Un archivo de propiedades físicas y termodinámicas de componentes puros y sus mezclas.

- Un sistema de trabajo que maneja bases de datos obtenidos del almacenamiento así como de los datos de entrada del problema.

- Un módulo individual de bases de datos derivados de los datos obtenidos del almacenamiento así como de los datos de entrada del problema.

- Un módulo individual de base de datos derivado de la base de datos de trabajo.

- Módulos o subrutinas para unidades de proceso individuales, procedimientos de cálculo incluyendo entradas y salidas para cada módulo, así como variables iterativas internas, si las hay.

- La topología del diagrama a ser usado por el sistema ejecutivo para ordenar la secuencia de cálculo. Esto es usualmente definido por una matriz de proceso, la cual especifica módulos unitarios estándares para usarse a lo largo de una simulación de proceso particular con números de identificación, positivos para las corrientes de entrada y negativos para las corrientes de salida.

- Rutinas para cálculos de recirculación y análisis de convergencia

- Otras rutinas matemáticas.

### ***Enfoque modular simultáneo.***

La estructura modular es conservada pero las ecuaciones de las corrientes de conexión y las especificaciones de diseño se hacen converger simultáneamente.

La principal diferencia es que para cada unidad, un módulo adicional es escrito, el cual relaciona cada valor de salida mediante una combinación lineal de todos los valores de entrada.

En este enfoque se manejan dos diferentes modelos, el riguroso se refiere a los modelos que describen las operaciones unitarias los cuales son usados para determinar los parámetros de los modelos simples.

Los modelos simples pueden ser de dos tipos, los lineales cuyos coeficientes pueden ser determinados mediante la perturbación numérica de los modelos rigurosos, y los no lineales usualmente representados por modelos aproximados de ingeniería.

Estos modelos simples requieren de una cantidad mucho menor de recursos computacionales. Para llegar a la solución se genera un sistema de ecuaciones de simulación de menor extensión, en contenido de variables internas así como de correlaciones para propiedades termodinámicas.

La convergencia de las variables de procesos se lleva a cabo resolviendo los modelos simples para obtener así valores de las variables de las corrientes de salida aproximados dentro de un límite de tolerancia, cuando no se alcanza esta tolerancia, se pueden modificar los valores de los parámetros de los modelos simples o mediante la obtención de valores más precisos en los modelos rigurosos.

Con este enfoque se elimina un ciclo iterativo, debido a que las especificaciones de diseño pueden manejarse directamente a nivel de proceso. Usa además modelos simplificados para realizar un análisis preliminar procediendo así a verificar el modelo simple en base a los modelos rigurosos.

Es requerido en este enfoque procedimientos con excelentes propiedades de convergencia. Un problema adicional que presenta se asocia al cálculo del jacobiano aproximado ya que éste requiere de un número mayor de recursos computacionales y tiempo.

## **ORIENTACION HACIA LAS ECUACIONES.**

Esta orientación se basa en el modelado de un proceso químico mediante la unión de todas las ecuaciones tanto de las operaciones unitarias, corrientes de conexión, así como de las especificaciones de diseño que lo describen.

Dichas ecuaciones son resueltas simultáneamente como un gran sistema de ecuaciones no lineales, requiriéndose entonces procedimientos que generen y representen las ecuaciones que describen el proceso completo.

En general, la simulación de un proceso en estado estable requiere la solución de ecuaciones simultáneas no lineales expresadas en la siguiente forma:

$$f(x,u) = 0$$

en donde  $x$  es vector de  $n$  variables de estado dependientes que incluyen todos los parámetros de equipo y las variables de las corrientes de entrada para cada operación unitaria y  $u$  representa a un vector de variables de decisión independientes que involucran a todas las variables internas así como de las corrientes de salida.

Un problema de simulación y diseño de un simulador orientado hacia las ecuaciones se puede formular como un problema de optimización.

Esta orientación presenta mayor flexibilidad en cuanto a que especificaciones diferentes generan diferentes sistemas de ecuaciones no lineales que son potencialmente más susceptibles de ser eficientemente resueltos evitando los ciclos iterativos anidados. A causa de la inexistencia de módulos, la información se maneja únicamente a nivel de proceso en forma de ecuaciones y variables, es por esto que no se presentan problemas de flujo de información entre unidades.

Debido a la rigidez de esta orientación en cuanto a la anticipada selección de los sistemas de ecuaciones a ser resueltas es común la aparición de inconsistencias termodinámicas, lo cual nos puede llevar a obtener resultados físicamente inexistentes o imposibles de ser solucionados. Requiere además valores iniciales razonables para operar eficientemente, los cuales solo pueden ser obtenidos a través de un recorrido secuencial del proceso. Al existir un error en la operación no se pueden extraer resultados parciales siendo complicado diagnosticar la falla.

### ***Enfoque basado en las ecuaciones con rompimiento.***

En este enfoque se necesitan suponer valores iniciales para un determinado número de variables con el fin de poder calcular las variables restantes a través de la solución de las ecuaciones.

Esto se realiza mediante procedimientos de sustituciones sucesivas. Las variables supuestas deben estar en forma explícita, de lo contrario, los residuos de las ecuaciones que contienen las variables supuestas pueden ser usados para aplicar algún otro procedimiento de evaluación de raíces.

La mejor estrategia de solución en este enfoque consiste en elegir modelos eficientes que permitan a las variables supuestas converger rápidamente, indicando que variables tienen valores supuestos y cuales son variables de diseño, con que ecuación se resuelven cuales variables así como en que secuencia.

Otra estrategia consiste en proponer el menor número de variables supuestas a fin de reducir el tamaño del subsistema, lo cual nos conduce a tener un mínimo número de variables que requieren iteración.

La ventaja que ofrece este enfoque es que un sistema de tipo ecuación variable suficientemente grande puede ser reducido a un sistema menor del tipo de ecuación supuesta-variable la cual es más sencilla de resolverse simultáneamente. Este enfoque aborda problemas de diseño y simulación más complejos y con mayor rapidez.

### ***Enfoque basado en las ecuaciones con linealización simultánea.***

Este enfoque implica la linealización simultánea de todas las ecuaciones y la iteración sobre todas las variables, a través de métodos de tipo Newton Raphson, quasi-Newton o una combinación de ambos. Dicho enfoque no presenta problemas en la resolución de ciclos anidados debido a que resuelve todas las variables iterandolas simultáneamente. Además las ecuaciones se pueden resolver en cualquier orden pudiendo aplicarse técnicas de convergencia de primer orden que son altamente precisas pero lentas.

Se pueden implementar en este enfoque estructuras de recirculación muy complejas y resolver adecuadamente los problemas de diseño.

Dicho enfoque no se ha utilizado ampliamente debido a que el requerimiento computacional que necesita es muy alto, puesto que tiene que resolver grandes sistemas de ecuaciones que genera para solucionar los problemas de simulación y de diseño.

Además, debido a que las dimensiones de las matrices dispersas son muy grandes los métodos de solución que existen aún no son eficientes, generando en algunas ocasiones resultados correctos matemáticamente aunque físicamente inexistentes.

## 2.3 SIMULADORES DE PROCESOS.

Todos los simuladores de procesos estan provistos de modelos de propiedades físicas y fenómenos químicos así como de equipos de proceso. La riqueza de un simulador es el resultado de la variedad de modelos con respecto a su naturaleza y a los múltiples niveles de exactitud disponibles. Los métodos rápidos proveen de respuestas rápidas en tiempos muy cortos usando pocos recursos computacionales, comprometiendola exactitud de los modelos comparada con la del proceso real.

La exactitud de un simulador de proceso depende de la exactitud de cada modelo individual así como de los algoritmos. Los modelos individuales no necesitan ser tan exactos para producir resultados idénticos a los de la planta, debido a que los modelos estan siendo continuamente mejorados.

Microchess es un simulador de procesos en estado estable, que tiene la principal característica de calcular balances de materia y energía en equipos de proceso.

El nombre Microchess viene de *micro*, microcomputadora y *chess* son las siglas en inglés de *CHemycal Engineering Simulation System*, Sistemas de simulación en Ingeniería química. Algunas de las aplicaciones de los simuladores son:

- Termodinámica y solución de ecuaciones
- Desarrollar diseños de proceso.
- Analizar múltiples alternativas de diseño.
- Predecir los efectos de cambios en las condiciones de operación de las plantas de proceso.
- Optimizar el consumo de energía.
- Eliminar enredos y visualizar el avance del proceso en turno.

**Microchess puede ser aplicado para simular diagramas de flujo de proceso conteniendo más de 100 corrientes y 50 piezas de equipo. El simulador cuenta con 14 módulos de equipo que son capaces de modelar muchas aplicaciones industriales.**

**El lenguaje de entrada del Microchess está orientado para que el usuario familiarizado con cálculos de ingeniería química lo manipule aunque no posea un conocimiento extensivo de la programación en computadoras.**

**El traductor de entrada es manejado por medio de tablas, lo que implica que toda la información requerida para declarar el proceso, tales como claves, valores por default, etc. son almacenados en tablas llamadas Archivos de definición del sistema.**

**La información de entrada que se requiere suministrar consiste en definir las corrientes de alimentación (flujo, composición, temperatura y presión), la secuencia y condiciones de proceso, etc., esto es, la información proporcionada en el diagrama de flujo de proceso. Los resultados obtenidos constan de una representación completa del funcionamiento de la planta.**

**Un simulador de proceso es una herramienta vital en el diseño de procesos, puesto que con él es posible diseñar procesos sumamente complicados en poco tiempo.**

**No sólo es posible diseñar procesos en este simulador, sino que se puede hacer optimizaciones a procesos existentes ya sea mejorando el rendimiento y/o reduciendo el uso de energía a través de modificaciones en las condiciones de operación o cambios en las especificaciones de los productos de salida.**

**Los pasos involucrados en el modelado de procesos son los siguientes:**

- Definir el diagrama de flujo de proceso a ser modelado.**
- Seleccionar las unidades de medición de entrada y salida de datos.**
- Especificar los componentes químicos involucrados a lo largo de todo el proceso.**
- Especificar el modelo a ser usado par el cálculo de propiedades físicas.**

- Romper el proceso en unidades de operación y escoger el modelo apropiado a cada bloque ( definir el diagrama de flujo).
- Definir la corriente de alimentación al proceso.
- Especificar las condiciones de operación de cada bloque.

Microchess proporciona una base de datos con propiedades físicas para 206 componentes puros, a la cual se le pueden agregar todos aquellos que sean requeridos. Además Microchess calcula las propiedades termodinámicas de las mezclas en las corrientes de proceso requeridas.

**CAPITULO III**

**FUNDAMENTOS DE  
DESTILACION**

### 3.1 DESTILACIÓN.

La destilación es un proceso de separación utilizado en la industria química para la separación de mezclas líquidas basándose en los puntos de ebullición de los componentes, ya que cuando se tiene una mezcla con puntos de ebullición diferentes, al ponerlos a ebullicir, en la fase vapor existirá más componente de aquel cuya presión de vapor sea mayor o cuya temperatura de ebullición sea menor ya que este se volatilizará más rápidamente.

La función que realiza la columna de destilación es la siguiente: vaporiza al componente más volátil es decir él o los componentes más volátiles se encuentran en mayor proporción en la fase gaseosa, por lo que se pone en contacto una corriente fría con la corriente gaseosa que va ascendiendo provocando que se condense aquel componente más pesado regresando este último a los fondos y dirigiéndose hacia los domos el componente más ligero. Es decir se llevan a cabo a lo largo de la columna equilibrios líquido-vapor.

La destilación puede llevarse a cabo por dos métodos principales: el primero implica la producción de un vapor por ebullición de la mezcla líquida que se quiere separar, condensando enseguida estos vapores, sin llevar ninguna porción del líquido condensado como reflujo al rehervidor para que se ponga en contacto con el vapor que se desprende. En el segundo método se envía una parte del condensado al rehervidor de tal forma que este retomo se encuentra en íntimo contacto y en contracorriente con los vapores que se desprenden y van hacia el condensador. Este último método tiene gran importancia y ha recibido el nombre de rectificación.

Existen dos tipos de destilación que no implican rectificación el primero de ellos es el denominado destilación en equilibrio o destilación flash, y el segundo es el de la destilación diferencial.

La destilación de equilibrio implica la vaporización de una fracción de una carga de líquido, manteniendo tanto el líquido como el vapor formado en íntimo contacto hasta el final de la operación, de manera que el vapor está siempre en equilibrio con el líquido, retirando el vapor y condensándolo. En la destilación diferencial o destilación sencilla, el vapor que se genera al hervir el líquido se va separando a medida que se forma y enseguida se condensa. Este tipo de destilación se aproxima a los procesos comerciales discontinuos o intermitentes, también se le conoce como destilación Rayleigh.

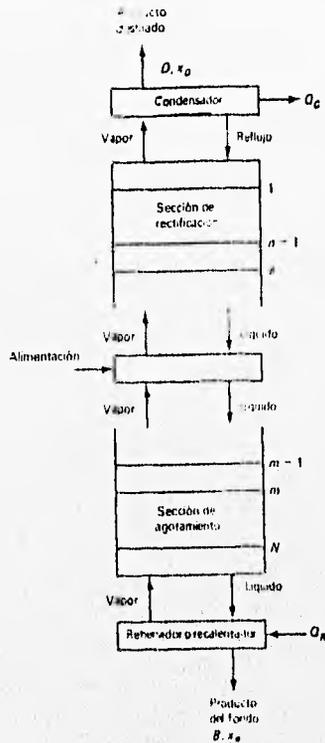
La rectificación ha recibido un gran desarrollo y es el más utilizado en la práctica como método de separación, además de que generalmente es un proceso continuo.

### 3.2 DESTILACION BINARIA.

En la práctica industrial, la separación de dos componentes volátiles por lo general se realiza sobre una base continua. Esto se logra mediante el uso de una columna de destilación o de fraccionamiento. La alimentación se introduce en forma continua en algún punto intermedio de la columna. El calor que se introduce al rehervidor vaporiza una parte del líquido. Este vapor asciende por la columna debido a que su densidad es menor que la del líquido que desciende. Se proporcionan etapas en la columna para permitir contacto íntimo del vapor y del líquido. Esos platos se fabrican en varias configuraciones pero desde el punto de vista de estudio, su importancia radica en que permiten al líquido fluir hacia abajo, a través de la columna, y al vapor ascender por la misma, realizando de este modo un mezclado y una separación periódicos. El vapor que entra a un plato desde el plato de abajo se encuentra a una temperatura más alta que el líquido que desciende a ese plato desde el plato de arriba. El vapor se enfriará lentamente, con alguna condensación que ocurra de los materiales más pesados, en el caso del líquido, éste se calentará con alguna vaporización correspondiente a los componentes más ligeros. El vapor que abandona el plato de la parte superior de la columna entra al condensador, donde el calor se remueve por enfriamiento con agua o algún otro medio de enfriamiento. Una parte del líquido que se condensa se regresa a la columna como refujo líquido y el restante se convierte en el producto destilado.

La combinación de la generación de vapor en el rehervidor y la condensación del líquido en el condensador, con sus respectivas corrientes regresando a la torre, diferencia la destilación discontinua de las separaciones en equilibrio o flasheo diferencial.

El vapor del rehervidor y el líquido del refujo permiten obtener productos de elevada pureza, y al mismo tiempo proporcionan una recuperación mucho mayor de los materiales útiles alimentados a la columna.



**Fig. 3.2.1. Esquema de una columna de destilación continua.**

El condensador puede operar ya sea como un condensador total o como un condensador parcial. En el primer tipo, todo el vapor que entra al condensador se condensa y el refujo que se regresa a la columna tiene la misma composición que el destilado o producto superior. En el caso de un condensador parcial, solamente una parte del vapor que entra al condensador se condensa e líquido. En la mayor parte de este segundo tipo de condensadores, sólo se condensará el líquido suficiente con el fin de proporcionar el refujo para la torre.

No obstante, en algunos casos, se condensará más líquido del que se requiere para el reflujo, y en realidad serán dos los productos destilados, uno que tenga la misma composición que la del reflujo, y el otro un producto en forma de vapor. En ambos tipos de condensadores parciales, el vapor y el líquido que salen del condensador se encuentran muy cerca del equilibrio uno con otro.

En la mayor parte de los casos, el rehervidor operará como un rehervidor parcial que vaporiza sólo una porción del líquido que entra desde el plato del fondo de la columna. En tal operación, el líquido y vapor que salen del rehervidor están muy cerca del equilibrio. En ciertos casos, como el control de la entrada de calor, el rehervidor puede operar como uno de tipo total con vaporización completa del líquido que entra.

La sección de la columna ubicada entre el plato de alimentación y el condensador por lo regular se conoce como la sección de *rectificación o de enriquecimiento* de la columna.

En la sección de rectificación, el plato de la parte superior (domo) por lo general se denota como el plato 1 y el plato inmediatamente arriba del de alimentación es el plato *Nésimo*. La sección de platos que se encuentra entre el plato de alimentación y el rehervidor por lo común se denomina sección de *aligeración o de agotamiento*.

El plato del fondo en la sección de agotamiento se numera etapa 1 y el plato de la parte superior es la etapa *iésima*.

La nomenclatura que se ocupa de identificar las corrientes y composiciones en una columna de destilación es sencilla una vez que se entiende. En casi todos los casos, los flujos de las corrientes y las composiciones están sobre bases molares.

Por ejemplo, para el régimen de flujo del destilado, el flujo molar total sería  $D$ , la composición del líquido en el producto destilado sería  $x_D$ ; la composición del vapor en el producto destilado sería  $y_D$ ; las moles de un componente en el producto destilado serían  $l_D$ ; las moles de un componente en la fase vapor del producto destilado serían  $v_D$ .

El diseño de una columna de destilación para operación continua requiere información acerca de la interrelación de tres variables: el número de platos que se requiere, el régimen de reflujo que se requiere y el calor de entrada que se requiere en el rehervidor. Estas tres variables determinan tanto el tamaño físico de la columna en términos de los medios de enfriamiento del condensador y los requerimientos de calor del rehervidor.

## **MÉTODOS DE DISEÑO**

### **-Método de McCabe-Thiele**

El procedimiento de McCabe Thiele (1925) , es nombrado así por los dos hombres que originalmente presentaron esta técnica de solución.

En este método se reducen los cálculos largos y tediosos de los métodos tradicionales ya que por medio del uso del diagrama x-y, se pueden leer las composiciones de las corrientes en forma gráfica, y lo que es más importante es que nos proporciona datos aproximados de las principales variables de destilación que necesitamos para resolver el problema deseado. Esto, sin embargo, deja por calcular los laboriosos balances de materia y de calor.

Las consideraciones que se emplean en el desarrollo de este procedimiento gráfico, en muchos casos no se manifiestan como serias limitaciones. En la mayor parte de las aplicaciones industriales, los dos componentes por separar serán miembros adyacentes de una serie homóloga. Esto significa que, en la mayoría de los casos, se desprecia el calor del mezclado de los dos componentes y sus entalpías están lo suficientemente próximas como para que la suposición de un derrame molar constante en la columna sea razonablemente preciso.

En la operación conocida como derrame molar constante, el derrame del líquido en los platos siguientes en una sección determinada de la columna es constante en términos de las moles totales que fluyen por unidad de tiempo, y lo mismo sucede para el flujo de vapor.

La localización del plato de alimentación adecuada ha sido una suposición inherente de los métodos de construcción gráficos. En las operaciones en planta puede o no introducirse en el punto adecuado en la columna.

### **-Método de entalpia-composición (Ponchon-Savarit)**

Se presentan casos en los que no se aplican las consideraciones de calor de mezclado despreciable y/o calores latentes molares constantes de vaporización.

