

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO



FACULTAD DE QUIMICA

EL MODELO DE ETAPA EN NO EQUILIBRIO UN AVANCE
EN LA SIMULACION DE OPERACIONES DE
SEPARACION

294724

T E S I S

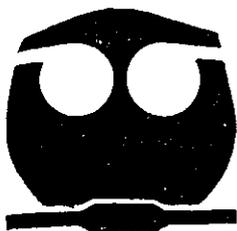
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A :
JUAN ROSENDO DIAZ MENDOZA



EXAMENES PROFESIONALES
FACULTAD DE QUIMICA

MEXICO, D. F.

2001





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.

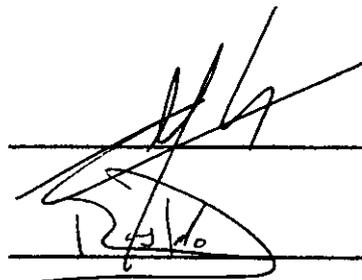
Jurado asignado:

Presidente	Prof. Celestino Montiel Maldonado
Vocal	Prof. Pedro Roquero Tejeda
Secretario	Prof. José Fernando Barragán Aroche
1er. Suplente	Prof. Martín Rivera Toledo
2o. Suplente	Prof. Francisco Javier Garfías Vasquez

Sitio donde se desarrolló el tema: Laboratorio de Simulación y Optimización de Procesos, Edificio E, Facultad de Química

Asesor: Celestino Montiel Maldonado

Sustentante: Juan Rosendo Díaz Mendoza



Handwritten signatures of Celestino Montiel Maldonado and Juan Rosendo Díaz Mendoza over horizontal lines.

Índice

1. Introducción	1
2. El Modelo de Etapa en Equilibrio	3
3. El Fenómeno de la Transferencia de Masa	8
3.1. Transferencia de Masa Interfacial	11
3.2. Difusión	14
3.2.1. Ley de Fick	15
3.2.2. Ecuaciones de Maxwell-Stefan	16
3.2.3. Calculo de los Coeficientes de Difusividad	23
3.2.4. Coeficientes de Transferencia de Masa	23
3.3. El Problema Bootstrap	26
3.3.1. La Matriz Bootstrap	30
3.4. Modelos de Transferencia de Masa	31
3.5. Transferencia de Masa y Energía	38
3.6. Modelos de Transferencia de Masa y Energía	45
4. El Modelo de Etapa en No Equilibrio	50
4.1. Modelo de Primera Generación	51
4.2. Modelo de Segunda Generación	54
4.3. Modelo de Destilación para 3 Fases	59
4.4. Modelo Dinámico	65
4.5. Destilación con Reacción	72
4.6. Coeficientes de transferencia de masa	74
4.6.1. Columnas de Platos	76
4.6.2. Columnas Empacadas	78
4.7. Caídas de Presión	81
4.7.1. Columnas de Platos	81
4.7.2. Columnas Empacadas	84
5. Aplicaciones Equilibrio vs. No Equilibrio	88
6. Conclusiones	174
7. Bibliografía	176

Lista de Tablas

4.1	Correlaciones existentes para calcular los k_{ij} para columnas de platos	75
4.2	Correlaciones existentes para calcular los k_{ij} para columnas empacadas	75
5.1	Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Aspen Plus para el sistema 1	90
5.2	Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Aspen Plus para el sistema 1	90
5.3	Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Chemsep para el sistema 1	91
5.4	Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Chemsep para el sistema 1	91
5.5	Error entre los dos modelos usando Aspen Plus para el sistema 1	92
5.6	Error entre los dos modelos usando Chemsep para el sistema 1	92
5.7	Comparación entre los flujos de líquido usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema 1	95
5.8	Comparación entre los flujos de vapor usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema 1	96
5.9	Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 1	99
5.10	Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 1	100
5.11	Comparación entre las fracciones mol del líquido usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 1	103
5.12	Comparación entre las fracciones mol del líquido usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 1	104
5.13	Comparación entre las fracciones mol del vapor usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 1	105
5.14	Comparación entre las fracciones mol del vapor usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 1	106
5.15	Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Aspen Plus para el sistema 2	110
5.16	Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Aspen Plus para el sistema 2	110
5.17	Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Chemsep para el sistema 2	111
5.18	Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Chemsep para el sistema 2	111
5.19	Error entre los dos modelos usando Aspen Plus para el sistema 2	112
5.20	Error entre los dos modelos usando Chemsep para el sistema 2	112
5.21	Comparación entre los flujos de líquido usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2	115

5.22	Comparación entre los flujos de líquido usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2	116
5.23	Comparación entre los flujos de vapor usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2	117
5.24	Comparación entre los flujos de vapor usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2	118
5.25	Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2	121
5.26	Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2	122
5.27	Comparación entre las fracciones mol del líquido usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2	125
5.28	Comparación entre las fracciones mol del líquido usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2	127
5.29	Comparación entre las fracciones mol del vapor usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2	129
5.30	Comparación entre las fracciones mol del vapor usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2	131
5.31	Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Aspen Plus para el sistema 3	136
5.32	Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Aspen Plus para el sistema 3	136
5.33	Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Chemsep para el sistema 3	137
5.34	Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Chemsep para el sistema 3	137
5.35	Error entre los dos modelos usando Aspen Plus para el sistema 3	138
5.36	Error entre los dos modelos usando Chemsep para el sistema 3	138
5.37	Comparación entre los flujos de líquido usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema 3	142
5.38	Comparación entre los flujos de vapor usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema 3	143
5.39	Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 3	145
5.40	Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 3	145
5.41	Comparación entre las fracciones mol del líquido en Aspen Plus para el sistema 3	148
5.42	Comparación entre las fracciones mol del líquido en Chemsep para el sistema 3	149
5.43	Comparación entre las fracciones mol del vapor en Aspen Plus para el sistema 3	150
5.44	Comparación entre las fracciones mol del vapor en Chemsep para el sistema 3	151
5.45	Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Aspen Plus para el sistema 4	155

5.46	Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Aspen Plus para el sistema 4	155
5.47	Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Chemsep para el sistema 4	156
5.48	Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Chemsep para el sistema 4	156
5.49	Error entre los dos modelos usando Aspen Plus para el sistema 4	157
5.50	Error entre los dos modelos usando Chemsep para el sistema 4	157
5.51	Comparación entre los flujos de líquido usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema 4	161
5.52	Comparación entre los flujos de vapor usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema 4	161
5.53	Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 4	163
5.54	Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 4	163
5.55	Comparación entre las fracciones mol del líquido en Aspen Plus para el sistema 4	168
5.56	Comparación entre las fracciones mol del líquido en Chemsep para el sistema 4	168
5.57	Comparación entre las fracciones mol del vapor en Aspen Plus para el sistema 4	169
5.58	Comparación entre las fracciones mol del vapor en Chemsep para el sistema 4	170

Lista de Figuras

1.1	Modelo de etapa en no equilibrio	2
2.1	Modelo de etapa ideal en equilibrio	3
2.2	Representación de una columna	4
2.3	Representación de una etapa ideal en equilibrio	4
3.1	Un ejemplo de difusión	8
3.2	Sistema de dos fases conectados por medio de una interfase	11
3.3	Volumen de control	17
3.4	Fenómenos que se pueden presentar en un sistema multicomponente	22
3.5	Perfiles de las fracciones mol en un proceso de transferencia de masa	24
3.6	Representación del problema Bootstrap	27
3.7	Modelo de película	31
3.8	Modelo de penetración	34
3.9	Distribución de edades $\psi(t)$ para el modelo de Higbie	36
3.10	Distribución de edades $\psi(t)$ para el modelo de Danckwerts	36
3.11	Transporte de Masa y de Energía Interfacial	42
4.1	Representación de una etapa en no equilibrio	50
4.2	Representación de una etapa del modelo de segunda generación	54
4.3	Modelo de no equilibrio para 3 fases	59
4.4	Representación gráfica de un plato típico	65
4.5	Acumulación en una etapa	66
4.6	Acumulación en un plato de malla	69
4.7	Etapa en No Equilibrio con reacción química	72
5.1	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo del líquido en Aspen Plus para el sistema 1	93
5.2	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Chemsep para el sistema 1	93
5.3	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Aspen Plus para el sistema 1	94
5.4	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Chemsep para el sistema 1	94
5.5	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Aspen Plus para el sistema 1	97
5.6	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Chemsep para el sistema 1	98
5.7	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Aspen Plus para el sistema 1	101
5.8	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Chemsep para el sistema 1	101

5.9	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Aspen Plus para el sistema 1	102
5.10	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Chemsep para el sistema 1	102
5.11	Comparación de la rapidez de transferencia de masa en Aspen Plus para el sistema 1	107
5.12	Comparación de la rapidez de transferencia de masa en Chemsep para el sistema 1	108
5.13	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Aspen Plus para el sistema 2	113
5.14	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Chemsep para el sistema 2	113
5.15	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Aspen Plus para el sistema 2	114
5.16	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Chemsep para el sistema 2	114
5.17	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Aspen Plus para el sistema 2	119
5.18	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Chemsep para el sistema 2	120
5.19	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Aspen Plus para el sistema 2	123
5.20	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Chemsep para el sistema 2	123
5.21	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Aspen Plus para el sistema 2	124
5.22	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Chemsep para el sistema 2	124
5.23	Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Aspen Plus para el sistema 2	133
5.24	Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Chemsep para el sistema 2	134
5.25	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Aspen Plus para el sistema 3	139
5.26	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Chemsep para el sistema 3	140
5.27	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Aspen Plus para el sistema 3	140
5.28	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Chemsep para el sistema 3	141
5.29	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Aspen Plus para el sistema 3	144
5.30	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Chemsep para el sistema 3	144
5.31	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Aspen Plus para el sistema 3	146

5.32	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Chemsep para el sistema 3	146
5.33	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Aspen Plus para el sistema 3	147
5.34	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Chemsep para el sistema 3	147
5.35	Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Aspen Plus para el sistema 3	153
5.36	Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Chemsep para el sistema 3	153
5.37	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Aspen Plus para el sistema 4	158
5.38	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Chemsep para el sistema 4	159
5.39	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Aspen Plus para el sistema 4	159
5.40	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Chemsep para el sistema 4	160
5.41	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Aspen Plus para el sistema 4	162
5.42	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Chemsep para el sistema 4	162
5.43	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Aspen Plus para el sistema 4	164
5.44	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Chemsep para el sistema 4	164
5.45	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Aspen Plus para el sistema 4	165
5.46	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Chemsep para el sistema 4	165
5.47	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Aspen Plus para el sistema 4	166
5.48	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Chemsep para el sistema 4	166
5.49	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Aspen Plus para el sistema 4	167
5.50	Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Chemsep para el sistema 4	167
5.51	Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Aspen Plus para el sistema 4	171
5.52	Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Chemsep para el sistema 4	172

1 Introducción

Las operaciones de separación son esenciales en la industria química ya que son el medio por el cual se purifican los productos de acuerdo a las especificaciones de los procesos, entre las operaciones más importantes y más usadas en la industria están la destilación, la absorción, la desorción y la extracción. Un ejemplo de su importancia se da en la industria del petróleo ya que todos los derivados se obtienen a partir de un proceso de separación, primero el crudo es tratado para separar el gas y luego es enviado a una serie de destilaciones mediante las cuales se obtienen productos como el diesel y la gasolina.

Las operaciones de separación se pueden ver desde el punto de vista de la simulación o del diseño, en ambos casos es importante saber cual es o va a ser el valor y el comportamiento de: los flujos, las composiciones, las temperaturas y las presiones; ya que a partir de esos datos se puede saber si la operación alcanzará los objetivos deseados o es necesario cambiar algún parámetro para lograrlos. Esos valores se pueden conocer a través de un modelo que describa apropiadamente los fenómenos que ocurren en el proceso.

Existen dos enfoques para modelar una operación de separación, el primero considera que los flujos que abandonan las etapas están en equilibrio termodinámico y el segundo considera que los flujos que abandonan las etapas no están en equilibrio termodinámico.

El modelo de etapa ideal en equilibrio es usado ampliamente desde 1893 y a partir de esa fecha ha sufrido modificaciones que han mejorado el modelo, siendo una de las más importantes la que ordena las ecuaciones de tal manera que se pueden resolver con la ayuda de una computadora, sin embargo las ecuaciones que describen el modelo simplifican los fenómenos fundamentales por lo que no proporcionan resultados reales, una manera en la que se puede mejorar el modelo para que proporcione resultados mas apegados a los reales es con el uso de las eficiencias. Al usar las eficiencias se presentan dos problemas, el primero consiste en escoger el tipo de eficiencia que se va a usar, y el segundo es determinar cómo se va a calcular, hay muchas correlaciones empíricas para sistemas particulares o que comparten elementos comunes pero en caso de que el sistema sea nuevo es necesario llevar a cabo un experimento para determinar su valor.

Como es necesario conocer el comportamiento real de la columna se necesita de un modelo que no dependa de las eficiencias o de otros conceptos para dar resultados apegados a la realidad, y aquí es donde entra el modelo de etapa en no equilibrio.

El modelo de etapa en no equilibrio se basa en los fenómenos fundamentales por lo que es más riguroso, considera las posibles interacciones entre los compuestos presentes y también entre el transporte de materia y energía, toma en cuenta los

aspectos internos del equipo en el cual se va a llevar a cabo la separación, por lo que los resultados que son obtenidos son más apegados a la realidad sin la necesidad de usar el concepto de eficiencia.

El modelo de etapas en no equilibrio considera la existencia de equilibrio en la interfase y un conjunto de resistencias a la transferencia de materia y energía que provoca una serie de gradientes.

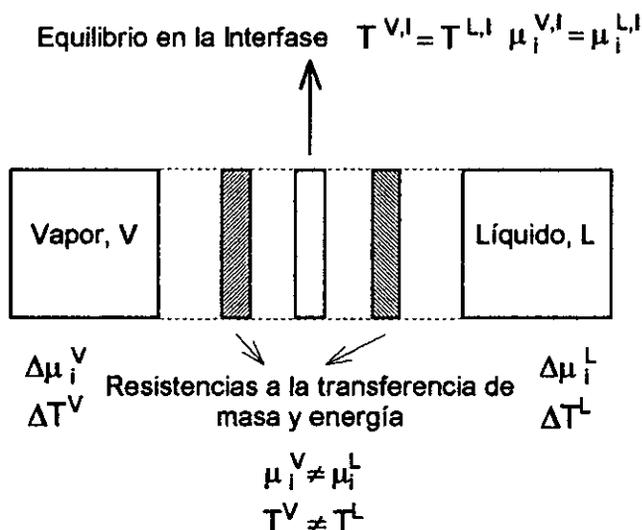


Figura 1.1 Modelo de etapa en no equilibrio

Los procesos de separación involucran el transporte de materia y energía entre diferentes fases con una rapidez que depende de que tan alejadas del equilibrio se encuentren las fases. En teoría usando el modelo de etapa en equilibrio no habría separación, en cambio el modelo de etapa en no equilibrio toma en consideración el fenómeno fundamental de la transferencia de masa y que tan alejado del equilibrio se encuentra el sistema, por lo que es importante analizarlo.

Como el modelo de no equilibrio es más completo y se apega más a lo que pasa en la realidad esta tesis tiene como objetivos:

- Exponer las bases teóricas que sustentan el modelo de no equilibrio.
- Analizar los modelos de etapa en no equilibrio que se han desarrollado para el diseño de procesos de separación en sistemas multicomponentes.
- Hacer una comparación entre los resultados obtenidos al usar los dos modelos Equilibrio vs. No Equilibrio y analizar las diferencias que puedan generar.

2 El Modelo de Etapa en Equilibrio

El modelo de etapa ideal en equilibrio fue presentado por Sorel [28] para estudiar la rectificación del alcohol, desde esa fecha se han hecho una serie de contribuciones que han mejorado el modelo. Este modelo toma en cuenta las siguientes consideraciones:

- La operación llega al estado estacionario.
- El sistema alcanza el equilibrio mecánico.
- El vapor y el líquido están perfectamente mezclados y se considera que están en equilibrio termodinámico.
- El calor de mezclado puede ser despreciado.

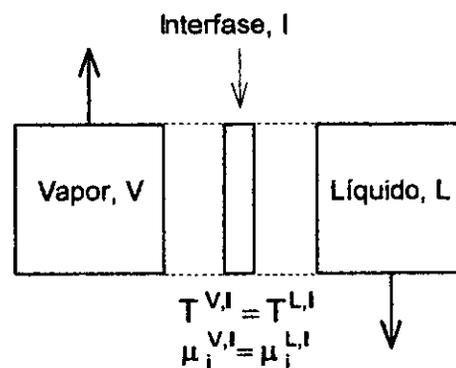


Figura 2.1 Modelo de etapa ideal en equilibrio

Las operaciones de separación como la destilación, la absorción y la desorción se llevan a cabo en columnas, la columna esta constituida internamente por una serie de platos o puede estar empacada de manera aleatoria o estructuradamente, la función de los platos y del material de empaque es que el vapor y el líquido entren en contacto para que se pueda llevar a cabo la transferencia de masa.

Cuando se usa el modelo de equilibrio se considera que las composiciones de los flujos están en equilibrio, y que la temperatura de los flujos que abandonan las etapas es la misma, lo anterior ocasiona un problema porque en la realidad los flujos nunca se encuentran en equilibrio termodinámico.

Una de las maneras en las que se puede tomar en cuenta el hecho de que los flujos que abandonan las etapas no están en equilibrio es por medio del uso de las eficiencias, que sirven para cuantificar que tan alejado del equilibrio opera el proceso, para un sistema binario la eficiencia varía de 0 a 1 y es la misma para los dos componentes. Sin embargo en los sistemas multicomponentes las eficiencias son diferentes para todos los compuestos y pueden tomar valores que van de $-\infty$ a $+\infty$. La eficiencia que se usa comúnmente en las columnas de platos es la de Murphree, en cambio en las columnas empacadas el concepto de eficiencia que se usa es la altura equivalente a un plato teórico (HETP).

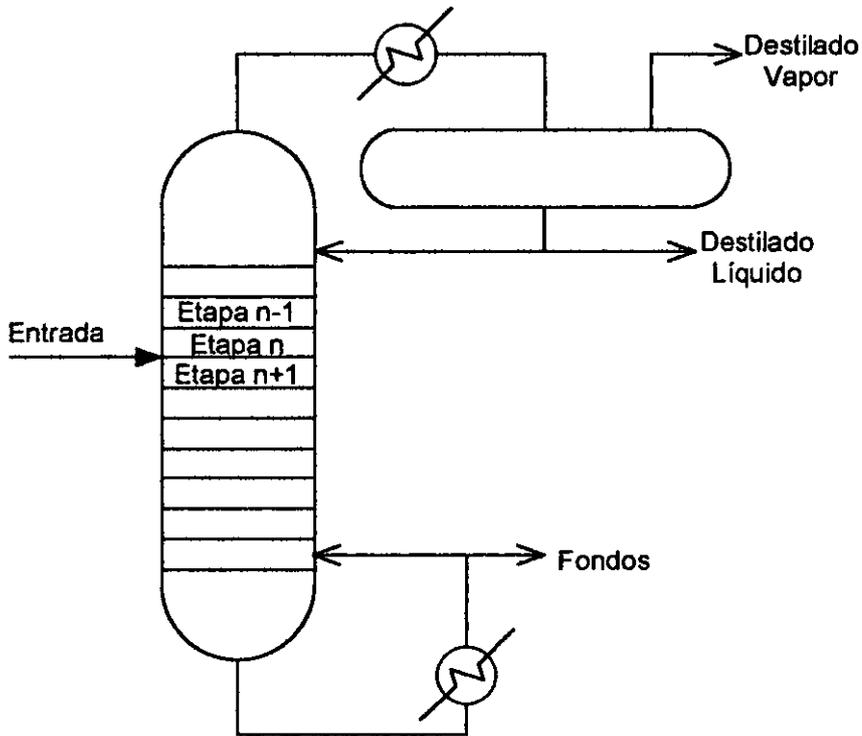


Figura 2.2 Representación de una columna

La columna esta constituida por etapas, cada etapa puede tener entradas y salidas laterales de masa y de energía, además a la etapa entra líquido de la etapa superior y vapor de la etapa inferior y salen vapor a la etapa superior y líquido a la etapa inferior.

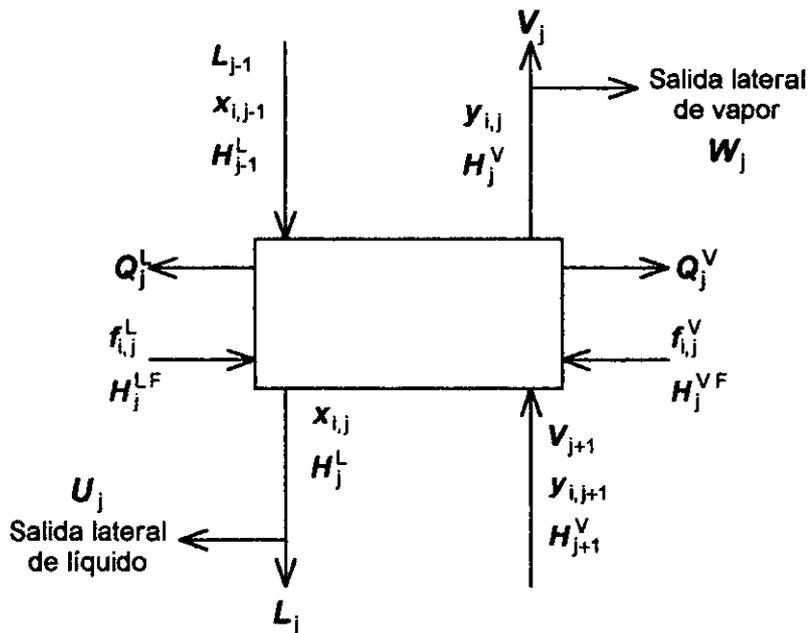


Figura 2.3 Representación de una etapa ideal en equilibrio

En una columna de platos cada plato es una etapa, en cambio una columna empacada se debe dividir en secciones para poder analizarla.

Las ecuaciones que representan el modelo de etapa ideal en equilibrio en un proceso de separación son:

→ los balances de materia por componente y el balance de materia total

$$M_{i,j} \equiv (1+r_j^V)V_j y_{i,j} + (1+r_j^L)L_j x_{i,j} - V_{j+1} y_{i,j+1} - L_{j-1} x_{i,j-1} - f_{i,j}^V - f_{i,j}^L = 0 \quad (2-1)$$

$i = 1, 2, \dots, C-1$

$$M_j^T \equiv (1+r_j^V)V_j + (1+r_j^L)L_j - V_{j+1} - L_{j-1} - F_j^V - F_j^L = 0 \quad (2-2)$$

en donde $r_j^V = \frac{W_j}{V_j}$ y $r_j^L = \frac{U_j}{L_j}$ y "C" es el número de componentes

→ las relaciones de equilibrio

$$E_{i,j} \equiv K_{i,j} x_{i,j} - y_{i,j} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (2-3)$$

→ la suma de las fracciones mol del vapor y del líquido debe ser igual a 1

$$S_j^V \equiv \sum_{i=1}^C y_{i,j} - 1 = 0 \quad (2-4)$$

$$S_j^L \equiv \sum_{i=1}^C x_{i,j} - 1 = 0 \quad (2-5)$$

→ el balance de energía

$$H_j \equiv (1+r_j^V)V_j H_j^V + (1+r_j^L)L_j H_j^L - V_{j+1} H_{j+1}^V - L_{j-1} H_{j-1}^L - F_j^V H_j^V - F_j^L H_j^L + Q_j^V + Q_j^L = 0 \quad (2-6)$$

Sumando las ecuaciones (2-1) a (2-6) se tiene un total de $2C+3$ ecuaciones, que se conocen como las ecuaciones MESH, M por el balance de Materia, E por las relaciones de Equilibrio, S por la ecuación de la sumatoria de las fracciones mol y H por el balance de Energía.

Para una etapa si se especifican todas las corrientes de alimentación, la presión, las cargas térmicas y el flujo de las corrientes laterales hay un total de $2C+3$ variables en cada etapa "j", las cuales son:

- la composición del vapor $y_{i,j}$ (C)

- la composición del líquido $x_{i,j}$ (C)
- flujo del vapor V_j (1)
- flujo del líquido L_j (1)
- temperatura de la etapa T_j (1)

Lo que da un total de $2C+3$ variables que se resuelven con las ecuaciones MESH, para una columna de "N" etapas el número de ecuaciones es $N(2C+3)$.

Si se incorporan las eficiencias a las ecuaciones entonces los resultados que se obtienen son más reales, pero en los sistemas multicomponentes hay que tomar en cuenta que las eficiencias pueden tomar cualquier valor.

La importancia del modelo de etapa ideal en equilibrio es la gran cantidad de algoritmos y programas que se han desarrollado para resolver las ecuaciones y obtener el valor de las variables que se están evaluando.

Nomenclatura

C	número de componente
E	ecuación de equilibrio
f	flujo molar por componente [kmol/s]
F	flujo molar total [kmol/s]
H	ecuación de balance de energía
H	entalpía [J/kmol]
K	relación de equilibrio
L	flujo molar del líquido [kmol/s]
M	ecuación de balance de materia
N	número de etapas
Q	entrada/salida de calor [J/s]
r	relación de la corriente lateral al flujo interetapa
S	ecuación de sumatoria de las fracciones mol
T	temperatura [K]
U	flujo lateral de líquido [kmol/s]
V	flujo molar del vapor [kmol/s]
W	flujo lateral de vapor [kmol/s]
x	fracción mol en la fase líquida [-]
y	fracción mol en la fase vapor [-]

Subíndice

i	número de componente
j	número de etapa

3 El Fenómeno de la Transferencia de Masa

La transferencia de masa es el movimiento neto de un componente de una mezcla, de un punto 1 a un punto 2, en donde la concentración del componente es distinta. La mayoría de las veces la transferencia de masa ocurre entre dos fases a través de una interfase.

En los procesos de transferencia de masa hay dos mecanismos por medio de los cuales se lleva a cabo la transferencia, esos mecanismos son la difusión y la convección, la masa total que es transferida es el resultado de la suma de la masa transferida por los dos mecanismos.

La difusión se presenta cuando la concentración de un fluido varía de un punto a otro, como consecuencia los componentes del fluido tienen la tendencia a moverse en el sentido en el que los gradientes de concentración sean eliminados y la composición sea uniforme. Si además de la existencia de un gradiente de concentración, el fluido se encuentra en movimiento, entonces también hay transferencia de masa por el mecanismo de convección. La convección va acompañada de la difusión, pero puede haber casos en los que únicamente exista la difusión y el fluido se encuentre estático por lo que la convección sería nula.

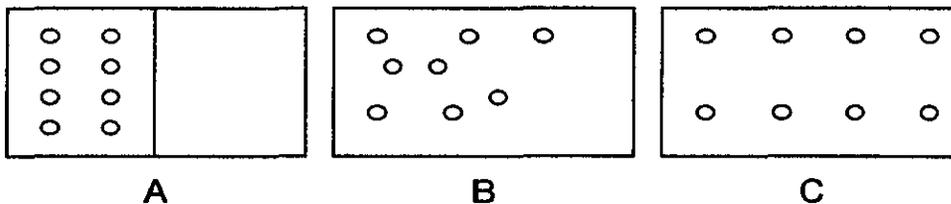


Figura 3.1 Un ejemplo de difusión. A) La concentración en el sistema es distinta, y hay una barrera que impide la difusión; B) la barrera es retirada y el compuesto se empieza a difundir hasta que; en C) la concentración es la misma en todo el sistema

La difusión provoca que los componentes del fluido se muevan para que la composición sea la misma en cualquier punto, la velocidad con la que se mueven dependen de la actividad difusional, si se considera que la velocidad media del componente "i" en la dirección "x" con respecto a un sistema de coordenadas estacionarias es u_i , entonces su flux molar difusivo es

$$J_i = c_i(u_i - u^A) \tag{3-1}$$

y su flux másico difusivo es

$$j_i = \rho_i(u_i - u^A) \tag{3-2}$$

en donde c_i es la concentración del componente "i", ρ_i es la densidad del componente "i" y u^A es una velocidad de referencia.

La velocidad de referencia puede ser:

- la velocidad molar promedio
- la velocidad másica promedio
- la velocidad volumétrica promedio

El flux molar convectivo debido al movimiento del seno del fluido se define como

$$I_i = c_i u^A \quad (3-3)$$

y el flux másico convectivo como

$$i_i = \rho_i u^A \quad (3-4)$$

Si se suman las dos contribuciones, el flux molar difusivo y el flux molar convectivo, se obtiene el flux molar de "i"

$$N_i = J_i + I_i = c_i(u_i - u^A) + c_i u^A \quad (3-5)$$

$$N_i = c_i u_i \quad (3-6)$$

y el flux másico de "i" es

$$n_i = j_i + i_i = \rho_i(u_i - u^A) + \rho_i u^A \quad (3-7)$$

$$n_i = \rho_i u_i \quad (3-8)$$

El flux molar se define como la cantidad de moles de la especie "i" que cruzan una unidad de área por unidad de tiempo, y el flux másico como la cantidad de masa de la especie "i" que cruza una unidad de área por unidad de tiempo.