En esos casos, el método de McCabe Thiele no proporcionará una buena descripción de la separación que se realiza. Ponchon (1921) y Savant (1922) presentaron un procedimiento gráfico que incorpora los balances de entalpía como una parte integral del cálculo. Este procedimiento combina los cálculos del balance de materia con los cálculos del balance de entalpía, de tal forma que no sólo se obtienen las composiciones del vapor y del líquido en la columna, sino también proporcionan información sobre las funciones del condensador y del rehedidor.

### 3.3 DESTILACION MULTICOMPONENTE.

Las separaciones de multicomponentes se realizan usando el mismo tipo de columnas de destilación, rehedidores, condensadores, intercambiadores de calor, etc., que se emplean para separaciones binarias. Sin embargo, existen algunas diferencias fundamentales entre las dos operaciones que deben ser completamente comprendidas por el diseñador si él o ella van a diseñar apropiadamente un sistema multicomponente.

Esas diferencias implican el uso de la regla de las fases para especificar las condiciones termodinámicas de una corriente en equilibrio. Debido a que la mayor parte de las fracciones forman parte de un sistema global, el análisis total también juega una parte importante.

Cuando se especifica una separación binaria, el diseñador tiene la libertad de especificar la cantidad del componente más volátil en el destilado. En un sistema de dos componentes, el resto del cálculo tiene que ser el segundo componente.

En sistemas multicomponentes no se alcanza el mismo grado de especificidad, a causa de la presencia de otros componentes en el producto de la parte superior los cuales no se pueden especificar en forma independiente. Cuando uno de estos componentes comienzan a aparecer en el destilado, será a muy baja concentración. A medida que la mayor parte del destilado se retira, la composición de ese componente aumentará hasta un máximo y después comenzará a disminuir. Típicamente, se presentarán dos regímenes del destilado en los cuales la composición de cualquier componente será la misma.

Existirá un número infinito de regímenes de destilado entre esos valores en los cuales la composición del producto de la parte superior alcanzará o excederá algún valor especificado. Por esta razón se tiene que utilizar un método de especificación diferente para sistemas multicomponentes.

La meta primordial del diseñador es especificar la separación multicomponente de tal forma que sólo exista una solución única y que cualquier procedimiento que emplee aquellas especificaciones llegue a la misma solución única. Para lograr esto en los sistemas multicomponentes, se deben seleccionar dos componentes conocidos como los *componentes clave*. El componente *clave ligero* es aquel acerca del cual se cuenta con suficiente información para especificar su recuperación en el producto destilado.

El componente *clave pesado* es aquel componente acerca del cual hay suficiente información para especificar su recuperación en el producto del fondo. En la mayor parte de los casos, el componente ligero será el componente que menos aparecerá en la corriente del residuo (fondo) en cualquier cantidad apreciable, y por el contrario, el componente clave pesado será el que menos esté presente también en la corriente del destilado. La última condición no actúa como restricción para la selección de los componentes clave.

Con el fin de llevar a cabo los cálculos en sistemas multicomponentes, en la actualidad se cuenta con varios métodos cortos. Por lo general, éstos involucran una estimación del número mínimo de platos y de la estimación de la relación de reflujo mínimo.

Así como el uso de algunas correlaciones para predecir la relación entre el número real de platos teóricos y la relación de reflujo real necesaria para producir el producto especificado.

La selección apropiada de los componentes clave es importante si se desea especificar en forma adecuada una separación multicomponente. Por el contrario, una selección inadecuada de estos componentes puede conducir a una columna diseñada incorrectamente.

En la práctica industrial la destilación multicomponente es uno de los procesos más frecuentes.

### **3.3.1 PROCEDIMIENTOS DE CALCULO**

#### **PROCEDIMIENTOS RIGUROSOS.**

La disponibilidad de grandes computadoras electrónicas hizo posible la resolución rigurosa del modelo de etapas de equilibrio para una columna de destilación de varias etapas y multicomponentes, con una exactitud limitada sólo por la precisión de los datos utilizados de equilibrio de fases y entalpia. El costo de obtención de esa solución es relativamente bajo, en comparación con el de una solución obtenida por medios manuales. En consecuencia, cuando aparecieron las computadoras, la mayor parte de las investigaciones de métodos de cálculo de la destilación pasaron de la búsqueda de técnicas abreviadas de aproximación al desarrollo de algoritmos eficientes de computación par resolver los problemas en forma rigurosa.

Esos esfuerzos se han visto coronados por el éxito y existen ya métodos que permiten resolver con exactitud casi todos los tipos de problemas de destilación con rapidez y eficiencia. Por todo esto los métodos rigurosos son una de las mejores alternativas, dado que permiten evaluar las condiciones internas, plato a plato del equipo con precisiones que dependen de los métodos para evaluar sus propiedades termodinámicas, equilibrio de fases, entalpia, etc.

Las limitaciones de espacio impiden el análisis detallado y la comparación de técnicas matemáticas que se utilizan en la actualidad para la resolución rigurosa de problemas de destilación

#### **PROCEDIMIENTOS CORTOS.**

Estos métodos se emplean generalmente para diseño y optimización dado que generan los valores mucho más rápido. Esta método se evalúa manualmente, con bastante aproximación (más del 95%) y en menor tiempo que cálculos por el método riguroso. Entre los más importantes tenemos el método Pseudobinario, el método de Smith-Brinkley y el método KUFEM.

### **Método Pseudo Binario (MPB)**

El método MPB está basado en un análisis rápido para la destilación multicomponente utilizando la ecuación de Smoker para este propósito. En este método se asume volatilidad relativa constante, flujo molar constante, lo cual es válido para cuando se dispone de un gran número de etapas. La solución de problemas es similar, al método de McCabe Thiele, la ecuación de Smoker, sin embargo elimina la necesidad del cálculo etapa por etapa y puede ser fácilmente programada.

La diferencia primordial entre el método MPB y el KUFEM radica en que el cálculo del  $R_{min}$ , no requiere cálculos iterativos.

### **Método de Smith- Brinkley.**

Smith y Brinkley (1960), presentaron una ecuación general que se puede aplicar tanto a procesos de absorción y extracción, como a la destilación. El método de Smith-Brinkley se basa en una resolución analítica de las ecuaciones de diferencias finitas que se pueden escribir para procesos de separación por etapas. Este método es aplicable a una columna de destilación con un rehovidor parcial o una entrada de calor a la etapa del fondo. La etapa más baja de equilibrio se debe numerar siempre con uno, sea cual sea su forma. El método no es aplicable estrictamente a una columna con un condensador parcial, por que pasa por alto cualquier diferencia posible entre la composición superior y la de reflujo. El efecto de un condensador parcial se puede determinar aumentando el número total de etapas de equilibrio en 1.0.

### **Método KUFEM.**

Se le denomina así porque utiliza los nombres de cinco hombres que se dedicaron al estudio y análisis de las columnas de destilación multicomponente. Kirkbride, Underwood, Fenske, Erbar y Maddox aportaron las ecuaciones que componen al método KUFEM, uno de los más eficientes para el diseño y optimización de columnas de destilación multicomponentes.

El método combina la ecuación de reflujo total de Fenske, la ecuación de reflujo mínimo de Underwood, la ecuación que localiza el plato de alimentación de Kirkbride y la correlación gráfica de Erbar y Maddox, que relaciona el rendimiento real de la columna con las condiciones de reflujo total y mínimo.

En este método se requiere la distribución de componentes por separar (componentes clave), composición, condición térmica de la alimentación, y razón de reflujo de operación. Con esto el método evalúa el  $R_{min}$ , el número de platos teóricos y el plato de alimentación así como la distribución de los componentes en el domo y en el fondo.

### **3.4 COLUMNAS DE PLATOS.**

Hay una variedad considerable de dispositivos para hacer que el contacto entre las dos corrientes sea íntimo y que pueden dividirse en dos tipos principales: columnas de platos y columnas de relleno. Las columnas de plato se subdividen a su vez en: columnas de campanas burbujeadoras y columnas de platos agujereados.

#### **Columnas de campanas burbujeadoras.**

La columna está dividida en secciones por medio de una serie de platos horizontales. Cada plato lleva un cierto número de cortas chimeneas; cada chimenea (o tubo de ascensión de vapores) está cubierto por un casquete en forma de campana, que está asegurada en su posición por una pieza con tres patas y un pasador. El borde de la campana puede ser dentado o las paredes laterales ranuradas.

El vapor asciende desde el plato inferior a través de las chimeneas, es desviado hacia abajo por la campana y sale en forma de burbujas por el dentado o por las ranuras de las campanas. Sobre el plato se mantiene una capa de líquido por medio de las tuberías de descenso, y la altura del líquido ha de ser tal que las ranuras permanezcan sumergidas. El tubo de descenso, que viene del plato superior, está cerrado por el líquido que hay sobre el plato inferior, de tal manera que el vapor no puede circular por esta tubería.

Normalmente el líquido se alimenta por el extremo de un diámetro por medio de un tubo de descenso desde el plato inmediatamente superior, circula a través del plato y se descarga por el otro extremo del diámetro mediante otro tubo de descenso, al plato inmediatamente inferior.

El borde del plato puede ir, pero raramente va soldado a la carcasa de la torre. El plato puede ir remachado a un anillo que a su vez va soldado a la carcasa. También los platos pueden ir soportados unos por otros por intermedio de una serie de pernos.

Se emplea una gran variedad de construcciones de acuerdo con el tamaño de la columna y de la frecuencia con que sean necesarias las reparaciones. En lugar de dejar las chimeneas sin sujeción en los agujeros del plato, pueden ir soldadas al mismo.

La campana puede mantenerse en su posición por un perno pasante, puede tener un soporte que descansa sobre la parte superior de la chimenea o puede también estar remachada a una tira soldada a la chimenea.

Volvemos a decir que hay una gran variedad de construcciones prácticas, debiendo darse preferencia a las de más simple construcción y que hagan más fáciles las sustituciones.

#### **Columnas de platos perforados.**

Una característica reciente en el proyecto de columnas, es utilizar en lugar de campanas burbujeadoras, platos planos con un gran número de perforaciones de pequeño diámetro. Estas perforaciones tienen normalmente 2.4 a 6.3 mm de diámetro con sus centros separados desde 25.4 a 51 mm. La velocidad del vapor que sube a través de los agujeros es suficiente para impedir que el líquido puede caer por los mismos, por lo que tales platos deben ir provistos de las bajadas de alimentación y descarga del líquido.

Primeramente se creyó que el plato perforado era más efectivo en una zona de cargas mucho más limitada que los platos de campanas, pero estudios recientes han puesto en tela de juicio esta conclusión. Los platos perforados se emplean hoy en día con mucha frecuencia en columnas y su importancia en comparación con los platos de campanas burbujeadoras va en aumento.

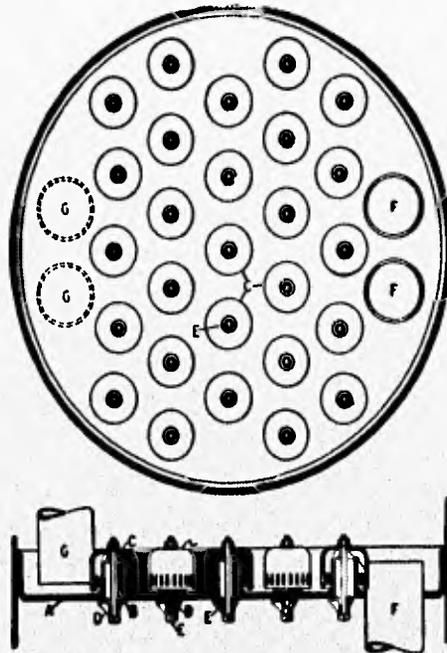


Fig. 3.4.1. Construcción de la columna de campanas burbujeadoras: A, plato de la columna; B, chimenea de subida del vapor; C, campanas burbujeadoras; D, sujeción en patas de araña; E, patas de sujeción; F, tubo de salida de líquido al plato inferior; G, tubo de llegada de líquido desde el plato superior.

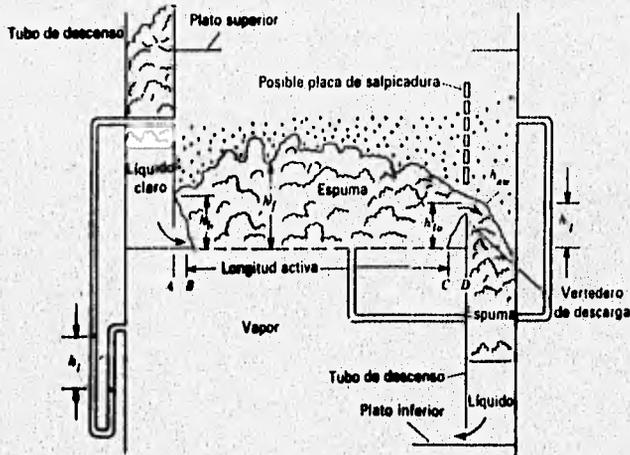


Fig. 3.4.2. Plato Perforado.

Aparentemente el plato perforado es más efectivo en el enriquecimiento del vapor en los componentes de puntos de ebullición más bajo que el plato de campanas y aparentemente puede operar con velocidades de vapor más elevadas que el plato de campanas sin originar un arrastre excesivo cuando está adecuadamente diseñado.

Un desarrollo de esta misma idea, de introducción relativamente reciente es el plato *Turbogrid*. Este plato, en lugar de estar construido por una chapa plana de metal con agujeros, consiste en una serie de rejillas horizontales provistas de rendijas estrechas, en este caso no se intenta impedir que el líquido que se alimenta caiga por las aberturas, a través de las cuales se eleva el vapor y por tanto esos platos no van provistos normalmente de esclusas de entrada y salida. El líquido fluye hacia abajo entre la parrillas al mismo tiempo que el vapor asciende a través de las mismas rendijas.

Esos platos se han utilizado en columnas de gran diámetro y aparentemente tiene una más elevada efectividad de separación, así como una menor caída de presión que los platos de campanas burbujeadoras.

Con respecto a la tecnología de construcción de las columnas de fraccionamiento en el momento actual se encuentra en estado de revisión y parece que tiende hacia las columnas de platos agujereados y de parrillas, dejando de lado los platos de campanas burbujeadoras. Varios diseños particulares que han aparecido en el mercado, son más complicados, pero intentan huir de la construcción antigua de campanas burbujeadoras. Sin embargo esta clase de columnas se utiliza aún con gran amplitud en gran número de instalaciones y permanece como una pieza normal del equipo de destilación.

#### **Propiedades de las columnas de platos.**

-Pueden ser diseñadas para manejar amplios rangos de cargas de líquido, sin que se presenten problemas de operación por inundación.

-El diseño de torres de platos es más confiable y requiere un factor de seguridad menor.

-Cuando la relación de masa velocidad del líquido a la masa velocidad del vapor es baja, se prefieren torres de platos.

-Las torres de platos soportan cambios importantes en las condiciones de temperatura de operación

-Los equipos con platos pueden operar con sólidos disueltos en el líquido sin presentarse problemas serios de mantenimiento.

-Soportan amplios rangos de operación con gran eficiencia.

-Se prefieren cuando es requerida la extracción o enfriamiento lateral de productos.

Por estas razones, las columnas de platos se usan con mayor frecuencia en procesos industriales, mientras que las empacadas generalmente tienen aplicación a nivel planta piloto y laboratorio.

### **3.5 COLUMNAS EMPACADAS.**

Puesto que el objeto de una columna de destilación es la de poner en íntimo contacto las fases líquida y vapor, cada una con la otra, se deduce que cualquier tipo de relleno que se coloque en la columna y que presente una gran superficie de contacto, será adecuado para efectuar la operación que se desea. Esto lleva de la mano, en la mayor parte de los casos, la utilización de columnas de relleno, en las que la columna propiamente dicha está vacía, y se rellena con una determinada clase de material que presenta una gran superficie para ser mojada por el líquido. Las torres de relleno deben cumplir con las siguientes características entre otras cosas: deben tener poco peso, la máxima superficie mojada por unidad de volumen y ofrecer una sección razonable para el paso de los vapores, a fin de que la pérdida de presión por fricción que se origine sea pequeña.

Se han utilizado una gran variedad de materiales de relleno tanto en un tiempo como en otro, pero probablemente el más utilizado es el anillo Rasching. Un anillo Rasching está formado por un cilindro hueco con el diámetro igual a su altura. pueden construirse en metal; en este caso se cortan de una tubería. También pueden hacerse de plástico, cerámica, porcelana u otros materiales.

Se han propuesto muchas variaciones de los anillos Rasching, pero el anillo sencillo con o sin tabiques o hélices interiores, permanece aún como relleno normal. En la práctica, los anillos se dejan caer en la torre al azar y rara vez se colocan en un orden regular cualquiera.

Las columnas de relleno presentan ciertas ventajas que determinan en algunos casos específicos su elección, entre ellas las torres de platos con campanas burbujeadoras y las de platos perforados. Las columnas de relleno tienen una caída de presión menor por unidad de altura que los otros tipos de construcción. En columnas de pequeños diámetros, en las que es difícil colocar más de dos o tres campanas burbujeadoras por plato, la columna de relleno es casi el único tipo que puede utilizarse y siempre es más barata que en estos pequeños diámetros que las columnas de campanas.

Puesto que los anillos Rasching pueden fabricarse de cualquier material, las columnas de relleno son casi el único dispositivo que puede utilizarse para operaciones con materias muy corrosivas, al menos cuando no son apropiados el acero inoxidable y aleaciones similares. Además en una columna de relleno que ha sido proyectada debidamente, la cantidad de líquido retenida por la columna es muy pequeña.

Esto puede ser una ventaja cuando se trata de líquidos sensibles a la temperatura y que han de estar en la columna durante un tiempo pequeño. La desventaja de las columnas de relleno es que no son relativamente flexibles. Dentro de los límites apropiados, tienen aproximadamente una mayor efectividad que una columna de platos perforados o de campanas burbujeadoras, pero no operan sobre amplias zonas de cargas de vapor o líquido por unidad de sección recta de la torre. Otra desventaja es que la distribución del líquido de esta clase de torres es difícil, aún en el caso de que el líquido se distribuya adecuadamente sobre el relleno en la cúspide de la torre. Se ha visto que cae y tiende a concentrarse en las paredes dejando el centro del relleno sin mojar. En consecuencia, en las torres de gran diámetro o de gran altura será necesario colocar a intervalos determinados redistribuidores que toman el líquido de las paredes y lo llevan al centro de la torre.

### **Principales características de las columnas empacadas.**

- Manejan una alta carga de vapor y baja carga de líquido.
- Su eficiencia varía con el tipo y tamaño del empaque.
- La distribución del líquido es difícil en las torres empacadas de diámetro mayor a 3 pies.
- Pueden manejar líquidos corrosivos sin dañar al empaque (cerámica)
- Ocasionalmente una baja caída de presión en los fluidos manejados.
- Son fáciles de construir.
- Tienen bajo costo inicial.
- Se recomienda su uso cuando el diámetro es menor de 3-4 ft.
- También se recomienda su uso cuando los líquidos son espumantes.
- La retención de líquido en su seno es pequeña.
- Se prefieren para servicios de operación subatmosférica.
- Requieren distribución del líquido a intervalos de 16 a 20 ft.
- Los empaques de paredes delgadas (anillos Pall) dan capacidades equivalentes a platos.

Las torres empacadas en general son menos costosas que las de platos. La disponibilidad de los equipos es mejor en las de empaque, ya que las de platos deben construirse para cada servicio específico. El costo de una torre empacada de diámetros grandes es mayor que su equivalente de platos. Para diámetros pequeños se invierte el resultado.

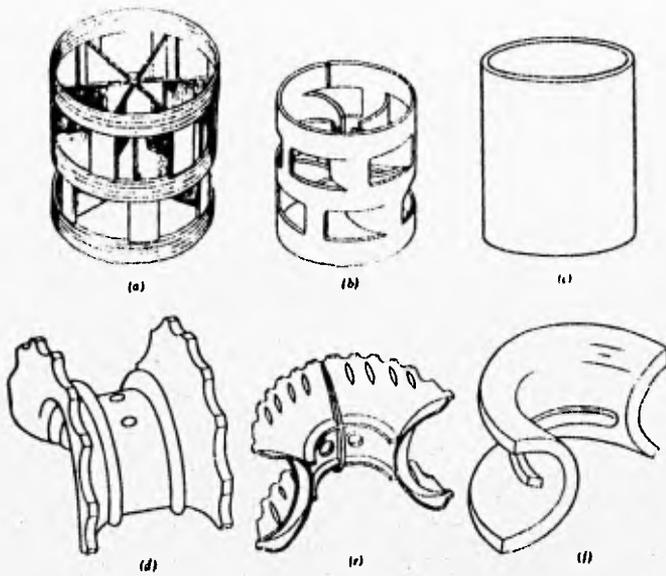


Fig. 3.6.2. Espigas de Malla.

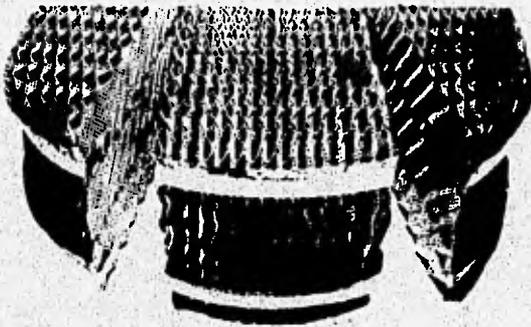


Fig. 3.6.3. Espigas Estructuradas.

## **CAPITULO IV**

# **PROPIEDADES DE LA MEZCLA**

## ORIGEN DE LA MEZCLA.

La mezcla utilizada como fundamento del presente trabajo, fué proporcionada por una empresa química que actualmente la tiene como desecho de proceso, por lo que tiene que pagar a terceros para que se la lleven y dispongan de ella, ya sea que la incineren o almacenen ya que está considerada como inservible.

Esta mezcla está conformada por los siguientes componentes y concentraciones molares correspondientes:

-Dimetilformamida	40 %
-Metanol	30 %
-Agua	30 %

### 4.1 ALCOHOL METILICO. (CH<sub>3</sub>OH)

También se le conoce como metanol, alcohol de madera, carbinol, espíritu de madera. Solamente en algún caso aislado, y siempre en pequeña cantidad se ha comprobado la existencia del alcohol metílico libre en la naturaleza, por el contrario, sus derivados están bastante difundidos. Por esto muchas esencias vegetales contienen ésteres de alcohol metílico, como son materias colorantes y alcaloides.

### PROPIEDADES.

Es un líquido incoloro, neutro a los papeles reactivos, se disuelve en agua en todas proporciones, y tiene un olor particular, a la vez alcohólico y etéreo.

Arde con llama azulada muy poco luminosa; tiene todas las reacciones de los alcoholes primarios, y cuando se le destila en presencia de cloruro de zinc fundido se verifican reacciones muy complejas obteniéndose entre sus productos el metano, y el hexametilbenceno, cuerpo de constitución cíclica.

Punto de fusión	- 144.04 °F
densidad de liq. a 68°F	49.47 $\frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}$
punto de ebullición	148.28 °F
Índice de refracción	1329 (68 °F)
tensión superficial	22.6 $\frac{\text{dinas}}{\text{cm}}$
viscosidad	0.593 centipoises (68 °F)
presión de vapor	92 mm (68 °F)
punto de inflamación	60.80 °F
temperatura de autoignición	867.20 °F

Envases: Camiones sistema de 15,000 litros.

Calidades: Técnica; Q.P. (99.85 %); electrónica (se emplea para limpiado y secado de componentes).

#### OBTENCION.

El único procedimiento que se empleaba en épocas anteriores para la obtención industrial del alcohol metílico consistía en la destilación de la madera. La fracción líquida de esta destilación, el llamado "vinagre de madera", contiene junto al ácido acético (10%), acetona (0.5%), acetaldehído, alcohol alílico, acetato de metilo, amoníaco, aminas y alcohol metílico en cantidades de 1.5 a 3%. El ácido acético se separa de esta mezcla haciendo pasar el destilado por lechada de cal en caliente, con lo cual queda retenido en forma de acetato cálcico. La separación de la cetona y el alcohol metílico se consigue mucho más difícilmente debido a la proximidad de sus puntos de ebullición. (acetona p.eb. 133.70 °F, alcohol metílico p.eb. 148.28 °F). No obstante esta dificultad, la industria consigue obtener un alcohol metílico casi totalmente libre de las sustancias que le acompañan, mediante cuidadosas rectificaciones en aparatos de columnas. El alcohol metílico impuro se conoce con el nombre de "espíritu de madera".

Modernamente se ha descubierto un método de obtención del alcohol metílico, que consiste en reducir el monóxido de carbono por el hidrógeno en presencia de mezclas de ciertos óxidos metálicos (óxidos de cromo y de cinc) que actúan de catalizadores.

Este proceso exige el empleo de temperaturas altas (unos 842 °F) y presiones elevadas (unas 2939 psias).

Por este elegante procedimiento, que está llamado a desplazar totalmente al de obtención del metanol a partir de la madera, se fabrica hoy día, una gran parte del alcohol metílico consumido. Como productos secundarios se forman alcohol isobutílico y otras sustancias que, empleando otros catalizadores (sales de cobalto), pueden llegar a ser el producto principal de la reacción.

El alcohol metílico químicamente puro se obtiene con más comodidad por saponificación de sus ésteres, por ejemplo, del oxalato de metilo bien cristalizado.

## PELIGROS.

Inflamable, peligroso riesgo de incendio. El metanol produce la embriaguez y es un tóxico enérgico; las bebidas con él preparadas dan lugar frecuentemente a trastornos de la vista, ceguera e intoxicaciones que terminan con la muerte. Por esta razón está severamente prohibido su empleo para las bebidas alcohólicas. Tolerancia, 200 ppm en el aire. Etiqueta de precaución MCA. Límite de explosión en el aire, 6 - 36.5 % por volumen.

## USOS.

Producción de formaldehído y terftalato de dimetilo; síntesis química (metilaminas, cloruro de metilo, metacrilato de metilo, etc.); combustibles de aviación (por inyección de agua); anticongelante para automóviles; disolvente de la nitrocelulosa, etilcelulosa, butiral polivinilo, shellac, resina, resina de manila, colorantes; desnaturizante del alcohol etílico; deshidratador del gas natural.

Precauciones de transporte: (ICC, CG, IATA) etiqueta roja. Denominación legal de la etiqueta (ICC, CG): alcohol de madera.

## 4.2 AGUA (HOH).

Compuesto químico cuya fórmula es  $H_2O$ , o sea que contiene en su molécula un átomo de oxígeno y dos de hidrógeno. A temperatura ordinaria es un líquido, inodoro e incoloro en cantidades pequeñas, en grandes cantidades retiene las radiaciones, por lo que a nuestros ojos adquiere un color azul. El punto de solidificación del agua (transformación en hielo) bajo la presión de una atmósfera, ha sido tomado convencionalmente como cero de la escala termométrica Celsius, mientras que el punto de ebullición le ha sido asignado el valor de 100 de la misma escala.

La estructura de la molécula de  $H_2O$  no es lineal, sino en forma de V, con un ángulo entre los dos enlaces O-H de  $105^\circ$ , este hecho, junto con la mayor electronegatividad del oxígeno, hace que la molécula sea muy polar.

El agua es, pues, un óptimo disolvente de las sustancias de naturaleza iónica, en cuanto, a que neutraliza la atracción electrostática de los iones del compuesto, provocando la disociación de los mismos.

En estado líquido, sin embargo, las moléculas de agua no se disponen de manera desordenada, sino que existe una cierta estructura en este líquido no ideal, una ordenación de las moléculas  $H_2O$  para constituir asociaciones macromoleculares de volumen, forma y fluctuantes en el tiempo y en el espacio ocupado por el líquido. Los responsables de este comportamiento son los puentes o enlaces de hidrógeno que se crean entre un átomo de oxígeno (polarizado negativamente) de una molécula y átomos de hidrógeno (con polaridad positiva) de otra molécula.

En estado puro el agua conduce muy poco la electricidad; en efecto, sólo una mínima parte está disociada en iones  $H^+$  y  $OH^-$ . El agua puede ser "fijada" en estado sólido como agua de cristalización o de coordinación en posiciones bien definidas del retículo del compuesto hidratado o bien en posiciones estáticas en las celulas.

Un ejemplo de agua de cristalización lo encontramos en el alumbre. Una importancia particular debe atribuirse al efecto provocado por el agua sobre la arcilla. En la estructura cristalina de los minerales arcillosos existen grupos hidrófilos dispuestos rítmicamente en capas reticulares.

El agua se coloca entre estas capas, separandolas y permitiendo que se deslicen unas sobre otras. Se interpreta así sobre esta base estructural el hinchamiento y la plasticidad de las arcillas.

## PROPIEDADES.

Líquido incoloro, inodoro e insípido; las formas alotrópicas son hielo (sólido) y vapor. El agua es un líquido altamente polar con alta constante dieléctrica (81 a 62.6 °F), lo que explica su poder disolvente. Es un electrólito débil, que ioniza como  $H_2O +$  y  $OH^-$ . A la presión atmosférica tiene un peso específico, 1.0 (4 °C); punto de congelación, 0 °C (32 °F) y se dilata aproximadamente el 10 % cuando se congela; viscosidad, 1.002 centipoise (248 °F). Calor específico, 1 caloría por gramo; presión de vapor (100 °C), 760 mm Hg. Índice de refracción, 1.333. El agua puede ser supercalentada en un autoclave e incrementando la presión; y puede ser superenfriada por adición de cloruro sódico u otro compuesto ionizante. Tiene actividad catalítica definida, especialmente de oxidación metálica.

## OBTENCION.

- a) Oxidación de hidrógeno
- b) Producto final de combustión
- c) Producto final de una reacción ácido-base
- d) Producto final de reacción de condensación.

## PURIFICACION.

- a) Destilación
- b) Reacción de intercambio de iones (zeolita)
- c) Cloración
- d) Filtración.

## USOS.

Fabricación de papel; procesos textiles; disolvente; enfriante industrial; filtración; lavados y purgas; hidrólisis; cemento Portland; sistemas hidráulicos; fuente de energía; generación de vapor.

Envases: Bombas de cristal; camiones cisterna; tuberías.

### 4.3 DIMETILFORMAMIDA (DMF).

#### PROPIEDADES FISICAS.

La DMF es un líquido de color claro, de alto punto de ebullición, no viscoso, altamente polar, destilable, higroscópico con un débil pero característico olor a amina. Las características físicas más importantes pueden resumirse como se indica a continuación:

Punto de fusión	- 77.80 °F
Punto de ebullición (14.50 psias)	308.3 °F
Densidad (68 °F)	59.31 lb/ft <sup>3</sup>
(122 °F)	57.53 lb/ft <sup>3</sup>
Índice de refracción $\eta_p$ 68 °F	1.4310
$\eta_p$ 77 °F	1.4282
Tensión superficial (68 °F)	35.5 dinas/cm
Calor específico (Cp a 68 °F)	0.8872 BTU/lb °K
Conductividad térmica (104 °F)	11272 BTU/lb
Calor de formación (64.4 °F)	- 1438 BTU/lb
Conductividad eléctrica (77 °F)	6x10 <sup>-8</sup> / cm
Constante dieléctrica (77 °C)	36
Momento dipolar	3.82 D
Punto de flash (DIN 51794)	136.4 °F
Temperatura de ignición (DIN 51794)	770 °F
Límite explosivo en el aire	2.2 - 16 vol %

La DMF es miscible en todas proporciones con el agua, alcoholes, éteres, cetonas, ésteres y disulfuro de carbono, así como también con hidrocarburos clorados y aromáticos. Por el contraste, tiene solubilidad limitada o insolubilidad completa en hidrocarburos alifáticos.

Muchos productos de alto peso molecular son bastantes solubles en DMF, pero también es un buen solvente para un número de aceites secadores, plásticos, derivados de celulosa, hules naturales y clorados.

La solubilidad de los poliuretanos en la DMF es función de las condiciones bajo las cuales ellos son preparados.

Muchos hidrocarburos halogenados, varias sales inorgánicas así como también varios gases inorgánicos y orgánicos son altamente solubles en DMF

Otros gases tales como amoníaco, monóxido de carbono, dióxido de carbono, oxígeno, y el hidrógeno se disuelven en DMF bajo condiciones límite a presión atmosférica.

## PROPIEDADES QUIMICAS.

La DMF es estable al aire y a la luz y puede ser destilado sin descomponerse a presión atmosférica, por estas y otras características difiere mucho del compuesto del que proviene: la formamida,

No obstante la descomposición de la DMF se observa en temperaturas arriba del punto de ebullición, resultando como productos monóxido de carbono y dimetilamina.

Este compuesto también muestra más baja tendencia que la formamida a hidrolizarse. Es higroscópico, sin embargo, ya que el agua absorbida del aire dejará en la DMF rastros de hidrólisis; estos rastros de humedad producen el olor fuerte a amina que frecuentemente acompaña a la DMF comercial. La resistencia de la DMF a hidrolizarse es demostrada por el hecho que refluendo 5% de una solución acuosa de encontró solo una descomposición de 0.17 % después de 120 hrs.

La DMF pura puede manejarse sin riesgo. No obstante, existen algunos informes de reacciones en las cuales la DMF muestra una reactividad muy cercana a lo explosivo. Así, con ciertos hidrocarburos halogenados a temperatura elevada y en presencia de hierro ocurre la descomposición explosiva.

Las reacciones energicas de oxidación se han hallado en sistemas de DMF que contienen ácido crómico así como también cuando los nitratos se disuelven en DMF. Finalmente, los vapores de DMF forman una mezcla combustible con el aire.

## PRODUCCION.

Las primeras experimentaciones dirigidas hacia la producción de alquilformamidas se iniciaron en el siglo XIX. Así A. Behal informó en 1889 que las alquilformamidas se obtenían por la acción de mezclar anhidridos de ácido fórmico y otros ácidos alifáticos que contenían a las alquilaminas. Desde entonces, la dimetilformamida ha sido sintetizada por la reacción de ácido hidrocianico con el metanol o metilaminas en presencia de agua.

Otros enfoques incluyen la reacción de amoníaco o formamida con hidrógeno y dióxido de carbono en presencia de catalizadores, así como la reacción de dimetilamina con hidrógeno y dióxido de carbono. Los procesos también se han descrito comenzando con monóxido de carbono y dimetilamina solo o junto con trimetilamina.

Actualmente dos métodos dominan la preparación comercial de la DMF: el de síntesis directa y el proceso de dos pasos.

### *Síntesis Directa.*

La síntesis directa o síntesis de un solo paso de DMF comienza con monóxido de carbono puro, es decir una corriente de gas que contiene monóxido de carbono. Este reacciona en un proceso continuo con dimetilamina, y se usa una solución de metóxido de sodio en metanol como catalizador. El formato de metilo presumiblemente se forma como un intermediario. La mezcla de reacción pasa a través de un intercambiador de calor externo para quitar el excesivo calor generado y para asegurar un completo mezclado de los componentes. La reacción se lleva a cabo entre 0.5 y 11MPa a 50-200 °C. La mezcla de reacción sale del reactor mediante una cámara de decompresión. Además de DMF, el producto crudo contiene metanol, una cierta cantidad de dimetilamina que no reaccionó, monóxido de carbono disuelto y catalizador residual. La adición de ácido o agua desactiva cualquier catalizador presente resultado de la formación de formato de sodio. Monóxido de carbono disuelto, junto con gases inertes, escapan de la mezcla durante la decompresión, y los gases fuera son removidos por la combustión. La destilación preliminar es seguida por una segunda destilación en una columna de separación; aquí la DMF se separa del metanol el cual contiene rastros de dimetilamina. La última destilación obtiene como resultado un producto de 99% pureza.

## Proceso de dos pasos.

El proceso de dos pasos para la síntesis de DMF difiere del de síntesis directa porque el formato de metilo se forma separadamente y se introduce en forma de material 96% puro (grado comercial). Cantidades equimolares de formato de metilo y dimetilamina se someten a una reacción continua a 60-100 °C y 0.1-0.3 Mpa. El producto resultante es una mezcla de DMF y metanol. El proceso de purificación involucra destilación y es análogo al que se describió para la síntesis directa. Sin embargo, no se requiere ninguna separación de sales porque no hay catalizadores involucrados en el proceso. Según las propiedades corrosivas de ambos materiales y productos, el acero inoxidable tiene que ser usado como material de construcción para instalaciones de producción.

## PROTECCION AMBIENTAL.

Las propiedades físicas de la DMF (punto de autoignición y el punto flash), son tales, que el compuesto está exento de la clasificación de líquidos peligrosos. De acuerdo al Instituto Nacional de Ecología en la Ciudad de México, la DMF es una sustancia clasificada como tóxica (Primer Listado de Sustancias Tóxicas; Gaceta Sanitaria, Octubre de 1987), sin embargo, no entra en la clasificación de sustancias altamente riesgosas (Primer y Segundo Listado de Actividades Altamente Riesgosas; Diario Oficial de la Federación del 28 de marzo de 1990 y 4 de mayo de 1992 respectivamente). Si el fuego causado por DMF se llega a presentar, puede extinguirse con agua, agentes químicos secos, o dióxido de carbono. La DMF se observa como un líquido muy dañino con respecto a la contaminación de agua, y su descarga directa en arroyos y los lagos debe evitarse. Las emisiones de DMF que excedan 3kg/hr deben ser diluidas tal que la concentración máxima en el aire no exceda de 150 mg/m<sup>3</sup>. Si este límite no puede alcanzarse, los gases correspondientes deben tratarse con agua o ser quemados. El contenido de DMF en el aire puede medirse por cromatografía de gases o con un detector infrarrojo.

## CALIDAD, ESPECIFICACIONES Y ANALISIS.

La mayoría de las aplicaciones de DMF requieren que esta esté disponible con una pureza alta. La tabla en la siguiente página contiene las especificaciones aplicables a la DMF en el mercado de solventes.

Las bases y ácidos contenidos en el muestreo de la DMF se establecen fácilmente por valoración potenciométrica. El método de elección para determinar DMF en una solución acuosa depende de la concentración de ésta: amba del 10% puede ser cuantificada por cromatografía de gases, las concentraciones más inferiores, se miden mejor con un fotómetro infrarrojo.

#### Especificaciones requeridas de DMF.

Compuestos	Límite	Método de prueba.
DMF	min 99.9 %	cromatografía de gases
METANOL	max.100 mg/kg	cromatografía de gases
AGUA	max. 0.03% en peso	DIN 51 777
Rango de ebullición	152.5-153.5 °C	DIN 53 171
Contenido de ácido (HCOOH)	max. 20 mg/kg	titulometría.
Contenido de base [ NH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ]	max. 20 mg/kg	titulometría.

Si los rastros de DMF son mínimos como en aguas residuales, debe llevarse a cabo una combinación de métodos físicos y químicos para su degradación. Así cualquier rastro de DMF presente puede ser hidrolizado con ácido, después de lo cual la solución se hace alcalina y la dimetilamina resultante se destila. En ausencia de impurezas de ácidos y bases, el contenido de DMF puede calcularse con medidas físicas simples tal como densidad o índice de refracción.