Ahora se definen dos velocidades de referencia, una para los casos donde la concentración esta en moles, en la cual la velocidad de referencia u^A es la velocidad molar promedio

$$u^A = u = \frac{1}{c_t} \sum_{i=1}^n c_i u_i = \sum_{i=1}^n x_i u_i \quad (3-9)$$

y otra para los casos donde la concentración esta en masa, y donde la velocidad de referencia u^A es la velocidad másica promedio

$$\mathbf{u}^A = \mathbf{v} = \frac{1}{\rho_t} \sum_{i=1}^n \rho_i \mathbf{u}_i = \sum_{i=1}^n \mathbf{w}_i \mathbf{u}_i \quad (3-10)$$

en los dos casos "n" es el número de componentes presentes.

Para obtener el flux molar total, que es la cantidad de moles totales que cruzan una unidad de área por unidad de tiempo, se suman los fluxes molares de todos los componentes

$$\mathbf{N}_t = \sum_{i=1}^n \mathbf{N}_i = \mathbf{c}_t \mathbf{u} \quad (3-11)$$

y para obtener el flux másico total, se suman los fluxes másicos de todos los componentes

$$\mathbf{n}_t = \sum_{i=1}^n \mathbf{n}_i = \rho_t \mathbf{v} \quad (3-12)$$

Si para los fluxes difusivos molares se suman las contribuciones individuales de todos los componentes se obtiene

$$\mathbf{J}_i = \mathbf{c}_i (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}) = \mathbf{c}_i \mathbf{u}_i - \mathbf{c}_i \mathbf{u} \quad (3-13)$$

$$\sum_{i=1}^n \mathbf{J}_i = \mathbf{N}_t - \mathbf{N}_t = 0 \quad (3-14)$$

lo que implica que los compuestos que se difunden lo hacen a expensas de otro, de manera tal que sus fluxes difusivos se anulan.

El flux molar \mathbf{N}_i esta relacionado con el flux molar difusivo \mathbf{J}_i a través de

$$\mathbf{N}_i = \mathbf{J}_i + \mathbf{c}_i \mathbf{u} \quad (3-15)$$

$$\mathbf{N}_i = \mathbf{J}_i + \mathbf{x}_i \mathbf{N}_t \quad (3-16)$$

lo que proporciona una relación para calcular el flux molar \mathbf{N}_i a través de \mathbf{J}_i y de \mathbf{N}_t .

Si ahora se sigue el mismo procedimiento anterior con los fluxes másicos y se suman las contribuciones individuales de todos los componentes se obtiene

$$\mathbf{j}_i = \rho_i (\mathbf{u}_i - \mathbf{v}) = \rho_i \mathbf{u}_i - \rho_i \mathbf{v} \quad (3-17)$$

$$\sum_{i=1}^n j_i = n_t - n_t = 0 \quad (3-18)$$

El flux másico n_i esta relacionado con el flux másico difusivo j_i a través de

$$n_i = j_i + \rho_i v \quad (3-19)$$

$$n_i = j_i + w_i n_t \quad (3-20)$$

La ecuación (3-20) es equivalente a (3-16) y proporciona una manera de calcular el flux másico n_i a través de j_i y de n_t .

3.1 Transferencia de Masa Interfacial

En los casos en los que la transferencia de masa es a través de una interfase hay que considerar los procesos que pasan en el seno del fluido y en la interfase.

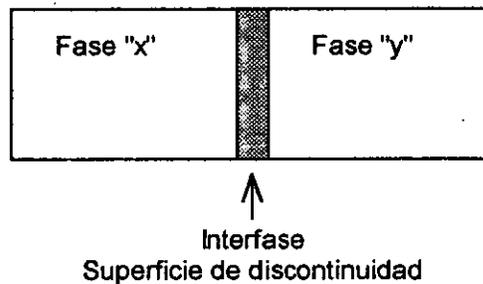


Figura 3.2 Sistema de dos fases conectadas por medio de una interfase

En la figura 3.2 "x" representa la fase 1 e "y" representa la fase 2, "I" representa la interfase, que es el punto de contacto de las fases "x" e "y".

Durante el proceso de transferencia de masa, se van a establecer gradientes de concentración en el seno del fluido y a través de la interfase.

Para calcular la variación de la concentración en el seno del fluido debido a los gradientes se usan las ecuaciones de continuidad que son:

$$\frac{\partial(\rho_t \psi)}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho_t \psi \mathbf{v}\} + \nabla \cdot \Phi = \zeta \quad (3-21)$$

en donde

- ψ = una cantidad de campo arbitraria por unidad de masa de la mezcla
- ζ = la rapidez de producción del campo por unidad de volumen del fluido

Φ = flux no convectivo de la cantidad del campo a través de una superficie externa de enlace "s"

ρ_t = densidad másica total de la mezcla

\mathbf{v} = velocidad másica promedio de la mezcla

Mientras que en la interfase "l" se tienen condiciones de salto o condiciones a la frontera que tienen que cumplir la siguiente ecuación

$$\zeta \cdot \left\{ \Phi^y + \rho_t^y \psi^y (\mathbf{v}^y - \mathbf{u}^l) - \Phi^x - \rho_t^x \psi^x (\mathbf{v}^x - \mathbf{u}^l) \right\} = \zeta^l \quad (3-22)$$

en donde

ζ = la unidad normal a "l" que va de la fase "x" a la fase "y"

ζ^l = la rapidez de producción de la cantidad del campo por unidad de area en la interfase "l"

\mathbf{u}^l = la velocidad de la interfase "l"

Además se deben de cumplir los siguientes 4 puntos

- 1. Balance de la especie "i" (no hay reacción química en el seno de la fase)

$$\psi = w_i \quad \Phi = j_i \quad \zeta = 0$$

- 2. Conservación de la masa total de la mezcla

$$\psi = 1 \quad \Phi = 0 \quad \zeta = 0 \quad \zeta^l = 0$$

- 3. Conservación del momentum lineal

$$\psi = \mathbf{v} \quad \Phi = \mathbf{p} \quad \zeta = \sum_{i=1}^n \rho_i \mathbf{F}_i \quad \zeta^l = 0$$

en donde

$\mathbf{p} = p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}$ es el tensor de presión

p = es la presión termodinámica

$\boldsymbol{\tau}$ = el tensor de fuerza

\mathbf{I} = el tensor unitario

\mathbf{F}_i = la fuerza del cuerpo que actúa por unidad de masa de la especie "i"

ζ = la suma de las fuerzas del cuerpo \mathbf{F}_i

- 4. Balance de Energía

$$\psi = U + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \quad \Phi = \mathbf{q} + \sum_{i=1}^n H_i j_i + \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} \quad \zeta = \sum_{i=1}^n \rho_i \mathbf{F}_i \cdot \mathbf{u}_i \quad \zeta^l = 0$$

en donde

U = la energía interna por unidad de masa de la mezcla

q = el flux de calor conductivo

H_i = la entalpia parcial específica del componente "i"

El juego de ecuaciones anteriores (3-21) y (3-22) son las ecuaciones generales que sirven para calcular el cambio de cualquier propiedad en el seno del fluido y en la interfase. Y ahora a partir de esas ecuaciones generales se van a obtener las ecuaciones para poder calcular el cambio de la concentración del fluido, lo que implica que se está llevando a cabo el proceso de transferencia de masa.

El balance diferencial para la continuidad de la masa de la especie "i", sin considerar reacción química se obtiene a partir de (3-21) y es

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho_i \mathbf{v}\} + \nabla \cdot \mathbf{j}_i = 0 \quad (3-23)$$

y para la mezcla total la ecuación queda como

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho_t \mathbf{v}\} = \frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \rho_t \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_t = 0 \quad (3-24)$$

La ecuación (3-24) se puede simplificar si se usa la siguiente ecuación

$$\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \quad (3-25)$$

$$\rho_t \frac{d \mathbf{w}_i}{dt} \equiv \rho_t \left\{ \frac{\partial \mathbf{w}_i}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{w}_i \right\} + \nabla \cdot \mathbf{j}_i = 0 \quad (3-26)$$

La velocidad de referencia \mathbf{v} se puede eliminar de la ecuación (3-26) si se expresa en términos de los fluxes másicos \mathbf{n}_i quedando

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{n}_i = 0 \quad (3-27)$$

La ecuación (3-27) se puede sumar para todos los compuestos presentes obteniendo así el balance diferencial que determina la continuidad de la masa total de la mezcla

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{n}_t = 0 \quad (3-28)$$

Las ecuaciones (3-27) y (3-28) se aplican en el seno del fluido.

Se pueden obtener las ecuaciones que determinan la continuidad del número de moles de la especie "i" y la continuidad del número de moles totales usando las ecuaciones anteriores pero haciendo los cambios correspondientes obteniendo las ecuaciones

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_i = 0 \quad (3-29)$$

$$\frac{\partial c_t}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_t = 0 \quad (3-30)$$

En la interfase, la ecuación que se aplica se obtiene a partir de (3-22) y es

$$\xi \cdot \mathbf{c}_i^x (\mathbf{u}_i^x - \mathbf{u}^l) = \xi \cdot \mathbf{c}_i^y (\mathbf{u}_i^y - \mathbf{u}^l) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3-31)$$

en donde se ve que el flux del componente "i" con respecto a la interfase debe ser continuo a través de la frontera de las fases. Si la interfase no se mueve $\mathbf{u}^l = 0$ y la ecuación (3-31) queda como

$$\xi \cdot \mathbf{N}_i^x = \xi \cdot \mathbf{N}_i^y \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3-32)$$

en donde \mathbf{N}_i^x es el flux del componente "i" en la fase "x" en un sistema de coordenadas estacionario, y \mathbf{N}_i^y es el flux del componente "i" en la fase "y" en un sistema de coordenadas estacionario.

La ecuación (3-32) indica que si la interfase no esta en movimiento, entonces los fluxes de la fase "x" y de la fase "y" deben ser iguales.

En las ecuaciones (3-27), (3-28), (3-29), (3-30) y (3-32) hay que obtener el valor de los fluxes molares, los cuales se pueden obtener a partir de los fluxes difusionales, de manera que se tiene que encontrar el valor de los j_i y de los J_i .

3.2 Difusión

Cuando se usa el modelo de no equilibrio es necesario calcular los fluxes \mathbf{N}_i que son iguales a $\mathbf{N}_i = \mathbf{J}_i + x_i \mathbf{N}_t$, si se reescribe la ecuación anterior se tiene que

$$\mathbf{N}_i = \mathbf{J}_i + x_i \sum_{i=1}^n \mathbf{N}_i \quad (3-33)$$

de donde se puede ver que es necesario calcular el valor del \mathbf{J}_i que es el flux difusivo.

Hay varias formas para calcular el flux difusivo entre las cuales están la ley de Fick, las ecuaciones de Maxwell-Stefan o por medio de los coeficientes de transferencia de masa. La Ley de Fick y los coeficientes de transferencia de masa están basados en observaciones experimentales y las ecuaciones de Maxwell-Stefan se desarrollaron a partir de la contribución mecánica de Maxwell y la contribución cinética de Stefan.

3.2.1 Ley de Fick

La Ley de Fick [6, 16, 29, 31] es una expresión matemática que describe cómo la especie "A" se mueve a través de un medio por causa de mecanismos moleculares, es decir cómo se mueven las moléculas de "A" por causa de los gradientes de concentración.

– Sistemas Binarios

La expresión general de la Ley de Fick para un sistema binario es:

$$J_A = -c_t D_{Fb AB} \nabla x_A \quad (3-34)$$

$$j_A = -\rho_t D_{Fb AB} \nabla w_A \quad (3-35)$$

en donde $D_{Fb AB}$ es el coeficiente de difusión de Fick binario para el sistema A-B.

Si se usan (3-13) y (3-34) para un sistema binario, se tiene que

$$J_1 = c_1(u_1 - u) = -c_t D_{Fb 12} \nabla x_1 \quad (3-36)$$

y como únicamente hay un flux independiente, pues de la ecuación (3-14) se sabe que $\sum_{i=1}^n J_i = 0$ el flux molar difusivo para la especie 2 queda como

$$J_2 = -J_1 = c_2(u_2 - u) = -c_t D_{Fb 21} \nabla x_2 \quad (3-37)$$

y para un sistema binario se cumple que

$$D_{Fb 12} = D_{Fb 21} \quad (3-38)$$

- Sistemas Multicomponentes

Para analizar los sistemas multicomponentes primero se toma un sistema ternario en donde las ecuaciones quedan de la siguiente manera

$$J_1 = -c_t D_{F11} \nabla x_1 - c_t D_{F12} \nabla x_2 \quad (3-39)$$

$$J_2 = -c_t D_{F21} \nabla x_1 - c_t D_{F22} \nabla x_2 \quad (3-40)$$

$$J_3 = -J_1 - J_2 \quad (3-41)$$

Para un sistema con "n" componentes hay "n-1" fluxes independientes, y se tiene que

$$\begin{aligned} J_1 &= -c_t D_{F11} \nabla x_1 - c_t D_{F12} \nabla x_2 \dots - c_t D_{F1,n-1} \nabla x_{n-1} \\ J_2 &= -c_t D_{F21} \nabla x_1 - c_t D_{F22} \nabla x_2 \dots - c_t D_{F2,n-1} \nabla x_{n-1} \\ &\vdots \\ J_i &= -c_t D_{Fi1} \nabla x_1 - c_t D_{Fi2} \nabla x_2 \dots - c_t D_{Fi,n-1} \nabla x_{n-1} \\ &\vdots \\ J_{n-1} &= -c_t D_{F_{n-1,1}} \nabla x_1 - c_t D_{F_{n-1,2}} \nabla x_2 \dots - c_t D_{F_{n-1,n-1}} \nabla x_{n-1} \end{aligned} \quad (3-42)$$

si la ecuación (3-42) se escribe en forma matricial queda como

$$(J) = -c_t [D_F] (\nabla x) \quad (3-43)$$

en donde (J) y (∇x) son matrices columna de dimensiones (n-1) y $[D_F]$ es una matriz cuadrada de dimensiones (n-1,n-1).

En estos casos los coeficientes de difusión multicomponentes, los D_F , son diferentes de los coeficientes de difusión binarios, los D_{Fb} , los D_F pueden tomar valores positivos o negativos y generalmente no son simétricos, en cambio los D_{Fb} son simétricos y tienen el mismo valor.

Los coeficientes de difusividad de Fick son obtenidos a partir de datos de laboratorio, pero también se pueden obtener a partir de los coeficientes de Maxwell-Stefan.

3.2.2 Ecuaciones de Maxwell-Stefan

Las ecuaciones de Maxwell-Stefan [16, 17, 29, 31] son otra forma diferente a la Ley de Fick para poder calcular el flux difusional J_i .

El desarrollo de las ecuaciones de Maxwell-Stefan considera que como resultado del movimiento de las moléculas del fluido en el proceso de difusión, las moléculas chocan entre sí, lo que produce una resistencia friccional.

Si se toma un volumen de control y se le aplica un balance se tiene que la suma de las fuerzas que actúan sobre el sistema es proporcional a la rapidez de cambio en el momentum del sistema

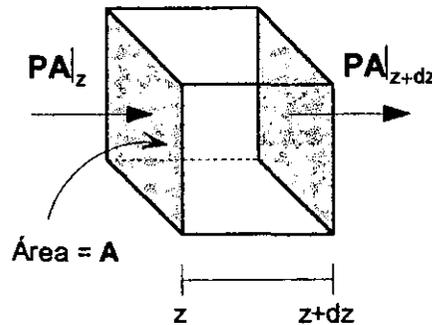


Figura 3.3 Volumen de Control

$$\sum \text{Fuerzas actuando en el sistema} \propto \text{Rapidez de cambio del momentum del sistema} \quad (3-44)$$

A través del volumen de control el momentum puede entrar o salir como producto del movimiento de las moléculas a través de las paredes, y dentro del volumen de control las moléculas de una especie "i" pueden ganar o perder momentum debido a que pueden chocar con moléculas de otras especies.

Si el volumen de control se mueve a la velocidad molar promedio u , entonces existe un equilibrio entre las moléculas que entran y las que salen, como resultado no hay un cambio neto en el momentum.

- Sistemas Binarios

Para calcular la rapidez de cambio del momentum del sistema, se tiene que calcular el número de choques entre las moléculas, el número de choques entre las moléculas de 1 y de 2 depende del número de moléculas presentes de cada especie, mientras más moléculas estén presentes el número de choques será mayor

$$\begin{aligned} \text{Número de choques entre 1 y 2} &\propto x_1 x_2 & (3-45) \\ \text{por unidad de volumen por} && \\ \text{unidad de tiempo} && \end{aligned}$$

La rapidez de cambio del momentum de las moléculas de la especie 1 por unidad de volumen, es igual al momentum promedio intercambiado en un choque, multiplicado por el número de choques entre las moléculas de 1 y las moléculas de 2 por unidad de volumen por unidad de tiempo.

Las fuerzas que pueden actuar sobre el sistema y en consecuencia sobre el volumen de control pueden ser: campos eléctricos, el esfuerzo cortante, la presión. Pero si la única fuerza presente es la presión y esta es constante, entonces no hay una fuerza neta actuando sobre el sistema.

El término de la Σ Fuerzas de la ecuación (3-44) es el resultado de las contribuciones que son ejercidas por las moléculas sobre las paredes del volumen de control. La fuerza neta que es ejercida sobre las paredes se divide en dos, la que es ejercida sobre la pared izquierda que es $PA|_z$ y la que es ejercida sobre la pared derecha que es $PA|_{z+dz}$.

La fuerza que es ejercida por las moléculas de la especie 1 sobre la pared izquierda es proporcional al número de moléculas y es igual a $p_1 A|_z$, en donde $p_1 = P x_1$, y la fuerza que es ejercida por las moléculas de 1 sobre la pared derecha es $p_1 A|_{z+dz}$.

Dividiendo entre el volumen $A\Delta z$ y tomando el límite cuando $\Delta z \rightarrow 0$ se tiene

$$\text{Fuerza neta ejercida por las moléculas de la especie 1} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{(p_1|_z - p_1|_{z+dz})}{\Delta z}$$

por unidad de volumen en la dirección z

(3-46)

Esa fuerza neta es igual a $-\frac{dp_1}{dz}$ y si se toman en cuenta las contribuciones en la dirección "x" y en la dirección "y", se tiene que

$$\text{Fuerza neta actuando sobre las moléculas de 1} = -\nabla p_1$$

por unidad de volumen

(3-47)

y la ecuación (3-44) queda como

$$-\nabla p_1 \propto (x_1 x_2 (u_1 - u_2))$$

(3-48)

para quitar la proporcionalidad se multiplica por una constante

$$\nabla p_1 = -f_{12} x_1 x_2 (u_1 - u_2)$$

(3-49)

$$d_1 = \left(\frac{1}{P} \right) \nabla p_1 = - \frac{x_1 x_2 (u_1 - u_2)}{D_{MS12}} \quad (3-50)$$

en donde $D_{MS12} = P / f_{12}$ es el Coeficiente de Difusividad de Maxwell-Stefan y d_1 es el gradiente de difusión de la especie 1 en un gas ideal a temperatura y presión constantes, para la especie 2 se tiene

$$d_2 = \left(\frac{1}{P} \right) \nabla p_2 = - \frac{x_1 x_2 (u_2 - u_1)}{D_{MS21}} \quad (3-51)$$

- Sistemas Multicomponentes

Para un sistema ternario las moléculas de 1 chocan con las moléculas de 2 y con las de 3, por lo que el balance de momentum para la especie 1 debe contemplar los choques entre 1-2 y 1-3

$$d_1 = - \frac{x_1 x_2 (u_1 - u_2)}{D_{MS12}} - \frac{x_1 x_3 (u_1 - u_3)}{D_{MS13}} \quad (3-52)$$

para la especie 2 el balance debe contemplar los choques entre 1-2 y 2-3

$$d_2 = - \frac{x_1 x_2 (u_2 - u_1)}{D_{MS21}} - \frac{x_2 x_3 (u_2 - u_3)}{D_{MS23}} \quad (3-53)$$

y para la especie 3 el balance debe contemplar los choques 1-3 y 2-3

$$d_3 = - \frac{x_1 x_3 (u_3 - u_1)}{D_{MS31}} - \frac{x_3 x_2 (u_3 - u_2)}{D_{MS32}} \quad (3-54)$$

Para un sistema multicomponente que contiene "n" especies, se suma un término por cada especie adicional y la ecuación queda

$$d_i = - \sum_{j=1}^n \frac{x_i x_j (u_i - u_j)}{D_{MSij}} \quad (3-55)$$

$$d_i = \sum_{j=1}^n \frac{(x_i N_j - x_j N_i)}{c_i D_{MSij}} \quad (3-56)$$

$$d_i = \sum_{j=1}^n \frac{(x_i J_j - x_j J_i)}{c_i D_{MSij}} \quad (3-57)$$

El término d_i hasta ahora es el gradiente de difusión, como el gradiente es la diferencia de concentración el término $d_i = \nabla x_i$, y ahora ya se puede encontrar el valor de J_i .

En los sistemas multicomponentes es más práctico expresar las ecuaciones en forma matricial, la ecuación (3-57) expresada de esta manera queda como

$$c_i d_i = -B_{ii} J_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} B_{ij} J_j \quad (3-58)$$

y los coeficientes de B están definidos por

$$B_{ij} = \frac{x_i}{D_{MSin}} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{x_k}{D_{MSik}} \quad (3-59)$$

$$B_{ij} = -x_i \left(\frac{1}{D_{MSij}} - \frac{1}{D_{MSin}} \right) \quad (3-60)$$

Las ecuaciones anteriores se expresan en función de J_i porque sólo "n-1" J_i son independientes y en cambio los "n" N_i son independientes, razón por la cual no hay una ecuación equivalente a (3-58) que use los N_i en lugar de los J_i .

Si la ecuación (3-58) se escribe en forma matricial en (n-1) dimensiones se tiene que

$$c_i(d) = -[B](J) \quad (3-59)$$

en donde $[B]$ es una matriz cuadrada de dimensiones (n-1,n-1), (J) y (d) son matrices columna de dimensiones (n-1).

Si se despeja (J) se tiene que

$$(J) = -c_i[B]^{-1}(d) \quad (3-60)$$

de manera que conociendo el valor de $[B]$ y de (d) es posible calcular el valor de J_i .

- Ecuación de Maxwell-Stefan para fluidos No Ideales

Para un fluido no ideal, d_i es un gradiente que está definido como

$$\mathbf{d}_i \equiv \frac{\mathbf{x}_i}{RT} \nabla_{T,P} \mu_i \quad (3-61)$$

donde μ_i es el potencial químico de la especie "i", y \mathbf{d}_i en función de los gradientes de las fracciones mol queda como

$$\mathbf{d}_i = \sum_{j=1}^{n-1} \Gamma_{ij} \nabla \mathbf{x}_j \quad (3-62)$$

en donde Γ es

$$\Gamma_{ij} = \delta_{ij} + \mathbf{x}_i \left. \frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial \mathbf{x}_j} \right|_{T,P,\Sigma} \quad (3-63)$$

en donde δ_{ij} es la delta de Kronecker $\delta_{ij} = 1$ si $i = j$ y $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$, el símbolo Σ indica que al diferenciar ($\ln \gamma_i$) con respecto a \mathbf{x}_j se dejan constantes las demás fracciones.

Para gases la formulación hecha en función de los coeficientes de actividad puede ser cambiada por la formulación en función del coeficiente de fugacidad ϕ_i .

$$\Gamma_{ij} = \delta_{ij} + \mathbf{x}_i \left. \frac{\partial \ln \phi_i}{\partial \mathbf{x}_j} \right|_{T,P,\Sigma} \quad (3-64)$$

si la ecuación (3-62) se escribe en forma matricial en "n-1" dimensiones queda de la siguiente forma

$$(\mathbf{d}) = [\Gamma](\nabla \mathbf{x}) \quad (3-65)$$

y sustituyendo en la ecuación (3-59) se tiene

$$\mathbf{c}_i [\Gamma](\nabla \mathbf{x}) = -[\mathbf{B}](\mathbf{J}) \quad (3-66)$$

para llegar a la forma matricial de la ecuación de Maxwell-Stefan para un fluido no ideal

$$(\mathbf{J}) = -\mathbf{c}_i [\mathbf{B}]^{-1} [\Gamma](\nabla \mathbf{x}) \quad (3-67)$$

La ecuación (3-67) es otra manera distinta a (3-60) para calcular \mathbf{J}_i con una diferencia sustancial, la presencia de Γ , por lo que el \mathbf{N}_i calculado es más exacto que el calculado con (3-60).

En los sistemas binarios el flux difusional de un compuesto es proporcional al gradiente de concentración de dicho compuesto, pero en los sistemas multicomponentes debido a las interacciones que pueden existir entre los compuestos el flux difusional de un compuesto no sólo es proporcional a su gradiente de concentración, sino que es proporcional a su propio gradiente de concentración y al gradiente de los otros compuestos presentes.

Como producto de esas interacciones los fenómenos que se pueden presentar son: la difusión inversa, la difusión osmótica y la barrera de difusión.

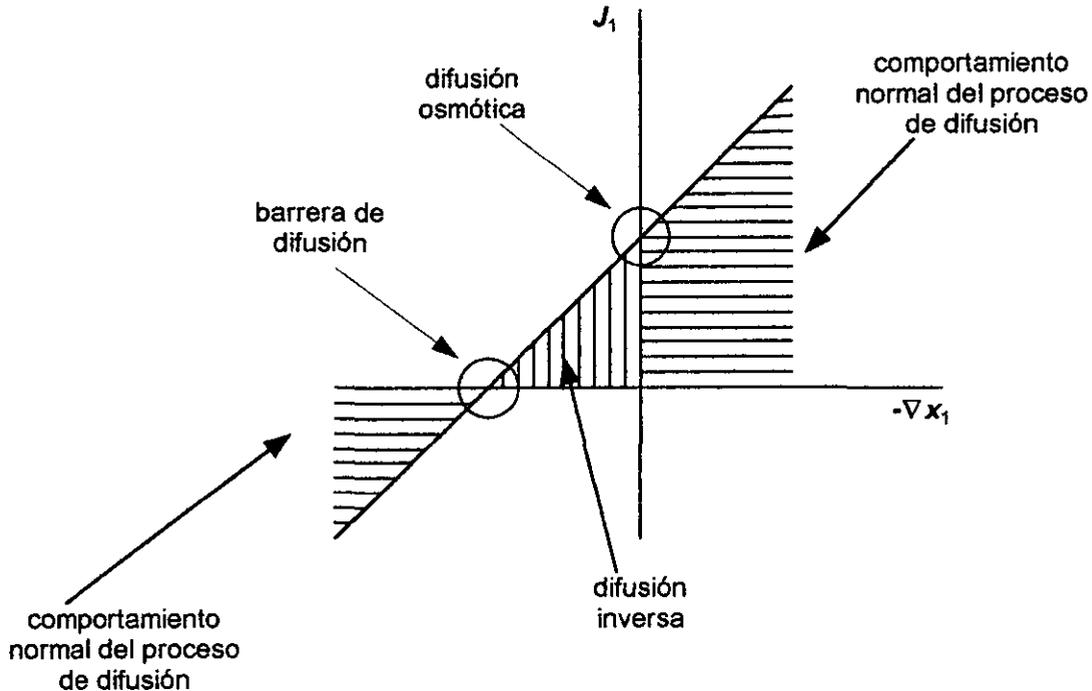


Figura 3.4 Fenómenos que se pueden presentar en un sistema multicomponente

La difusión inversa es causada cuando un compuesto se difunde en una dirección opuesta a la indicada por su gradiente de concentración, el compuesto se difunde de un área de menor concentración a un área de mayor concentración.

La difusión osmótica es causada cuando un compuesto se difunde $J_i \neq 0$, pero su gradiente de concentración es igual a cero $\nabla x_i = 0$.

Por último la barrera de difusión es causada cuando el compuesto no se difunde $J_i = 0$, pero su gradiente de concentración es diferente de cero $\nabla x_i \neq 0$.

3.2.3 Cálculo de los Coeficientes de Difusividad

Para poder calcular el flux difusional es necesario contar con los coeficientes de difusividad, hay dos tipos de coeficientes: los de Maxwell-Stefan y los de Fick.

Los coeficientes de difusión de Maxwell-Stefan:

- son más fáciles de interpretar físicamente, son producto de la fuerza de fricción intermolecular
- la interpretación es la misma aun cuando existan otro tipo de gradientes distintos al gradiente de concentración
- describen el fenómeno desde el punto de vista microscópico.

Los coeficientes de difusión de Fick

- son más prácticos porque se introducen más fácilmente en las ecuaciones de continuidad
- describen el fenómeno desde el punto de vista macroscópico.

Los coeficientes de Maxwell-Stefan y los de Fick se relacionan por medio de la ecuación

$$[D_F] = [B]^{-1} [\Gamma] \quad (3-68)$$

Si el fluido se comporta de manera ideal, entonces la matriz $[\Gamma]$ es la matriz identidad y los coeficientes de Fick y los de Maxwell-Stefan son iguales.

La manera de calcular los coeficientes de difusividad es a partir de correlaciones, hay correlaciones para gases, para líquidos, algunas son mejores que otras y sirven para compuestos con propiedades específicas.