#### ALMACENAJE Y TRANSPORTE.

Si está pura y anhidra a temperatura ordinaria, la DMF no tiende a corroer metales durante el almacenaje y transporte, por ejemplo, con el acero estándar, el valor lineal de corrosión para la DMF es menos de 0.01mm por el año. Las excepciones a esta generalización incluyen cobre, estaño y sus aleaciones. Debido a que la DMF es higroscópica, fácilmente absorbe mezclas de el aire, lo cual la vuelve más corrosiva. Para prevenir la contaminación de hierro, la DMF debe envasarse bajo una atmósfera seca de nitrógeno si se usan recipientes de hierro.

Para evitar todo riesgo de contaminación, se debe almacenar en recipientes de acero inoxidable, aunque los recipientes de aluminio se recomiendan para la DMF usada en la producción de fibras sintéticas. La DMF puede embarcarse en contenedores, camiones tanque y recipientes fabricados de acero inoxidable.

Los tambores de hierro con una capacidad de 200 kg también se pueden utilizar. Sin embargo no debería permitirse que la DMF tenga contacto con hidrocarburos clorados a causa de la potencialidad que esta tiene para la reacción explosiva, especialmente con compuestos tales como: tetracloruro de carbono o hexaclorobenceno en presencia de hierro disuelto.

#### USOS.

Las aplicaciones principales de DMF son como un solvente y como un extractor particularmente para sales y compuestos de alto peso molecular. Este papel es uniforme con la interesante combinación de propiedades físicas y químicas que presenta: bajo peso molecular, constante dieléctrica alta, donador de electrones y su gran capacidad para formar complejos.

El uso más importante de DMF, es como un solvente para polímeros, por ejemplo en la preparación de soluciones de poliacrilonitrilo para la manufactura de fibras de poliacrilonitrilo. En este proceso la DMF residual puede ser reciclada de las fibras hiladas con relativamente poco gasto de energía. Además la DMF se usa como un solvente en la preparación de láminas de alta calidad con base en poliuretanos, que son de otra manera difíciles de solubilizar, y se emplea como un solvente para revestimiento de placas con poliamidas.

El punto de ebullición alto y alto poder de solvencia de la DMF nos muestra su uso adicional como un solvente para el esmalte de cables fabricados con poliamidas, poliésteramidas, o poliuretanos.

Así mismo, su capacidad de solubilizarse también lo hace un componente efectivo de removedores de pintura, y se usa como un solvente selectivo en una gama amplia de procesos de fabricación. Por ejemplo, la DMF es útil en separar acetileno de etileno, y ácido clorhídrico, ácido sulfhídrico o dióxido de azufre de  $\text{CO}_2$  que contenga estos gases.

La DMF o las mezclas que la contienen son usadas por las refinerías de petróleo para extraer compuestos aromáticos de las mezclas de hidrocarburos.

Las soluciones hechas especialmente en DMF pura sirven como relleno de condensadores electrolíticos, este papel es posible por la alta constante dieléctrica de la DMF.

También se usa sola o con otros solventes en las recristalización de aromáticos, heterocíclicos, tinturas, agentes fluorescentes de blanqueo, y pigmentos. La industria farmacéutica también utiliza su amplia solvencia y propiedades de extracción. La DMF podría potencialmente ser empleada en la síntesis de aldehídos, acetatos, amidas, y ésteres.

#### TOXICIDAD

Es muy tóxica, se absorbe por la piel, su tolerancia máxima es de 10 ppm en el aire. Es inflamable y presenta un moderado riesgo de incendio.

#### ASPECTOS ECONOMICOS.

La DMF es producida por numerosos fabricantes en todo el mundo; la capacidad total de producción, se estima en 250 000 toneladas al año. Mucha de la producción es utilizada directamente por los fabricantes, los más importantes son los siguientes:

#### Fabricantes de DMF

<i>Fabricante</i>	<i>País</i>	<i>Capacidad anual (ton)</i>
Air Products	USA	7 000
BASF AG	Alemania	60 000
BASF	Brasil	6 000
Celanese	México	6 000
Chinook	Canadá	10 000
Du Pont	USA	40 000
Ertisa	España	5 000
ICI	Reino Unido	15 000
Korea Fertilizer Co	Corea	8 000
LCY	Taiwan	10 000
Mitsubishi Gas Chemicals	Japón	20 000
Nitto Chemicals	Japón	25 000
UCB	Bélgica	16 000
VEB	Alemania	19 000

El mercado principal para la DMF es como solvente de poliacrilonitrilo, seguido por su uso para procesar poliuretanos. Las aplicaciones restantes son notablemente diversas pero son de menor importancia con relación a sus usos principales. La capacidad producida actualmente es suficiente para cubrir la demanda mundial.

#### 4.4 MEZCLA

Los datos se tomaron de la corriente de alimentación a la columna empacada, estos se estimaron mediante el simulador MicroCHESS.

Temperatura °F	77.00
presión (psias)	24.70
Entalpia KBTU/hr	- 993.78
Entropía KBTU/hr °R	- 8.14
Densidad lb/ft <sup>3</sup>	56.92
Viscosidad (centipoises)	0.62
Calor específico BTU/lb °R	0.69
Tensión superficial Dina/cm	22.86

De acuerdo a los datos de equilibrio reportados en el DECHEMA, este sistema no presenta problemas azeotrópicos, por lo que se aplicó el método KUFEM (Descrito posteriormente) para una destilación multicomponente normal.

## **CAPITULO V**

# **SECUENCIA DE CALCULO**

## 5.1 METODOS CORTOS DE DESTILACION (METODO KUFEM).

Cuando se empiezan a aplicar métodos de etapa por etapa, se requieren un gran número de cálculos repetitivos. Por lo tanto se requiere de una computadora para facilitar el procedimiento. Pero la aplicabilidad de estos métodos cuando la computadora no está disponible, se limita notablemente. En tales situaciones, los ingenieros de planta necesitan una solución efectiva para problemas de destilación, que sea confiable rápida y en la que no sea necesario el uso constante de una computadora..

El método KUFEM, se utiliza para el diseño preliminar de columnas de destilación, empleándose en estudios, para establecer las condiciones óptimas de diseño de éstas. En los sistemas multicomponentes se deben seleccionar dos componentes conocidos como clave ligero y clave pesado. Los componentes clave son sobre los que se conoce más información tal que se puede especificar la recuperación del clave ligero en el destilado, y el clave pesado en el fondo.

### **Ecuación de Hengstebeck-Geddes.**

Esta ecuación se utiliza básicamente para estimar la recuperación de los componentes. Por otro lado, para establecer la composición del destilado y de los fondos, así como su flujo respectivo, es común emplear las condiciones especificadas de recuperación o separación de los componentes clave. Así, dado el número de moles de cada componente clave en la alimentación, es posible determinar el número de moles que pasaran a las corrientes de destilado y fondo.

De esta forma, la distribución de los componentes no clave necesaria para determinar el número de etapas puede determinarse aplicando este método, en el cual se relaciona en una función lineal logarítmica el número de moles de cada componente en el destilado y en las colas o fondos, con la volatilidad relativa de la especie.

$$\log \frac{\eta_{iD}}{\eta_{iB}} = c \log \alpha + c'$$

$\eta_{iD}$  = moles del componente i en el destilado.

$\eta_{iB}$  = moles del componente i en el fondo

$c, c'$  = parámetros de la línea recta.

$\alpha$  = volatilidad relativa del componente i

Para determinar  $c$  y  $c'$ , a partir de dos puntos se utiliza la ecuación de la función lineal la cual tiene la forma:

$$y = mx + b$$

y en nuestro caso en particular sería:

$$y = cx + c'$$

donde :  $c$  = pendiente o inclinación de la recta  
 $c'$  = ordenada al origen.

Con esto se dan valores a " $x$ " a " $y$ ", y se despejan  $c$  y  $c'$  obteniendo así los valores requeridos.

Para determinar  $\alpha$  hacemos uso de la siguiente ecuación:

$$\alpha = \frac{K_i}{K_h}$$

donde :  $K_i$  = coeficiente de reparto L-V del componente  $i$   
 $K_h$  = Coeficiente de reparto L-V del componente  $i$  clave pesado.

### **Ecuación de Fenske.**

Para el caso de la separación de una mezcla multicomponente, se requiere un número mínimo de platos para una separación determinada. Fenske fue el primero (1932) en presentar una ecuación para aplicarla a una mezcla multicomponente. En esta ecuación, las fracciones de vapor del domo y el flujo de vapor del domo son determinados por un balance de materia total, otro por componentes y un balance de energía en el condensador. Sin embargo, el número mínimo de platos depende del grado de separación de los dos componentes clave y de su volatilidad relativa.

### **CONDENSADOR TOTAL.**

En el caso de un condensador total, el último contacto de la separación vapor-líquido será sobre el plato superior de la columna, que opera a la temperatura del punto de rocío del producto destilado. Por lo que la ecuación queda de la siguiente manera:

$$N_{\min} = \frac{\log \left[ \frac{X_{LD} \cdot X_{HB}}{X_{HD} \cdot X_{LB}} \right]}{\log \alpha}$$

$X_{LD}$  = Fracción del componente clave ligero en el destilado

$X_{LB}$  = Fracción del componente clave ligero en el fondo.

$X_{HD}$  = Fracción del componente clave pesado en el destilado

$X_{HB}$  = Fracción del componente clave pesado en el fondo.

$N_{\min}$  = Número mínimo de platos.

$\alpha$  = Volatilidad relativa del componente clave ligero.

### CONDENSADOR PARCIAL.

En vista de que la mayor parte de las columnas operan con un rehervidor parcial, la última separación entre el vapor y el líquido que ocurre en el fondo de la columna será a la temperatura de el rehervidor. Este es el punto de burbuja del producto del fondo. Por otro lado, el último contacto vapor-líquido será en el condensador, el cual opera a la temperatura del punto de rocío del producto del destilado, con lo que la ecuación queda como sigue:

$$N_{\min} + 1 = \frac{\log \left[ \frac{X_{HB} \cdot Y_{LD}}{X_{LB} \cdot Y_{HD}} \right]}{\log \alpha}$$

### Ecuación de Underwood.

En una separación multicomponente uno de los parámetros más importantes es la relación de reflujo, porque influye directamente en el costo total de operación de la columna. El reflujo se obtiene condensando los vapores que salen de la columna y el calor que se transmite al agua de enfriamiento normalmente se pierde. Este calor se debe suministrar por medio de serpentines situados en el rehervidor. El costo del calor, por consiguiente, aumenta prácticamente proporcional a la relación de reflujo.

Uno de los métodos para determinar el reflujo mínimo que ha de tener una columna para efectuar una separación de una mezcla multicomponente, fue desarrollado y presentado por Underwood (1948), el cual expresó las ecuaciones de su método de la siguiente manera:

$$\sum_{i=1}^k \frac{(\alpha_i \cdot X_i)}{\alpha_i - \theta} F = 1 - q$$

$$\sum_{i=1}^k \frac{(\alpha_i \cdot X_i)}{\alpha_i - \theta} D = R_{\min} + 1$$

donde  $\alpha_H < \theta < \alpha_L$

$X_{iF}$  = Fracción mol del componente i en la alimentación.

$X_{iD}$  = Fracción mol del componente i en el destilado.

q = condición térmica de la alimentación.

$\theta$  = Raíz común de las ecuaciones de Underwood.

$R_{\min}$  = Razón de reflujo mínima (L/D) mínimo.

$\alpha_i$  = volatilidad relativa del componente i.

$\alpha_H$  = volatilidad relativa del clave pesado.

$\alpha_L$  = volatilidad relativa del clave ligero.

Este método supone una variación de la volatilidad relativa de no más del 10% a lo largo de la columna. El valor de  $\theta$ , debe cumplir las restricciones de fracción molar y satisfacer la desigualdad.

#### **Ecuación de Kirkbride.**

Todo los trabajos realizados sobre la localización del plato de alimentación, se han basado en la suposición implícita de que la alimentación se introduce a la columna en la localización "óptima". El punto óptimo, que se basa solamente en las consideraciones de la fraccionación, es difícil de establecer con claridad, pero se puede decir en una de dos formas:

-Para una relación de reflujo dada, el plato de alimentación es aquel que requiere el número más pequeño de contactos teóricos para llevar a cabo la separación deseada, o bien

-Para un número determinado de platos, el plato de alimentación será aquel que requerirá la relación de reflujo más pequeña para efectuar la separación especificada.

Kirkbnde (1944) presentó un método empírico para estimar la localización del plato de alimentación.

$$\log\left(\frac{m}{p}\right) = 0.206 \log\left[\frac{B \cdot X_{LF} \left(\frac{X_{LB}}{X_{HD}}\right)^2}{X_{LF} \cdot D \left(\frac{X_{HD}}{X_{LD}}\right)^2}\right]$$

m = número de platos teóricos por arriba del plato de alimentación.

p = número de platos teóricos debajo del plato de alimentación.

B = flujo molar de los fondos.

D = flujo molar del destilado.

H = clave pesado.

L = clave ligero.

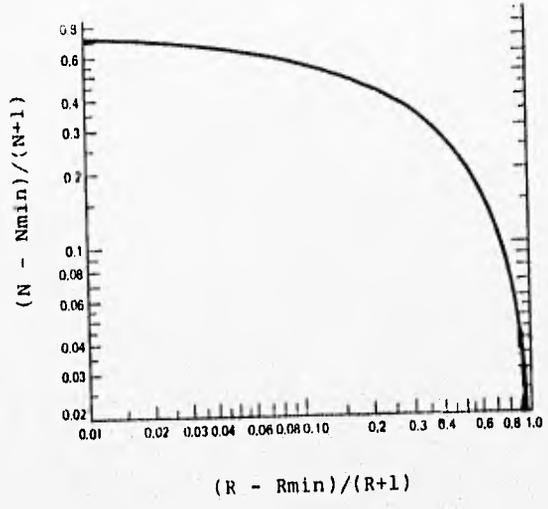
X = fracción mol del componente.

### Ecuaciones de Gilliland y Erbar - Maddox.

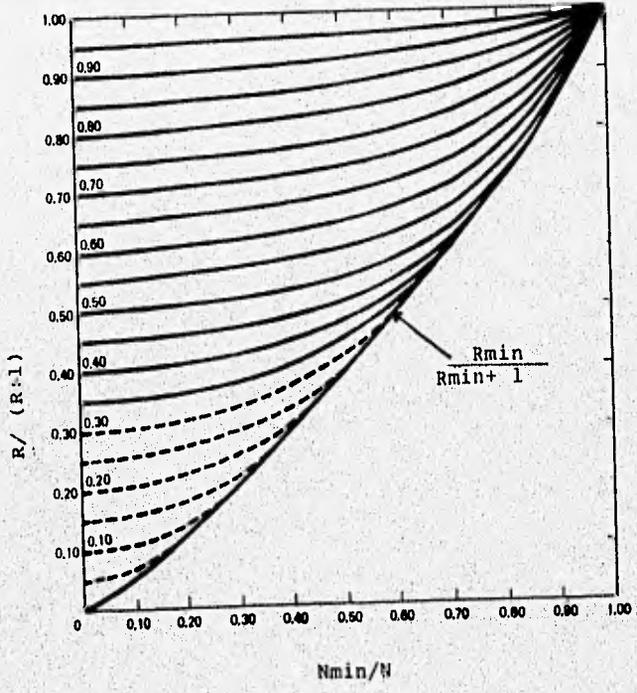
A través de los años, se han presentado correlaciones que relacionan la operación a relaciones de reflujo mínimo y platos mínimos. Quizá la más popular de éstas es la que propuso Gilliland (1940) y que se muestra en la figura 5.1.1, pero aunque esta correlación es útil para realizar un análisis económico preliminar, Erbar y Maddox (1961) desarrollaron una correlación un poco mejor. Esta correlación se muestra en la figura 5.1.2, y una curva determinada de esta figura representa la relación de reflujo mínimo  $R/(R+1)$  para una separación especificada. Leyendo en forma vertical desde el eje de las  $x$  ( $N_{mn}/N$ ) hasta la relación de reflujo mínimo, se puede determinar el valor de operación de  $R_{mn}/(R_{mn}+1)$ . Las ecuaciones básicas utilizadas en estas correlaciones son:

$$y = 1 - \exp\left[\left(\frac{1 + 54.4x}{11 + 117.2x}\right)\left(\frac{x-1}{x^{0.5}}\right)\right], \quad x = \frac{R - R_{mn}}{R + 1}, \quad y = \frac{N - N_{mn}}{N + 1}$$

**Fig. 5.1.1.**  
**Correlación de Gilliland.**



**Fig. 5.1.2. Correlación de Erbar - Maddox.**



A continuación se presenta el algoritmo para la aplicación del método KUFEM, el cual fue el que se utilizó en el presente trabajo, ya que este método es aplicable a la destilación multicomponente y se prefiere a los métodos rigurosos porque se ahorra tiempo y proporciona datos confiables.

**Algoritmo para el procedimiento KUFEM (Método corto para destilación multicomponente).**

1. Datos del problema. Composición de la alimentación, datos de reflujo externo, presión de operación, temperatura a las condiciones de equilibrio y conocimiento del uso de un condensador parcial o total.
2. Determinar los coeficientes de reparto de cada uno de los componentes, diagrama de Prster o analítico (ecuación de estado,  $y_i = K_i x_i$ .)
3. Elegir los componentes clave (ligero y pesado) del sistema multicomponente.
4. Distribuir los componentes en el destilado y fondos.  
Para los componentes clave se utiliza un balance de materia total y por componente.  
Para los componentes no clave, la composición se calcula a partir de los resultados del balance y con la ecuación de Geddes.
5. Se determina la cantidad de destilados y fondos totales.
6. Obtener el número mínimo de platos teóricos ( $N_{min}$ ), utilizando la ecuación de Fenske.
7. Obtener la relación de reflujo mínimo ( $R_{min}$ ), utilizando las ecuaciones de Underwood (incluir el valor de  $q$  a condiciones de operación)
8. Calcular el número de platos teóricos ( $N$ ), utilizando el diagrama de Gilliland o el diagrama de Erbar-Maddox.
9. Determinar la localización del plato de alimentación utilizando la ecuación de Kirkbride.

## PROBLEMA.

Sistema.	Fórmula	Composición.	Polaridad
(1) Metanol	$\text{CH}_3\text{OH}$	0.30	Muy polar
(2) Agua	$\text{H}_2\text{O}$	0.30	Muy polar
(3) Dimetilformamida	$\text{C}_2\text{H}_7\text{NO}$	0.40	Dipolar

Presión de operación: 24.7 psias

Alimentación (F) : 100 lbmol/hr.

Clave ligero:  $\text{H}_2\text{O}$  98% en domos

Clave pesado:  $\text{C}_2\text{H}_7\text{NO}$  99.9% en fondos.

-Para el componente clave ligero (Agua):

$30 \times 0.98 = 29.4$  lbmol/hr de  $\text{H}_2\text{O}$  para el destilado.

$30 - 29.4 = 0.6$  lbmol/hr de  $\text{H}_2\text{O}$  para los fondos.

-Para el componente clave pesado (Dimetilformamida)

$40 \times 0.999 = 39.96$  lbmol/hr de  $\text{C}_2\text{H}_7\text{NO}$  para el fondo.

$40 - 39.96 = 0.04$  lbmol/hr de  $\text{C}_2\text{H}_7\text{NO}$  para el destilado.

El cálculo de los coeficientes de reparto se hizo utilizando el método analítico con la ecuación cúbica de estado de Peng-Robinson, ya que se ha comprobado que es la más adecuada en la aplicación a mezclas líquidas con componentes polares y en la predicción de volúmenes de líquidos (An Improved Peng-Robinson Equation of State for Pure Compounds and Mixtures, Can. J. Chem. Eng. 64, p.323-333 (1986)).

	Metanol	Agua	DFA
K.	2.4285	0.7845	0.09018
x	0.30	0.30	0.40
y	0.7285	0.2353	0.03607

Por lo que la temperatura de burbuja para este sistema a 24.7 psias es:

$$T_b = 188.5581 \text{ } ^\circ\text{F}$$

## METODO KUFEM.

Balance Total :

$$F = D + B \quad (1)$$

$$F X_{iF} = D X_{iD} + B X_{iB} \quad (2)$$

Si  $F = 100 \text{ lbmol/hr}$ .

- 1.-)  $100 (0.30) = 30 \text{ lbmol/hr}$  de metanol
- 2.-)  $100 (0.30) = 30 \text{ lbmol/hr}$  de agua , clave ligero
- 3.-)  $100 (0.40) = 40 \text{ lbmol/hr}$  de DMF, clave pesado

### Ecuación de Geddes.

$$\log \frac{\eta_D}{\eta_B} = c \log \alpha + c'$$

Donde:

$$\begin{aligned} \eta_D (\text{H}_2\text{O}) &= 29.4 \text{ moles} \\ \eta_B (\text{H}_2\text{O}) &= 0.60 \text{ moles} \\ \eta_B (\text{C}_2\text{H}_7\text{NO}) &= 39.96 \text{ moles} \\ \eta_D (\text{C}_2\text{H}_7\text{NO}) &= 0.04 \text{ moles} \end{aligned}$$

Aplicando la ecuación de Geddes y ajustando los datos del clave ligero y clave pesado a una línea recta, tenemos :

$$\begin{aligned} c &= 4.9918 \\ c' &= -2.9996 \end{aligned}$$

Por lo tanto, para el metanol:

$$\log \frac{\eta_D}{\eta_B} = 4.9918 * 1.4302 + (-2.9996)$$

$$\log \frac{\eta^w}{\eta^s} = 4.1937$$

$$\frac{\eta^w}{\eta^s} = 13,793.4327$$

$$\eta^p = \eta^w + \eta^s$$

$$\eta^w = \eta^p - \eta^s$$

$$\psi = \frac{\eta^w}{\eta^s}$$

$$\eta^p = X_{1p} \cdot F$$

$$\eta^w = \frac{\eta^p}{\left(\frac{\eta^w}{\eta^s}\right) + 1}$$

Por consiguiente para el metanol:

$$\eta^w = 29.9978$$

$$\eta^s = 2.17494 \times 10^{-3}$$

$$\sum \eta^w = 59.4378 \Rightarrow D = 59.4378$$

$$\sum \eta^s = 40.5622 \Rightarrow B = 40.5622$$

$$X_{1w} = \frac{\eta^w}{D}$$

$$X_{1s} = \frac{\eta^s}{B}$$

## TABLAS DE RESULTADOS.

Tabla 1

Comp.	Ki	$\alpha_i$	$\log \alpha_i$	$\eta_{i0}$	$\eta_{iB}$	$\eta_{i0}/\eta_{iB}$	$\log(\eta_{i0}/\eta_{iB})$
CH <sub>3</sub> OH	2.4285	26.92	1.4302	29.997	0.0022	13793.4	4.1397
H <sub>2</sub> O	0.7845	8.699	0.9395	29.400	0.6000	49.000	1.6902
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NO	0.0901	1.000	0.0000	0.0400	39.960	0.0010	-2.9996

Tabla 2

Comp. i	$x_{i0}$	$x_{iB}$
Metanol	0.5047	5.3619x10 <sup>-5</sup>
Agua	0.4946	0.0148
DFA	6.729x10 <sup>-4</sup>	0.9852
	$\Sigma 1.0$	$\Sigma 1.0$

**Determinación de N<sub>min</sub> por la ecuación de Fenske.**

$$N_{min} = \frac{\log \left[ \frac{x_{LD} \cdot x_{HB}}{x_{HD} \cdot x_{LB}} \right]}{\log \alpha} \quad (\text{condensador total})$$

Donde:

- $x_{LD}$  = Fracción del componente clave ligero en D
- $x_{LB}$  = Fracción del componente clave ligero en B
- $x_{HD}$  = Fracción del componente clave pesado en D
- $x_{HB}$  = Fracción del componente clave pesado en B
- $\alpha_i$  = Volatilidad relativa del componente clave ligero
- N<sub>min</sub> = Número mínimo de platos.

$$N_{\min} = \frac{\log \left[ \left( \frac{0.4946}{6.729 \times 10^{-4}} \right) \left( \frac{(0.0148)^{-1}}{0.9852} \right) \right]}{\log(8.6990)}$$

$N_{\min} = 5.0056$ , por lo que tenemos más o menos 5 platos.

**Determinación del  $R_{\min}$  por la ecuación de Underwood:**

$$\sum_{i=1}^k \frac{\alpha_i \cdot X_{iF}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q$$

Donde:

$q = 1$  (Líquido saturado)

$k =$  Número de componentes.

Por Newton Raphson:  $\theta = 1.5292$

por lo tanto;

$$\sum_{i=1}^k \frac{\alpha_i \cdot X_{iD}}{\alpha_i - \theta} = R_{\min} + 1$$

entonces  $R_{\min} = 0.2014$

**Determinación del plato de alimentación.**

**Ecuación de Kirkbride.**

$$\log \left( \frac{m}{p} \right) = 0.206 \log \left[ \frac{B \cdot X_{iF} \left( \frac{X_{iB}}{X_{iD}} \right)^2}{D \cdot X_{iF} \left( \frac{X_{iB}}{X_{iD}} \right)^2} \right]$$

$$m + p + 1 = N \Rightarrow m = N - 1 - p$$

$$p = \frac{N - 1}{\left( \frac{m}{p} \right) + 1}$$

Evaluando:

$$\log \left( \frac{m}{p} \right) = 0.206 \log \left[ \frac{40.5622 \cdot 0.40 \cdot \left( \frac{0.0148}{6.729 \times 10^{-4}} \right)^2}{59.4378 \cdot 0.30 \cdot \left( \frac{0.0148}{6.729 \times 10^{-4}} \right)^2} \right]$$

$$\log\left(\frac{m}{p}\right) = 0.5470$$

$$\frac{m}{p} = 3.5237$$

$$p = \frac{5-1}{3.5237+1} \Rightarrow p = 0.8842 \approx 1$$

$$m = 5 - 1 - 0.8842 \Rightarrow m = 3.1158 \approx 3$$

para:

$$n = 5, p \approx 1, m \approx 3$$

Por lo tanto si arriba del plato de alimentación hay 3 platos y abajo hay un plato, el plato de alimentación es el segundo plato de fondo a domo.

### Relación entre el número de platos y la relación de reflujo.

En esta tabla se presenta la relación que existe entre el número de platos y la relación de reflujo óptima ( $R_{op}$ ).

$R_{op}$	$\frac{R_{op} - R_{min}}{R_{op} + 1}$	$\frac{(N+1) - N_{min}}{N+2}$	N
1	0.3993	0.31	6.09
1.5	0.5194	0.25	5.44
2	0.5995	0.18	4.80
2.5	0.6567	0.17	4.72
3	0.6997	0.15	4.56
5	0.7998	0.09	4.13
10	0.8998	0.04	3.81

El método que se usó para elaborar esta tabla, es el siguiente:

Se propone el  $R_{op}$ . y se evalúa la ecuación  $\frac{R_{op} - R_{min}}{R_{op} + 1}$  y con el valor

obtenido se encuentra el valor correspondiente a la ecuación  $\frac{(N+1) - N_{min}}{N+2}$ , mediante el nomograma de Gilliland, y por Newton Raphson se

obtiene N (Número de platos) y se determina el  $R_{op}$  óptimo

Con esto se puede decir que mediante la correlación de Gilliland se obtuvo  $R_{min} = 0.2014$  y  $N_{min} = 5.0056$ , entonces chequeando con la tabla anterior el reflujo de operación óptimo ( $R_{op}$ ) es igual a 2.

## 5.2 CALCULOS EN COLUMNAS EMPACADAS.

### Columnas empacadas.

El propósito fundamental de los equipos usados en operaciones gas-líquido es el de provocar un íntimo contacto entre los dos fluidos, con la finalidad de que se lleva a cabo una difusión en la interfase de los constituyentes.

La transferencia de masa depende directamente de la superficie interfacial expuesta entre las fases y del gradiente de concentración existente entre las mismas.

El equipo puede ser clasificado de una manera muy general, dependiendo de, si su principal función es la de dispersar el gas o el líquido, aunque en muchos dispositivos ambas fases se encuentran dispersas. Dentro del primer grupo se encuentran incluidos aquellos dispositivos tales como, las torres de platos y algunos recipientes agitados en los cuales la fase gaseosa es dispersada en burbujas o gotas. En el segundo grupo el líquido es dispersado en forma de pequeñas capas o gotas, este es el caso de las torres de pared mojada, de las torres de rocío y de las columnas empacadas.

Desde el punto de vista de destilación fraccionaria, son las torres de platos, las columnas empacadas y las de pared mojada las de mayor importancia.

Las columnas empacadas son de gran utilidad para destilaciones a nivel laboratorio y en planta piloto, pero sus aplicaciones en grandes columnas son pocas en comparación con las de platos.

Los empaques son colocados en las columnas de destilación con el objeto de mejorar el contacto entre los líquidos descendentes y los vapores ascendentes. Originalmente el término "empaque" se refería a pequeños sólidos irregulares que colocados al azar en un lecho dejaban espacios irregulares para el paso a contracorriente del vapor y el líquido. Sin embargo, algunos empaques posteriores han sido tan variados que la única definición que puede darse ahora es: dispositivos de contacto vapor-líquido no clasificables como platos.

### **Tipos de empaque.**

#### **CLASIFICACION**

Los empaques generalmente se dividen en tres clases:

1. Los empaques descargados o aleatorios: Estos son pedazos discretos de empaque de una geometría específica de tal forma que son acomodados al azar en la coraza de la columna. Ejemplos son los anillos y las monturas que se fabrican de diferentes formas y con diferentes materiales.

2. Estructurado o sistemático (arreglos de empaque): Estos son rizos, capas de la malla, capas de cable u hojas arrugadas, elaboradas más comúnmente de metal. Las secciones de estos empaques se amontonan en la columna.

3. Las rejillas: estos empaques también se arreglan sistemáticamente, pero en vez de cables, mallas u hojas arrugadas estos usan una estructura de enrejados abiertos.

Los empaques aleatorios son por mucho la más comunes en la práctica comercial. Los empaques estructurados son menos comunes, pero su mercado ha crecido rápidamente en el pasado decenio. La aplicación de rejillas se limita primariamente a servicios de transferencia de calor, servicios de lavado y/o donde se requiere una alta resistencia al ensuciamiento.

El relleno de torres para ser colocado al azar se fabrica en formas tales que se adosan unos con otros dejando pequeños huecos entre ellos. antes de 1915 se utilizaron como cuerpos de relleno coque o trozos de vidrio o cerámica rotos con formas al azar, por lo cual nunca dos torres se comportaban de la misma forma. Los anillos de Rasching, fueron desarrollados por Frederick Rasching en 1915 y con ellos se introdujo un cierto grado de normalización en esta industria.

Los anillos de Rasching, juntamente con las monturas de Bert, fueron los cuerpos de relleno más ampliamente utilizados hasta 1965 sin embargo, desde 1970 estos materiales fueron en gran parte sustituidos por anillos Pall y por monturas de formas más elaboradas tales como Norton's Intalox Saddle, Koch's Flexisaddle, Glitsch's Ballast Saddle, etc. En la actualidad los rellenos más ampliamente utilizados son: (a) anillos de Pall modificados que tienen unas nervaduras exteriores para darle mayor resistencia mecánica y numerosas protuberancias en el interior para promover la turbulencia y proporcionar más puntos para el paso de líquido y (b) monturas con bordes festoneados, onículos o protuberancias. de estos dos tipos, las monturas son las más ampliamente utilizadas, en parte debido a que se encuentran disponibles en materiales cerámicos mientras que los anillos no.

#### **Principales objetivos de el empaque.**

##### **OBJETIVOS PARA MAXIMIZAR LA EFICIENCIA.**

1. Maximizar el área superficial específica, por ejemplo el área superficial por unidad de volumen: Esto aumenta al máximo el área de contacto líquido-vapor, y por lo tanto, la eficiencia. Un corolario es que para relleno de anillos, la eficiencia generalmente incrementa conforme el tamaño de partícula disminuye; para rellenos de monturas, la eficiencia generalmente se incrementa así como el espacio entre capas adyacentes disminuye, y por lo tanto, para relleno de malla la eficiencia generalmente aumenta cuando las aberturas entre enrejados se estrechan.

2. Esparcir el área de superficie uniformemente: esto mejora el contacto líquido-vapor, y por lo tanto, la eficiencia.

Por ejemplo, un anillo Rashing y un anillo Pall de un tamaño idéntico tienen áreas idénticas de superficie por el unidad de volumen, pero el anillo Pall tiene una mejor diseminación de área superficial y es por lo tanto mucho más eficiente.

3. Promover la distribución uniforme de vapor y líquido a lo largo de el lecho empacado: Una distribución uniforme mejora la eficiencia del empaque.

Por ejemplo, las partículas del empaque aleatorio tienden a "enclavar" o "anidar" junto con otras partículas lo que puede conducir a canalizaciones y por lo tanto a una menor eficiencia.

4. Desaguar libremente cualquier líquido, para que las bolsas de líquido estancado se minimicen: El líquido estancado contribuye poco a la transferencia de masa y gasta superficie de empaque.

5. Maximizar el mojado de superficie de empaque: las áreas de empaque que permanecen secas cuando hay bajo flujo de líquido reducen la eficiencia y restringen el reflujo a lo largo de la columna. Aunque las características de mojadura sean primariamente una función del material de empaque, el tamaño y geometría del empaque son también importantes.

#### **OBJETIVOS PARA AUMENTAR AL MAXIMO LA CAPACIDAD**

1. Maximizar el espacio nulo por unidad de volumen en la columna: Esto minimiza la resistencia del vapor de fluir hacia arriba, y por lo tanto, mejora la capacidad del empaque. Un corolario es que para rellenos aleatorios, la capacidad aumenta con el tamaño de partícula; para relleno estructurado, la capacidad aumenta con el espacio entre capas adyacentes, y para relleno de malla, la capacidad aumenta cuando las aberturas entre enrejados se amplían. Comparando esto con el primer objetivo, que nos habla de maximizar la eficiencia, este corolario afirma que el tamaño de empaque, que aumenta al máximo la capacidad también minimiza la eficiencia.

Se puede especificar entonces que, el tamaño ideal de el empaque queda determinado ya sea maximizando la eficiencia o maximizando la capacidad.

2. **Minimizar la fricción:** Para cumplir este punto, es necesario que la forma del empaque tenga buenas características aerodinámicas. Por ejemplo, el anillo Pall está más abierto para el paso de corrientes gaseosas comparado con el anillo Rasching, y por lo tanto, el relleno con este tipo de empaques tiene una mejor capacidad para el libre paso de los gases a través de la columna.

3. **Asegurar la resistencia uniforme del flujo de vapor y líquido a través del lecho.** La resistencia aerodinámica concentrada en bolsas de aire puede bajar el área efectiva en la sección transversal de la columna reduciendo así su capacidad

4. **Permitir el fácil desprendimiento de vapor de el líquido:** Esto es importante en servicios de alta presión y en servicios de corrientes rápidas de flujo de líquido. El desprendimiento de vapor es difícil cuando la apertura disponible para que el líquido fluya hacia abajo, es estrecha (como en los canales estrechos de los rellenos estructurados).

#### OTROS OBJETIVOS.

1. **Aumentar al máximo la resistencia a la deformación mecánica y/o fractura y, especialmente, a la deformación de el peso de el lecho:** Por ejemplo, la partición en el centro de el anillo Lessing nos da una resistencia superior a la deformación y fractura que la del anillo Rasching.

2. **Minimizar costos:** El costo del empaque, así como también los requerimientos para soportes de empaque y cimientos de la columna, generalmente se incrementan con el peso del empaque por unidad de volumen. Un corolario es que los empaques llegan a ser más baratos si se aumenta el tamaño de partícula (aleatorio), si el espacio entre capas aumenta (estructurado), o si las aperturas de enrejado se amplían (mallas)

3. **Maximizar la resistencia al ensuciamiento:** Los empaques pueden llegar a ser más resistentes al ensuciamiento si se incrementa el tamaño de partícula (anillos y monturas), o el espacio entre capas aumenta (estructurado) o si el enrejado se amplía (mallas). Las formas geométricas a las que no se adhiere sedimento o polímero son muy ventajosas.

4. Minimizar el deterioro causado por líquidos. El más común es el que tiene lugar a temperaturas altas, y esto generalmente se da en degradaciones y polimerizaciones.

5. Minimizar el deterioro en el servicio: La geometría de el empaque y el tamaño afecta la sensibilidad de un empaque a la corrosión, erosión, ataque químico, y migración mediante las aperturas de la rejilla de apoyo.

6. Minimizar el daño durante la operación anormal: La geometría de el empaque y el tamaño afectan la capacidad de un lecho empacado para resistir oleajes de presión o para inflamarse (cuando se adhiere material inflamable o están revestidos con el líquido combustible caliente).

#### **Hidráulica de columnas empacadas.**

La caída de presión de un gas que fluye hacia arriba por un empaque, a contracorriente del flujo del líquido, presenta la siguiente característica: a flujos muy bajos de líquido, la sección transversal efectiva abierta del empaque no es muy diferente de la del empaque seco y la caída de presión se debe al flujo a través de una serie de aperturas de tamaños y ubicaciones aleatorias, en el lecho. Así pues la caída de presión es aproximadamente proporcional al cuadrado de la velocidad del gas.

Con flujos más elevados de líquido, la sección transversal efectiva abierta es menor debido a que la presencia de líquido y una parte de la energía de la corriente del gas se utiliza para soportar una cantidad creciente de líquido en la columna. El aumento de la caída de presión se debe a la acumulación rápida de líquido en el volumen de espacios vacíos del empaque.

Al aumentar la retención de líquido, se puede producir uno de dos cambios. Si el empaque se compone esencialmente de superficies extendidas, el diámetro efectivo de orificios se hace tan pequeño, que la superficie de líquido resulta continua a través de la sección transversal de la columna, en general, en la parte superior del empaque. La inestabilidad de la columna se produce al mismo tiempo que la elevación de un cuerpo líquido de fase continua en la columna. El cambio de caída de presión es muy grande con un sólo cambio ligero del flujo de gas.

El fenómeno se denomina inundación y es análogo a la inundación de arrastre en una columna de platos. Si la superficie de empaque no es continua por naturaleza, tiene lugar una inversión de fases y el gas burbujea a través del líquido.

La columna no es inestable y se puede hacer que regrese al funcionamiento continuo de fase gaseosa, reduciendo simplemente el flujo de gas. En forma análoga a la condición de inundación, la caída de presión se eleva con rapidez, conforme se produce la inversión de fases.

### CAIDA DE PRESION.

El pronóstico del punto de inundación. Sherwood-Eckert generalizaron la correlación de caída de presión (GPDC), por lo que en varias décadas, la carta de Sherwood - Eckert ha sido la norma de la industria para predecir caídas de presión y puntos de inundación.