3.2.4 Coeficientes de Transferencia de Masa

Una manera alternativa para calcular el flux difusivo sin emplear la ley de Fick o las ecuaciones de Maxwell-Stefan es usando los coeficientes de transferencia de masa [16, 17, 19, 27, 29, 31]

Por lo general los problemas de transferencia de masa que involucran fluidos se resuelven usando coeficientes de transferencia de masa.

Para desarrollar el concepto de los coeficientes de transferencia de masa primero se considera un sistema constituido por dos fases como en la figura 3.5, que contiene una fase "x" y una fase "y", las composiciones en el seno del fluido se denotan como x_{ib} e y_{ib} , y las composiciones en la interfase se denotan como x_{ii} e y_{ii} . La interfase se considera como una superficie que no ofrece resistencia a la

transferencia de masa y en donde se establece un equilibrio entre la fase "x" y la fase "y".

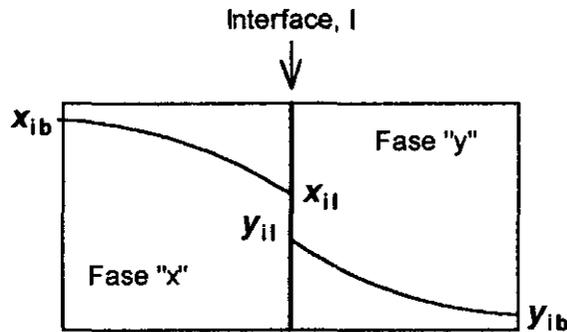


Figura 3.5 Perfiles de las fracciones mol en un proceso de transferencia de masa

- Coeficientes de Transferencia de Masa Binarios

El coeficiente de transferencia de masa k para la fase "x" de un sistema binario se define como

$$k_b = \lim_{N_i \rightarrow 0} \frac{N_{ib} - x_{ib}N_t}{c_t(x_{ib} - x_{il})} = \frac{J_{ib}}{c_t \Delta x_i} \quad (3-69)$$

Δx_i es la diferencia entre la fracción mol en el seno del fluido y la fracción mol en la interfase. El término k_b es el coeficiente de transferencia de masa para la fase "x" en el seno del fluido. De la ecuación (3-1) se tiene que $J_i = c_t x_i (u_i - u)$ y la ecuación (3-69) queda como

$$k_b = \frac{c_t x_i (u_i - u)}{c_t \Delta x_i} = \frac{(u_i - u)}{\Delta x_i / x_i} \quad (3-70)$$

que le da un significado físico al término k_b como la velocidad máxima (relativa a la velocidad de la mezcla) a la que un componente puede ser transferido de una fase a la otra.

En un proceso de transferencia de masa los perfiles de composición y de velocidad son alterados por la difusión de los componentes de la mezcla a través de la interfase. Si el flux es muy pequeño como en la ecuación (3-69), los perfiles no son alterados. En condiciones reales el coeficiente de transferencia de masa es

$$k_b^* = \frac{N_{ib} - x_{ib}N_t}{c_t(x_{ib} - x_{il})} = \frac{J_{ib}}{c_t \Delta x_i} \quad (3-71)$$

en donde el término k_b^* toma en consideración que el flux no es pequeño, y que los perfiles de composición y velocidad son alterados.

Hay muchas correlaciones para encontrar los coeficientes de transferencia de masa, las correlaciones proporcionan el valor de k_b , es decir el coeficiente de transferencia de masa cuando el flux es muy pequeño, dicho de otra manera cuando la velocidad del proceso de transferencia de masa es muy pequeña. Si se quiere obtener el coeficiente de transferencia de masa en condiciones reales, se usa un factor de corrección Ξ_b

$$k_b^* = k_b \Xi_b \quad (3-72)$$

en donde Ξ_b depende del perfil de composición y del modelo hidrodinámico escogido para describir el proceso de transferencia de masa.

- Coeficientes de Transferencia de Masa Multicomponentes

Para un sistema multicomponente el coeficiente de transferencia de masa en condiciones reales es

$$(J_b) = (N) - (x_b)N_i = c_i [k_b^*] (x_b - x_i) = c_i [k_b^*] (\Delta x) \quad (3-73)$$

Los coeficientes de flux finito, los $k_{b,ij}^*$ están relacionados con los coeficientes cuando el flux es pequeño $[k_b]$ por una ecuación de la forma

$$[k_b^*] = [k_b] [\Xi_b] \quad (3-74)$$

en donde $[\Xi_b]$ es la matriz de factores de corrección, que depende del modelo de transferencia de masa.

En la ecuación (3-73) se definió una matriz $[k_b^*]$ de $(n-1) \times (n-1)$ elementos, pero puede haber varios grupos de coeficientes $k_{b,ij}^*$ que lleven al mismo grupo de valores de N_i , por lo que en un sistema multicomponente si se hacen mediciones para N_i y x_i para calcular los coeficientes de transferencia de masa, el grupo de coeficientes que se obtiene es uno de varios que pueden existir. Lo anterior sucede porque cuando se multiplican matrices si $[A] \times [B] = [C]$ y si $[A] \times [D] = [C]$ no se cumple que $[B] = [D]$.

– Correlaciones de Coeficientes de Transferencia de Masa

Una de las maneras para obtener los coeficientes de transferencia de masa es por medio de experimentos, pero los coeficientes que son obtenidos de esa manera solamente pueden ser usados en sistemas que sean similares al original. Otra manera para poder conocer su valor es por medio del uso de grupos adimensionales o de correlaciones.

Como ejemplo los coeficientes de transferencia de masa se correlacionan con los siguientes grupos adimensionales

- Número de Sherwood = $Sh = \frac{k d}{D_f}$
- Número de Stanton = $St = \frac{k}{\bar{u}}$
- Número de Schimdt = $Sc = \frac{\nu}{D_f}$
- Factor j de Chilton-Colburn = $j_D = St Sc^{2/3}$

en donde d es una longitud característica del equipo de transferencia de masa, \bar{u} es la velocidad media del flujo y ν es la viscosidad cinemática. Estos grupos adimensionales sólo son un grupo, hay más grupos adimensionales que se pueden usar para calcular el valor de los coeficientes.

Las correlaciones se dividen en dos grupos para interfases fluido-fluido y para interfases fluido-sólido. Las fluido-fluido son las más importantes porque se usan en absorción, extracción líquido-líquido, destilación entre otras. Las correlaciones tienen mayor uso para calcular los coeficientes de transferencia de masa de una columna, los cuales dependen del tipo de columna, de si la columna está empacada o no y de las características del empaque entre otros factores.

3.3 El Problema Bootstrap

El problema de determinar el valor de los N_i a partir de los J_i se llama bootstrap [29, 31], el problema radica en que si se conocen los fluxes difusionales, los J_i , no se puede determinar el valor de los fluxes molares, los N_i , porque los "n" N_i son independientes, mientras que solo "n-1" J_i son independientes, por lo que se necesita una relación adicional que está determinada por el proceso de transferencia de masa que se lleva a cabo.

La importancia de conocer el valor de los N_i es porque son usados en el modelo de no equilibrio.

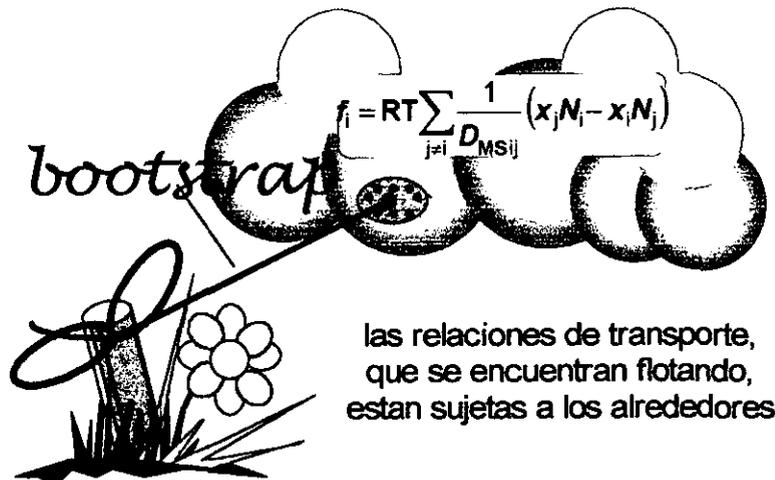


Figura 3.6 Representación del problema Bootstrap

Para resolver el problema, primero se escribe la condición general de determinación

$$\sum_{i=1}^n v_i N_i = 0 \quad (3-75)$$

en donde los v_i son los coeficientes de determinación, esos coeficientes son los que van a contener la información que indica cómo se lleva a cabo el proceso de transferencia de masa, que es la información extra que se necesita para resolver el problema bootstrap.

Ahora se necesita tener una expresión más sencilla que (3-75) que contenga a los v_i , la expresión parte de relacionar los N_i , los J_i y los v_i mediante la ecuación

$$v_i N_i = v_i J_i + v_i x_i N_t \quad (3-76)$$

si la ecuación (3-76) se suma para todos los componentes se tiene

$$\sum_{i=1}^n v_i J_i + N_t \sum_{i=1}^n v_i x_i = 0 \quad (3-77)$$

y el flux total N_t puede ser expresado en términos del flux difusional como

$$N_t = -\left(\frac{\sum_{i=1}^n v_i J_i}{\sum_{i=1}^n v_i x_i} \right) = -\sum_{k=1}^{n-1} \Lambda_k J_k \quad (3-78)$$

y en donde los coeficientes Λ_k son

$$\Lambda_k = (v_k - v_n) / \sum_{j=1}^n v_j x_j \quad (3-79)$$

La ecuación (3-78) proporciona el valor del flux total a partir de los J_i y los v_i , pero también es necesario conocer el valor de los N_i que se obtienen al sustituir (3-78) en (3-16)

$$N_i = \sum_{k=1}^{n-1} \beta_{ik} J_k \quad (3-80)$$

en donde el valor de los β_{ik} es

$$\beta_{ik} \equiv \delta_{ik} - x_i \Lambda_k \quad (3-81)$$

y δ_{ik} es la delta de Kronecker. La ecuación (3-80) proporciona el valor de los N_i a partir de los J_i y los v_i .

El problema ahora se transforma en conocer el valor de v_i , una de las maneras es analizando el proceso ya que hay varios casos especiales que simplifican las ecuaciones.

– Casos Especiales

- Contradifusión Equimolar

Cuando el flux molar total es cero $N_t = 0$, entonces los fluxes molares son iguales a los fluxes difusionales para todos los componentes presentes en la mezcla

$$N_i = J_i \quad (N_t = 0) \quad (3-82)$$

y además todas las v_i tienen el mismo valor

$$v_i = v_n \quad (N_t = 0) \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \quad (3-83)$$

y β_{ik} se reduce a δ_{ik} .

- Destilación Multicomponente

En este caso se tiene que

$$\sum_{i=1}^n N_i \Delta H_{vap,i} = 0 \quad (3-84)$$

en donde ΔH_{vap} son los calores latentes molares de vaporización, y el valor de los v_i es igual a

$$v_i = \Delta H_{vap,i} \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3-85)$$

- Difusión de Stefan

En este caso el valor del flux de uno de los componentes de la mezcla es cero. Si el valor del flux de la especie "n" es cero entonces

$$N_n = J_n + x_n N_t = 0 \quad (3-86)$$

y despejando el flux total se tiene que

$$N_t = \frac{-J_n}{x_n} \quad (3-87)$$

y se puede calcular el valor de los $N_i \neq 0$ a partir de los J_i con

$$N_i = J_i + x_i N_t = J_i - \frac{x_i J_n}{x_n} \quad (3-88)$$

$$N_i = \left(1 + \frac{x_i}{x_n}\right) J_i + \frac{x_i}{x_n} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{n-1} J_k$$

En este caso todos los v_i valen cero excepto el v_n

$$v_i = 0 \quad v_n \neq 0 \quad (N_n = 0) \quad (3-89)$$

y la ecuación (3-81) puede ser simplificada y queda como

$$\beta_{ik} = \delta_{ik} + x_i/x_n \quad (N_n = 0) \quad (3-90)$$

- Relación entre los fluxes

A veces es posible especificar la relación del flux de un componente con respecto al flux total

$$N_i = z_i N_t \quad (3-91)$$

y la relación entre el N_i y el J_i es

$$N_i = \frac{J_i}{(1 - x_i/z_i)} \quad (3-92)$$

y β_{ik} es

$$\beta_{ik} = \delta_{ik} / (1 - x_i/z_i) \quad (3-93)$$

3.3.1 La Matriz Bootstrap

Cuando se trabaja con sistemas multicomponentes es más fácil y útil escribir las ecuaciones (3-78) y (3-80) en forma matricial

$$N_t = -(\Lambda)^T (J) \quad (3-94)$$

$$(N) = [\beta](J) \quad (3-95)$$

en donde $[\beta]$ se conoce como la matriz bootstrap.

Las ecuaciones anteriores se pueden aplicar en el seno del fluido o en la interfase para calcular los N_i , si la ecuación se aplica en el seno del fluido queda como

$$(N) = [\beta_b](J_b) = c_t [\beta_b] [k_b^*] (\Delta x) \quad (3-96)$$

y si se aplica en la interfase queda como

$$(N) = [\beta_i](J_i) = c_t [\beta_i] [k_i^*] (\Delta x) \quad (3-97)$$

En la interfase debe de existir la continuidad de los fluxes que se establece por medio de las siguientes ecuaciones

$$(N) = c_t^L [k_L^*] (x^L - x^I) + N_t (x^L) = c_t^L [\beta^L] [k_L^*] (x^L - x^I) \quad (3-98)$$

$$(N) = c_t^V [k_V^*] (y^I - y^V) + N_t (y^V) = c_t^V [\beta^V] [k_V^*] (y^I - y^V) \quad (3-99)$$

Las ecuaciones (3-98) y (3-99) son las ecuaciones que se utilizan cuando se calcula el valor de los N_i a partir de los coeficientes de transferencia de masa.

3.4 Modelos de Transferencia de Masa

Un modelo de transferencia de masa es una serie de suposiciones que proporcionan una visión microscópica de como se lleva a cabo el proceso de transferencia de masa. Las suposiciones establecen las ecuaciones y los términos que deben ser usados para resolver el modelo y ayudan a establecer las condiciones a la frontera.

Además son importantes porque cuando se trabaja con coeficientes de transferencia de masa, la matriz de factores de corrección depende del modelo seleccionado.

- Modelo de Película [29]

En este modelo se considera un sistema de dos fases en el cual toda la resistencia a la transferencia de masa está concentrada en una película que está adyacente a la fase en consideración.

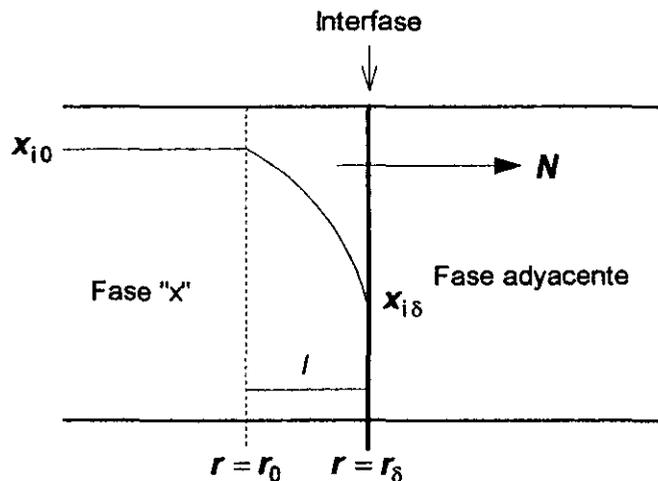


Figura 3.7 Modelo de película

En la película la masa es transferida por difusión molecular, fuera de la película la turbulencia del fluido aumenta y provoca que la composición del fluido sea la misma en cualquier punto. El proceso de transferencia se lleva a cabo en una dirección normal a la interfase, si hay transferencia en cualquier otra dirección esta se considera nula en comparación con la que se lleva a cabo en la dirección normal.

El espesor de la película varía de 0.01 a 0.1 mm cuando la fase en consideración es la fase líquida y de 0.1 a 1 mm cuando la fase en consideración es la fase vapor.

Las ecuaciones que describen el proceso de transferencia de masa en la zona de la película son:

→ Las ecuaciones (3-29) $\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_i = 0$ y (3-30) $\frac{\partial c_t}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_t = 0$, pero como se considera que el proceso llega al estado estacionario y que la transferencia es unidimensional las ecuaciones se simplifican en

$$\frac{dN_i}{dr} = 0 \quad (3-100)$$

y

$$\frac{dN_t}{dr} = 0 \quad (3-101)$$

en donde r es la dirección en la que se lleva a cabo el proceso de transferencia.

→ Las ecuaciones que describen el proceso de difusión, pueden ser la Ley de Fick ecuación (3-43) $(\mathbf{J}) = -c_t [D_f](\nabla \mathbf{x})$ o las ecuaciones de Maxwell-Stefan ecuación (3-67) $(\mathbf{J}) = -c_t [B]^{-1} [\Gamma](\nabla \mathbf{x})$.

→ La condición de determinación ecuación (3-75) $\sum_{i=1}^n v_i \mathbf{N}_i = 0$.

→ Las condiciones a la frontera que se usan para resolver el modelo son

$$\begin{aligned} r = r_0 \quad x_i = x_{i0} \\ r = r_b \quad x_i = x_{ib} \end{aligned} \quad (3-102)$$

Ahora se tiene que resolver el modelo para obtener de manera explícita el valor de N_i

– Modelo de Película para Sistemas Multicomponentes No Ideales

Partiendo de las ecuaciones de Maxwell-Stefan se tiene que

$$d_i = -\sum_{j=1}^n \frac{x_i x_j (u_i - u_j)}{D_{MSij}} \quad (3-103)$$

$$d_i = -\sum_{j=1}^n \frac{(x_i N_j - x_j N_i)}{c_t D_{MSij}}$$

en donde

$$d_i = \frac{x_i}{RT} \frac{d\mu_i}{dr} \quad (3-104)$$

Para resolver el modelo la ecuación (3-103) se escribe en forma matricial en (n-1) dimensiones como

$$[\Gamma] \frac{d(\mathbf{x})}{d\eta} = [\Phi](\mathbf{x}) + (\phi) \quad (3-105)$$

en donde

$$\eta = \frac{(r - r_0)}{l} \quad (3-106)$$

$$\Phi_{ii} = \frac{N_i}{c_t D_{MSin}/l} + \sum_{\substack{k=1 \\ i \neq k}}^n \frac{N_k}{c_t D_{MSik}/l} \quad (3-107)$$

$$\Phi_{ij} = -N_i \left(\frac{1}{c_t D_{MSij}/l} - \frac{1}{c_t D_{MSin}/l} \right) \quad (3-108)$$

$$\phi_i = -\frac{N_i}{c_t D_{MSin}/l} \quad (3-109)$$

Ahora se hace una simplificación para que sea más sencillo resolver la ecuación, se considera que Γ_{ik} y que D_{MSik} son constantes a lo largo de la película, aunque en la realidad los dos valores dependen de la composición. Resolviendo la ecuación se obtienen los perfiles de composición

$$(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = [\exp[\Theta]\eta - [I]] [\exp[\Theta] - [I]]^{-1} (\mathbf{x}_\delta - \mathbf{x}_0) \quad (3-110)$$

en donde

$$[\Theta] = [\Gamma_{av}]^{-1} [\Phi] \quad (3-111)$$

Y ya se pueden calcular los fluxes molares que son los valores que se están evaluando

$$\begin{aligned} (N) &= c_t [\beta_o] [k_o] [\Xi_o] (x_o - x_s) \\ (N) &= c_t [\beta_s] [k_s] [\Xi_s] (x_o - x_s) \end{aligned} \quad (3-112)$$

El valor de los coeficientes de transferencia de baja a flux finito está dado por

$$\begin{aligned} [k_o] &= [D_f] / l = [B_o]^{-1} [\Gamma_{av}] / l \\ [k_s] &= [D_f] / l = [B_s]^{-1} [\Gamma_{av}] / l \end{aligned} \quad (3-113)$$

Y el valor de los factores de corrección está dado por

$$\begin{aligned} [\Xi_o] &= [\Theta] [\exp[\Theta] - [I]]^{-1} \\ [\Xi_s] &= [\Theta] \exp[\Theta] [\exp[\Theta] - [I]]^{-1} \end{aligned} \quad (3-114)$$

el valor de $[\Gamma_{av}]$ se evalúa con la concentración promedio, la cual se considera constante a lo largo de la película.

– Modelos de Penetración [29]

En estos modelos se considera que debido a la turbulencia en el seno del fluido hay un grupo de elementos del fluido o eddies que se acercan a la interfase y permanecen en ella por un tiempo t_e . El tiempo que permanecen los eddies en la interfase es muy pequeño lo que provoca que el proceso de transferencia de masa que se lleva a cabo con la fase adyacente sea a estado no estacionario, el proceso de transferencia de masa de los eddies es el de difusión molecular. Después de la transferencia de masa los eddies regresan al seno del fluido y su lugar es tomado por eddies nuevos o frescos.

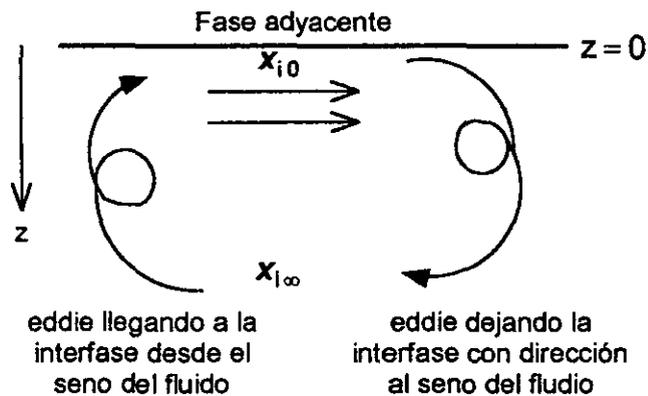


Figura 3.8 Modelo de penetración

Las ecuaciones que describen el proceso son:

→ La ecuación (3-29) $\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot N_i = 0$, y considerando que el proceso es unidimensional la ecuación se puede simplificar y queda como

$$c_t \frac{\partial x_i}{\partial t} + \frac{\partial N_i}{\partial z} = 0 \quad (3-115)$$

en donde "z" representa la dirección del proceso de difusión.

Si se suma la ecuación (3-115) para todas las especies presentes se obtiene

$$\frac{\partial N_t}{\partial z} = 0 \quad (3-116)$$

por lo que N_t sólo es función del tiempo.

Como $N_i = J_i + x_i N_t$ la ecuación (3-115) se puede escribir como

$$c_t \frac{\partial x_i}{\partial t} + N_t \frac{\partial x_i}{\partial z} = \frac{\partial J_{iz}}{\partial z} \quad (3-117)$$

y J_{iz} puede ser calculado a partir de la ley de Fick, las ecuaciones de Maxwell-Stefan o por medio de los coeficientes de transferencia de masa.

→ Como condiciones a la frontera se tienen

1. durante el proceso de difusión la composición de la interfase es constante y es igual a x_{i0}

$$z = 0 \quad t > 0 \quad x_i = x_{i0} \quad (3-118)$$

2. antes de que empiece el proceso de difusión, la composición es uniforme en cualquier lugar y es igual a la composición del seno del fluido $x_{i\infty}$

$$z \geq 0 \quad t = 0 \quad x_i = x_{i\infty} \quad (3-119)$$

3. si el tiempo de residencia es muy corto, entonces se puede considerar que el componente que se está difundiendo no ha llegado al seno del fluido y por lo tanto no ha cambiado su concentración, lo que se puede expresar como

$$z \rightarrow \infty \quad t > 0 \quad x_i = x_{i\infty} \quad (3-120)$$

Hay dos modelos de penetración el de Higbie (1935) y el de Danckwerts (1941), la diferencia entre los dos radica en el tiempo que los eddies permanecen en la interfase.

El modelo de Higbie considera que todos los eddies permanecen en la interfase la misma cantidad de tiempo. La distribución de edades para este modelo es

$$\psi(t) = 1/t_e \text{ si } t \leq t_e \quad (3-121)$$

$$\psi(t) = 0 \text{ si } t > t_e \quad (3-122)$$

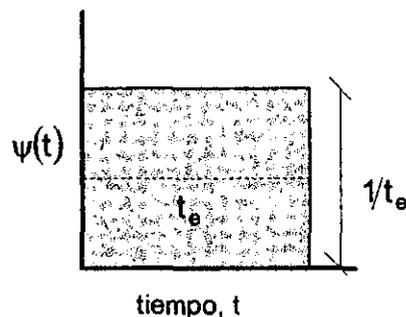


Figura 3.9 Distribución de edades $\psi(t)$ para el modelo de Higbie

El modelo de Danckwerts supone que hay un espectro de tiempos de contacto, en el cual algunos elementos permanecen en la interfase por un tiempo muy corto mientras que otros permanecen por un tiempo muy largo. Además la posibilidad de que un eddie que está en la interfase, eddie 1, sea reemplazado por un eddie fresco, eddie 2, es independiente del tiempo de exposición del eddie 1.

La distribución de edades para el modelo de Danckwerts es

$$\psi(t) = s \exp(-s t) \quad (3-123)$$

en donde s es la fracción del área de la superficie que es reemplazada por líquido fresco por unidad de tiempo.

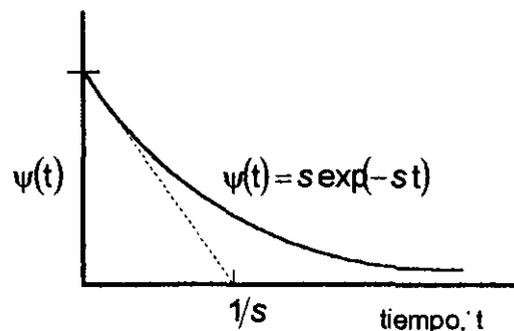


Figura 3.10 Distribución de edades $\psi(t)$ para el modelo de Danckwerts

– Modelo de Penetración para Sistemas Multicomponentes

Para resolver el modelo se usa la aproximación de Toor-Stewart-Prober (1964) en la cual se considera que $[D_F]$ es constante, de manera que la ecuación (3-115) queda como

$$c_t \frac{\partial(x)}{\partial t} + N_t \frac{\partial(x)}{\partial z} = c_t [D_{Fav}] \frac{\partial^2(x)}{\partial z^2} \quad (3-124)$$

resolviendo (3-124) se obtiene la siguiente ecuación para calcular el perfil de composiciones

$$(x - x_\infty) = \left[[I] - \operatorname{erf}\left[\frac{z - \phi}{\sqrt{D_{Fav} t}}\right] \right] \times \left[[I] + \operatorname{erf}\left[\frac{\phi}{\sqrt{D_{Fav} t}}\right] \right]^{-1} (x_0 - x_\infty) \quad (3-125)$$

y el valor del flux difusional se calcula con

$$(J_0) = \frac{c_t}{\sqrt{\pi t}} [D_{Fav}]^{1/2} \exp\left[-\frac{\phi^2}{D_{Fav} t}\right] \left[[I] + \operatorname{erf}\left[\frac{\phi}{\sqrt{D_{Fav} t}}\right] \right]^{-1} (x_0 - x_\infty) \quad (3-126)$$

y la matriz de función error $\operatorname{erf}[\zeta [M]]$ se define como

$$\operatorname{erf}[\zeta [M]] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\zeta [M] - \frac{\zeta^3}{3 \times 1!} [M]^3 + \frac{\zeta^5}{5 \times 2!} [M]^5 - \frac{\zeta^7}{7 \times 3!} [M]^7 + \dots \right] \quad (3-127)$$

si $N_t = 0$, lo que se traduce en que $\phi = 0$, el perfil de composiciones que se obtiene es

$$(x - x_\infty) = \left[[I] - \operatorname{erf}\left[\frac{z}{\sqrt{D_{Fav} t}}\right] \right] (x_0 - x_\infty) \quad N_t = 0 \quad (3-128)$$

y el flux difusional es

$$(J_0) = \frac{c_t}{\sqrt{\pi t}} [D_{Fav}]^{1/2} (x_0 - x_\infty) \quad N_t = 0 \quad (3-129)$$

de donde se puede ver que la matriz de coeficientes de transferencia de masa cuando el flux es pequeño es

$$[k] = \frac{[D_{Fav}]^{1/2}}{\sqrt{\pi t}} \quad (3-130)$$

y la matriz de factores de corrección es

$$[\Xi] = \exp\left[-\frac{[\Phi]^2}{\sqrt{\pi}}\right] \left[[I] + \operatorname{erf}[\Phi/\pi] \right]^{-1} \quad (3-131)$$

en donde Φ es igual a

$$[\Phi] = u [D_{F,av}]^{1/2} \sqrt{\pi t} = N_t [k]^{-1} / c_t \quad (3-132)$$

La matriz $[k]$ de la ecuación (3-130) proporciona el valor del coeficiente de transferencia de masa en cualquier tiempo t . Si a esa matriz se le saca un promedio con respecto al tiempo, se obtiene la siguiente expresión que es el coeficiente de transferencia de masa cuando el flux es pequeño para el modelo de Higbie

$$[k] = 2 \frac{[D_{F,av}]^{1/2}}{\sqrt{\pi t}} \quad (3-133)$$

y para el modelo de Dankwerts se tiene

$$[k] = \sqrt{s} [D_{F,av}]^{1/2} \quad (3-134)$$

Con las ecuaciones anteriores los fluxes en la interfase están dados por

$$(J_o) = c_t [k] [\Xi] (x_o - x_\infty) \quad (3-135)$$

$$(N_o) = c_t [\beta_o] [k] [\Xi] (x_o - x_\infty) \quad (3-136)$$

La ecuación (3-136) es la expresión que se usa para conocer el valor de los N_i usando el modelo de penetración. La diferencia entre usar el modelo de Higbie o el de Danckwerts esta determinada por la forma de la matriz k .

La diferencia esencial entre el modelo de película y el de penetración es que en el primero la operación es en estado estacionario, y en el segundo la operación es en estado no estacionario, por lo que es necesario promediar las propiedades con respecto al tiempo.

3.5 Transferencia de Materia y de Energía

En algunas operaciones de separación además del proceso de transferencia de masa se presenta el fenómeno de la transferencia de energía, en esos casos es necesario resolver las ecuaciones que describen el proceso de transferencia de energía además de las ecuaciones que describen la transferencia de masa.

– Transferencia de Energía

Primero hay que encontrar las ecuaciones que, al igual que las ecuaciones que describen la transferencia de masa, describen cómo es el proceso de la transferencia de energía [17, 29, 31], la energía puede ser transferida por convección y por conducción, si se considera que existe equilibrio mecánico el balance de energía se puede escribir de las siguientes dos maneras

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^n c_i H_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \left\{ \mathbf{q} + \sum_{i=1}^n H_i \mathbf{N}_i \right\} \quad (3-137)$$

$$\frac{\partial \{c_t C_p T\}}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot \{c_t C_p T \mathbf{u}\} - \sum_{i=1}^n J_i \cdot \nabla H_i \quad (3-138)$$

en donde \mathbf{q} es el flux de calor conductivo, la ecuación (3-138) es muy parecida a la ecuación (3-24) las cuales se obtuvieron a partir de la ecuación general (3-21).

Nuevamente en la interfase tiene que haber continuidad lo que se representa por medio de la ecuación

$$\xi \cdot \mathbf{e}^x = \xi \cdot \mathbf{e}^y \quad (3-139)$$

en donde \mathbf{e}^x y \mathbf{e}^y son los fluxes de energía de las fases adyacentes a la interfase, la ecuación (3-139) establece que la componente normal de los fluxes de energía debe ser continua a través de la interfase.

En cualquiera de las fases el flux de energía \mathbf{e} se puede escribir como

$$\mathbf{e} = \mathbf{q} + \sum_{i=1}^n H_i \mathbf{N}_i \quad (3-140)$$

– Relaciones para el Transporte Simultaneo de Masa y Energía

Las ecuaciones anteriores consideran que únicamente hay transferencia de energía. Para poder describir el proceso adecuadamente hay que añadir a las ecuaciones de transferencia de masa, el término que contabiliza la contribución a la transferencia de masa producto de la transferencia de energía, y añadir a las ecuaciones de transferencia de energía el término que contabiliza la contribución a la transferencia de energía, producto de la transferencia de masa.

Considerando que el proceso que se lleva a cabo es termodinámicamente irreversible, la expresión que describe la producción de entropía para un proceso en donde hay transferencia simultánea de masa y de energía queda como

$$\sigma = \mathbf{q} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \frac{c_t R}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathbf{d}_i \cdot (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \quad (3-141)$$

En los procesos isotérmicos el gradiente \mathbf{d}_i es una función de las velocidades relativas $(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)$. En el caso de un proceso no isotérmico las ecuaciones de transferencia de masa y de energía se acoplan, de manera que \mathbf{d}_i debe contener un término que establezca la contribución de la transferencia de energía, y \mathbf{q}_i debe contener un término que establezca la contribución de la transferencia de masa. Por lo que \mathbf{d}_i y \mathbf{q}_i se escriben en términos de $(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)$ y de $\nabla(1/T)$. De manera que \mathbf{q} queda como

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + c_t R T \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{x_i x_j}{D_{MSij}} \left(\frac{D_i^T}{\rho_i} \right) (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \quad (3-142)$$

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \frac{1}{2} c_t R T \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{x_i x_j}{D_{MSij}} \left(\frac{D_i^T}{\rho_i} - \frac{D_j^T}{\rho_j} \right) (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \quad (3-143)$$

en donde λ es la conductividad térmica de la mezcla y D_i^T es el coeficiente de difusión térmica de la especie "i". Si se definen los factores de difusión térmica multicomponentes como

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{D_{MSij}} \left(\frac{D_i^T}{\rho_i} - \frac{D_j^T}{\rho_j} \right) \quad i \neq j = 1, 2, \dots, n \quad (3-144)$$

la ecuación (3-143) queda como

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \frac{1}{2} c_t R T \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \alpha_{ij} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \quad (3-145)$$

y además los factores de difusión térmica multicomponentes tienen la propiedad de antisimetría, por lo que

$$\alpha_{ij} = -\alpha_{ji} \quad i \neq j = 1, 2, \dots, n \quad (3-146)$$

El término $\frac{1}{2} c_t RT \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \alpha_{ij} (u_i - u_j)$ de la ecuación (3-145) proporciona la contribución de la transferencia de masa al flux de calor conductivo q y recibe el nombre de efecto Dufour.

El inverso del efecto Dufour es la producción de fluxes máxicos por causa de los gradientes de temperatura y recibe el nombre de difusión térmica o efecto Soret. Para considerar la contribución del efecto Soret, se debe de considerar el término $\nabla(1/T)$ en la ecuación de Maxwell Stefan que queda de la siguiente manera

$$d_i = - \sum_{j=1}^n \frac{x_i x_j (u_i - u_j)}{D_{MS ij}} - \sum_{j=1}^n x_i x_j \alpha_{ij} \frac{\nabla T}{T} \quad (3-147)$$

Las ecuaciones (3-145) y (3-147) son las ecuaciones que describen el transporte simultaneo de masa y de energía.

Sin embargo en las operaciones de separación los gradientes de temperatura no son tan grandes ni se mantienen mucho tiempo como para considerar la contribución de la transferencia de energía al proceso de transferencia de masa, por lo que frecuentemente se ignoran los efectos Dufour y Soret.

– Coeficientes de Transferencia de Calor

Los coeficientes de transferencia de calor se definen de manera similar a los coeficientes de transferencia de masa como

$$\dot{h} = \lim_{N_i \rightarrow 0} \left[\frac{e - \sum_{i=1}^n H_i N_i}{c_t C_p (T_b - T_i)} = \frac{q}{c_t C_p \Delta T} \right] \quad (3-148)$$

en donde \dot{h} es el coeficiente de transferencia de calor, y su significado físico es la velocidad máxima a la que el calor puede ser transferido a la fase en consideración.

La definición convencional de los coeficientes de transferencia de calor es

$$h = \lim_{N_i \rightarrow 0} \left(\frac{q}{\Delta T} \right) \quad (3-149)$$

en donde se considera que los fluxes másicos son despreciables. En condiciones reales los fluxes másicos no son despreciables y el coeficiente de transferencia de calor es

$$h^* = \frac{q}{\Delta T} \tag{3-150}$$

La ecuación que relaciona los coeficientes de transferencia de calor cuando el flux másico es despreciable, con aquellos cuando el flux másico no es despreciable es

$$h^* = h \Xi_H \tag{3-151}$$

en donde Ξ_H es un factor de corrección, h y Ξ_H dependen de la temperatura y del perfil de composiciones en la región adyacente a la interfase, al igual que los coeficientes de transferencia de masa su valor se determina usando un modelo de transferencia de energía.

– Transferencia Interfacial de Masa y de Energía

Si el proceso de transferencia se da a través de una interfase entonces hay que describir de qué manera se lleva a cabo el proceso de transferencia de masa y energía a través de la interfase. El proceso de transferencia de masa está descrito en la ecuación (3-32) y para la transferencia de energía se usa una ecuación similar

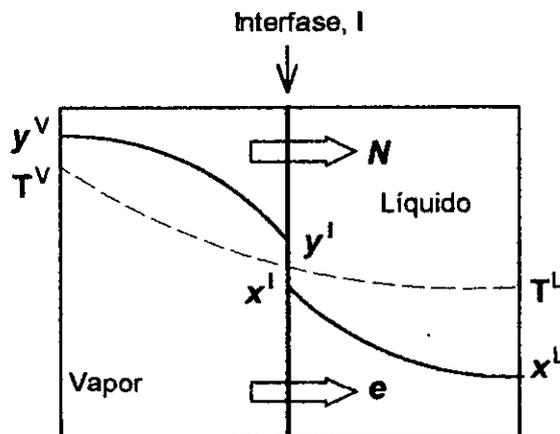


Figura 3.11 Transporte de Masa y de Energía Interfacial

En la interfase entre el líquido y el vapor se tiene que cumplir la continuidad de los fluxes molares por componente y la de los fluxes molares totales, lo que se representa por medio de las ecuaciones

$$N_i^L = N_i = N_i^V \tag{3-152}$$

$$N_i^L = J_i^L + x_i N_t^L = N_i = J_i^V + y_i N_t^V = N_i^V \quad (3-153)$$

$$N_t^L = N_t = N_t^V \quad (3-154)$$

en donde si la transferencia ocurre de la fase "V" a la fase "L" el flux que se obtiene es positivo.

En la interfase también tiene que existir la continuidad del flux de energía, lo que se representa por la ecuación

$$e^V = e = e^L \quad (3-155)$$

en donde e^V y e^L son las componentes normales del flux de energía en la interfase, usando la ecuación (3-140), la ecuación (3-155) se puede escribir como

$$q^V + \sum_{i=1}^n N_i^V H_i^V = q^L + \sum_{i=1}^n N_i^L H_i^L \quad (3-156)$$

en donde los fluxes de calor están dados por

$$q^V = h_v^*(T^V - T^I) \quad (3-157)$$

$$q^L = h_l^*(T^I - T^L) \quad (3-158)$$

- La Matriz Bootstrap para Transferencia de Masa y de Energía

La matriz bootstrap puede ser modificada para que maneje además del transporte de materia el transporte de energía, con el objeto de obtener los fluxes molares en condiciones no isotérmicas, para obtenerla primero se reescribe la ecuación (3-156)

$$q^L - q^V = \sum_{i=1}^n (H_i^V - H_i^L) N_i = \sum_{i=1}^n \lambda_i N_i \quad (3-159)$$

$$q^L - q^V = \sum_{i=1}^{n-1} (\lambda_i - \lambda_n) J_i^V + \lambda_y N_t = \sum_{i=1}^{n-1} (\lambda_i - \lambda_n) J_i^L + \lambda_x N_t \quad (3-160)$$

en donde

$$\lambda_y = \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i \quad \lambda_x = \sum_{i=1}^n \lambda_i x_i \quad \lambda_i = H_i^V - H_i^L \quad (3-161)$$

Al igual que en la transferencia de masa hay que encontrar una relación para el flux molar total N_t y a partir de esa relación desarrollar la ecuación para los fluxes molares por componente, los N_i .

Usando las ecuaciones (3-152) a (3-154) y (3-159) a (3-161) se obtiene el flux molar total N_t como

$$\frac{J_i^L - J_i^V}{x_i - y_i} = \frac{q^L - q^V}{\lambda_y} - \frac{\sum_{k=1}^n (\lambda_k - \lambda_n) J_k^V}{\lambda_y} = N_t \quad (3-162)$$

la ecuación (3-162) usa el flux difusional de la fase vapor, pero también se puede usar el flux difusional de la fase líquida quedando en ese caso la ecuación

$$\frac{J_i^L - J_i^V}{x_i - y_i} = \frac{q^L - q^V}{\lambda_x} - \frac{\sum_{k=1}^n (\lambda_k - \lambda_n) J_k^L}{\lambda_x} = N_t \quad (3-163)$$

Ahora usando la ecuación (3-162) se elimina N_t de la ecuación (3-153) para obtener una ecuación muy parecida a la ecuación (3-80) con la diferencia de que esta nueva ecuación considera el transporte de energía

$$N_i = J_i^V - y_i \sum_{k=1}^{n-1} \Lambda_k J_k^V + y_i \frac{\Delta q}{\lambda_y} \quad (3-164)$$

en donde

$$\Lambda_k = (\lambda_k - \lambda_n) / \lambda_y \quad \Delta q = q^L - q^V \quad (3-165)$$

La ecuación (3-165) se puede escribir en notación matricial en (n-1) dimensiones como

$$(N) = [\beta^V](J^V) + (y) \frac{\Delta q}{\lambda_x} \quad (3-166)$$

los elementos de la matriz β^V son

$$\beta_{ik}^V = \delta_{ik} - y_i \Lambda_k \quad i, k = 1, 2, \dots, n-1 \quad (3-167)$$

se puede obtener una expresión similar a la ecuación (3-166) para la fase líquida quedando en este caso

$$(N) = [\beta^L](J^L) + (x) \frac{\Delta q}{\lambda_x} \quad (3-168)$$

Los términos $(y) \frac{\Delta q}{\lambda_x}$ de la ecuación (3-166) y $(x) \frac{\Delta q}{\lambda_x}$ de la ecuación (3-168) toman en cuenta la contribución de la transferencia de energía a la transferencia de masa.

3.6 Modelos de Transferencia de Materia y Energía

De la misma manera que en la transferencia de materia ahora hay que usar un modelo que describa el transporte de energía para poder incorporarlo y obtener la forma de calcular los coeficientes de transferencia de calor y los factores de corrección.

- Modelo de Película para Transferencia de Materia y Energía [29]

El modelo de película puede tomar en consideración el transporte de energía, si se considera que el transporte de energía es unidimensional y es un proceso que llega al estado estacionario, si se cumplen esas condiciones el balance de energía queda como

$$\frac{de}{dr} = 0 \quad (3-169)$$

el flux de energía e es $e = q + \sum_{i=1}^n H_i N_i$, pero como $q = -\lambda \nabla T$ entonces

$$e = -\lambda \nabla T + \sum_{i=1}^n H_i N_i \quad (3-170)$$

si se considera que el C_p es independiente de la temperatura entonces

$$H_i = C_{pi}(T - T_{ref}) \quad (3-171)$$

Para resolver la ecuación se define un factor de velocidad de transferencia de energía Φ_H

$$\Phi_H = \frac{\sum_{i=1}^n N_i C_{pi}}{\lambda / \ell} \quad (3-172)$$

en donde ℓ es la longitud de la zona de difusión, si se trata de un plano entonces ℓ es igual a la longitud de la película.

Usando (3-171) y (3-172), (3-170) queda como

$$\frac{d(T - T_{ref})}{d\eta} = \Phi_H (T - T_{ref}) - \frac{e}{\lambda / \ell} \quad (3-173)$$

Si se considera que el Calor Específico y que las Conductividades Térmicas son constantes entonces se puede resolver (3-173) y se obtiene

$$\frac{(T - T_0)}{(T_s - T_0)} = \frac{\exp(\Phi_H \eta) - 1}{\exp(\Phi_H) - 1} \quad (3-174)$$

Con el flux de energía conductivo en $\eta = 0$ dado por $q_0 = -\frac{\lambda}{\ell} \frac{dT}{d\eta} \Big|_{\eta=0}$, se puede diferenciar (3-174) para obtener el gradiente de temperaturas y poder identificar el coeficiente de transferencia de energía h y el factor de corrección Ξ_H

$$q_0 = h \Xi_H (T_0 - T_s) \quad (3-175)$$

en donde el coeficiente de transferencia de calor es

$$h = \lambda / \ell \quad (3-176)$$

y el factor de corrección está dado por

$$\Xi_H = \frac{\Phi_H}{(\exp \Phi_H - 1)} \quad (3-177)$$

Ξ_H se conoce como el factor de corrección de Ackerman.

– Modelo de Penetración para Transferencia de Materia y Energía [29]

Cuando se usa el modelo de penetración y si el tiempo de contacto es pequeño $Fo = \lambda t / \rho C_p r_0^2 \rightarrow 0$, entonces el coeficiente de transferencia de energía promediado con respecto del tiempo es

$$h = 2\rho C_p \sqrt{\frac{\lambda}{\rho C_p \pi t_0}} \quad (3-178)$$

El factor de corrección que se usa generalmente es el del modelo de película, ecuación (3-177), o se puede calcular con las siguientes ecuaciones

$$\Xi_H = \frac{\exp(-\Phi_H^2/\pi)}{1 + \operatorname{erf}(\Phi_H/\sqrt{\pi})} \quad (3-179)$$

con Φ_H definido como

$$\Phi_H = \frac{\sum_{i=1}^n N_i C_{pi}}{h} \quad (3-180)$$

y

$$\operatorname{erf} x = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz \quad (3-181)$$

Una de las simplificaciones que se hicieron para poder resolver el modelo es considerar el C_p constante y no como una función de la temperatura, ya que si no se considera de esa manera las ecuaciones resultantes son muy complicadas.

Lo que se puede ver en las ecuaciones es que no se considera el transporte de materia directamente, el transporte de materia se considera una vez que se utiliza la matriz bootstrap.

Los conceptos de transporte de materia y energía son importantes en los capítulos posteriores porque a partir de ellos se desarrolla el modelo de etapa en no equilibrio.

Nomenclatura

A	área [m ²]
[B]	matriz de coeficientes de difusión binarios invertidos [s/m ²]
c	concentración [kmol/m ³]
C_p	calor específico [J/kmol]
d	gradiente de difusión [m ⁻¹]
D_{Fb}	coeficiente de difusión de Fick binario [m ² /s]
D_F	coeficiente de difusión de Fick [m ² /s]
D_{MS}	coeficiente de difusión de Maxwell-Stefan [m ² /s]
D^T	coeficiente de difusión térmica [kg/ms]
e	flux de energía [J/m ²]
h̄	coeficiente de transferencia de calor [m/s]
h	coeficiente de transferencia de calor [m/s]

H_i	entalpía molar parcial del componente i [J/kmol]
i	flux másico convectivo [kg/m ² s]
I	flux molar convectivo [kmol/m ² s]
$[I]$	matriz identidad [-]
j	flux másico difusivo [kg/m ² s]
J	flux molar difusivo [kmol/m ² s]
k	coeficiente de transferencia de masa [m/s]
$[k]$	matriz de coeficientes de transferencia de masa [m/s]
l	longitud de la película [m]
l	longitud de la película [m]
n	número de componentes
n	flux másico [kg/m ² s]
N	flux molar [kmol/m ² s]
p	presión parcial [bar]
P	presión total [bar]
q	flux de calor conductivo [J/m ²]
r	coordenada de dirección o posición [m]
r_0	lado interno de la película [m]
r_s	lado externo de la película [m]
R	constante de los gases [J/mol K]
s	frecuencia de renovación de superficie [s ⁻¹]
t	tiempo [s]
t_e	tiempo de exposición [s]
T	temperatura [K]
u	velocidad [m/s]
v	velocidad [m/s]
w	fracción peso [-]
x	fracción mol [-]
z	coordenada de dirección o posición [m]

Letras griegas

α	Factor de difusión térmica [-]
$[\beta]$	matriz bootstrap [-]
γ	coeficiente de actividad [-]
$[\Gamma]$	matriz de factores termodinámicos [-]
η	distancia adimensional
λ	conductividad térmica [J/kmolK]
μ	potencial químico molar [J/kmol]
ν	coeficiente de determinación [varia]
$[\Xi]$	matriz de factores de corrección [-]
ρ	densidad [kg/m ³]
σ	Rapidez de producción de entropía [J/m ³ sK]
ϕ	coeficiente de fugacidad [-]
$[\phi]$	matriz columna de parámetros de transferencia de masa [-]

$[\Phi]$	matriz de factores de rapidez de transferencia de masa [-]
$\psi(t)$	distribución de edades [s^{-1}]
$[\Theta]$	matriz de factores de corrección para sistemas no ideales [-]

Subíndice

av	promedio
b	seno del fluido
H	referente a la transferencia de energía
i, j, n	número de componente
l	interfase
t	total
x	referente a la fase x
y	referente a la fase y

Superíndice

l	interfase
L	líquido
V	vapor

Matrices

()	matriz columna
[]	matriz cuadrada

Símbolos Matemáticos

∇	gradiente
Δ	operador diferencia
lim	límite

4 El Modelo de Etapa en No Equilibrio

El modelo de etapa en no equilibrio se basa en los fenómenos fundamentales por lo que es más riguroso. Este modelo considera que los flujos que abandonan las etapas en una operación de separación no están en equilibrio termodinámico, el único lugar en el que prevalece el equilibrio es en la interfase.

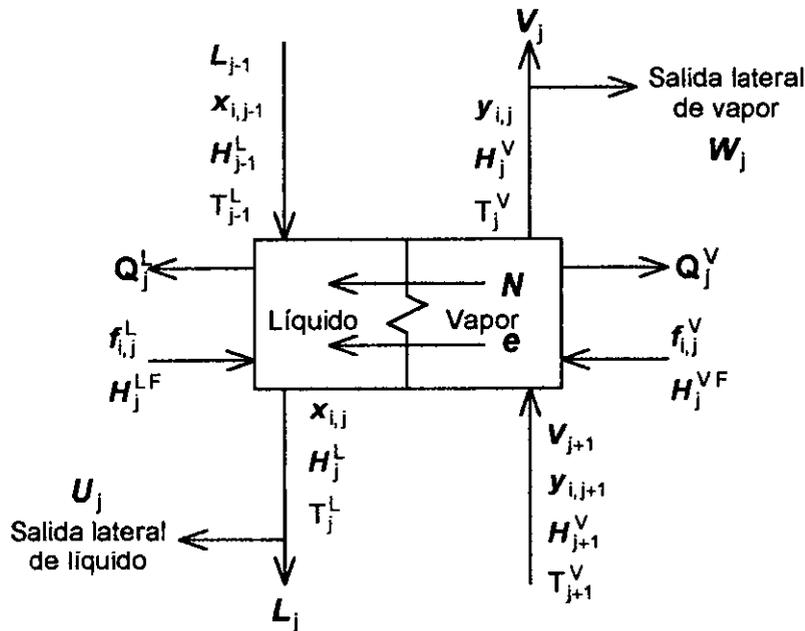


Figura 4.1 Representación de una etapa en no equilibrio

Cuando se usa el modelo de no equilibrio, la etapa de la figura 4.1 puede representar un plato o una sección de una columna empacada.

Además el modelo se basa en las ecuaciones de transporte que se vieron en el capítulo anterior, el hecho de usar esas ecuaciones hace que el modelo sea más estricto, y que considere todas las posibles interacciones que pueden existir en la operación.

Las ecuaciones en las que se basa el modelo son las ecuaciones de conservación, las ecuaciones de rapidez de transferencia de masa y las ecuaciones de la interfase.

Los modelos de no equilibrio se clasifican por generaciones que se distinguen por los aspectos que son considerados para modelar el comportamiento de las etapas.

Todos los modelos usan las mismas ecuaciones, pero los términos que son considerados dependen de las características inherentes al modelo.

4.1 Modelo de Primera Generación

El modelo de primera generación [17, 18, 19, 20, 21] es el más sencillo porque no considera la caída de presión en las etapas ni la existencia de flujos cruzados.

Las ecuaciones que describen este modelo son:

→ Las ecuaciones de conservación, que están compuestas de los balances de materia y de energía

el balance de materia para el vapor es

$$M_{ij}^V \equiv (1+r_j^V)v_{ij} - v_{i,j+1} - f_{ij}^V + N_{ij}^V = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (4-1)$$

el balance de materia para el líquido es

$$M_{ij}^L \equiv (1+r_j^L)l_{ij} - l_{i,j+1} - f_{ij}^L - N_{ij}^L = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (4-2)$$

en donde $r_j^V = \frac{W_j}{V_j}$, $r_j^L = \frac{U_j}{L_j}$, "C" es el número de componentes y $N_{i,j}$ representa la pérdida o la ganancia neta del componente "i" en la etapa "j" debido al transporte interfacial. $N_{i,j}^V$ y $N_{i,j}^L$ se definen como

$$N_{i,j}^V \equiv \int N_{i,j}^V da_j \quad (4-3)$$

$$N_{i,j}^L \equiv \int N_{i,j}^L da_j \quad (4-4)$$

$N_{i,j}^V$ y $N_{i,j}^L$ son los fluxes molares del componente "i" en un punto específico entre las dos fases y da_j es el área interfacial a través de la cual pasa el flux

el balance de energía para el vapor es

$$E_j^V \equiv (1+r_j^V)V_j H_j^V - V_{j+1} H_{j+1}^V - F_j^V H_j^{VF} + Q_j^V + E_j^V = 0 \quad (4-5)$$

el balance de energía para el líquido es

$$E_j^L \equiv (1+r_j^L)L_j H_j^L - L_{j+1} H_{j+1}^L - F_j^L H_j^{LF} + Q_j^L - E_j^L = 0 \quad (4-6)$$

en donde E_j representa la pérdida o la ganancia de energía debida al transporte de energía e una fase a la otra, E_j^V y E_j^L se definen como

$$E_j^V \equiv \int e_j^V da_j \quad (4-7)$$

$$E_j^L \equiv \int e_j^L da_j \quad (4-8)$$

y e_j es el flux de energía en un punto específico entre las dos fases, en la interfase se tiene que cumplir que

$$E_j^I \equiv E_j^V - E_j^L = 0 \quad (4-9)$$

→ Las relaciones de transporte establecen que las ecuaciones (4-1) y (4-2) están acopladas por las ecuaciones de rapidez de transferencia de masa y las ecuaciones que resultan son

$$R_{ij}^V \equiv N_{ij} - N_{ij}^V = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (4-10)$$

$$R_{ij}^L \equiv N_{ij} - N_{ij}^L = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (4-11)$$

→ La interfase se considera como una superficie que no ofrece resistencia a la transferencia de masa, y en la cual existe el equilibrio, por lo que la ecuación queda como

$$Q_{ij}^I \equiv K_{ij} x_{ij}^I - y_{ij}^I = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (4-12)$$

Sumando las ecuaciones independientes se tienen

- C ecuaciones del balance de materia del vapor, ecuación (4-1)
- C ecuaciones del balance de materia del líquido, ecuación (4-2)
- 1 ecuación del balance de energía del vapor, ecuación (4-5)
- 1 ecuación del balance de energía del líquido, ecuación (4-6)
- 1 ecuación del balance de energía interfacial, ecuación (4-9)
- C-1 ecuaciones de rapidez de transferencia de masa para el vapor, ecuación (4-10)
- C-1 ecuaciones de rapidez de transferencia de masa para el líquido, ecuación (4-11)
- C ecuaciones de equilibrio en la interfase, ecuación (4-14)

Lo que da un total de $5C+1$ ecuaciones que se conocen con el nombre de MERQ, las variables que son determinadas por el juego de ecuaciones son:

- C variables del flujo de vapor, v_{ij}
- C variables del flujo del líquido, l_{ij}

- C-1 composición del vapor de la interfase, y_{ij}^I
- C-1 composición del líquido de la interfase, x_{ij}^I
- C fluxes molares, N_{ij}
- 1 temperatura del vapor, T^V
- 1 temperatura del líquido, T^L
- 1 temperatura de la interfase, T^I

Para una columna de N etapas, el número de ecuaciones es $N(5C+1)$, con sus correspondientes $N(5C+1)$ variables.

Usando este primer modelo se puede ver que en este se calculan los fluxes molares y 3 temperaturas, en cambio en el modelo de etapa ideal en equilibrio no se calculan los fluxes molares y solo se calcula una temperatura.

El sistema de ecuaciones resultante se puede resolver simultáneamente usando el método de Newton-Raphson.

Primero las ecuaciones independientes se ordenan en un vector de funciones que queda como

$$\begin{aligned} (\mathbf{F}_j)^T \equiv & (M_{1j}^V, M_{2j}^V, \dots, M_{Cj}^V, E_j^V, E_j^L, M_{1j}^L, M_{2j}^L, \dots, M_{Cj}^L, R_{1j}^V, R_{2j}^V, \dots, R_{C-1j}^V, \\ & E_j^I, Q_{1j}^I, Q_{2j}^I, \dots, Q_{Cj}^I, R_{1j}^L, R_{2j}^L, \dots, R_{C-1j}^L) \end{aligned} \quad (4-13)$$

y un vector de incógnitas que queda como

$$\begin{aligned} (\chi_j)^T \equiv & (v_{1j}, v_{2j}, \dots, v_{Cj}, T_j^V, T_j^L, l_{1j}, l_{2j}, \dots, l_{Cj}, N_{1j}, N_{2j}, \dots, N_{Cj}, \\ & y_{1j}^I, y_{2j}^I, \dots, y_{C-1j}^I, T_j^I, x_{1j}^I, x_{2j}^I, \dots, x_{C-1j}^I) \end{aligned} \quad (4-14)$$

Las ecuaciones que corresponden a toda la columna son

$$(\mathbf{F})^T \equiv ((\mathbf{F}_1)^T, (\mathbf{F}_2)^T, \dots, (\mathbf{F}_N)^T) \quad (4-15)$$

$$(\chi)^T \equiv ((\chi_1)^T, (\chi_2)^T, \dots, (\chi_N)^T) \quad (4-16)$$

El sistema lineal que tiene que ser resuelto es

$$[\mathbf{J}^k](\chi^{k+1} - \chi^k) = -(\mathbf{F}(\chi^k)) \quad (4-17)$$

en donde k indica el número de iteración y $[\mathbf{J}^k]$ es el Jacobiano que está definido por

$$J_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \tag{4-18}$$

El siguiente modelo toma una serie de elementos que describen de una manera más adecuada el comportamiento de la etapa.