La última versión popular de la carta GPDC que contiene una curva de inundación era la correlación de Eckert. Esta versión es la norma de la industria para predecir el punto de inundación para empaques aleatorios. La carta GPDC ordinaria describe el balance entre la fuerza de momentum del vapor, que actúa cuando entran abundantes gotas de líquido, y la fuerza de gravedad, que resiste el flujo ascendente.

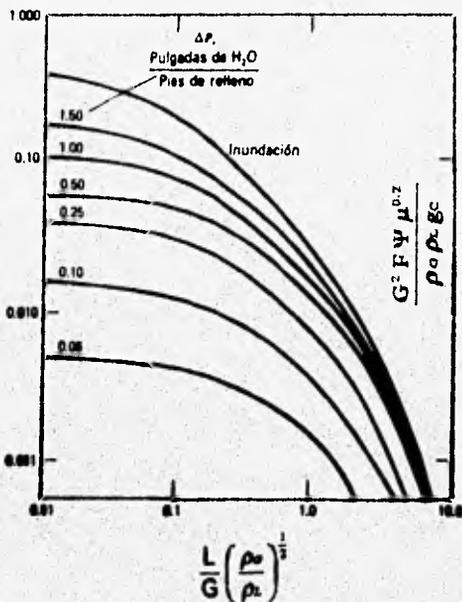


Fig. 5.2.1. Correlación de Eckert (1970) donde:

$L$  = flujo de líquido,  $\text{lb/s ft}^2$

$G$  = flujo de gas,  $\text{lb/s ft}^2$

$\rho$  = densidad del líquido,  $\text{lb/ft}^3$

$\rho_0$  = densidad del gas,  $\text{lb/ft}^3$

$F$  = factor del empaque.

$\mu$  = viscosidad del líquido (cP)

$\psi = \frac{\text{densidad del agua}}{\text{densidad del líquido}}$

$g_c$  = constante gravitacional = 32.2

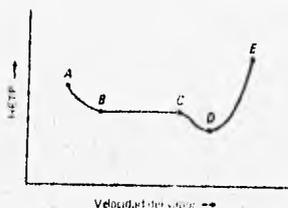
## HETP.

En muchos cálculos con frecuencia, se necesita la altura del empaque que es equivalente a un plato teórico (HETP) y por esto se ha derrochado una gran cantidad de esfuerzo para encontrar la relación entre las torres empacadas y de platos.

El concepto de HETP (altura equivalente de un plato teórico) se introdujo para permitir la comparación de eficiencia entre columnas de empaques y columnas de platos. Es conveniente también para sistemas multicomponentes, ya que puede usarse para facilitar el cálculo etapa por etapa en programas de computadora que se usan para columnas multietapas. Además permite hacer la comparación más fácil entre columnas empacadas y columnas de platos.

Si se cuenta con un valor aceptable de HETP, la altura total de la torre empacada se puede determinar multiplicando el número de platos de equilibrio por la HETP.

Fig. 5.2.2.



En la gráfica anterior se muestra la variación de HETP con la velocidad del vapor. En la región B a la C, el HETP es relativamente constante. De la región A hasta la B, la cantidad de líquido es demasiado baja para mojar el empaque completamente y por ello ocurre la canalización del líquido y del vapor. Esto provoca la pérdida de eficiencia y da valores más altos de HETP. De D a E el empaque empieza a inundarse y la eficiencia disminuye rápidamente. Debido a que la mayor parte de los cálculos de destilación y de absorción multicomponente se hacen en base a los platos de equilibrio, las correlaciones de HETP confiables son muy importantes.

## PREDICCIÓN DEL HETP

Para el cálculo del HETP, se utilizó la relación de Murch(1953):

$$\text{HETP} = k_1 \cdot G^{k_2} \cdot d^{k_3} \cdot h^{1/2} \frac{\alpha \cdot \mu}{\rho}$$

en donde :

G = masa velocidad superficial del vapor,  $\frac{\text{lb}}{\text{h ft}^2}$

d = diámetro de la columna, in

h = altura del empaque, ft

$\alpha$  = volatilidad relativa

$\mu$  = viscosidad del líquido, centipoises (cP)

$\rho$  = densidad del líquido,  $\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$

HETP = altura equivalente de un plato teórico, in

$k_1, k_2, k_3$  = constantes en función del empaque.

## CALCULOS.

$$D = 59.4371 \frac{\text{lbmol}}{\text{hr}}$$

$$B = 40.5622 \frac{\text{lbmol}}{\text{hr}}$$

$$\text{Si } R = \frac{L}{D} \text{ y } R = 2 \therefore \frac{L}{D} = 2 \Rightarrow L = 2D = 2(59.4371) = 118.8742 \frac{\text{lbmol}}{\text{hr}}$$

$$G = D(R + 1) \Rightarrow G = 178.3113 \frac{\text{lbmol}}{\text{hr}}$$

$$\frac{L}{G} = 0.6667$$

$$\rho_v = 0.1498 \frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}$$

$$\rho_L = 50.1032 \frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}$$

$$\mu = 0.3055 \text{ cp}$$

$$\frac{L}{V} = \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L}} \Rightarrow 0.6667 \cdot \sqrt{\frac{0.1498}{50.1032}} = 0.0365$$

Este último resultado es la ordenada de la carta de Eckert, por lo que trazando una línea desde la ordenada hasta la línea de inundamiento se lee:

$$\frac{G^2 \cdot F(\mu)^{0.2} \cdot \psi}{g_c \cdot \rho_v \cdot \rho_L} = 0.19$$

Por lo tanto, despejando G tenemos:

$$G = \left[ \frac{0.19 \cdot g_c \cdot \rho_v \cdot \rho_L}{F(\mu)^{0.2} \cdot \psi} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad \psi = \frac{62.43}{50.1032} = 1.2460$$

Sustituyendo,  $G = 0.3946 \text{ lb}/\text{s ft}^2$

pero se consideró un inundamiento del 80% para el caso de nuestra columna por lo que:

$$G = 0.80(0.3946) \Rightarrow G = 0.3157 \text{ lb}/\text{s ft}^2$$

y para la sección transversal de la columna

$$s = \frac{\Pi \cdot d^2}{4} \Rightarrow s = \frac{\Pi(0.7083)^2}{4} \Rightarrow s = 0.3941 \text{ ft}^2$$

por lo que

$$\therefore \frac{G^2 \cdot F(\mu)^{0.2} \cdot \psi}{g_c \cdot \rho_v \cdot \rho_L} = \frac{0.3157^2 \cdot 300 \cdot (0.3055)^{0.2} \cdot 1.2460}{32.2 \cdot 0.1498 \cdot 50.1032} = 0.1216$$

y utilizando nuevamente la carta de Eckert obtenemos la caída de presión para la columna

$$\Delta P = 1.5 \frac{\text{in de H}_2\text{O}}{\text{ft de empaque}}$$

$$\Delta P_{\text{Total}} = (1.5) \cdot (14 \text{ ft}) \Rightarrow \Delta P_{\text{Total}} = 21 \text{ in H}_2\text{O}$$

Para las ecuaciones anteriores se utilizó F (factor de relleno), por lo que en la tabla 5.2.3, se encuentran factores de relleno diversos para diferentes tipos de empaque y elaborados con diferentes materiales. Dado que en nuestro caso, tenemos anillos Rasching de metal de 1/2 pulgada el factor de relleno para nuestra ecuación es de 300.

**Fig. 5.2.3. Factores de Relleno.**

Tipo de relleno	Material	Tamaño nominal de relleno (pulgadas)								
		1/4	3/8	1/2	5/8	3/4	1.0	1.25	1.50	2.0
Super Intalox	Cerámica	—	—	—	—	—	60	—	—	30
Super Intalox	Plástico	—	—	—	—	—	33	—	—	21
Monturas Intalox	Cerámica	725	330	200	—	145	98	—	52	40
Anillo Hy-Pak	Metal	—	—	—	—	—	42	—	—	18
Anillos Pall	Plástico	—	—	—	97	—	52	—	40	25
Anillos Pall	Metal	—	—	—	70	—	48	—	28	20
Monturas Bert	Cerámica	900	—	240	—	170h	110h	—	65h	45
Anillos Raschig	Cerámica	1600b	1000b	580c	380c	255c	155d	125e	95e	65f
Anillos Raschig 1/32 pared	Metal	700	390	300	170	155	115	—	—	—
Anillos Raschig 1/16 pared	Metal	—	—	410	290	220	137	110	83	57
Tailerettes	Plástico	—	—	—	—	—	40	—	—	20
Maspak	Plástico	—	—	—	—	—	—	—	—	32
Leasing exp.	Metal	—	—	—	—	—	—	—	30	—
Partición cruzada	Cerámica	—	—	—	—	—	—	—	—	—

b= 1/16 pared c= 3/32 pared d= 1/8 pared e= 3/16 pared f= 1/4 pared g= 3/8 pared  
h: Factores de relleno contenidos en torres de 16 y 30 pulg. de diámetro interno. Extrapolado.

**Fig. 5.2.4. Constantes para la ecuación de Murch.**

	Tamaño, pulg.	K1	K2	K3
Anillos	1/4			
	3/8	2.100	- 0.37	1.24
	1/2	8.530	- 0.34	1.24
	1.0	0.570	- 0.10	1.24
	2.0	0.420	0.0	1.24
Sillas	1/2	5.620	- 0.45	1.11
	1.0	0.760	- 0.14	1.11
McMahon	1/4	0.017	0.50	1.00
	3/8	0.200	0.25	1.00
	1/2	0.330	0.20	1.00
Empaques salientes	0.16	0.390	0.25	0.30
	0.24	0.076	0.50	0.30
	0.48	0.450	0.30	0.30
	1.0	3.080	0.12	0.30
Stedman	2.0	0.077	0.48	0.24
	3.0	0.363	0.26	0.24
	6.0	0.218	0.32	0.24

**CALCULO DEL HETP.**

De la tabla 5. 2. 4. , tomamos, para anillos Rasching de 0. 5 pulgadas, las constantes en función del empaque son :

$$k_1 = 8,5$$

$$k_2 = - 0,34$$

$$k_3 = 1,24$$

$$G = 1136,52 \frac{\text{lb}}{\text{h ft}^2}$$

$$d = 8,5 \text{ pulgadas}$$

$$h = 14 \text{ ft}$$

$$\alpha = 8,6990$$

$$\mu_L = 0,3055 \text{ cp}$$

$$\rho_L = 0,8025 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$$

utilizando la relación de Murch:

$$\text{HETP} = k_1 + G \cdot k_2 + d \cdot k_3 + h \cdot \frac{\alpha + \mu_L}{\rho_L}$$

HETP = 8. 4074 in, lo que nos da multi plicando por los 14 ft del empaque:

⇒ HETP = 9. 8086 ≈ 10 platos.

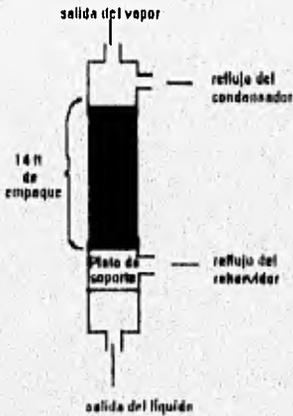


Fig. 5.2.5.  
Diagrama esquemático de la columna empacada.

### 5.3 BALANCE DE MATERIA Y ENERGIA.

En esta parte de la trabajo, se realiza el balance de materia y energía para el proceso seleccionado, tomando como referencia para el cálculo, las condiciones de operación del mismo.

Este balance de materia y energía tiene como finalidad primordial el mostrar las principales variables que afectan el proceso para poder determinar las características de operación de la planta piloto y el funcionamiento de servicios, tuberías y de los instrumentos de control requiendo; con el fin de tener los datos en forma accesible y comparativa de las diferentes corrientes que se manejan dentro del proceso de fraccionamiento de la mezcla.

#### **Balance de materia.**

Del análisis del proceso propuesto para efectuar la purificación de la DFA, se puede observar que el principal equipo involucrado es la columna de destilación empacada, ya que para finalidad de balance de materia, no importan ciertos equipos, como cambiadores de calor y bombas, debido a que la masa que entra a ellos es igual a la que sale; por lo que a continuación se desglosa el balance de materia en este equipo.

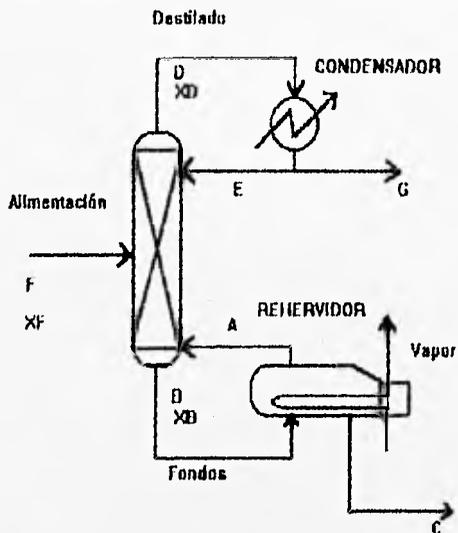
Como se ha establecido anteriormente en el método KUFEM, el destilado tendrá una composición de 98% de metanol y los fondos una composición de 99.9% de DFA. Se tomaran 100 Lbmol/hr como base de cálculo, por lo que las ecuaciones y resultados quedaron de la manera siguiente.

#### **Balance total de materia.**

$$F = D + B$$

$$F x_F = D x_D + B x_B$$

**Figura 5.3.1**



De los calculos del método KUFEM se obtuvo:

$$F = 100 \text{ lbmol/hr}$$

$$D = 59.4378 \text{ lbmol/hr}$$

$$B = 40.5622 \text{ lbmol/hr}$$

$$R = 2 \text{ (relación de reflujo).}$$

### **DOMO**

Para calcular la corriente  $G$  se toman en cuenta las siguientes ecuaciones:

$$D = E + G$$

pero D es igual a 59.4378 por lo que

$$E + G = 59.4378$$

$$R = E/G \text{ como } R = 2 \quad E/G = 2$$

y resolviendo el sistema de ecuaciones se obtiene:

$$E = 39.6252, G = 19.8126.$$

## **FONDO**

Se maneja igual que el domo:

$$B = A + C$$

pero  $B = 40.5622$ , así que  $A + C = 40.5622$

$$R = A/C, \quad A/C = 2$$

$$A = 27.0415 \text{ y } C = 13.5207$$

Por lo que con esto se completa el balance de materia para la columna empacada de destilación.

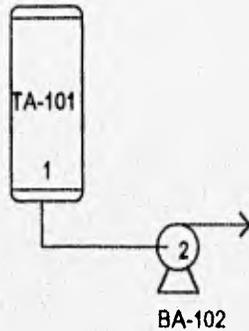
## **Balance de energía.**

En el balance de energía se ven involucrados todos los equipos, por lo que para simplificar el balance, se anexa el diagrama de flujo de proceso como guía (Figura 5.3.2)



### BOMBA BA-102.

Es el primer equipo y en el se tiene que realizar un balance de energía mecánica, ya que se trata de la bomba centrífuga que toma la alimentación del tanque almacenador y lo manda al precalentador. Se tienen todos los datos a excepción de la presión de salida de la bomba que es la que se va a calcular.



$$Z_1 \frac{g}{g_c} + \frac{u_1^2}{2g_c} + \frac{P_1}{\rho} = Z_2 \frac{g}{g_c} + \frac{u_2^2}{2g_c} + \frac{P_2}{\rho} + H_{fs}$$

pero  $Z_2 = 0$  y  $u_2 = 0$  por lo que la ecuación queda:

$$Z_1 \frac{g}{g_c} + \frac{P_1}{\rho} = \frac{u_2^2}{2g_c} + \frac{P_2}{\rho} + H_{fs}$$

de esta ecuación se tienen todos los datos a excepción de  $P_2$ , que es la que se va a calcular.

$$Z_1 = 1.9686 \text{ ft}, \quad g_c = 32.2 \frac{\text{lb ft}}{\text{lb f sec}^2}, \quad \rho = 50.1032 \frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}, \quad P_1 = 24.7 \text{ psias}, \quad D = 0.1250 \text{ ft}$$

para ese tipo de bomba centrífuga el caudal a entregar es de 90 lpm (curva de bombeo), por lo que dividiendo entre el área transversal de la tubería que es igual a  $0.0123 \text{ ft}^2$ ,

entonces la velocidad del fluido por la tubería es  $u = 4.3089 \frac{\text{ft}}{\text{seg}}$

$$H_{fs} = f_D \frac{L}{D} \frac{u^3}{2g_c} \Rightarrow f_D = 0.0055 \left[ 1 + \left( \frac{20000}{D} \epsilon + \frac{10^4}{Re} \right)^{1/4} \right] \Rightarrow Re = \frac{D u \rho}{\mu}$$

$$\epsilon = 0.00015, \quad L = 6.5620 \text{ ft}$$

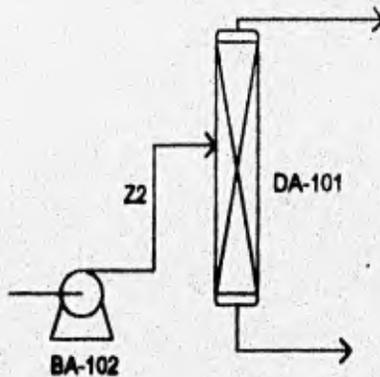
con todo esto se puede entonces calcular  $P_2$  por lo que los resultados de las ecuaciones arriba planteadas dan:

$$Re = 131\,454.0884, \quad f_D = 0.0229, \quad H_{fs} = 0.3466$$

y finalmente  $P_2 = 60.5235 \text{ psias}$ .

para poder calcular el balance de energía del siguiente equipo, que es el precalentador, es necesario calcular primero la presión de entrada del líquido a la columna la cual tiene una altura considerable por lo que sería un gran error no calcular la caída de presión a lo largo de la tubería.

Esto se debe a que el cálculo del precalentador no considera esta presión, pero para nuestros fines es necesario, por lo que el diagrama queda como sigue:



De un análisis similar al anterior se parte de la ecuación general del balance de energía mecánica, por lo que para nuestro sistema es necesario considerar  $Z = 0$ , entonces la ecuación queda:

$$\frac{u_1^2}{2gc} + \frac{P_1}{\rho} = Z_1 \frac{g}{gc} + \frac{u_2^2}{2gc} + \frac{P_2}{\rho} + Hfs$$

y los datos para esta ecuación son:

$$u_1 = 4.3089 \frac{\text{ft}}{\text{seg}} \quad Z_2 = 24 \text{ ft} \quad \rho = 50.1032 \frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}$$

$$P_1 = 91.5235 \text{ psias} \quad L = 31.1695 \text{ ft} \quad \mu = 2.05296 \times 10^{-4} \frac{\text{lb}}{\text{ft seg}}$$

$D = 0.0833 \text{ ft}$  (la tubería es de una pulgada)

para el estimado, de la velocidad, se consideró 9 gpm como el flujo que entra a la columna entonces se divide este flujo entre el área transversal de la tubería ( $0.0055 \text{ ft}^2$ ), y la velocidad

$$\text{nos da: } u_1 = 3.6458 \frac{\text{ft}}{\text{seg}}$$

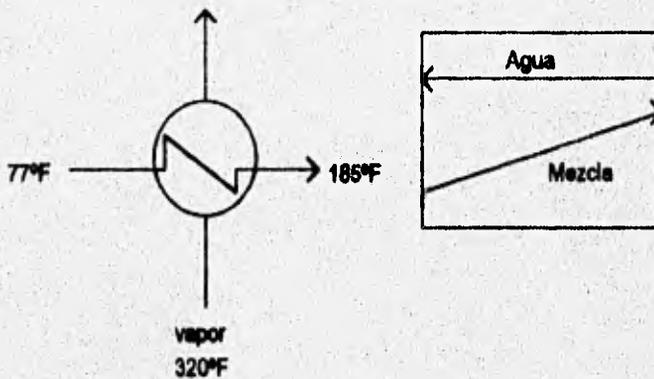
con esto se calcula el número de Reynold ( $Re$ ), y luego el factor de Darcy ( $f$ ), para calcular después las pérdidas por presión en accesorios ( $Hfs$ ).

$$Re = 87598.4443, \quad f = 0.0254, \quad Hfs = 26.7411$$

y con esto se obtiene finalmente la presión a la entrada de la columna que da

$$P_1 = 24.8938 \text{ psias}$$

### PRECALENTADOR (CA-101)



$$C_{pm} = 0.6936 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{R}}$$

$$W_m = 4425.51 \frac{\text{lb}}{\text{hr}}$$

Con esto se tienen todos los datos para realizar el balance de energía calorífica del precalentador por lo que para la mezcla :

$$Q = W C_p \Delta T = 4425.50 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} \cdot 0.6936 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{R}} \cdot (645 - 537 \text{ } ^\circ\text{R}) = 331510 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}$$

### **COLUMNA EMPACADA (DA-101).**

El primer cálculo, en cualquier equipo, por lo regular involucra las condiciones de alimentación. Dado que la relación de reflujo se conoce, se puede usar para determinar la composición y el gasto de vapor que deja el plato superior de la columna.