4.2 Modelo de Segunda Generación

El modelo de primera generación no considera las caídas de presión, los flujos cruzados y el arrastre, que son factores importantes que se presentan en la operación de la columna. El modelo de segunda generación [13, 27] se hizo con el propósito de tomar en cuenta estos factores para tener un modelo más exacto en comparación con el de primera generación. En este modelo las etapas se consideran en equilibrio mecánico por lo que $P_j^V = P_j^L = P$.

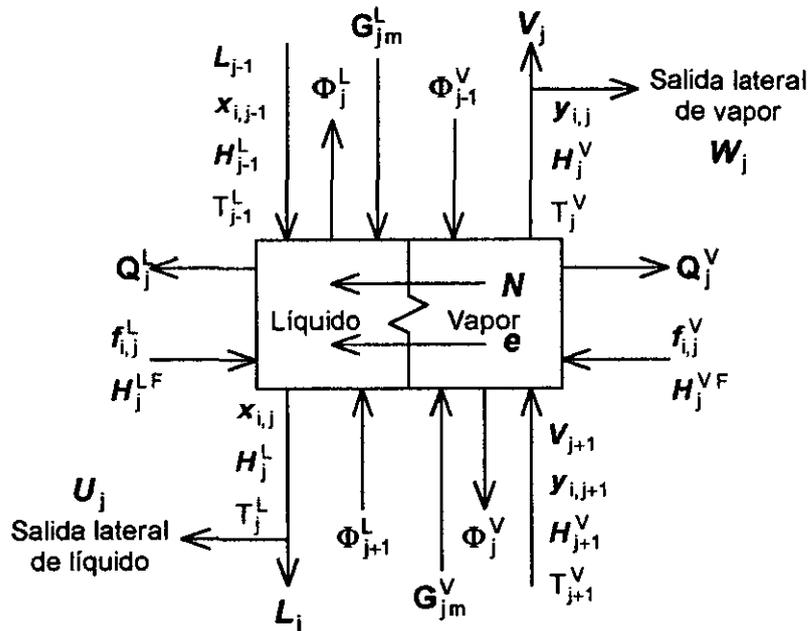


Figura 4.2 Representación de una etapa del modelo de segunda generación

Este modelo usa las ecuaciones del modelo de primera generación, pero añade los términos necesarios para considerar los factores que no considera el primero.

→ Las ecuaciones de conservación, que están compuestas de los balances de materia y de energía son:

el balance de materia por componente para la fase vapor es

$$M_{ij}^V \equiv (1 + r_j^V + \phi_j^V) V_j y_{ij} - V_{j+1} y_{i,j+1} - \phi_{j+1}^V V_{j+1} y_{i,j+1} - f_{ij}^V - \sum_{v=1}^N G_{ijv}^V + N_{ij}^V = 0 \quad (4-19)$$

$i = 1, 2, \dots, C$

el balance de materia total para la fase vapor es

$$M_{tj}^V \equiv (1 + r_j^V + \phi_j^V) V_j - V_{j+1} - \phi_{j+1}^V V_{j+1} - F_j^V - \sum_{i=1}^C \sum_{v=1}^N G_{ijv}^V + N_{tj}^V = 0 \quad (4-20)$$

el balance de materia por componente para la fase líquida es

$$M_{ij}^L \equiv (1 + r_j^L + \phi_j^L) L_j x_{ij} - L_{j+1} x_{i,j+1} - \phi_{j+1}^L L_{j+1} x_{i,j+1} - f_{ij}^L - \sum_{v=1}^N G_{ijv}^L - N_{ij}^L = 0 \quad (4-21)$$

$i = 1, 2, \dots, C$

el balance de materia total para la fase líquida es

$$M_{tj}^L \equiv (1 + r_j^L + \phi_j^L) L_j - L_{j+1} - \phi_{j+1}^L L_{j+1} - F_j^L - \sum_{i=1}^C \sum_{v=1}^N G_{ijv}^L - N_{tj}^L = 0 \quad (4-22)$$

el término ϕ_j^L es la fracción de arrastre del líquido que se define como la relación de las moles de líquido atrapadas en el vapor en la etapa "j" entre las moles de líquido que provienen de la etapa "j", y ϕ_j^V es la relación de vapor atrapado en el líquido que abandona la etapa "j", pero la mayoría de las veces los dos términos no son tomados en cuenta. El término G_{ijv} es la relación del flujo cruzado del componente "i" de la etapa "v" a la etapa "j".

el balance de energía para la fase vapor es

$$E_j^V \equiv (1 + r_j^V + \phi_j^V) V_j H_j^V - V_{j+1} H_{j+1}^V - \phi_{j+1}^V V_{j+1} H_{j+1}^V - F_j^V H_j^{VF} - \sum_{v=1}^N G_{jv}^V H_{jv}^V + Q_j^V + E_j^V = 0 \quad (4-23)$$

el balance de energía para la fase líquida es

$$E_j^L \equiv (1 + r_j^L + \phi_j^L) L_j H_j^L - L_{j+1} H_{j+1}^L - \phi_{j+1}^L L_{j+1} H_{j+1}^L - F_j^L H_j^{LF} - \sum_{v=1}^N G_{jv}^L H_{jv}^L + Q_j^L - E_j^L = 0 \quad (4-24)$$

y G_{jv} es flujo cruzado total de la etapa "v" a la etapa "j". El balance de energía en la interfase queda como

$$E_j^I \equiv E_j^V - E_j^L = 0 \quad (4-9)$$

→ Como el modelo de segunda generación considera las caídas de presión se añade una ecuación de conservación que es una ecuación hidráulica y hay dos casos posibles para hacer el juego de ecuaciones

En caso de que la etapa superior sea un condensador las ecuaciones hidráulicas quedan como

$$P_1 \equiv p_c - p_1 = 0 \quad (4-25)$$

$$P_2 \equiv p_{\text{especificada}} - p_2 = 0 \quad (4-26)$$

$$P_j \equiv p_j - p_{j-1} - (\Delta p_{j-1}) = 0, \quad j = 3, 4, \dots, N \quad (4-27)$$

en donde p_c es la presión del condensador, $p_{\text{especificada}}$ es la presión en la etapa inferior al condensador y Δp_{j-1} es la caída de presión por plato en una columna de platos o por sección en una columna empacada.

En caso de que la etapa superior no sea un condensador las ecuaciones hidráulicas quedan como

$$P_1 \equiv p_{\text{especificada}} - p_1 = 0 \quad (4-28)$$

$$P_j \equiv p_j - p_{j-1} - (\Delta p_{j-1}) = 0, \quad j = 2, 3, \dots, N \quad (4-29)$$

en este caso $p_{\text{especificada}}$ es la presión de la etapa superior.

→ Las ecuaciones de rapidez de transferencia de masa son

$$R_{ij}^V \equiv N_{ij} - N_{ij}^V = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (4-10)$$

$$R_{ij}^L \equiv N_{ij} - N_{ij}^L = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (4-11)$$

→ La ecuación de la interfase es

$$Q_{ij}^I \equiv K_{ij} x_{ij}^I - y_{ij}^I = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (4-12)$$

→ Las ecuaciones de suma de las fracciones mol sirven para asegurar que la suma sea 1, y se aplican en la interfase y en el seno del fluido

para la interfase las ecuaciones son

$$S_j^{IV} \equiv \sum_{i=1}^C y_{ij}^I - 1 = 0 \quad (4-30)$$

$$S_j^{IL} \equiv \sum_{i=1}^C x_{ij}^I - 1 = 0 \quad (4-31)$$

y en el seno del fluido las ecuaciones son

$$S_j^V \equiv \sum_{i=1}^C y_{ij} - 1 = 0 \quad (4-32)$$

$$S_j^L \equiv \sum_{i=1}^C x_{ij} - 1 = 0 \quad (4-33)$$

Para el seno del fluido hay C+1 ecuaciones de balance de materia y 1 ecuación de suma de fracciones mol, lo que da un total de C+2 ecuaciones de las cuales sólo C+1 son independientes. Las ecuaciones independientes en el modelo de segunda generación son:

- C ecuaciones del balance de materia por componente para la fase vapor, ecuación (4-19)
- 1 ecuación del balance de materia total para la fase vapor, ecuación (4-20)
- C ecuaciones del balance de materia por componente para la fase líquida, ecuación (4-21)
- 1 ecuación del balance de materia total para la fase líquida, ecuación (4-22)
- 1 ecuación del balance de energía para la fase vapor, ecuación (4-23)
- 1 ecuación del balance de energía para la fase líquida, ecuación (4-24)
- 1 ecuación del balance de energía interfacial, ecuación (4-9)
- C-1 ecuaciones de rapidez de transferencia de masa para la fase vapor, ecuación (4-10)
- C-1 ecuaciones de rapidez de transferencia de masa para la fase líquida, ecuación (4-11)
- 1 ecuación de suma de fracciones mol en la interfase del vapor, ecuación (4-30)
- 1 ecuación de suma de fracciones mol en la interfase del líquido, ecuación (4-31)
- 1 ecuación hidráulica que tiene la forma general $P_j \equiv p_j - p_{j-1} - (\Delta p_{j-1})$
- C ecuaciones que establecen el equilibrio en la interfase, ecuación (4-12)

Lo que da un total de 5C+6 ecuaciones independientes que se conocen como ecuaciones MERSHQ.

Si se conocen las condiciones de todas las corrientes de alimentación, la carga térmica de todas las etapas, los flujos laterales, y los flujos cruzados entonces queda por calcular la caída de presión, el arrastre y el entremezclado, los cuales pueden ser calculados por medio de modelos que están en función del tipo de plato, o se pueden calcular con los parámetros de diseño de la columna, o se pueden calcular por medio de modelos que son función de las propiedades físicas y de transporte de cada fase.

Las $5C+6$ variables que se determinan son:

- 1 flujo de vapor, V_j
- 1 flujo de líquido, L_j
- C composición del seno del vapor, y_{ij}
- C composición del seno del líquido, x_{ij}
- 1 temperatura del vapor, T^V
- 1 temperatura del líquido, T^L
- 1 temperatura de la interfase, T^I
- C fluxes molares, N_{ij}
- 1 presión de la etapa, p_j
- C composición de la interfase del vapor, y_{ij}^I
- C composición de la interfase del líquido, x_{ij}^I

Si se comparan las variables que se obtienen en este modelo con el de primera generación la única diferencia es que en este modelo se calcula un dato adicional que es la presión, pero como las ecuaciones que se usan consideran los términos adicionales también los resultados son distintos.

Para una columna con N etapas hay $N(5C+6)$ ecuaciones y $N(5C+6)$ variables, las cuales se pueden resolver por el método de Newton-Raphson.

Primero las ecuaciones independientes se ordenan en un vector de funciones que queda como

$$(F_j)^T \equiv (M_{tj}^V, M_{1j}^V, M_{2j}^V, \dots, M_{Cj}^V, E_j^V, R_{1j}^V, R_{2j}^V, \dots, R_{C-1j}^V, S_j^{IV}, Q_{1j}^I, Q_{2j}^I, \dots, Q_{Cj}^I, E_j^I, M_{tj}^L, M_{1j}^L, M_{2j}^L, \dots, M_{Cj}^L, E_j^L, R_{1j}^L, R_{2j}^L, \dots, R_{C-1j}^L, S_j^{IL}, P_j) \quad (4-34)$$

y vector de incógnitas queda como

$$(x_j)^T \equiv (V_j, y_{1j}, y_{2j}, \dots, y_{Cj}, T_j^V, y_{1j}^I, y_{2j}^I, \dots, y_{Cj}^I, x_{1j}^I, x_{2j}^I, \dots, x_{Cj}^I, T_j, L_j, x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{Cj}, T_j^L, N_{1j}, N_{2j}, \dots, N_{Cj}, P_j) \quad (4-35)$$

y se resuelve de la misma manera que el modelo de primera generación, pero cambiando el vector de funciones y el vector de incógnitas.

4.3 Modelo de Destilación para 3 Fases

En algunas operaciones de destilación se presenta la existencia de 3 fases, 1 fase vapor y 2 fases líquidas, para hacer un modelo de 3 fases [22] se necesita contabilizar el efecto de la fase extra.

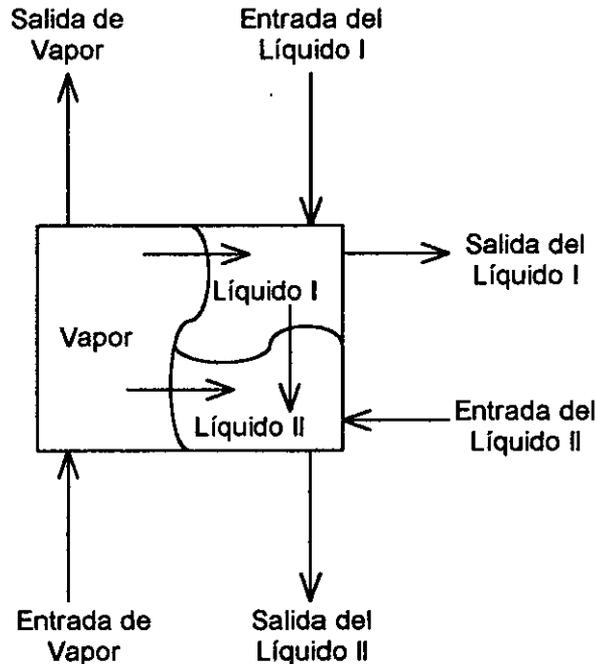


Figura 4.3 Modelo de no equilibrio para 3 fases

Las ecuaciones son las mismas que las del modelo de primera generación con la diferencia de que se tiene una fase líquida extra.

→ Las ecuaciones de conservación están compuestas por el balance de materia y el de energía para cada una de las fases

el balance de materia por componente para el vapor es

$$M_{ij}^V \equiv V_j y_{ij} - V_{j+1} y_{i,j+1} - f_{ij}^V + N_{ij}^{V'} + N_{ij}^{V''} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (4-36)$$

el balance de materia total para el vapor es

$$M_{tj}^V \equiv V_j - V_{j+1} - F_j^V + N_{tj}^{V'} + N_{tj}^{V''} = 0 \quad (4-37)$$

el balance de materia por componente para la fase líquida 1 L' es

$$M'_{ij} \equiv L'_j x'_{ij} - L'_{j-1} x'_{i,j-1} - f'_{ij} - N'_{ij}{}^V + N'_{ij}{}^{L''} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (4-38)$$

el balance de materia total para la fase líquida 1 L' es

$$M'_{tj} \equiv L'_j - L'_{j-1} - F'_j - N'_{tj}{}^V + N'_{tj}{}^{L''} = 0 \quad (4-39)$$

el balance de materia por componente para la fase líquida 2 L'' es

$$M''_{ij} \equiv L''_j x''_{ij} - L''_{j-1} x''_{i,j-1} - f''_{ij} - N''_{ij}{}^V - N''_{ij}{}^{L'} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (4-40)$$

el balance de materia total para la fase líquida 2 L'' es

$$M''_{tj} \equiv L''_j - L''_{j-1} - F''_j - N''_{tj}{}^V + N''_{tj}{}^{L'} = 0 \quad (4-41)$$

los balances de materia están acoplados por los balances de materia alrededor de cada interfase, para la interfase V-L' se tiene

$$N_i{}^V{}' - N_i{}^V = 0 \quad (4-42)$$

para la interfase V-L'' se tiene

$$N_i{}^V{}'' - N_i{}^V = 0 \quad (4-43)$$

para la interfase L'-L'' se tiene

$$N_i{}^{L''} - N_i{}^{L'} = 0 \quad (4-44)$$

el balance de energía para la fase vapor es

$$E_j{}^V \equiv V_j H_j{}^V - V_{j-1} H_{j-1}{}^V + Q_j{}^V - F_j{}^V H_j{}^{VF} + E_j{}^{V'} + E_j{}^{V''} = 0 \quad (4-45)$$

el balance de energía para la fase líquida 1 L' es

$$E_j{}^L' \equiv L'_j H'_j - L'_{j-1} H'_{j-1} - Q'_j - F'_j H'_j - E_j{}^V + E_j{}^{L''} = 0 \quad (4-46)$$

el balance de energía para la fase líquida 2 L'' es

$$E_j{}^L'' \equiv L''_j H''_j - L''_{j-1} H''_{j-1} - Q''_j - F''_j H''_j - E_j{}^V - E_j{}^{L'} = 0 \quad (4-47)$$

el balance de energía para la interfase V-L' queda como

$$E_j^{V'} - E_j^{V} = 0 \quad (4-48)$$

el balance de energía para la interfase V-L'' queda como

$$E_j^{L''} - E_j^{L'} = 0 \quad (4-49)$$

el balance de energía para la interfase L'-L'' queda como

$$E_j^{L''} - E_j^{L'} = 0 \quad (4-50)$$

→ Las ecuaciones de rapidez de transferencia de masa son

para la transferencia de masa de la fase vapor a la fase líquida 1 L' las ecuaciones son

$$R_{ij} \equiv N_{ij} - N_{ij}^{VL'} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (4-51)$$

$$R_{ij} \equiv N_{ij} - N_{ij}^{LV} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (4-52)$$

para la transferencia de masa de la fase vapor a la fase líquida 2 L'' las ecuaciones son

$$R_{ij} \equiv N_{ij} - N_{ij}^{VL''} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (4-53)$$

$$R_{ij} \equiv N_{ij} - N_{ij}^{LV} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (4-54)$$

para la transferencia de masa de la fase líquida 1 L' a la fase líquida 2 L'' las ecuaciones son

$$R_{ij} \equiv N_{ij} - N_{ij}^{L'L''} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (4-55)$$

$$R_{ij} \equiv N_{ij} - N_{ij}^{L'L'} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (4-56)$$

→ Las ecuaciones de equilibrio son

para la interfase vapor líquido 1 L'

$$Q_{ij}^{V'} \equiv K_{ij}' x_{ij}^{V'} - y_{ij}^{V'} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (4-57)$$

para la interfase vapor líquido 2 L''

$$Q_{ij}^{V''} \equiv K_{ij}'' x_{ij}^{V''} - y_{ij}^{V''} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (4-58)$$

para la interfase liquido 1 L' liquido 2 L''

$$Q_{ij}^{L''} \equiv K_{ij}^{L'} x_{ij}^{L'} - x_{ij}^{L''} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C \quad (4-59)$$

→ Las ecuaciones de la suma de las fracciones mol en el seno del fluido son

para el vapor

$$S_j^V \equiv \sum_{i=1}^C y_{ij} - 1 = 0 \quad (4-60)$$

para la fase líquida 1 L'

$$S_j^{L'} \equiv \sum_{i=1}^C x_{ij}^{L'} - 1 = 0 \quad (4-61)$$

para la fase líquida 2 L''

$$S_j^{L''} \equiv \sum_{i=1}^C x_{ij}^{L''} - 1 = 0 \quad (4-62)$$

→ Las ecuaciones de la suma de las fracciones mol para cada fase para cada interfase son

para el vapor

$$S_j^{IV'} \equiv \sum_{i=1}^C y_{ij}^{IV'} - 1 = 0 \quad (4-63)$$

$$S_j^{IV''} \equiv \sum_{i=1}^C y_{ij}^{IV''} - 1 = 0 \quad (4-64)$$

para la fase líquida 1 L'

$$S_j^{I'V} \equiv \sum_{i=1}^C x_{ij}^{I'V} - 1 = 0 \quad (4-65)$$

$$S_j^{I''V} \equiv \sum_{i=1}^C x_{ij}^{I''V} - 1 = 0 \quad (4-66)$$

para la fase líquida 2 L''

$$S_j^{''V} \equiv \sum_{i=1}^C x_{ij}^{''V} - 1 = 0 \quad (4-67)$$

$$S_j^{''L'} \equiv \sum_{i=1}^C x_{ij}^{''L'} - 1 = 0 \quad (4-68)$$

El número de ecuaciones es

- C ecuaciones del balance de materia por componente para el vapor, ecuación (4-36)
- 1 ecuación del balance de materia total para el vapor, ecuación (4-37)
- C ecuaciones del balance de materia por componente para la fase líquida 1 L', ecuación (4-38)
- 1 ecuación del balance de materia total para la fase líquida 1 L', ecuación (4-39)
- C ecuaciones del balance de materia por componente para la fase líquida 2 L'', ecuación (4-40)
- 1 ecuación de balance de materia total para la fase líquida 2 L'', ecuación (4-41)
- C ecuaciones del balance de materia en la interfase para el vapor, ecuación (4-42)
- C ecuaciones del balance de materia en la interfase para la fase líquida 1 L', ecuación (4-43)
- C ecuaciones del balance de materia en la interfase para la fase líquida 2 L'', ecuación (4-44)
- 1 ecuación del balance de energía para el vapor, ecuación (4-45)
- 1 ecuación del balance de energía para la fase líquida 1 L', ecuación (4-46)
- 1 ecuación del balance de energía para la fase líquida 2 L'', ecuación (4-47)
- 1 ecuación del balance de energía para la interfase V-L', ecuación (4-48)
- 1 ecuación del balance de energía para la interfase V-L'', ecuación (4-49)
- 1 ecuación del balance de energía para la interfase L-L'', ecuación (4-50)
- 2(C-1) ecuaciones de rapidez de transferencia de masa de la fase vapor a la fase líquida 1 L', ecuaciones (4-51) y (4-52)
- 2(C-1) ecuaciones de rapidez de transferencia de masa de la fase vapor a la fase líquida 2 L'', ecuaciones (4-53) y (4-54)
- 2(C-1) ecuaciones de rapidez de transferencia de masa de la fase líquida 1 L' a la fase líquida 2 L'', ecuaciones (4-55) y (4-56)
- C ecuaciones de equilibrio para la interfase vapor líquido 1 L', ecuación (4-57)
- C ecuaciones de equilibrio para la interfase vapor líquido 2 L'', ecuación (4-58)
- C ecuaciones de equilibrio para la interfase líquido 1 L' líquido 2 L'', ecuación (4-59)
- 1 ecuación de suma de fracciones mol del vapor, ecuación (4-60)
- 1 ecuación de suma de fracciones mol del líquido 1 L', ecuación (4-61)
- 1 ecuación de suma de fracciones mol del líquido 2 L'', ecuación (4-62)

- 2 ecuaciones de suma de fracciones mol del vapor en las interfases V-L' y V-L'', ecuaciones (4-63) y (4-64)
- 2 ecuaciones de suma de fracciones mol del líquido 1 en las interfases L'-V y L'-L'', ecuaciones (4-65) y (4-66)
- 2 ecuaciones de suma de fracciones mol del líquido 2 en las interfases L''-V y L''-L', ecuaciones (4-67) y (4-68)

Lo que da un total de $15C+12$ ecuaciones, como los balances de materia totales no son independientes y los fluxes molares en las interfases son iguales el número de ecuaciones independientes es $15C+9$. Las $15C+9$ variables que se determinan con las ecuaciones independientes son:

- 1 flujo de vapor, V_j
- 1 flujo del líquido 1, L_j'
- 1 flujo del líquido 2, L_j''
- C composición del seno del vapor, y_{ij}
- C composición del seno del líquido 1 L1, x_{ij}'
- C composición del seno del líquido 2 L2, x_{ij}''
- 1 temperatura del vapor, T^V
- 1 temperatura del líquido 1, $T^{L'}$
- 1 temperatura del líquido 2, $T^{L''}$
- 1 temperatura de la interfase V-L', $T^{IV'}$
- 1 temperatura de la interfase V-L'', $T^{IV''}$
- 1 temperatura de la interfase L'-L'', $T^{I'L''}$
- C fluxes molares V-L', $N_{ij}^{V'}$
- C fluxes molares V-L'', $N_{ij}^{V''}$
- C fluxes molares L'-V, $N_{ij}^{L'V}$
- C fluxes molares L'-L'', $N_{ij}^{L'L''}$
- C fluxes molares L''-V, $N_{ij}^{L''V}$
- C fluxes molares L''-L', $N_{ij}^{L''L'}$
- C composición del vapor en la interfase V-L', $y_{ij}^{IV'}$
- C composición del vapor en la interfase V-L'', $y_{ij}^{IV''}$
- C composición de la fase líquida 1 L' en la interfase L'-V, $x_{ij}^{I'V}$
- C composición de la fase líquida 1 L' en la interfase L'-L'', $x_{ij}^{I'L''}$
- C composición de la fase líquida 2 L'' en la interfase L''-V, $x_{ij}^{I''V}$
- C composición de la fase líquida 2 L'' en la interfase L''-L', $x_{ij}^{I''L'}$

Este modelo se puede mejorar si se consideran los términos adicionales que se toman en cuenta en el modelo de segunda generación, pero se necesitarían las relaciones para calcular esos términos en un sistema de 3 fases.

4.4 Modelo Dinámico

Un modelo dinámico [14] estudia el comportamiento con respecto del tiempo de la columna, generalmente se usa para conocer la respuesta de la columna cuando una perturbación es introducida en el sistema, o para saber el comportamiento en el arranque o en caso de que la operación sea detenida.

Si se toma una sección de una columna de platos como en la figura 4.4

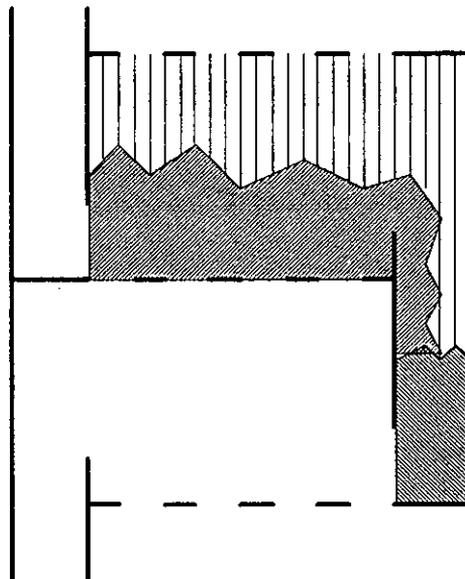


Figura 4.4 Representación gráfica de un plato típico

se puede ver que hay zonas en donde el líquido es retenido hasta que después de alcanzar un cierto nivel cae a la etapa inferior, lo que ocasiona que haya una acumulación. El término principal y que es la base del modelo dinámico es el término de la acumulación, que es la derivada de una propiedad con respecto del tiempo.

En un plato puede haber distintos regímenes de flujo entre los cuales están: rocío, espuma, emulsión, líquido burbujeante o niebla. Para hacer el estudio dinámico se va a considerar que el régimen de flujo es el de espuma. Arriba de la espuma hay un área para la salida del vapor y debajo de la espuma hay un área para la salida del líquido. Estas zonas contribuyen a la acumulación, de manera que hay 4 zonas de acumulación las cuales son:

- Líquido en la espuma del plato
- Vapor disperso en la espuma del plato
- Líquido en el tubo de descenso inferior del plato
- Vapor en el tubo de descenso de la parte superior del plato

La espuma es modelada por 2 acumulaciones que están representadas en la figura 4.5.

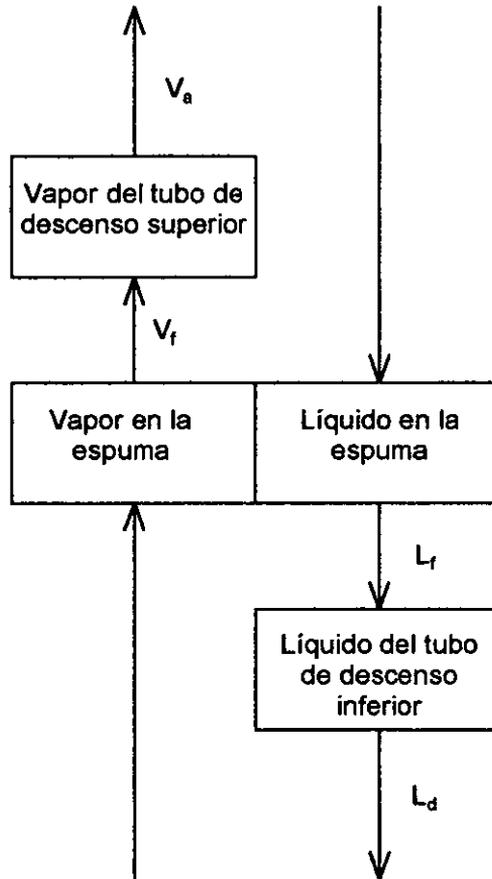


Figura 4.5 Acumulación en una etapa

El término que indica la acumulación molar se expresa en la forma general U_{ij}^{Pw} en donde "P" indica la fase y "w" se refiere al lugar del cual proviene la acumulación y puede ser "f" para la espuma, "d" para el tubo de descenso inferior y "a" si viene del tubo de descenso superior. El término que indica la acumulación molar total tiene la forma general U_{ij}^{Pw} . Las composiciones de la acumulación del vapor y del líquido son

$$y_{ij}^w = \frac{U_{ij}^{Vw}}{U_{ij}^{Vw}} \quad (4-69)$$

$$x_{ij}^w = \frac{U_{ij}^{L,w}}{U_{tj}^{L,w}} \quad (4-70)$$

Los flujos interetapas que llegan al plato "j" se expresan como L_j^w y V_j^w , en donde "w" indica la zona de la cual proviene el líquido o el vapor, ese flujo que viene de "w" fue acumulado previamente en esa zona. Si una etapa tiene más de una alimentación se expresan como $F_{ij}^{p,w}$.

Las relaciones que describen el proceso son las mismas que en los modelos anteriores, hay que usar las ecuaciones de conservación, las relaciones de transporte y la ecuación que describe a la interfase, pero ahora para este modelo hay que añadir los términos de acumulación.

Para una etapa los balances de materia en cada zona de acumulación son

$$\frac{dU_{ij}^{Vf}}{dt} = y_{i,j+1}^a V_{j+1}^a + F_{ij}^{Vf} - y_{ij}^f V_{ij}^f - N_{ij}^f \quad (4-71)$$

$$\frac{dU_{ij}^{Lf}}{dt} = x_{i,j+1}^d L_{j+1}^d + F_{ij}^{Lf} - x_{ij}^f L_{ij}^f + N_{ij}^f \quad (4-72)$$

$$\frac{dU_{ij}^{Va}}{dt} = y_{ij}^f V_j^f + F_{ij}^{Va} - y_{ij}^a V_j^a \quad (4-73)$$

$$\frac{dU_{ij}^{Ld}}{dt} = x_{ij}^f L_j^f + F_{ij}^{Ld} - x_{ij}^d L_j^d \quad (4-74)$$

La suma de los términos de acumulación por componente debe ser igual a la acumulación total lo que se puede expresar como

$$0 = \sum_{i=1}^C U_{ij}^{Vf} - U_{tj}^{Vf} \quad (4-75)$$

$$0 = \sum_{i=1}^C U_{ij}^{Lf} - U_{tj}^{Lf} \quad (4-76)$$

$$0 = \sum_{i=1}^C U_{ij}^{Va} - U_{tj}^{Va} \quad (4-77)$$

$$0 = \sum_{i=1}^C U_{ij}^{Ld} - U_{tj}^{Ld} \quad (4-78)$$

Los balances de energía para cada zona de acumulación son

$$\frac{dE_j^{Vf}}{dt} = \frac{E_{j+1}^{Va}}{U_{t,j+1}^{Va}} V_{j+1}^a + \sum_{i=1}^C H_{ij}^{FVf} F_{ij}^{Vf} - \frac{E_j^{Vf}}{U_{ij}^{Vf}} V_j^f - E_j^{Vf} + Q_j^{Vf} \quad (4-79)$$

$$\frac{dE_j^{Lf}}{dt} = \frac{E_{j-1}^{Ld}}{U_{t,j-1}^{Ld}} L_{j-1}^d + \sum_{i=1}^C H_{ij}^{FLf} F_{ij}^{Lf} - \frac{E_j^{Lf}}{U_{ij}^{Lf}} L_j^f + E_j^{Lf} + Q_j^{Lf} \quad (4-80)$$

$$\frac{dE_j^{Va}}{dt} = \frac{E_j^{Vf}}{U_{tj}^{Vf}} V_j^f + \sum_{i=1}^C H_{ij}^{FVa} F_{ij}^{Va} - \frac{E_j^{Va}}{U_{tj}^{Va}} + Q_j^{Va} \quad (4-81)$$

$$\frac{dE_j^{Ld}}{dt} = \frac{E_j^{Lf}}{U_{tj}^{Lf}} L_j^f + \sum_{i=1}^C H_{ij}^{FLd} F_{ij}^{Ld} - \frac{E_j^{Ld}}{U_{tj}^{Ld}} L_j^d + Q_j^{Ld} \quad (4-82)$$

La acumulación de energía E_j^{Pw} esta relacionada con la acumulación molar y la entalpia por las siguientes ecuaciones

$$0 = \sum_{i=1}^C (H_{ij}^{Vf} U_{ij}^{Vf}) - E_j^{Vf} \quad (4-83)$$

$$0 = \sum_{i=1}^C (H_{ij}^{Lf} U_{ij}^{Lf}) - E_j^{Lf} \quad (4-84)$$

$$0 = \sum_{i=1}^C (H_{ij}^{Va} U_{ij}^{Va}) - E_j^{Va} \quad (4-85)$$

$$0 = \sum_{i=1}^C (H_{ij}^{Ld} U_{ij}^{Ld}) - E_j^{Ld} \quad (4-86)$$

Si se hace un balance de energía sobre la interfase se tiene que

$$0 = E_j^{Vf} - E_j^{Lf} \quad (4-87)$$

y además la interfase se considera que esta en equilibrio por lo que

$$0 = K_{ij}^{lf} x_{ij}^{lf} - y_{ij}^{lf} \quad (4-88)$$

y se tienen las siguientes relaciones adicionales en la interfase

$$0 = \sum_{i=1}^C y_{ij}^{lf} - 1 \quad (4-89)$$

$$0 = \sum_{i=1}^C x_{ij}^{lf} - 1 \quad (4-90)$$

Los N_{ij} del vapor son iguales a los del líquido en la interfase y se tiene que

$$N_{ij} - N_{ij}^V = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C - 1 \quad (4-10)$$

$$N_{ij} - N_{ij}^L = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C - 1 \quad (4-11)$$

La presión se calcula con las ecuaciones

$$p_{\text{especifica da}} - p_1 = 0 \quad (4-28)$$

$$p_j - p_{j-1} - (\Delta p_{j-1}) = 0, \quad j = 2, 3, \dots, N \quad (4-29)$$

en donde $p_{\text{especifica da}}$ es la presión en la parte superior de la columna y Δp es la caída de presión.

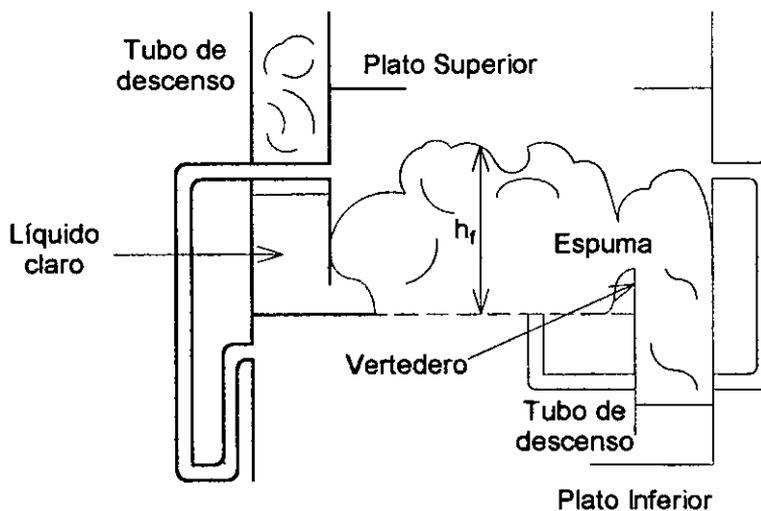


Figura 4.6 Acumulación en un plato de malla

El valor de la acumulación total puede ser determinado teóricamente o a partir de correlaciones, una forma de calcularla es con

$$0 = (h_j^f - h_j^{cl}) A_j^f c_j^{Vf} - U_{tj}^{Vf} \quad (4-91)$$

$$0 = h_j^{cl} A_j^f c_j^{L,f} - U_{tj}^{L,f} \quad (4-92)$$

$$0 = \left((h_j^{ts} - h_j^f) A_j^b + (2h_j^{ts} - h_j^d) A_j^d \right) c_j^{V,a} - U_{tj}^{V,a} \quad (4-93)$$

$$0 = h_j^d A_j^d c_j^{L,d} - U_{tj}^{L,d} \quad (4-94)$$

en donde h_j^f es la altura de la espuma, h_j^{cl} es la altura del líquido claro, h_j^{ts} es el espacio entre los platos y h_j^d es la altura del líquido en el tubo de descenso.

Si se suman las ecuaciones se tienen

- C ecuaciones de la acumulación del vapor en la espuma, ecuación (4-71)
- C ecuaciones de la acumulación del líquido en la espuma, ecuación (4-72)
- C ecuaciones de la acumulación del vapor de la parte superior de la espuma, ecuación (4-73)
- C ecuaciones de la acumulación del líquido en el tubo de descenso, ecuación (4-74)
- 4 ecuaciones que relacionan la suma de la acumulación por componente con la acumulación total, ecuaciones (4-75), (4-76), (4-77) y (4-78)
- 1 ecuación del balance de energía para el vapor en la espuma, ecuación (4-79)
- 1 ecuación del balance de energía para el líquido en la espuma, ecuación (4-80)
- 1 ecuación del balance de energía para el vapor de la parte superior de la espuma, ecuación (4-81)
- 1 ecuación del balance de energía para el líquido en el tubo de descenso, ecuación (4-82)
- 4 ecuaciones que relacionan la suma del producto de la acumulación por la entalpia con la acumulación de energía, ecuaciones (4-83), (4-84), (4-85) y (4-86)
- 1 ecuación del balance de energía interfacial, ecuación (4-87)
- C ecuaciones de equilibrio en la interfase, ecuación (4-88)
- 1 ecuación de suma de fracciones mol del vapor en la interfase, ecuación (4-89)
- 1 ecuación de suma de fracciones mol del líquido en la interfase, ecuación (4-90)
- 2(C-1) ecuaciones de igualdad de fluxes en la interfase, ecuaciones (7-10) y (7-11)
- 1 ecuación de caída de presión que tiene la forma general $p_j - p_{j-1} - (\Delta p_{j-1}) = 0$
- 1 ecuación de acumulación total del vapor en la espuma, ecuación (4-91)
- 1 ecuación de acumulación total del líquido en la espuma, ecuación (4-92)
- 1 ecuación de acumulación total del vapor en la parte superior de la espuma, ecuación (4-93)

- 1 ecuación de acumulación total del líquido en el tubo de descenso, ecuación (4-94)

Lo que da un total de $7C+18$ ecuaciones independientes, de las cuales $4C+4$ son ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE) y $3C+14$ son ecuaciones algebraicas, las $4C+4$ ODE son las ecuaciones (4-71), (4-72), (4-73), (4-74), (4-79), (4-80), (4-81) y (4-82).

Las $7C+18$ variables que son determinadas con las ecuaciones son

- C acumulación del vapor en la espuma, U_{ij}^{Vf}
- C acumulación del líquido en la espuma, U_{ij}^{Lf}
- C acumulación del vapor en la parte superior de la espuma, U_{ij}^{Va}
- C acumulación del líquido en el tubo de descenso, U_{ij}^{Ld}
- 1 flujo de vapor en la espuma, V_j^{Vf}
- 1 flujo de líquido en la espuma, L_j^{Lf}
- 1 flujo de vapor en la parte superior de la espuma, V_j^{Va}
- 1 flujo de líquido en el tubo de descenso, L_j^{Ld}
- 1 acumulación de energía del vapor en la espuma, E_j^{Vf}
- 1 acumulación de energía del líquido en la espuma, E_j^{Lf}
- 1 acumulación de energía del vapor de la parte superior de la espuma, E_j^{Va}
- 1 acumulación de energía del líquido en el tubo de descenso, E_j^{Ld}
- 1 temperatura del vapor en la espuma, T^{Vf}
- 1 temperatura del líquido en la espuma, T^{Lf}
- 1 temperatura del vapor de la parte superior de la espuma, T^{Va}
- 1 temperatura del líquido en el tubo de descenso, T^{Ld}
- 1 temperatura de la interfase, T^I
- C composición del vapor en la interfase, y_{ij}^{Vf}
- C composición del líquido en la interfase, x_{ij}^{Lf}
- C fluxes molares, N_{ij}
- 1 presión, P_j
- 1 acumulación total del vapor en la espuma, U_{tj}^{Vf}
- 1 acumulación total del líquido en la espuma, U_{tj}^{Lf}
- 1 acumulación total del vapor de la parte superior de la espuma, U_{tj}^{Va}
- 1 acumulación total del líquido en el tubo de descenso, U_{tj}^{Ld}

En este modelo se tienen 4 zonas, la espuma, la parte superior de la espuma, el tubo de descenso superior y el tubo de descenso inferior, para todas las zonas se calculan las acumulaciones, los flujos de líquido y vapor, las composiciones y las temperaturas, pero como únicamente en la espuma hay transferencia de masa solo ahí se calculan los fluxes.

4.5 Destilación con Reacción

La destilación con reacción [1, 8, 23, 32] involucra la reacción y la separación de los productos de la reacción en la misma columna. La reacción puede ser homogénea o heterogénea. La destilación con reacción se usa generalmente cuando la reacción se lleva a cabo es en la fase líquida y es necesario agregar una cantidad de reactivo arriba de la estequiométrica.

Las ventajas de usar la destilación con reacción son:

- Las conversiones que se obtienen son más altas porque se retira el producto de la zona de reacción, lo que ocasiona que el equilibrio se desplace hacia la derecha.
- En algunos casos la reacción puede involucrar a los azeótropos, de manera que son eliminados del sistema.
- La selectividad aumenta porque se evita la formación de subproductos al eliminar los productos y los reactivos de la zona de reacción.
- Si una reacción es exotérmica el calor generado puede ser aprovechado para vaporizar las corrientes, lo que se traduce en una integración térmica.

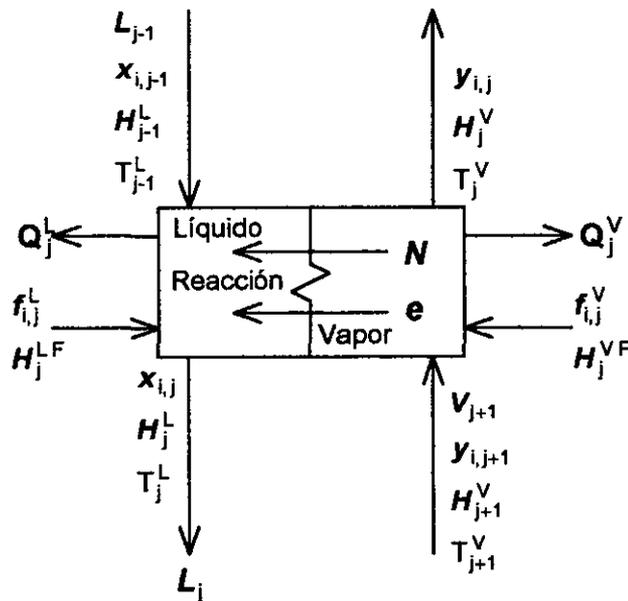


Figura 4.7 Etapa en No Equilibrio con reacción química

Las columnas que se usan en destilación reactiva están divididas en 3 zonas que son: la zona de reacción, la zona de rectificación y la zona de agotamiento. En la zona de reacción los reactivos son convertidos a productos, si el producto tiene el menor punto de ebullición de todos los compuestos presentes entonces la zona de rectificación es usada para la purificación del producto y para reciclar los reactivos, y la zona de agotamiento es usada para retirar los inertes, cualquier subproducto y para reciclar los reactivos, en caso de que el punto de ebullición del producto sea el mayor de todos los compuestos presentes el papel de las zonas de rectificación y agotamiento se intercambia.

Las ecuaciones que describen el modelo son las ecuaciones de conservación, las ecuaciones de transporte y las relaciones de equilibrio.

→ Las ecuaciones de conservación son los balances de materia y de energía

– El balance de materia queda como

$$V_j y_{ij} - V_{j+1} y_{i,j+1} - f_{ij}^V + N_{ij}^V = 0 \quad (4-95)$$

$$L_j x_{ij} - L_{j-1} x_{i,j-1} - f_{ij}^L - N_{ij}^L - \sum_{m=1}^r v_{im} R_{mj} \varepsilon = 0 \quad (4-96)$$

en donde R_{mj} es la rapidez de la reacción "m" en la etapa "j", v_{im} es el coeficiente estequiométrico del componente "i" en la reacción "m" y ε es el volumen de reacción. Para reacciones homogéneas el término ε es la acumulación del líquido en la etapa "j". Para reacciones heterogéneas que sean pseudohomogéneas el término ε es la cantidad total de catalizador que está en la etapa que se esta considerando.

– Los balances de energía son

$$V_j H_j^V - V_{j+1} H_{j+1}^V - F_j^V H_j^{VF} + E_j^V + Q_j^V = 0 \quad (4-97)$$

$$L_j H_j^L - L_{j-1} H_{j-1}^L - F_j^L H_j^{LF} - E_j^L + Q_j^L = 0 \quad (4-98)$$

en la interfase se cumple que

$$E_j^V - E_j^L = 0 \quad (4-9)$$

→ Las ecuaciones de transporte establecen que la rapidez de transferencia de masa del vapor al líquido debe ser igual

$$N_{ij} - N_{ij}^V = 0 \quad (4-10)$$

$$N_{ij} - N_{ij}^L = 0 \quad (4-11)$$

→ Como la interfase se considera en equilibrio sus ecuaciones son

$$K_{ij} x_{ij}^l - y_{ij}^l = 0 \quad (4-12)$$

$$\sum_{i=1}^c y_{ij}^l - 1 = 0 \quad (4-30)$$

$$\sum_{i=1}^c x_{ij}^l - 1 = 0 \quad (4-31)$$

y además en el seno del fluido se tienen además las siguientes ecuaciones

$$S_j^V \equiv \sum_{i=1}^c y_{ij} - 1 = 0 \quad (4-32)$$

$$S_j^L \equiv \sum_{i=1}^c x_{ij} - 1 = 0 \quad (4-33)$$

→ En caso de que se consideren caídas de presión se usan las ecuaciones

$$P_1 \equiv p_{\text{especificada}} - p_1 = 0 \quad (4-28)$$

$$P_j \equiv p_j - p_{j-1} - (\Delta p_{j-1}) = 0, \quad j = 2, 3, \dots, N \quad (4-29)$$

Las ecuaciones son las mismas que se aplican en los otros modelos, pero en este modelo es necesario tomar en cuenta la reacción en el seno del líquido. La manera en la que se toma en cuenta la reacción es con los términos de rapidez de reacción, los coeficientes estequiométricos y con el volumen de reacción.

4.6 Coeficientes de transferencia de masa

Cuando se usa el modelo de no equilibrio es necesario saber el valor de los coeficientes de transferencia de masa que van a ser utilizados en las ecuaciones para calcular el $N_{i,j}^V \equiv \int N_{i,j}^V da_j$ y el $N_{i,j}^L \equiv \int N_{i,j}^L da_j$.

Los N_i se pueden calcular con la ecuación (3-98) para la fase líquida $(N) = c_t^L [k_L^*] (x^L - x^l) + N_t(x^L) = c_t^L [\beta^L] [k_L^*] (x^L - x^l)$ o con la ecuación (3-99) $(N) = c_t^V [k_V^*] (y^l - y^V) + N_t(y^V) = c_t^V [\beta^V] [k_V^*] (y^l - y^V)$ para la fase vapor, los

términos $[k_L^*]$ y $[k_V^*]$ son los coeficientes de transferencia de masa los cuales son calculados con la ecuación $[k_p^*] = [k_p][\Xi_p]$ en donde la p indica la fase. De acuerdo a Powers [25] en destilación la matriz $[\Xi_p]$ es igual a la matriz identidad, y entonces $[k_p^*] = [k_p]$.

La matriz $[k]$ puede ser calculada como

$$[k] = [R]^{-1}[\Gamma] \tag{4-99}$$

en donde

$$R_{ii} = \frac{z_i}{k_{ic}} + \sum_{j \neq i}^c \frac{z_j}{k_{ij}} \tag{4-100}$$

$$R_{ij} = -z_i \left(\frac{1}{k_{ij}} - \frac{1}{k_{ic}} \right) \tag{4-101}$$

y $[\Gamma]$ es una matriz de factores de corrección que es igual a la ecuación (3-63) para líquidos y a la ecuación (3-64) para gases, los k_{ij} son los coeficientes de transferencia de masa binarios.

Dependiendo de las características de la columna es decir dependiendo de si es de platos o esta empacada, hay distintos tipos de correlaciones empíricas que proporcionan el valor de los k_{ij} entre las que están

Platos de Cachucha	Platos de Malla	Platos de Valvula
AICHE [15] Hughmark [12]	AICHE [15] Chan-Fair [5] Zuidweg [33]	AICHE [15]

Tabla 4.1 Correlaciones existentes para calcular los k_{ij} para columnas de platos

Empaque Aleatorio	Empaque Estructurado
Onda [24] Bravo [3]	Bravo [4]

Tabla 4.2 Correlaciones existentes para calcular los k_{ij} para columnas empacadas

Como hay algunas correlaciones que proporcionan los k_{ij} en función de los NUT que son el Número de Unidades de Transferencia, primero se tiene que encontrar una relación entre los k_{ij} y los NUT.

$$k_{ij} = \frac{NTU_{ij}^V}{t_v a^V} \quad (4-102)$$

$$k_{ij} = \frac{NTU_{ij}^L}{t_L a^L} \quad (4-103)$$

t_v es el tiempo de residencia del vapor y t_L es el tiempo de residencia del líquido, a^L y a^V se definen como

$$a^V = \frac{a_d}{\varepsilon h_f} \quad (4-104)$$

$$a^L = \frac{a_d}{\alpha h_f} \quad (4-105)$$

en donde a_d es la densidad de área interfacial [m^2/m^3] y h_f es la altura de la espuma [m]

4.6.1 Columnas de Platos

– Correlación del AIChE para platos de cachucha y de malla

$$NUT_{ij}^V = \frac{(0.776 + 4.57 h_w - 0.238 F_s + 104.8 Q_L/W_I)}{\sqrt{Sc_{ij}^V}} \quad (4-106)$$

$$F_s = u_s \sqrt{\rho_t^V} \quad (4-107)$$

$$Sc_{ij}^V = \frac{\mu^V}{\rho_t^V D_{Fij}^V} \quad (4-108)$$

$$NUT_{ij}^L = 19700 \sqrt{D_{Fij}^L} (0.4 F_s + 0.17) t_L \quad (4-109)$$

$$t_L = \frac{h_L Z W_I}{Q_L} \quad (4-110)$$

h_L se calcula mediante el método de Bennett [2]

$$h_L = \alpha_e \left(h_w + C \left(\frac{Q_L}{\alpha_e W_l} \right)^{0.67} \right) \quad (4-111)$$

$$\alpha_e = \exp \left(-12.55 \left(u_s \left(\frac{\rho^v}{\rho^l - \rho^v} \right)^{0.5} \right)^{0.91} \right) \quad (4-112)$$

$$C = 0.50 + 0.438 \exp(-137.8 h_w) \quad (4-113)$$

h_w es la altura del vertedero [m], F_s es factor superficial F [$\text{kg}^{0.5}/\text{m}^{0.5} \text{ s}$], u_s es la velocidad superficial, [m/s], W_l es la longitud del vertedero [m], Q_L es el flujo volumétrico del líquido [m^3/s] y Z es la longitud del flujo de líquido.

- Correlación de Chan Fair para platos de malla
en esta correlación las NUT del líquido son las obtenidas por medio de la correlación del AIChE, y las NUT del vapor se calculan como

$$\text{NUT}_{ij}^v = (10300 - 8760 F_f) F_f t^v \sqrt{D_{Fij}^v} / \sqrt{h_L} \quad (4-114)$$

$$t^v = \frac{(1 - \alpha_e) h_L}{\alpha_e u_s} \quad (4-115)$$

h_L también se calcula con la correlación de Bennett, y F_f es el factor superficial F a condiciones de inundación.

- Correlación de Zuidweg para platos de malla

$$k^v = \frac{0.13}{\rho_t^v} - \frac{0.065}{(\rho_t^v)^2} \quad (4-116)$$

en donde el k_{ij} del vapor es independiente del coeficiente de difusión y el k_{ij} del líquido puede ser calculado por la ecuación

$$k^l = 2.6 \times 10^5 (\mu^l)^{-0.25} \quad (4-117)$$

en donde el k_{ij} del líquido también es independiente del coeficiente de difusión o se puede calcular mediante la ecuación

$$k_{ij}^L = 0.024(D_{Fij}^L)^{0.25} \quad (4-118)$$

en donde es función del coeficiente de difusión

- Correlación de Hughmark para platos de cachucha

$$NUT^V = (0.051 + 0.0105 F_s) \sqrt{\frac{\rho^L}{F_s}} \quad (4-119)$$

en donde el k_{ij} del vapor es independiente del coeficiente de difusión

$$NUT_{ij}^L = \frac{-44 + 10.7747 \times 10^4 Q_L}{W_i + 127.1457 F_s} \sqrt{D_{Fij}^L} \frac{A_{bub}}{Q_L} \quad (4-120)$$

y A_{bub} es el área de burbujeo.

- Correlación de Harris para platos de malla

$$NUT_{ij}^V = \frac{0.3 + 15 t_v}{\sqrt{Sc_{ij}^V}} \quad (4-121)$$

$$NUT_{ij}^L = \frac{5 + 10 t_L (1 + 0.17(0.82 F_b - 1)(39.3 h_w + 2))}{\sqrt{Sc_{ij}^L}} \quad (4-122)$$

el Sc_{ij}^L se calcula usando las condiciones del líquido en la ecuación 4-108

4.6.2 Columnas Empacadas

- Correlación de Onda para columnas empacadas aleatoriamente

$$k_{ij}^V = A (Re^V)^{0.7} (Sc_{ij}^V)^{0.333} (a_p D_{Fij}^V) (a_p d_p)^{-2} \quad (4-123)$$

en donde $A = 2$ si $d_p < 0.012$ y $A = 5.23$ si $d_p \geq 0.012$

$$k_{ij}^L = 0.0051 (Re_L^L)^{2/3} (Sc_{ij}^L)^{-0.5} (a_p d_p)^{0.4} \left(\frac{\eta^L g}{\rho^L} \right)^{1/3} \quad (4-124)$$

$$Re^v = \frac{\rho^v u_v}{\eta^v a_p} \quad (4-125)$$

$$Re_L^l = \frac{\rho^l u_L}{\eta^l a_d} \quad (4-126)$$

$$Fr^L = \frac{a_p u_L^2}{g} \quad (4-127)$$

$$We^L = \frac{\rho^l u_L^2}{a_p \sigma} \quad (4-128)$$

y el área interfacial a_d [m^2/m^3] se calcula con

$$a_d = a_p \left(1 - \exp \left(-1.45 \left(\frac{\sigma_c}{\sigma} \right)^{0.75} (Re^L)^{0.1} (Fr^L)^{-0.05} (We^L)^{0.2} \right) \right) \quad (4-129)$$

a_p , d_p y σ_c son parámetros y son el área del empaque [m^2], el diámetro del empaque [m] y la tensión superficial crítica del empaque [N/m] respectivamente

- Correlación de Bravo y Fair para columnas empacadas aleatoriamente
la correlación usa las mismas ecuaciones que la correlación de Onda pero el área interfacial es calculada con

$$a_d = 19.78 (C_{al} Re^v)^{0.392} H^{-0.4} a_p \sqrt{\sigma} \quad (4-130)$$

H es la altura de la sección empacada [m] y C_{al} es el número de capilar

$$C_{al} = \frac{u_L \eta^L}{\rho^L \sigma} \quad (4-131)$$

a_p , d_p y σ_c son parámetros

- Correlación de Bravo para columnas con empaque estructurado
el método se basa en la suposición de que la superficie esta completamente mojada y que la densidad de área interfacial es igual a la superficie específica del empaque $a_d = a_p$

$$k_{ij}^v = \frac{Sh^v D_{Fij}^v}{d_{eq}} \quad (4-132)$$

$$Sh^v = 0.0338(Re^v)^{0.8}(Sc^v)^{0.333} \quad (4-133)$$

el diámetro equivalente del canal d_{eq} se obtiene con la ecuación

$$d_{eq} = B h_c \left(\frac{1}{B+2S} + \frac{1}{2S} \right) \quad (4-134)$$

en donde B es la base del triángulo (base del canal), S es el espacio corrugado (lado del canal) y h_c es la altura del triángulo. El número de Reynolds para la fase vapor es

$$Re^v = \frac{d_{eq} \rho^v (u_{v,eff} + u_{L,eff})}{\eta^v} \quad (4-135)$$

y la velocidad efectiva del vapor a través del canal es

$$u_{v,eff} = \frac{u_v}{\varepsilon \sin\theta} \quad (4-136)$$

en donde u_v es la velocidad superficial del vapor, ε es el espacio vacío y θ es el ángulo del canal con respecto a la horizontal. La velocidad efectiva para el líquido es

$$u_{L,eff} = \frac{3T}{2\rho^L} \left(\frac{(\rho^L)^2 g}{3\eta^L T} \right) \quad (4-137)$$

y T es el flujo de líquido por unidad de perímetro

$$T = \frac{\rho^L u^L}{P} \quad (4-138)$$

P es el perímetro por unidad de área cruzada

$$P = \frac{4S+B}{B h_c} \quad (4-139)$$

para calcular el k_{ij} del líquido se usa el modelo de penetración en donde se considera que el tiempo de exposición es el tiempo requerido para que el líquido fluya entre los espacios

$$t_L = \frac{S}{u_{L, \text{eff}}} \quad (4-140)$$

$$k_{ij}^L = 2 \sqrt{\frac{D_{Fij}^L}{\pi t_L}} \quad (4-141)$$

a_p , ε , B , h_c , S y θ son parámetros del modelo.