Este plato se considera que es un plato de equilibrio, así que el vapor sale a su punto de rocío. Esto fija la temperatura del vapor que sale de dicho plato. Por otro lado la temperatura del líquido que sale del fondo de la columna se puede determinar mediante un cálculo del punto de burbuja.

### **DOMO.**

ECUACION: PENG ROBINSON STRYJEK VERA  
 REGLA DE MEZCLADO: Van der Waals, 1 parámetro  
 TEMPERATURA DE ROCIO: (° F) 210.4198  
 PRESION: (psias) 25  
 RELACION V/F: 1.000000

#### **PROPIEDADES DE LAS FASES:**

Z LIQ = 0.001502	Z VAP = 0.980205
H LIQ = -37234.485287	H VAP = 2819.472078
S LIQ = -97.762337	S VAP = 9.928583
G LIQ = -840.291340	G VAP = -876.662897

PROPIEDADES DE LA MEZCLA:

H TOTAL = 2819.472078 H [=] JOULE/MOL  
S TOTAL = 9.928583 S [=] JOULE/MOL-K  
G TOTAL = -876.662897 G [=] JOULE/MOL

COMPOSICION DE LAS FASES:

COMPUESTO:	GLOBAL	X LIQ	Y VAP
Metanol	0.504700	0.157783	0.504700
Agua	0.494600	0.842170	0.494600
DFA	0.000700	0.000047	0.000700

CONSTANTES DE EQUILIBRIO:

COMPUESTO:	K EQUIL
Metanol	3.198547
Agua	0.587298
DFA	14.919046

FONDO.

ECUACION: PENG ROBINSON STRYJEK VERA  
REGLA DE MEZCLADO: Van der Waals, 1 parámetro  
TEMPERATURA DE BURBUJA (° F) 360.1439  
PRESION: (psias) 32  
RELACION V/F: 0.000000

PROPIEDADES DE LAS FASES:

Z LIQ = 0.007089	Z VAP = 0.948918
H LIQ = -21299.159163	H VAP = 15776.664989
S LIQ = -43.509644	S VAP = 39.001776
G LIQ = -1482.597593	G VAP = -1986.778213

PROPIEDADES DE LA MEZCLA:

H TOTAL = -21299.159163 H [=] JOULE/MOL  
S TOTAL = -43.509644 S [=] JOULE/MOL-K  
G TOTAL = -1482.597593 G [=] JOULE/MOL

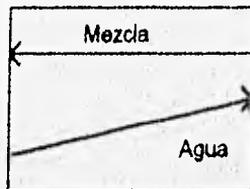
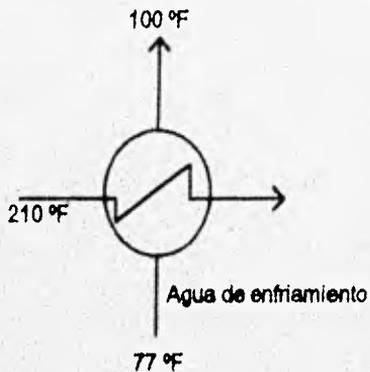
COMPOSICION DE LAS FASES:

COMPUESTO:	GLOBAL	X LIQ	Y VAP
Metanol	0.000054	0.000054	0.001112
Agua	0.014799	0.014799	0.104098
DFA	0.985147	0.985147	0.894791

CONSTANTES DE EQUILIBRIO:

COMPUESTO:	K EQUIL
Metanol	20.735270
Agua	7.034136
DFA	0.908279

CALCULO DEL CONDENSADOR.



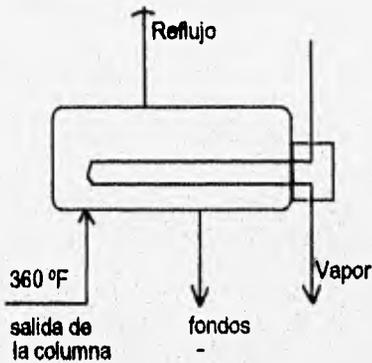
Para el calculo del condensador es necesario considerar que la mezcla tiene calor latente por lo que, para la mezcla.

$$W_M = 2630.4250 \frac{\text{lb}}{\text{hr}}$$

$$\lambda_M = 740.00 \frac{\text{BTU}}{\text{lb}}$$

$$Q = W \lambda = 2630.4250 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} * 740.00 \frac{\text{BTU}}{\text{lb}} = 1948140 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}$$

### CALCULO DEL REHERVIDOR.

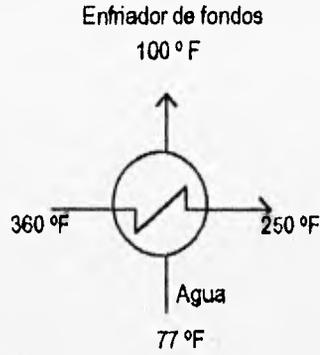
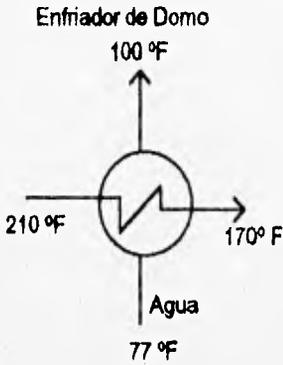


Para el calculo del reboiler, se considera que el vapor que pasa a través de el tiene calor latente por lo que los calculos de la mezcla quedan como sigue:

$$W_M = 1795.0842 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} \quad \lambda = 300 \frac{\text{BTU}}{\text{lb}}$$

$$Q = W \lambda = 1795.0842 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} * 300 \frac{\text{BTU}}{\text{lb}} = 538500 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}$$

## ENFRIADORES.



Para el enfriador de domos se tiene:

MEZCLA

$$W = 876.8086 \frac{\text{lb}}{\text{hr}}, \quad C_p = 0.9388 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{R}}$$

$$Q = W C_p \Delta T = 876.8086 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} \cdot 0.9388 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{R}} \cdot (670 - 630 \text{ } ^\circ\text{R}) = 32926 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}$$

Para el enfriador de fondos se tiene:

MEZCLA

$$W = 598.3599 \frac{\text{lb}}{\text{hr}}, \quad C_p = 0.7452 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{R}}$$

$$Q = W C_p \Delta T = 598.3599 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} \cdot 0.7452 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{R}} \cdot (820 - 710 \text{ } ^\circ\text{R}) = 49\,049 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}$$

## **CAPITULO VI**

# **FACTIBILIDAD DE LA SEPARACION**

## 6. 1 ESTIMACION DE COSTOS DE SEPARACION.

La estimación de costos de producción. en este caso de separación, incluye varios factores, desde la adquisición de las materias primas y el flete, hasta el envío del producto, es por ello que en este apartado se estimarán los costos más representativos para la obtención de DMF al 99.9%.

Pre calentador:

$$Q = W C_p \Delta T = 4425.5 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} * 0.6936 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{R}} (645 - 537^\circ \text{R}) = 33510 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}$$

$$Q = 83715 \frac{\text{Kcal}}{\text{hr}}$$

$$\text{Vapor saturado a } 3 \frac{\text{Kg}}{\text{cm}^2} \Rightarrow H = 650 \frac{\text{Kcal}}{\text{Kg}}$$

$$83715 \frac{\text{Kcal}}{\text{hr}} + 650 \frac{\text{Kcal}}{\text{Kg}} = 130 \frac{\text{Kg}}{\text{hr}} \text{ Vapor.}$$

Rehervidor:

$$Q = W \lambda = 1795 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} * 300 \frac{\text{BTU}}{\text{lb}} = 538500 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}$$

$$Q = 136000 \frac{\text{Kcal}}{\text{hr}}$$

$$136000 \frac{\text{Kcal}}{\text{hr}} + 650 \frac{\text{Kcal}}{\text{Kg}} = 210 \frac{\text{Kg}}{\text{hr}} \text{ Vapor}$$

$$\text{Total de Calentamiento} = 340 \frac{\text{Kg}}{\text{hr}} \text{ Vapor}$$

$$= 748 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} \text{ de Vapor}$$

Enfriador de Domo:

Mezcla.

$$Q = 32926 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}$$

Agua de enfriamiento.

$$Q = W C_p \Delta T$$

$$C_p = 1 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{F}}$$

$$\Delta T = (100 - 77 \text{ } ^\circ\text{F})$$

$$W = \frac{Q}{C_p \Delta T} = \frac{32926 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}}{1 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{F}} (100 - 77 \text{ } ^\circ\text{F})} = 1432 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} = 3 \text{ GPM}$$

Enfriador de fondos :

Mezcla.

$$Q = 49\ 049 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}$$

Agua de enfriamiento.

$$Q = W C_p \Delta T$$

$$W = \frac{Q}{C_p \Delta T} = \frac{49049 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}}{1 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{F}} \cdot (100 - 77 \text{ } ^\circ\text{F})} = 2133 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} = 5 \text{ GPM}$$

Condensador:

Mezcla:

$$Q = 1\ 946\ 515 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}$$

Agua de enfriamiento.

$$Q = W C_p \Delta T$$

$$W = \frac{Q}{C_p \Delta T} = \frac{1\ 946\ 515 \frac{\text{BTU}}{\text{hr}}}{1 \frac{\text{BTU}}{\text{lb} \cdot \text{F}} \cdot (100 - 77 \text{ } ^\circ\text{F})} = 84631 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} = 170 \text{ GPM}$$

Total de agua de enfriamiento = 178 GPM  $\Rightarrow$  10 680 Galones por hora.

## 6.2 ESTUDIO DE MERCADO.

En este punto sólo se mostrarán algunos datos económicos de producción tanto de la DMF como del metanol, con la finalidad de conocer de una manera rápida y muy general cómo se encuentra el mercado de estos solventes. Esto se realizó con el propósito de averiguar si el mercado de la DMF (principalmente) era propicio, y ya con el análisis adecuado estimar los costos de separación y determinar que tan rentable es la purificación de la DMF.

### METANOL

AÑO	PRODUCCION	IMPORTACION	EXPORTACION	CAPACIDAD INSTALADA *	CONSUMO APARENTE
1988	200,686	20,630	---	171,500	221,296
1989	207,606	22,615	---	171,500	230,221
1990	210,494	22,005	---	171,500	232,499
1991	213,280	32,362	---	171,500	245,642
1992	200,130	44,200	227	171,500	244,103
1993	169,000	90,790	41	171,500	259,749

\* Los datos de capacidad instalada se refieren a capacidad nominal.

### DIMETIL FORMAMIDA

AÑO	IMPORTACION
1991	125
1992	301
1993	371
1994	312

NOTA: DATOS EN TONELADAS  
FUENTES: ANIQ Y BANCOMEX

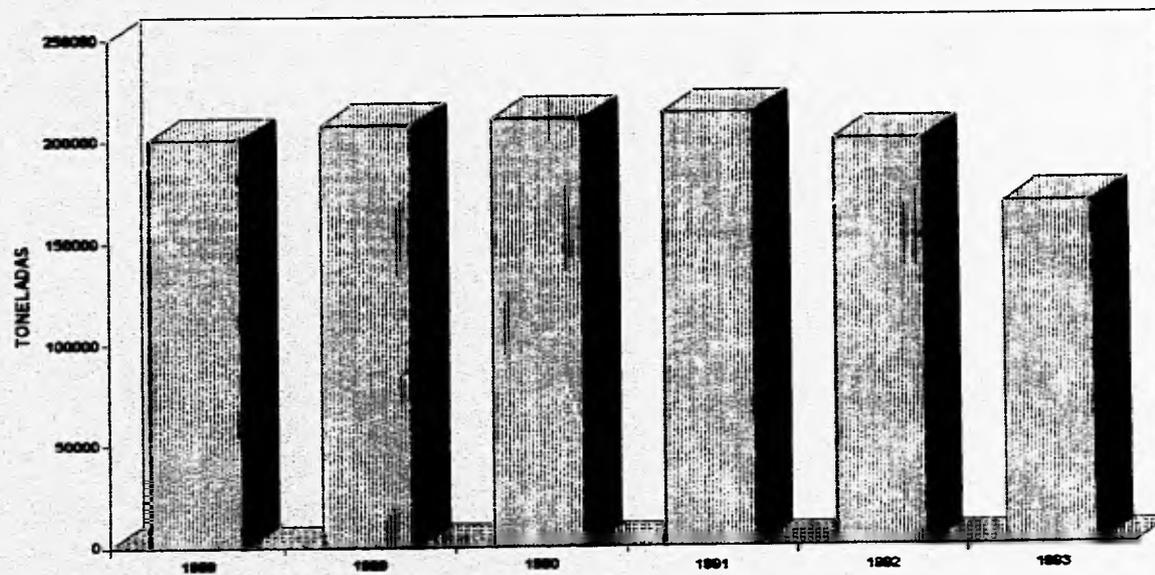
## PRECIOS

1994-1995	METANOL DLS/GAL	DIMETIL FORMAMIDA DLS/LB
ENERO	0.52	0.68
FEBRERO	0.53	0.68
MARZO	0.53	0.68
ABRIL	0.58	0.68
MAYO	0.58	0.68
JUNIO	0.72	0.68
JULIO	0.92	0.68
AGOSTO	1.02	0.68
SEPTIEMBRE	1.02	0.68
OCTUBRE	1.30	0.68
NOVIEMBRE	1.50	0.68
DICIEMBRE	1.55	0.68
ENERO	1.55	0.83
FEBRERO	1.55	0.83

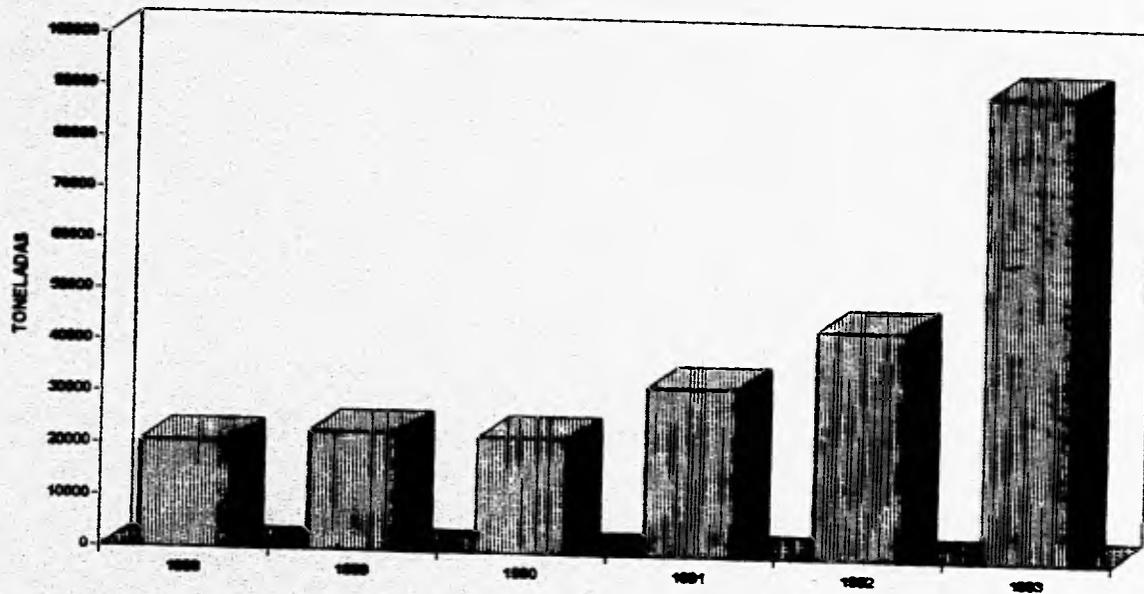
FUENTE: CHEMICAL MARKETING REPORTER  
BANCOMEX

A continuación se presentan las gráficas de mercado correspondientes a las tablas anteriores.