4.7 Caídas de Presión

En el modelo de segunda generación una de las ecuaciones nuevas es la de la caída de presión. La caída de presión puede ser estimada a través de correlaciones o se puede fijar su valor [13,15]. En el caso de columnas de platos no hay correlaciones de manera que la caída de presión se fija o se estima, en el caso de columnas empacadas sí hay correlaciones para calcular las caídas de presión.

4.7.1 Columnas de Platos

– Platos de cachucha

La caída de presión a través de un plato de cachucha esta definida por la ecuación general

$$\Delta p \equiv \rho_t^L g h_t \quad (4-142)$$

$$h_t = h_d + h_i' \quad (4-143)$$

en donde h_t es la caída de presión total, h_d es la caída de presión a través de la unidad de dispersión y h_i' es la caída de presión a través de la masa aireada encima y alrededor del dispersor.

$$h_d = 0.001 \left(K_1 + K_2 \frac{\rho_t^V}{\rho_t^L} u_h^2 \right) \quad (4-144)$$

u_h es la velocidad del gas/vapor a través del dispersor, K_2 se puede obtener a través de una gráfica o mediante la ecuación

$$K_2 = -28.70 r_a^3 + 121.75 r_a^2 - 178.92 r_a + 103.49 \quad 1 \leq r_a \leq 1.5 \quad (4-145)$$

r_a es la relación entre el área anular y el área del dispersor

$$K_1 = 936.93 \left(\frac{\rho_t^v}{\rho_t^l - \rho_t^v} \right)^{0.2} h_{sh}^{0.8} u_{sl}^{0.4} \quad (4-146)$$

en donde K_1 es la caída de presión a través de los orificios, u_{sl} es la velocidad del gas/vapor a través de los orificios y h_{sh} es la altura del orificio.

$$h_i' = \beta h_{ds} \quad (4-147)$$

el valor de β se puede obtener a través de una gráfica o mediante la ecuación

$$\beta = -0.0348 F_s^3 + 0.2206 F_s^2 - 0.4940 F_s + 1.0002 \quad 0.4 \leq F_s \leq 2.5 \quad (4-148)$$

y F_s se calcula con la ecuación 4-107, h_{ds} es la altura del líquido claro calculada sobre los dispersores y está definida como

$$h_{ds} \equiv h_s + h_{ow} + 0.5h_{hg} \quad (4-149)$$

en donde h_s es el sello estático de ranura que se fija mediante la selección de la altura del vertedero y de la geometría de la cachucha

h_{ow} es la altura de la cresta sobre el vertedero, para un vertedero segmentado se calcula como

$$h_{ow} = 664 \left(\frac{q}{L_w} \right)^{0.667} \quad (4-150)$$

para un vertedero circular se calcula como

$$h_{ow} = 342.3 \left(\frac{q}{d_w} \right)^{0.704} \quad (4-151)$$

para un vertedero dentado se calcula como

$$h_{ow} = 851 \left(\frac{q}{\tan(\theta/2)} \right)^{0.4} \quad (4-152)$$

en donde q es el flujo volumétrico, L_w es la longitud del vertedero, d_w es el diámetro del vertedero y θ es el ángulo de los dientes

h_{hg} es el gradiente hidráulico a través del plato que se obtiene mediante la ecuación

$$h_{hg} = C_{vf} h'_{hg} \quad (4-153)$$

C_{vf} es un factor de corrección que se obtiene a través de una gráfica y el gradiente hidráulico corregido h'_{hg} es una función que depende de la media de la profundidad del líquido.

→ Platos de malla y de válvula

Para estos platos la ecuación básica en términos de la caída de presión total es

$$\Delta p = \rho_t L g h_{wt} \quad (4-154)$$

y

$$h_{wt} = h_{cl} + h_{dt} + h_r \quad (4-155)$$

en donde h_{cl} es la altura del líquido claro, h_{dt} es la caída de presión del plato seco y h_r es la caída de presión residual, h_{cl} puede ser calculada por la ecuación

$$h_{cl} = (1 - \varepsilon)(h_w + h_{ow}) \quad (4-156)$$

ε es la retención del gas, h_w es la altura del vertedero y h_{ow} es la altura sobre el vertedero

$$h_{ow} = \frac{1.04}{C_d^{0.67} g^{0.33}} \left(\frac{Q_L}{(1 - \varepsilon_w) W} \right)^{0.67} \quad (4-157)$$

W es la longitud del vertedero, ε_w es el valor de ε en la espuma que fluye sobre el vertedero y C_d es la constante de descarga.

El h_{dt} para platos de malla es calculado con

$$h_{dt} = \frac{\zeta \rho_t^V u_h^2}{2g\rho_t^L} \quad (4-158)$$

en donde ζ es el coeficiente de orificio.

El h_{dt} para platos de válvula es calculado con

$$h_{dt} = \frac{\zeta_{vt} u_h^2 \rho_t^V}{2g\rho_t^L} + \frac{K M_v}{\rho_t^L A_v} \quad (4-159)$$

en donde ζ_{vt} es el coeficiente de orificio, K es el coeficiente para contabilizar la caída de presión radial debajo del disco, M_v es la masa del disco y A_v es el área del disco.

4.7.2 Columnas Empacadas

- Columnas empacadas aleatoriamente

La caída de presión se puede calcular con

$$\Delta p = \alpha (10^{\beta L'}) \left(\frac{G'^2}{\rho_t^V} \right) \quad (4-160)$$

en donde Δp es la caída de presión, L' es el flujo másico del líquido, G' es el flujo másico del vapor, α y β son parámetros que dependen del tipo de empaque.

- Columnas con empaque estructurado

La caída de presión se puede calcular con

$$\Delta p = \left(0.171 + \frac{92.7}{Re^V} \right) \left(\frac{\rho_t^V u_{ge}^2}{d_{eq} g_c} \right) \left(\frac{1}{1 - C_3 Fr^{0.5}} \right)^5 \quad (4-161)$$

C_3 es una constante que depende del tipo de material, u_{ge} es la velocidad efectiva del vapor y Fr se calcula con

$$Fr = \frac{u_i}{\varepsilon^2 g d_{eq}} \quad (4-162)$$

Hasta este punto ya están expuestas las bases del modelo de etapa en no equilibrio, el siguiente paso es hacer una comparación entre el modelo de etapa ideal en equilibrio y etapa en no equilibrio para ver cuál es el mejor.

Nomenclatura

a	área interfacial [m ²]
a_d	densidad de área interfacial [m ² /m ³]
A	área [m ²]
A_{bub}	área de burbujeo [m ²]
c	concentración [kmol/m ³]
C	número de componentes
d_w	diámetro del vertedero [m]
D_F	coeficiente de difusividad de Fick [m ² /s]
e	flux de energía [J/m ² s]
E	ecuación de balance de energía
E	rapidez de transferencia de energía interfacial [J/s]
f	flujo de alimentación por componente [kmol/s]
F	flujo de alimentación [kmol/s]
F	vector de funciones error
F_f	factor superficial a condiciones de inundación [kg ^{0.5} /m ^{0.5} s]
F_s	factor supercicial [kg ^{0.5} /m ^{0.5} s]
F_r	número de Froude [-]
g	constante de la gravedad
G	flujo másico del vapor [kg/s]
h_j^{cl}	altura del líquido claro [m]
h_j^d	altura del líquido en el tubo de descenso [m]
h_j^f	altura de la espuma [m]
h_i	caída de presión a través de la masa aireada [Pa]
h^{ts}	espacio entre los platos [m]
h_d	caída de presión a través de la unidad de dispersión [Pa]
h_{dt}	caída de presión del plato seco [m]
h_{ow}	altura de la cresta sobre el vertedero [m]
h_r	caída de presión residual [Pa]
h_t	caída de presión total [Pa]
h_w	altura del vertedero [m]
h_L	altura de la caída de presión del líquido [m]
H	entalpía [J/kmol]
H	altura de la sección empacada [m]
[J^k]	Jacobiano

[k]	coeficientes de transferencia de masa [m/s]
k	coeficientes de transferencia de masa binarios [m/s]
K	constante de equilibrio [-]
I	flujo por componente del líquido [kmol/s]
L	flujo del líquido [kmol/s]
L'	flujo másico del líquido [kg/s]
L_w	longitud del vertedero [m]
M	ecuación de balance de masa
N	flux molar [kmol/m ² s]
N	rapidez de transferencia de masa interfacial [kmol/s]
NTU	número de unidades de transferencia [-]
p	presión [Pa]
P	ecuación hidráulica
Q	ecuación de balance de energía
Q	entrada/salida de calor [J/s]
q	flujo volumétrico [m ³ /s]
Q_L	flujo volumétrico del líquido [m ³ /s]
r	relación de la salida lateral al flujo interetapa
[R]	matriz de coeficientes de transferencia de masa binarios invertidos [s/m]
R	ecuación de rapidez de transferencia de masa
R	rapidez de reacción [kmol/m ³ s]
Re	número de Reynolds [-]
S	ecuación de sumatoria
Sc	número de Schimdt [-]
t_l	tiempo de residencia del líquido [s]
t_v	tiempo de residencia del vapor [s]
T	temperatura [K]
u_s	velocidad superficial [m/s]
U	salida lateral de líquido [kmol/s]
U	acumulación molar
v	flujo por componente del vapor [kmol/s]
V	flujo del vapor [kmol/s]
W	salida lateral de vapor [kmol/s]
We	número de Weber [-]
W_l	longitud del vertedero [m]
x	composición del líquido [-]
χ	vector de variables
y	composición del vapor [-]
z	composición [-]
Z	longitud del flujo de líquido [m]

Letras Griegas

[β]	matriz bootstrap
[Γ]	matriz de factores de corrección termodinámicos

ε	volumen de reacción [m^3]
η	viscosidad [Pa s]
ϕ	fracción de arrastre [-]
ν	coeficiente estequiométrico [-]
$[\Xi]$	matriz de factores de corrección [-]
σ	tensión superficial [N/m]

Subíndice

i	número de componente
j, v	número de etapa
m	número de reacción
t	total

Superíndice

'	referente a la fase líquida 1
''	referente a la fase líquida 2
a	proveniente del tubo de descenso superior
d	proveniente del tubo de descenso inferior
f	proveniente de la espuma
l	interfase
k	número de iteración
L	líquido
V	vapor

Matrices

$()$	matriz columna
$()^T$	matriz renglón
$[]$	matriz cuadrada

5 Aplicaciones Equilibrio vs. No Equilibrio

El modelo de etapa en no equilibrio es el más riguroso, la principal diferencia entre los dos modelos es que el modelo de etapa en no equilibrio está basado en la rapidez de transferencia de masa, mientras que el modelo de etapa ideal en equilibrio considera que las composiciones de los flujos están en equilibrio.

Para demostrar las diferencias entre los modelos y las características que hacen al modelo de no equilibrio el mejor, se tomaron 4 sistemas y se simuló el proceso de separación con el modelo de equilibrio y con el modelo de no equilibrio en dos sistemas, Aspen Plus y Chemsep. Los dos sistemas utilizan el modelo de coeficientes de transferencia de masa y las correlaciones del AIChE.

El objetivo es ver si los flujos, las composiciones y las temperaturas son iguales, si son iguales entonces los dos modelos son equivalentes y no hay necesidad de un modelo de etapa en no equilibrio, pero si hay diferencias entonces se tiene que ver cuál de los dos modelos se apega más a la realidad y describe adecuadamente los procesos, para posteriormente analizar por qué se dan esas diferencias.

Sistema 1

Operación	Destilación
Componentes	n-heptano tolueno metil etil cetona MEK
K de equilibrio	Modelo Gamma-Phi Phi modelo de EOS Redlich Kwong Gamma modelo NRTL
No. de Etapas	22
Alimentación 1	
Etapa de Alimentación	11
Presión (psia)	20
Líquido Saturado	
Flujos (lbmol/hr)	
n-heptano	55
tolueno	45
MEK	100

Alimentación 2	
Etapa de Alimentación	16
Presión (psia)	20
Líquido Saturado	
Flujos (lbmol/hr)	
MEK	100
Columna	
Tipo de Columna	Columna de Platos de Malla
Diámetro de la columna (m)	6
Espacio entre los platos (in)	2
Altura de bajante(in)	19.7
Reflujo	1.5
Flujo de los fondos (lbmol/hr)	45
Presión etapa 1 (psia)	15

	Alim. 1	Alim. 2	Destilado	Fondos
Temperatura (°F)	199.2	192.8	172.8	230.9
Presión (psi)	20.0	20.0	15.0	15.0
Fracción de vapor	0	0	0	0
Flujo Molar (lbmol/hr)	200.0000	100.0000	255.0000	45.0000
Flujos Molares (lbmol/hr)				
n-Heptano	55.0000	0.0000	54.9160	0.0840
Tolueno	45.0000	0.0000	0.5180	44.4820
MEK	100.0000	100.0000	199.5660	0.4340
Fracciones Mol				
n-Heptano	0.2750	0.0000	0.2150	0.0020
Tolueno	0.2250	0.0000	0.0020	0.9880
MEK	0.5000	1.0000	0.7830	0.0100

Tabla 5.1 Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Aspen Plus para el sistema 1

	Alim. 1	Alim. 2	Destilado	Fondos
Temperatura (°F)	199.2	192.8	173.1	226.3
Presión (psi)	20.0	20.0	15.0	15.0
Fracción de vapor	0	0	0	0
Flujo Molar (lbmol/hr)	200.0000	100.0000	255.0000	45.0000
Flujos Molares (lbmol/hr)				
n-Heptano	55.0000	0.0000	54.2940	0.7060
Tolueno	45.0000	0.0000	2.4240	42.5760
MEK	100.0000	100.0000	198.2820	1.7180
Fracciones Mol				
n-Heptano	0.2750	0.0000	0.2130	0.0160
Tolueno	0.2250	0.0000	0.0100	0.9460
MEK	0.5000	1.0000	0.7780	0.0380

Tabla 5.2 Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Aspen Plus para el sistema 1

	Alim. 1	Alim. 2	Destilado	Fondos
Temperatura (°F)	195.8	192.2	169.9	231.6
Presión (psi)	20.0	20.0	20.0	20.0
Fracción de vapor	0	0	0	0
Flujo Molar (lbmol/hr)	200.0000	100.0000	254.9893	44.9994
Flujos Molares (lbmol/hr)				
n-Heptano	55.0000	0.0000	54.9900	0.0083
Tolueno	45.0000	0.0000	0.2993	44.7000
MEK	100.0000	100.0000	199.7000	0.2911
Fracciones Mol				
n-Heptano	0.2750	0.0000	0.2157	0.0002
Tolueno	0.2250	0.0000	0.0012	0.9933
MEK	0.5000	1.0000	0.7832	0.0065

Tabla 5.3 Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Chemsep para el sistema 1

	Alim. 1	Alim. 2	Destilado	Fondos
Temperatura (°F)	195.8	192.2	170.3	225.6
Presión (psi)	20.0	20.0	15.0	15.0
Fracción de vapor	0	0	0	0
Flujo Molar (lbmol/hr)	200.0000	100.0000	255.0360	44.9958
Flujos Molares (lbmol/hr)				
n-Heptano	55.0000	0.0000	54.7800	0.2198
Tolueno	45.0000	0.0000	2.6560	42.3400
MEK	100.0000	100.0000	197.6000	2.4360
Fracciones Mol				
n-Heptano	0.2750	0.0000	0.2148	0.0049
Tolueno	0.2250	0.0000	0.0104	0.9410
MEK	0.5000	1.0000	0.7748	0.0541

Tabla 5.4 Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Chemsep para el sistema 1

	Destilado	Fondos
	Error %	Error %
Temperatura	0.17	2.03
Flujos Molares		
n-Heptano	1.15	88.10
Tolueno	78.63	4.48
MEK	0.65	74.74
Fracciones Mol		
n-Heptano	0.94	87.50
Tolueno	80.00	4.44
MEK	0.64	73.68

Tabla 5.5 Error entre los dos modelos usando Aspen Plus para el sistema 1

	Destilado	Fondos
	Error %	Error %
Temperatura	0.23	2.66
Flujos Molares		
n-Heptano	0.38	96.23
Tolueno	88.73	5.57
MEK	1.06	88.05
Fracciones Mol		
n-Heptano	0.42	96.23
Tolueno	88.72	5.56
MEK	1.08	88.05

Tabla 5.6 Error entre los dos modelos usando Chemsep para el sistema 1

En Aspen Plus y en Chemsep la pureza de las corrientes cuando se usa el modelo de no equilibrio es menor que cuando se usa el modelo de equilibrio, la razón principal es que la eficiencia de las etapas en el modelo de equilibrio se esta considerando del 100%.

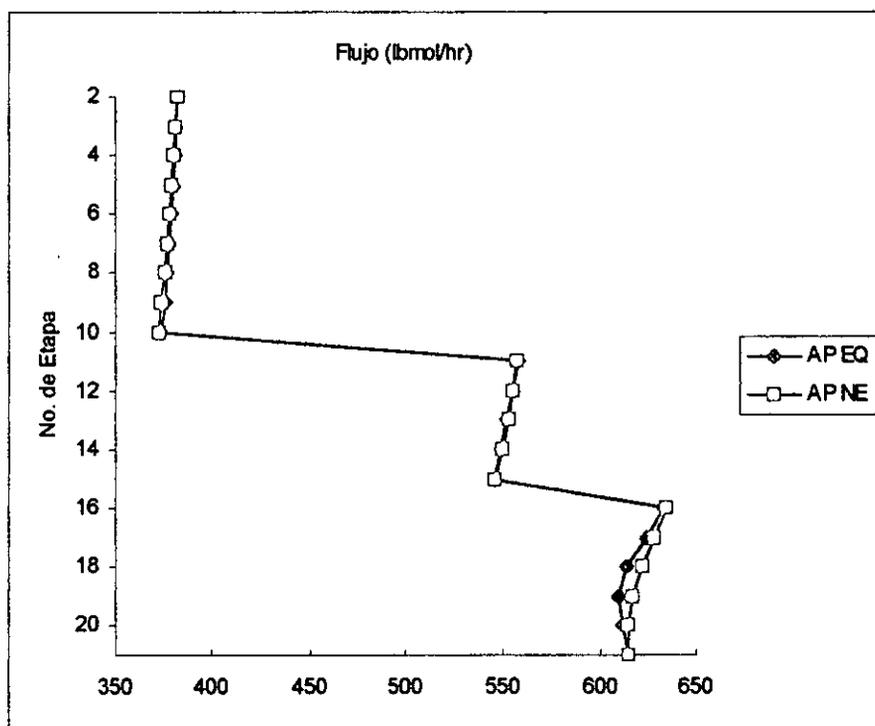


Figura 5.1 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo del líquido en Aspen Plus para el sistema 1

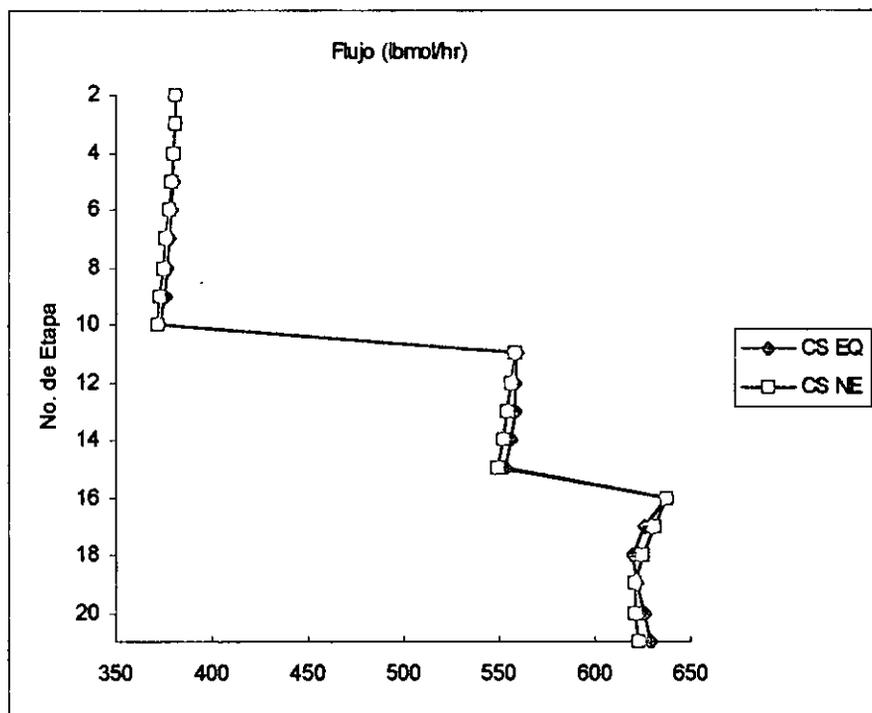


Figura 5.2 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Chemsep para el sistema 1

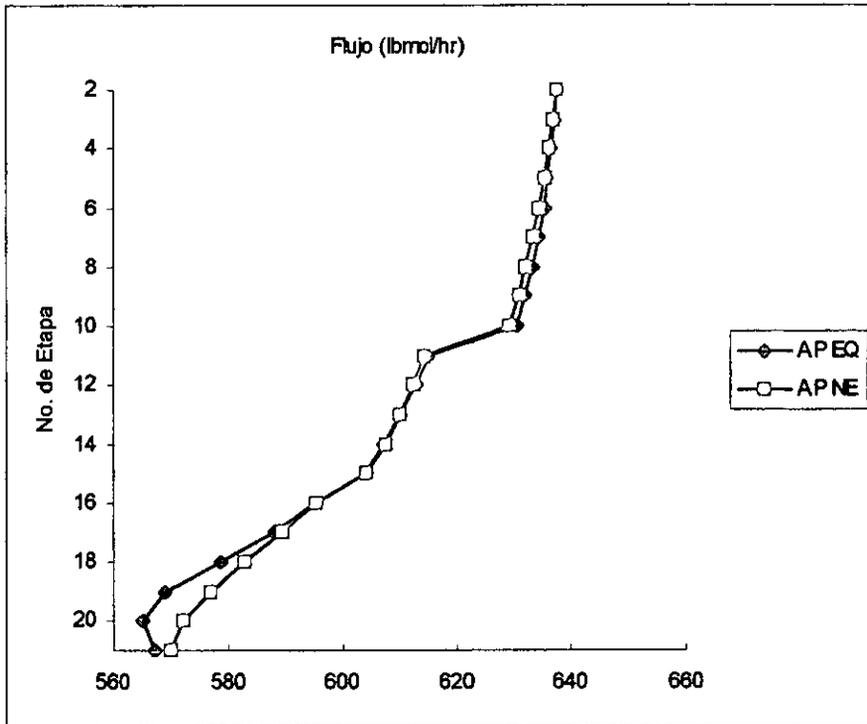


Figura 5.3 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Aspen Plus para el sistema 1

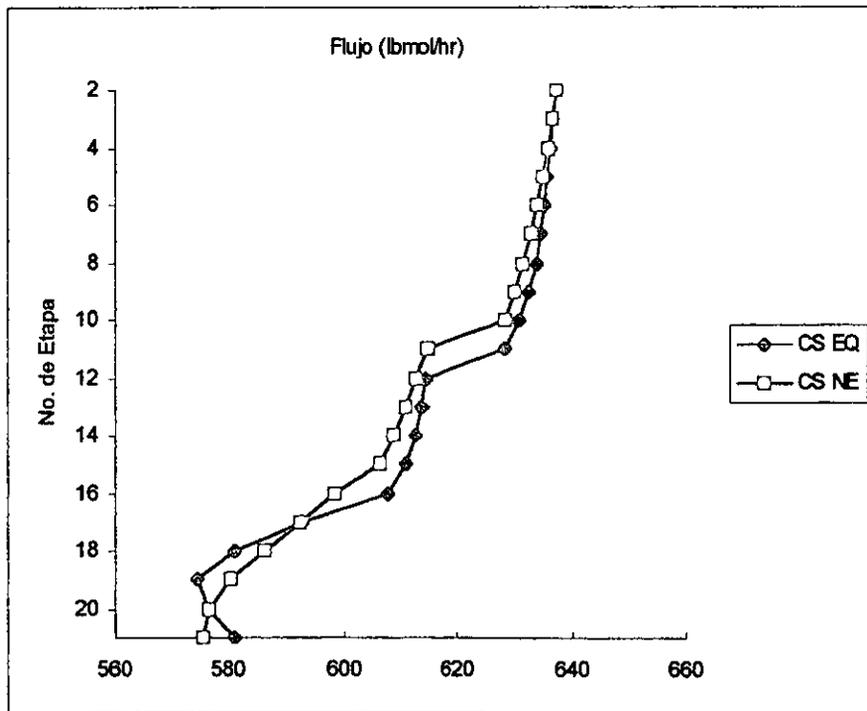


Figura 5.4 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Chemsep para el sistema 1

Aspen Plus	Flujo Líquido	Flujo Líquido	Error
	lbmol/hr	lbmol/hr	%
Etapa	EQ	NE	
1	382.50	637.50	40.00
2	382.00	381.85	0.04
3	381.46	381.09	0.10
4	380.86	380.24	0.16
5	380.18	379.29	0.23
6	379.36	378.22	0.30
7	378.32	377.02	0.34
8	377.01	375.69	0.35
9	375.37	374.23	0.30
10	373.31	372.66	0.17
11	557.76	557.40	0.07
12	555.15	555.16	0.00
13	552.16	552.45	0.05
14	548.98	549.27	0.05
15	545.63	545.60	0.01
16	633.28	634.36	0.17
17	623.65	628.08	0.71
18	613.92	621.87	1.28
19	610.15	617.14	1.13
20	612.23	614.96	0.44
21	614.90	614.99	0.02
22	45.00	45.00	0.00

Chemsep	Flujo Líquido	Flujo Líquido	Error
	lbmol/hr	lbmol/hr	%
Etapa	EQ	NE	
1	382.50	382.50	0.00
2	381.77	381.72	0.01
3	381.19	380.84	0.09
4	380.72	379.91	0.21
5	380.23	378.89	0.35
6	379.61	377.75	0.49
7	378.73	376.46	0.60
8	377.48	375.03	0.65
9	375.69	373.41	0.61
10	373.20	371.60	0.43
11	559.39	557.64	0.31
12	558.52	555.80	0.49
13	557.52	553.74	0.68
14	555.75	551.34	0.80
15	552.62	548.45	0.76
16	637.91	637.48	0.07
17	625.84	631.26	0.86
18	619.20	625.30	0.98
19	621.43	621.23	0.03
20	626.04	620.39	0.91
21	628.92	622.57	1.02
22	45.00	45.00	0.00

Tabla 5.7 Comparación entre los flujos de líquido usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema 1

Aspen Plus	Flujo Vapor	Flujo Vapor	Error
	lbmol/hr	lbmol/hr	%
Etapa	EQ	NE	
1	0.00	0.00	0.00
2	637.50	637.50	0.00
3	637.00	636.85	0.02
4	636.46	636.09	0.06
5	635.86	635.24	0.10
6	635.18	634.29	0.14
7	634.36	633.22	0.18
8	633.32	632.02	0.20
9	632.01	630.69	0.21
10	630.37	629.23	0.18
11	614.85	614.20	0.11
12	612.76	612.40	0.06
13	610.15	610.16	0.00
14	607.16	607.45	0.05
15	603.98	604.27	0.05
16	595.53	595.50	0.01
17	588.28	589.36	0.18
18	578.65	583.08	0.76
19	568.92	576.87	1.38
20	565.15	572.14	1.22
21	567.23	569.96	0.48
22	569.90	569.99	0.02

Chemsep	Flujo Vapor	Flujo Vapor	Error
	lbmol/hr	lbmol/hr	%
Etapa	EQ	NE	
1	255.00	255.00	0.00
2	637.50	637.50	0.00
3	636.77	636.72	0.01
4	636.19	635.84	0.05
5	635.72	634.91	0.13
6	635.23	633.89	0.21
7	634.61	632.75	0.29
8	633.73	631.46	0.36
9	632.48	630.03	0.39
10	630.69	628.41	0.36
11	628.20	614.75	2.19
12	614.39	612.64	0.29
13	613.52	610.80	0.44
14	612.52	608.74	0.62
15	610.75	606.34	0.73
16	607.62	598.24	1.57
17	592.91	592.48	0.07
18	580.84	586.26	0.92
19	574.20	580.30	1.05
20	576.43	576.23	0.04
21	581.04	575.39	0.98
22	583.92	577.57	1.10

Tabla 5.8 Comparación entre los flujos de vapor usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema 1

En los dos casos los flujos son casi iguales, de manera que los dos modelos dan resultados idénticos en cuanto al flujo de líquido, los dos picos que se observan en las figuras 5.1 y 5.2 corresponden a las etapas de alimentación.