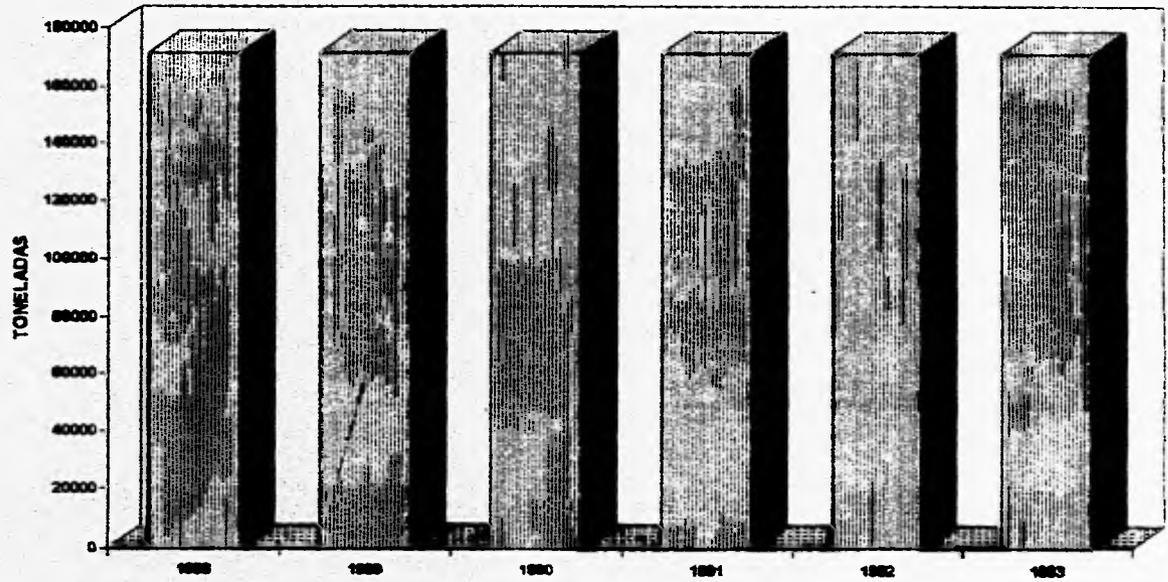
## PRODUCCION DE METANOL



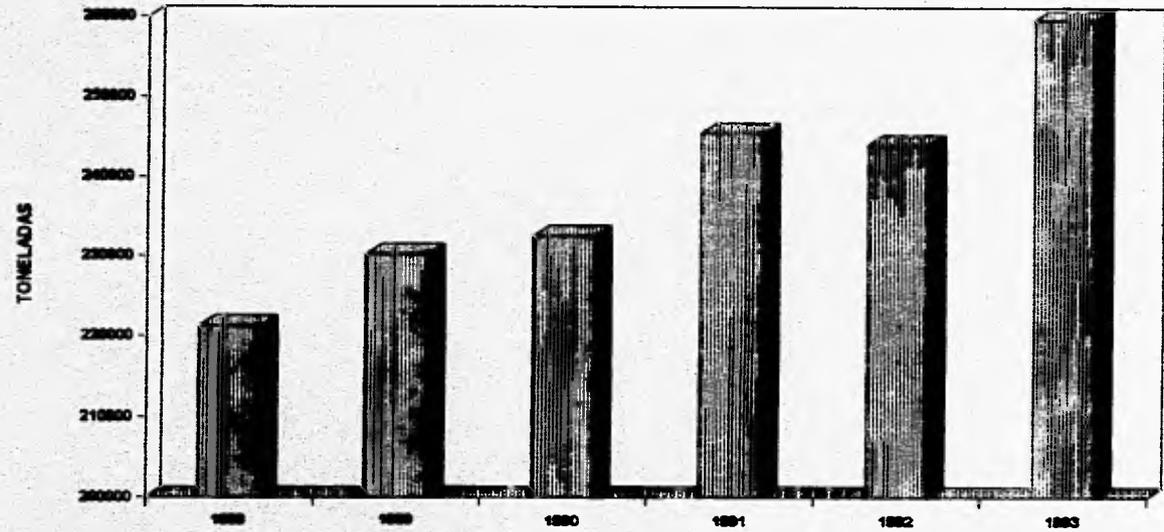
## IMPORTACION DE METANOL



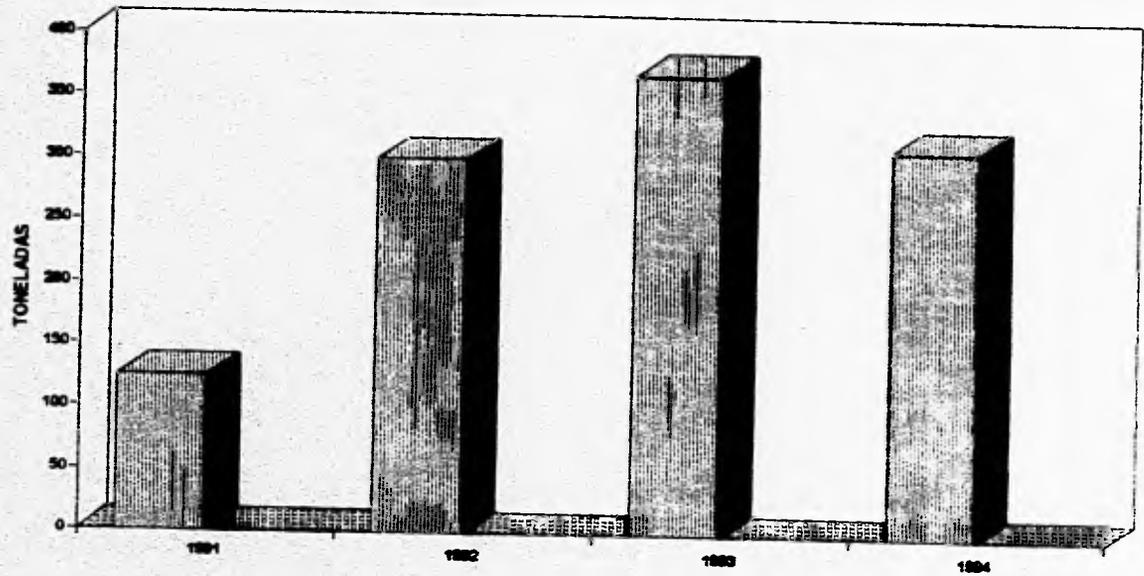
## CAP. INSTALADA METANOL



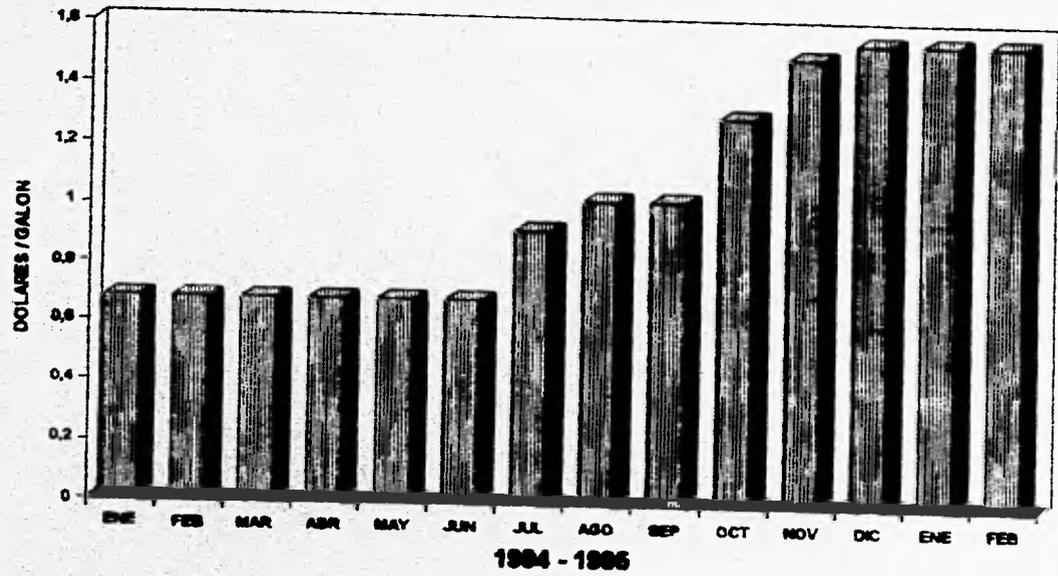
## CONSUMO APARENTE METANOL



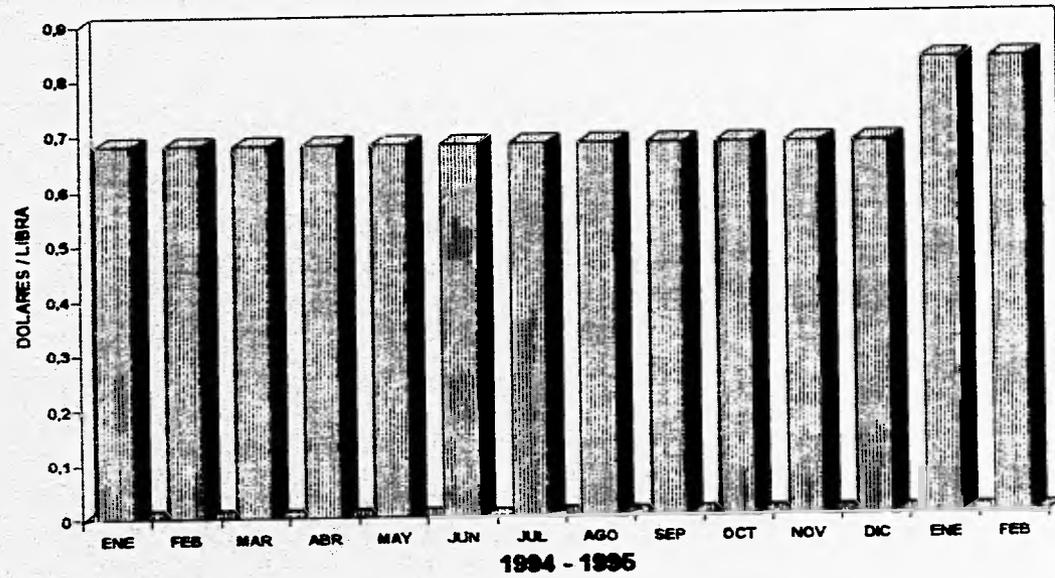
## IMPORTACION DE DIMETIL FORMAMIDA



## PRECIOS DEL METANOL



## PRECIOS DE DIMETILFORMAMIDA



### 6.3 FACTIBILIDAD DE LA SEPARACION

Siendo la factibilidad y rentabilidad económica de la separación el principal objetivo de este trabajo, en el presente capítulo se analizará este punto por unidad másica de producto (DMF), es decir, la rentabilidad de la separación en \$/lb, esto con la finalidad de tener un parámetro comparativo entre los costos de separación y el beneficio económico.

Costo de agua de enfriamiento(1) = 0.03 DLS por cada 1000 galones

$$10680 \frac{\text{gal}}{\text{hr}} + \frac{0.03 \text{ DLS}}{1000 \text{ galones}} = 0.32 \frac{\text{DLS}}{\text{hr}} + 6.25 \frac{\$}{\text{DLS}} = 2.0 \frac{\$}{\text{hr}}$$

$$\text{Costo de Vapor} = 340 \frac{\text{Kg}}{\text{hr}} + 650 \frac{\text{Kcal}}{\text{Kg}} \text{ Vapor} \Rightarrow 221\,000 \frac{\text{Kcal}}{\text{hr}}$$

$$\text{Poder calorífico del Diesel} = 9243 \frac{\text{Kcal}}{\text{lt}}$$

$$221\,000 \frac{\text{Kcal}}{\text{hr}} + 9243 \frac{\text{Kcal}}{\text{lt}} = 24 \frac{\text{lt}}{\text{hr}} \text{ Diesel.}$$

Eficiencia de la caldera = 60 %

$$\text{Precio de Diesel} = 1.4 \frac{\$}{\text{lt}}$$

$$24 \frac{\text{lt}}{\text{hr}} + 0.6 = 40 \frac{\text{lt}}{\text{hr}} + 1.4 \frac{\$}{\text{lt}} = 56 \frac{\$}{\text{hr}}$$

La generación de vapor requiere de otros gastos aparte del combustible, algunos de ellos son, tratamiento de agua para caldera, mano de obra operacional, depreciación del equipo y mantenimiento, es por ello que se aplica un factor del orden de 2 ó 3 veces el costo del combustible(2).

Por lo tanto, el costo total de vapor :

$$56 \$/\text{hr} * 2.5 = 140 \$/\text{hr}$$

Costo de Energía Eléctrica(3) = 100 Kw

Tomando como base la Tarifa OM, 18 hrs de trabajo al día y 25 días por mes:

$$100 \text{ Kw} \cdot 18 \frac{\text{hrs}}{\text{día}} \cdot 25 \frac{\text{días}}{\text{mes}} = 45000 \frac{\text{Kwh}}{\text{mes}}$$

$$45000 \frac{\text{Kwh}}{\text{mes}} \cdot 0.2 \frac{\$}{\text{Kwh}} = 9000 \frac{\$}{\text{mes}}$$

$$100 \frac{\text{Kw}}{\text{mes}} \cdot 24 \frac{\$}{\text{Kw}} = 2400 \frac{\$}{\text{mes}}$$

$$11400 \frac{\$}{\text{mes}} + \left( 25 \frac{\text{días}}{\text{mes}} \cdot 18 \frac{\text{hrs}}{\text{día}} \right) = 25 \frac{\$}{\text{hr}}$$

Costo de Operación(4):

$$2 \text{ Supervisores} = 8000 \frac{\$}{\text{mes}}$$

$$10 \text{ Operadores} = 20000 \frac{\$}{\text{mes}}$$

$$28000 \frac{\$}{\text{mes}} \Rightarrow 62 \frac{\$}{\text{hr}}$$

Costo de Mantenimiento(5) = 0.01  $\frac{\text{Dls}}{\text{Kwh}}$

$$45000 \frac{\text{Kwh}}{\text{mes}} \cdot 0.01 \frac{\text{Dls}}{\text{Kwh}} \cdot 6.25 \frac{\$}{\text{Dls}} = 2813 \frac{\$}{\text{mes}} \Rightarrow 7 \frac{\$}{\text{hr}}$$

Amortización de la Planta(6) = 1 \$ por cada \$ del costo de operación y mantenimiento

$$\Rightarrow 70 \frac{\$}{\text{hr}}$$

Costo Total de Separación

$$\Rightarrow 306 \frac{\$}{\text{hr}} + 598 \frac{\text{lb}}{\text{hr}} \text{ de DMF} = 0.51 \frac{\$}{\text{lb}}$$

A este valor adicionamos un costo de 0.3  $\frac{\$}{\text{lb}}$  por cargos de transporte

$$\Rightarrow 0.81 \frac{\$}{\text{lb}}$$

Nota: El horario de trabajo se estimó basado en la cantidad de muestra disponible.

(1), (2), (3) y (6): Precios Típicos de servicios municipales \* Manual del Ingeniero Químico \*

(3): \* Tarifa Eléctrica - Comisión Federal de Electricidad \*

(4): Estimación basada en el salario mínimo en efecto en el momento de realizar el presente trabajo.

Ahora, se obtendrá el beneficio económico de la separación:

$$\text{El precio en el mercado de DFA} = 0.83 \frac{\text{DLS}}{\text{lb}} * 6.25 \frac{\$}{\text{DLS}} \Rightarrow 5.18 \frac{\$}{\text{lb}}$$

$$\text{Por lo tanto, el beneficio económico de la separación es} = 4.37 \frac{\$}{\text{lb}}$$

# **ANALISIS DE RESULTADOS Y CONCLUSIONES**

## 7.1 ANALISIS DE RESULTADOS.

El análisis de procesos existentes es actualmente necesario, debido a los cambios de filosofías de diseño, aplicación de nuevas tecnologías y cambios en los costos de energía y equipo.

En la simulación de la planta, se tuvieron serios problemas de convergencia, por lo que, podemos afirmar que la selección de los mejores modelos para cada operación unitaria y los métodos de convergencia, depende de la precisión necesaria, el tiempo disponible y el tipo de información sobre el proceso. En la simulación se hizo una primera tentativa con modelos simples de manera de tener buenos estimados para la simulación rigurosa.

Para esto los usuarios de los simuladores deben tener amplios conocimientos de ingeniería química, computación y matemáticas. A pesar de que los simuladores generan mucha información que permite resolver errores, los usuarios requieren de un tiempo de entrenamiento en el cual se familiarizan con el lenguaje de entrada al simulador y las ventajas y dificultades del funcionamiento de cada modelo. Un mal manejo de un simulador genera resultados fuera de la realidad, estos errores deben ser corregidos por el usuario ya que el simulador no lo puede detectar.

Un problema para la simulación fue que no se tienen datos reportados de la planta por el hecho de que, el procesamiento de la mezcla requería de un tiempo considerable, y no se contaba con él, por lo tanto se tomaron datos de diseño y operación de los planos de los equipos con el fin de que la simulación de proceso fuera lo más aproximada posible a la realidad.

Se realizaron inicialmente los cálculos de operación por métodos cortos para obtener una aproximación de los datos del proceso y con esto poder llevar a cabo la simulación, pero dado que la planta ya está construida algunos cálculos se tuvieron que adaptar para que la separación fuera lo más satisfactoria posible. Un ejemplo de esto fue el número de platos ya que por métodos cortos se obtuvieron cinco platos, y la columna empacada de acuerdo al HETP tiene diez platos, esto no fue problema ya que al tener más platos la mezcla sale con un porcentaje mayor de pureza.

En la separación nuestro interés principal era el de obtener la mayor pureza en la DMF ya que es la que tiene un precio más atractivo, por esto mismo la mezcla de agua-metanol ya no se separó por no considerar tan rentable al metanol.

En el inicio básicamente se desconocía la composición de la corriente de entrada por lo que se definió tomando en cuenta los elementos que estaban en mayor porcentaje dentro de la mezcla. Pero podemos decir que con todo esto el objetivo se logró ya que se obtuvo DMF con 99.9% de pureza.

Por otro lado en base a los datos de mercado de la DMF, se puede apreciar que la recuperación de este solvente es una fuente económica muy atractiva, ya que el volumen total del consumo nacional es importado y por lo tanto su pago es en dólares; por otro lado, su precio aunque se mantuvo constante durante todo el año de 1994 ha sufrido un incremento a inicios de 1995; en lo referente al consumo, este se mantuvo casi a un mismo nivel de importación de 1992 a 1994 (no se cuentan con datos de 1995).

### **Conclusiones.**

Tomando como argumento la factibilidad de la separación, que es proxímadamente de 4.37 \$/lb de producto, se afirma que la recuperación de la DMF es económicamente muy atractiva y rentable, esto sin considerar una separación posterior del metanol y el agua.

Así mismo, se cumplieron los objetivos del presente trabajo, ya que la población estudiantil de la FES Zaragoza, específicamente los alumnos de la carrera de ingeniería química, realizarán la separación de la mezcla con la asesoría de los profesores y se le dará un uso adecuado al equipo instalado (columna empacada principalmente) que actualmente se encuentra en pruebas de arranque y operación.

En cuanto a la maquilación a la industria, se ha dado un primer paso al conocer la factibilidad de la recuperación, en este caso específico de la DMF, con ayuda de la simulación, herramienta importantísima para el análisis y optimización de procesos.

# **BIBLIOGRAFIA**

Dimitrios S. Marinou-Kouris, "A short-cut method for multicomponent distillation", National Technical University of Athens (Greece), Chem. Eng., March 9, pag.83,(1981).

Smith, J. M., Van Ness, H.C. "Introducción a la termodinámica en Ingeniería Química", México, Mc Graw Hill, 1989.

Perry R.H., Chilton C., " Manual del Ingeniero Químico", México. Mc Graw Hill, 1973, 5ª edición.

Kirk R. E., Othmer D. F., " Enciclopedia de tecnología Química", México, Hispanoamericana, 1962. Tomo VI.

Giral J., Barnés F., Ramírez A., " Manual para el diseño de procesos apropiados para países en desarrollo", UNAM, México, 1977.

Holland C. D., " Multicomponent Distillation", Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1963.

Treybal R.E., " Mass Transfer Operations", Mc Graw Hill, Singapore, 1980.

Henley E.J., Seader J.D., "Operaciones de separación por etapas de equilibrio en Ingeniería Química", Repla, México, 1990.

Maddox R.N., Hines A.L., "Transferencia de Masa". Prentice Hall Hispanoamericana, México, 1987.

Badger W.L., Banchemo J.T., " Introducción a la Ingeniería Química", Mc Graw Hill, México, 1981.

Enciclopedia: "Hombre, Ciencia y Tecnología", Britannica, México, 1982. Tomo 1.

Cuadernos de Posgrado 22, "Diseño de Equipo II", UNAM, México, 1986.

Kister H.Z., "Distillation Design", Mc Graw Hill", U.S.A., 1992.

Bazúa Rueda Enrique, "Equilibrio Físico", México, Facultad de Química, UNAM, 1994.

Luyben, William M., "Process Modeling Simulation and Control for Chemical Engineers", 2ª edición, Singapur, Mc Graw Hill, 1989.

Ojeda Ramos Miguel, "Métodos modulares simultáneos para la simulación de procesos químicos en estado estacionario". Tesis, México, UNAM, ENEP Zaragoza, 1987.

Pedemera Romano Javier E. " Simulación y propuesta de mejoras a la planta de desintegración catalítica de la refinería de Tula, Hidalgo", Tesis, México, UNAM, Facultad de Química, 1994.

Ruiz Garcia Marco A., Corona Sánchez Victor M., " Simulación de una torre de destilación por lote por el método implícito del doble punto y el método theta", Tesis, México, UNAM, ENEP Zaragoza, 1987.

Bárceñas Escobar Julio C., " Simulación de separadores multietapas con tres fases", Tesis, México, UNAM, ENEP Zaragoza, 1986.

Herrera Juárez José F. T., "Desarrollo de un módulo de simulación para el transporte y recolección de hidrocarburos en la sonda de Campeche", Tesis, México, UNAM, ENEP Zaragoza, 1983.