En el caso de los flujos de vapor se puede ver en las tablas que el error es muy pequeño y que prácticamente los dos modelos proporcionan el mismo valor.

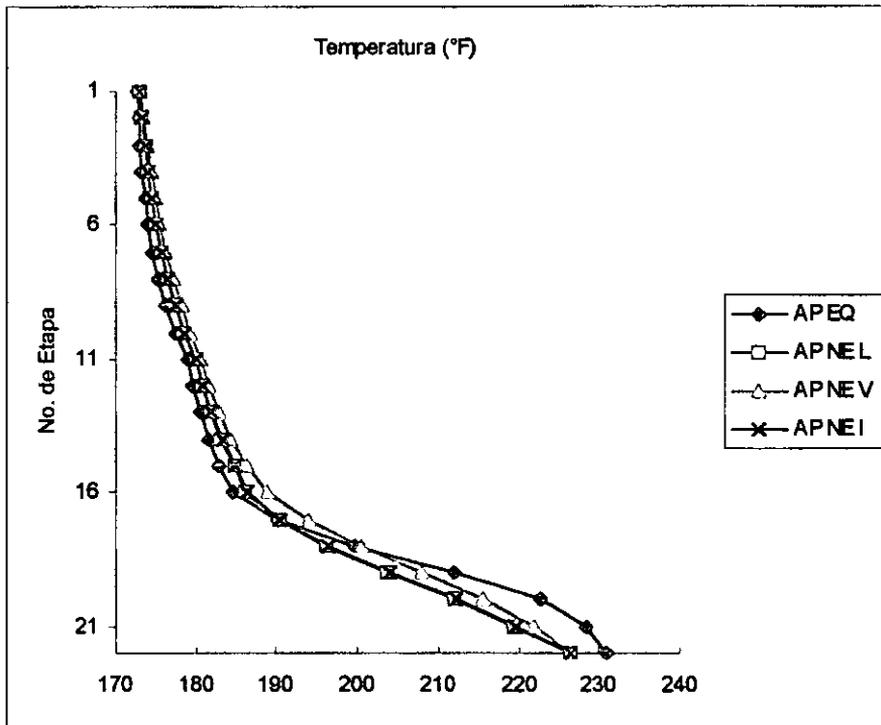


Figura 5.5 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Aspen Plus para el sistema 1

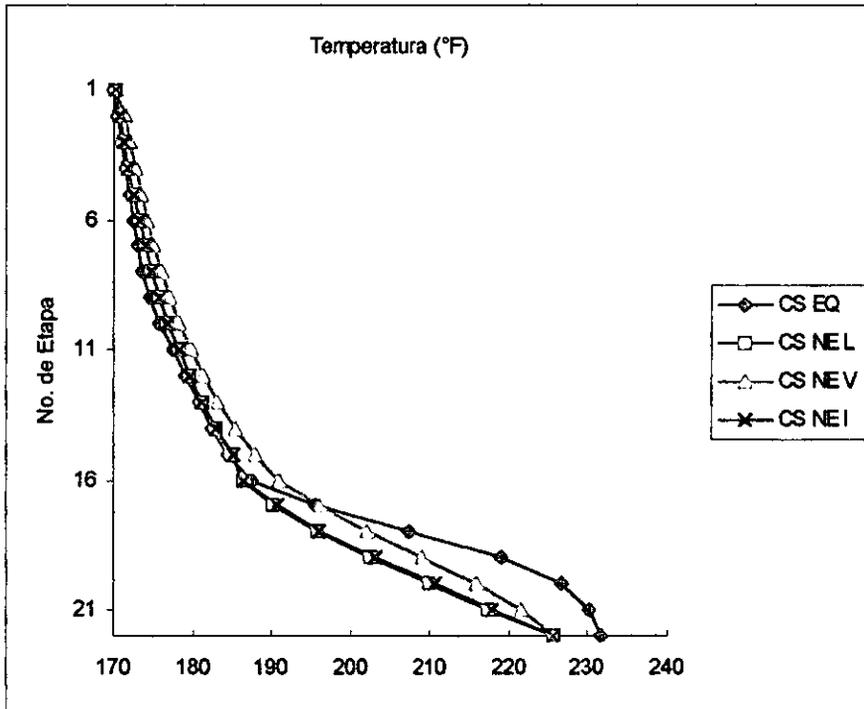


Figura 5.6 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Chemsep para el sistema 1

En los dos modelos las temperaturas son similares en la parte superior de la columna, pero en la parte inferior después de la etapa 16 el error entre las temperaturas obtenidas en los dos modelos empieza a crecer. La etapa 16 es donde se alimenta la corriente de metil etil cetona (MEK) el modelo de equilibrio se ve afectado por esa alimentación provocando que la temperatura aumente, mientras que el modelo de no equilibrio sigue el mismo perfil que tenía desde la parte superior y no se ve afectado por la alimentación. En el modelo de no equilibrio las 3 temperaturas son muy parecidas y la temperatura de la interfase se asemeja más a la temperatura de la fase líquida.

Etapa	T	T Líquido	T Vapor	T Interfase	Error
	°F	°F	°F	°F	%
	EQ	NE	NE	NE	
1	172.80	173.06	173.06	173.06	0.15
2	172.95	173.37	173.60	173.37	0.25
3	173.14	173.71	173.99	173.71	0.33
4	173.38	174.11	174.44	174.12	0.42
5	173.70	174.59	174.98	174.60	0.52
6	174.10	175.15	175.61	175.16	0.61
7	174.64	175.81	176.34	175.83	0.68
8	175.35	176.59	177.21	176.61	0.71
9	176.31	177.50	178.21	177.52	0.68
10	177.57	178.56	179.35	178.58	0.57
11	179.13	180.05	180.59	180.07	0.52
12	179.69	180.83	181.53	180.85	0.64
13	180.48	181.86	182.77	181.89	0.78
14	181.50	183.21	184.35	183.24	0.95
15	182.80	184.92	186.35	184.96	1.17
16	184.62	186.19	188.97	186.26	0.88
17	190.16	190.35	193.96	190.47	0.17
18	199.60	196.19	200.42	196.36	1.65
19	212.02	203.73	207.99	203.96	3.95
20	222.55	212.06	215.61	212.30	4.82
21	228.37	219.48	221.94	219.70	3.95
22	230.86	226.31	226.31	226.31	2.01

Tabla 5.9 Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 1

Etapa	T	T Líquido	T Vapor	T Interfase	Error
	°F	°F	°F	°F	%
	EQ	NE	NE	NE	
1	169.92	170.26	170.26	170.26	0.20
2	170.38	170.72	171.39	170.74	0.21
3	170.97	171.25	171.99	171.27	0.18
4	171.53	171.85	172.67	171.88	0.20
5	172.01	172.51	173.40	172.54	0.31
6	172.46	173.22	174.20	173.25	0.46
7	172.97	173.99	175.09	174.02	0.60
8	173.62	174.82	176.07	174.86	0.71
9	174.52	175.75	177.15	175.80	0.73
10	175.79	176.80	178.35	176.85	0.60
11	177.56	178.20	179.70	178.25	0.39
12	179.12	179.47	181.27	179.55	0.24
13	180.73	181.02	183.12	181.12	0.22
14	182.39	182.83	185.29	182.95	0.31
15	184.42	184.92	187.80	185.06	0.34
16	187.32	186.25	190.86	186.45	0.47
17	195.40	190.26	195.91	190.56	2.54
18	207.31	195.65	202.05	196.04	5.75
19	219.05	202.45	208.93	202.96	7.93
20	226.57	210.10	215.74	210.67	7.55
21	230.13	217.37	221.51	217.92	5.60
22	231.57	225.60	225.60	225.60	2.64

Tabla 5.10 Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Chemsepe para el sistema 1

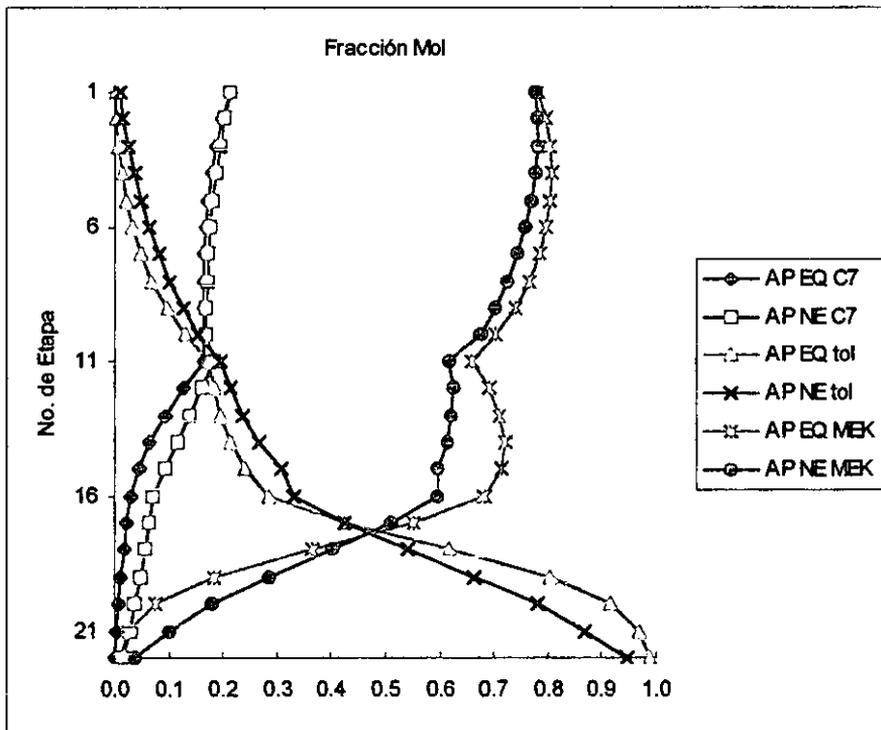


Figura 5.7 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Aspen Plus para el sistema 1

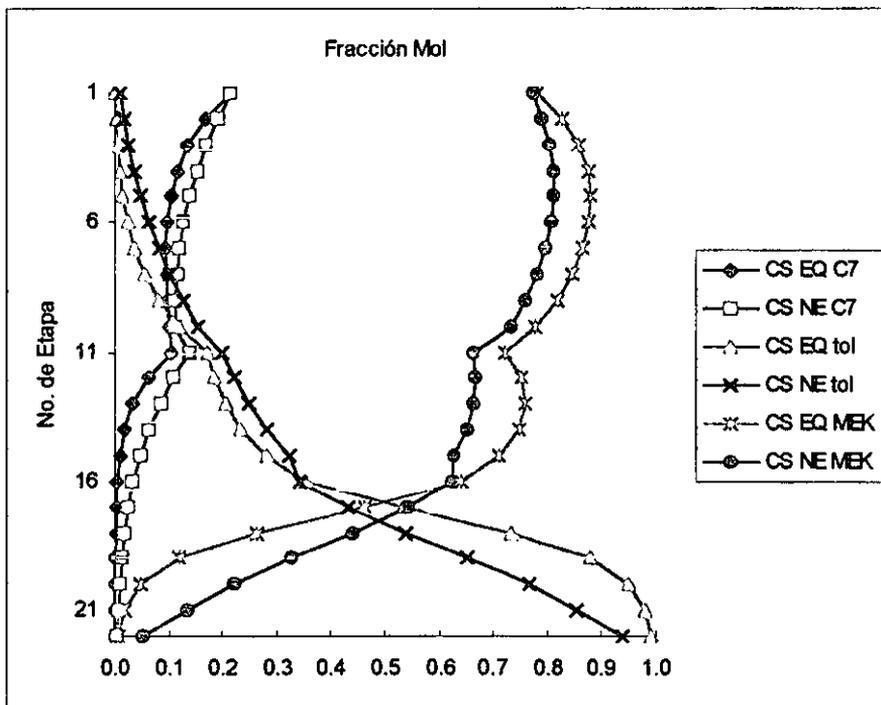


Figura 5.8 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Chemsep para el sistema 1

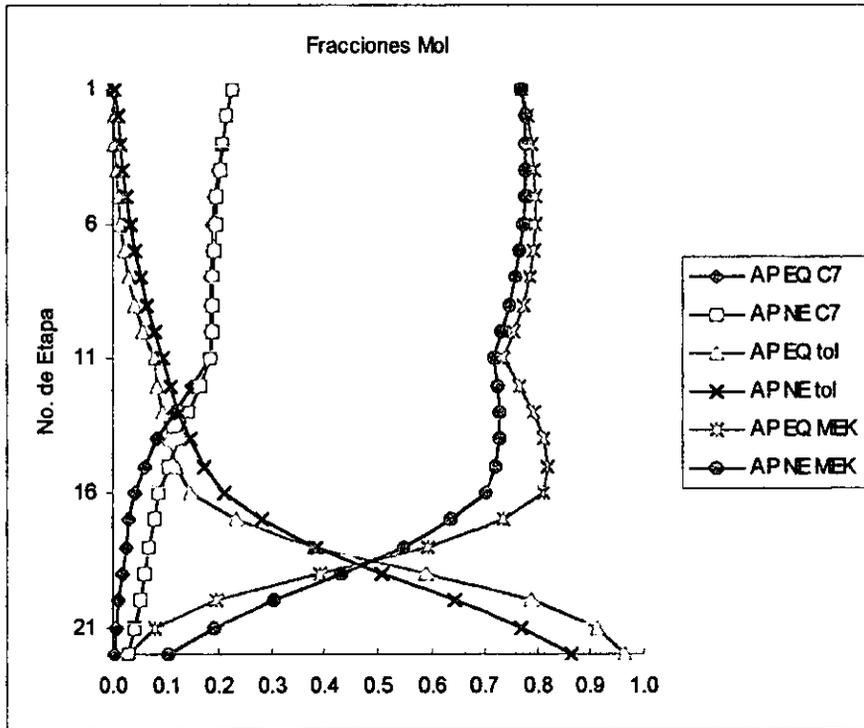


Figura 5.9 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Aspen Plus para el sistema 1

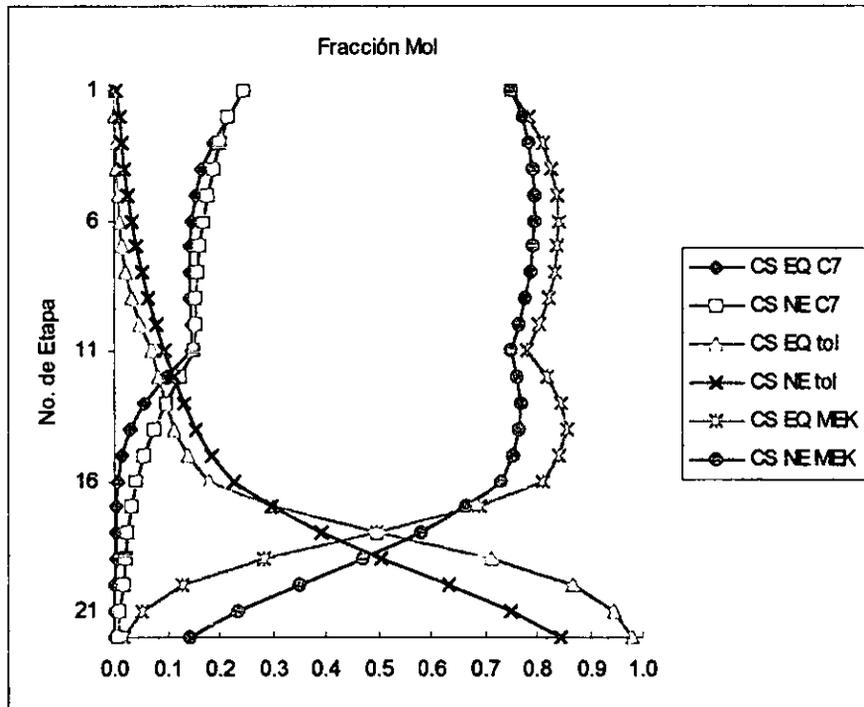


Figura 5.10 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Chemsep para el sistema 1

Etapa	Fraccion Mol	Error	Error	Error					
	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	n-heptano	tolueno	MEK
	n-heptano	tolueno	MEK	n-heptano	tolueno	MEK	%	%	%
	EQ	EQ	EQ	NE	NE	NE			
1	0.21536	0.00203	0.78261	0.21292	0.00950	0.77758	1.15	78.65	0.65
2	0.19981	0.00490	0.79530	0.20269	0.01664	0.78067	1.42	70.57	1.87
3	0.18773	0.00896	0.80330	0.19404	0.02534	0.78062	3.25	64.62	2.91
4	0.17876	0.01468	0.80656	0.18692	0.03588	0.77720	4.37	59.08	3.78
5	0.17238	0.02266	0.80496	0.18122	0.04857	0.77021	4.87	53.35	4.51
6	0.16812	0.03367	0.79820	0.17681	0.06373	0.75946	4.91	47.16	5.10
7	0.16556	0.04874	0.78571	0.17356	0.08168	0.74476	4.61	40.33	5.50
8	0.16438	0.06906	0.76656	0.17133	0.10276	0.72592	4.06	32.79	5.60
9	0.16437	0.09597	0.73967	0.16997	0.12720	0.70284	3.29	24.56	5.24
10	0.16535	0.13068	0.70397	0.16933	0.15516	0.67551	2.35	15.78	4.21
11	0.16498	0.17247	0.66255	0.18297	0.19527	0.62176	9.83	11.68	6.56
12	0.12717	0.18239	0.69044	0.16019	0.21359	0.62622	20.61	14.61	10.25
13	0.09285	0.19570	0.71146	0.13739	0.23744	0.62516	32.42	17.58	13.80
14	0.06478	0.21435	0.72087	0.11553	0.26810	0.61637	43.92	20.05	16.95
15	0.04372	0.24176	0.71452	0.09536	0.30694	0.59771	54.15	21.23	19.54
16	0.02916	0.28526	0.68558	0.07301	0.33037	0.59662	60.06	13.66	14.91
17	0.02287	0.42395	0.55318	0.06519	0.42360	0.51121	64.92	0.08	8.21
18	0.01739	0.61951	0.36310	0.05725	0.53999	0.40277	69.63	14.73	9.85
19	0.01182	0.80491	0.18327	0.04844	0.66697	0.28459	75.60	20.68	35.60
20	0.00696	0.91766	0.07538	0.03858	0.78240	0.17902	81.96	17.29	57.89
21	0.00371	0.96852	0.02777	0.02866	0.86943	0.10191	87.05	11.40	72.76
22	0.00187	0.98850	0.00964	0.01569	0.94614	0.03817	88.11	4.48	74.76

Tabla 5.11 Comparación entre las fracciones mol del líquido usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 1

Etapa	Fraccion Mol	Error	Error	Error					
	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	n-heptano	tolueno	MEK
	n-heptano	tolueno	MEK	n-heptano	tolueno	MEK	%	%	%
	EQ	EQ	EQ	NE	NE	NE			
1	0.21565	0.00117	0.78317	0.21482	0.01041	0.77476	0.39	88.73	1.09
2	0.16946	0.00317	0.82737	0.19126	0.01764	0.79111	11.40	82.02	4.58
3	0.13590	0.00616	0.85794	0.17029	0.02644	0.80327	20.19	76.70	6.81
4	0.11504	0.01052	0.87445	0.15270	0.03703	0.81027	24.67	71.59	7.92
5	0.10349	0.01681	0.87970	0.13878	0.04964	0.81158	25.43	66.14	8.39
6	0.09782	0.02588	0.87630	0.12835	0.06455	0.80709	23.79	59.91	8.57
7	0.09573	0.03895	0.86532	0.12103	0.08209	0.79689	20.90	52.55	8.59
8	0.09595	0.05769	0.84636	0.11630	0.10258	0.78112	17.50	43.76	8.35
9	0.09790	0.08433	0.81778	0.11368	0.12640	0.75992	13.88	33.29	7.61
10	0.10140	0.12149	0.77711	0.11273	0.15385	0.73342	10.05	21.04	5.96
11	0.10636	0.17159	0.72205	0.13809	0.19838	0.66353	22.98	13.50	8.82
12	0.06256	0.18609	0.75135	0.11015	0.22061	0.66923	43.21	15.65	12.27
13	0.03427	0.20545	0.76027	0.08522	0.24814	0.66664	59.78	17.20	14.05
14	0.01815	0.23463	0.74721	0.06430	0.28194	0.65375	71.77	16.78	14.30
15	0.00957	0.28085	0.70958	0.04762	0.32306	0.62932	79.91	13.07	12.75
16	0.00511	0.35236	0.64252	0.03240	0.34316	0.62444	84.22	2.68	2.90
17	0.00334	0.53332	0.46334	0.02588	0.43126	0.54286	87.09	23.66	14.65
18	0.00212	0.73453	0.26335	0.02059	0.53842	0.44099	89.69	36.42	40.28
19	0.00125	0.87845	0.12030	0.01615	0.65540	0.32845	92.27	34.03	63.37
20	0.00068	0.95122	0.04809	0.01230	0.76566	0.22204	94.43	24.24	78.34
21	0.00036	0.98164	0.01800	0.00904	0.85394	0.13703	96.01	14.95	86.87
22	0.00018	0.99335	0.00647	0.00489	0.94098	0.05413	96.23	5.57	88.05

Tabla 5.12 Comparación entre las fracciones mol del líquido usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 1

Etapa	Fraccion Mol Vapor	Error n-heptano	Error tolueno	Error MEK					
	n-heptano	tolueno	MEK	n-heptano	tolueno	MEK	%	%	%
	EQ	EQ	EQ	NE	NE	NE			
1	0.22681	0.00083	0.77235	0.22485	0.00392	0.77123	0.87	78.73	0.15
2	0.21536	0.00203	0.78261	0.21292	0.00950	0.77758	1.15	78.65	0.65
3	0.20603	0.00375	0.79022	0.20679	0.01378	0.77943	0.37	72.80	1.38
4	0.19880	0.00619	0.79501	0.20161	0.01899	0.77940	1.39	67.43	2.00
5	0.19344	0.00961	0.79696	0.19735	0.02529	0.77735	1.99	62.01	2.52
6	0.18964	0.01438	0.79599	0.19396	0.03287	0.77317	2.23	56.26	2.95
7	0.18711	0.02095	0.79194	0.19135	0.04189	0.76676	2.22	49.98	3.28
8	0.18561	0.02993	0.78446	0.18944	0.05256	0.75800	2.02	43.06	3.49
9	0.18495	0.04201	0.77304	0.18814	0.06505	0.74681	1.70	35.42	3.51
10	0.18500	0.05797	0.75704	0.18737	0.07950	0.73313	1.27	27.09	3.26
11	0.18389	0.07787	0.73824	0.18532	0.09577	0.71891	0.77	18.69	2.69
12	0.15004	0.08440	0.76557	0.16538	0.10821	0.72641	9.28	22.01	5.39
13	0.11557	0.09304	0.79138	0.14459	0.12456	0.73085	20.07	25.30	8.28
14	0.08430	0.10471	0.81100	0.12379	0.14585	0.73036	31.90	28.21	11.04
15	0.05875	0.12118	0.82007	0.10384	0.17324	0.72291	43.43	30.05	13.44
16	0.03992	0.14681	0.81327	0.08618	0.20972	0.70410	53.68	30.00	15.50
17	0.03125	0.23146	0.73729	0.07739	0.28336	0.63926	59.62	18.31	15.34
18	0.02450	0.38005	0.59545	0.06901	0.38328	0.54771	64.49	0.84	8.71
19	0.01862	0.59032	0.39106	0.06049	0.50830	0.43121	69.22	16.14	9.31
20	0.01261	0.79029	0.19710	0.05101	0.64501	0.30398	75.28	22.52	35.16
21	0.00736	0.91205	0.08059	0.04039	0.76948	0.19014	81.77	18.53	57.61
22	0.00386	0.96694	0.02920	0.02968	0.86337	0.10694	87.00	12.00	72.70

Tabla 5.13 Comparación entre las fracciones mol del vapor usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 1

Etapa	Fraccion Mol	Error	Error	Error					
	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	n-heptano	tolueno	MEK
	n-heptano	tolueno	MEK	n-heptano	tolueno	MEK	%	%	%
	EQ	EQ	EQ	NE	NE	NE			
1	0.24679	0.00042	0.75279	0.24550	0.00372	0.75078	0.53	88.79	0.27
2	0.21565	0.00117	0.78317	0.21482	0.01041	0.77476	0.39	88.73	1.09
3	0.18796	0.00237	0.80967	0.20069	0.01474	0.78456	6.35	83.92	3.20
4	0.16787	0.00416	0.82797	0.18815	0.02001	0.79184	10.78	79.20	4.56
5	0.15540	0.00677	0.83783	0.17765	0.02634	0.79601	12.53	74.30	5.25
6	0.14851	0.01053	0.84095	0.16937	0.03386	0.79677	12.31	68.89	5.55
7	0.14517	0.01595	0.83888	0.16320	0.04274	0.79406	11.05	62.67	5.64
8	0.14399	0.02375	0.83227	0.15891	0.05314	0.78795	9.39	55.31	5.62
9	0.14421	0.03490	0.82089	0.15618	0.06528	0.77854	7.66	46.53	5.44
10	0.14551	0.05071	0.80379	0.15472	0.07934	0.76594	5.95	36.09	4.94
11	0.14778	0.07265	0.77957	0.15200	0.09550	0.75250	2.78	23.93	3.60
12	0.09683	0.08347	0.81970	0.12533	0.11145	0.76322	22.75	25.10	7.40
13	0.05694	0.09655	0.84652	0.09987	0.13142	0.76870	42.99	26.54	10.12
14	0.03118	0.11403	0.85479	0.07716	0.15616	0.76668	59.59	26.98	11.49
15	0.01651	0.14031	0.84318	0.05811	0.18653	0.75536	71.59	24.78	11.63
16	0.00869	0.18186	0.80945	0.04329	0.22540	0.73131	79.93	19.31	10.68
17	0.00549	0.30372	0.69080	0.03449	0.29775	0.66775	84.09	2.00	3.45
18	0.00358	0.49768	0.49874	0.02749	0.39214	0.58037	86.96	26.91	14.07
19	0.00227	0.71424	0.28348	0.02181	0.50720	0.47099	89.57	40.82	39.81
20	0.00133	0.86948	0.12919	0.01702	0.63310	0.34988	92.19	37.34	63.08
21	0.00072	0.94796	0.05132	0.01288	0.75195	0.23517	94.38	26.07	78.18
22	0.00037	0.98074	0.01889	0.00936	0.84716	0.14348	96.00	15.77	86.84

Tabla 5.14 Comparación entre las fracciones mol del vapor usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 1

Las composiciones del líquido y del vapor varían mucho de un sistema a otro, esta variación afecta el comportamiento de la columna y la manera en la que se ve reflejado el efecto de la diferencia de composiciones de un modelo a otro, es en la pureza de las corrientes de salida. La razón principal para que se de esa variación es que las etapas se comportan de manera distinta y por lo tanto la cantidad de masa que es transferida es diferente a pesar de que los flujos y las temperaturas sean las mismas en los dos modelos.

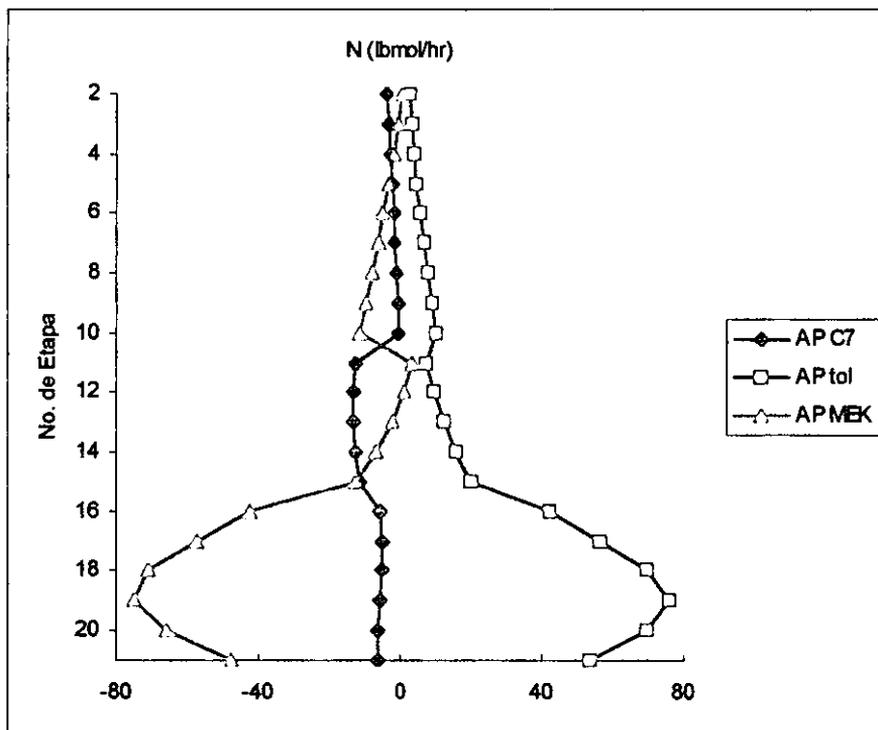


Figura 5.11 Comparación de la rapidez de transferencia de masa en Aspen Plus para el sistema 1

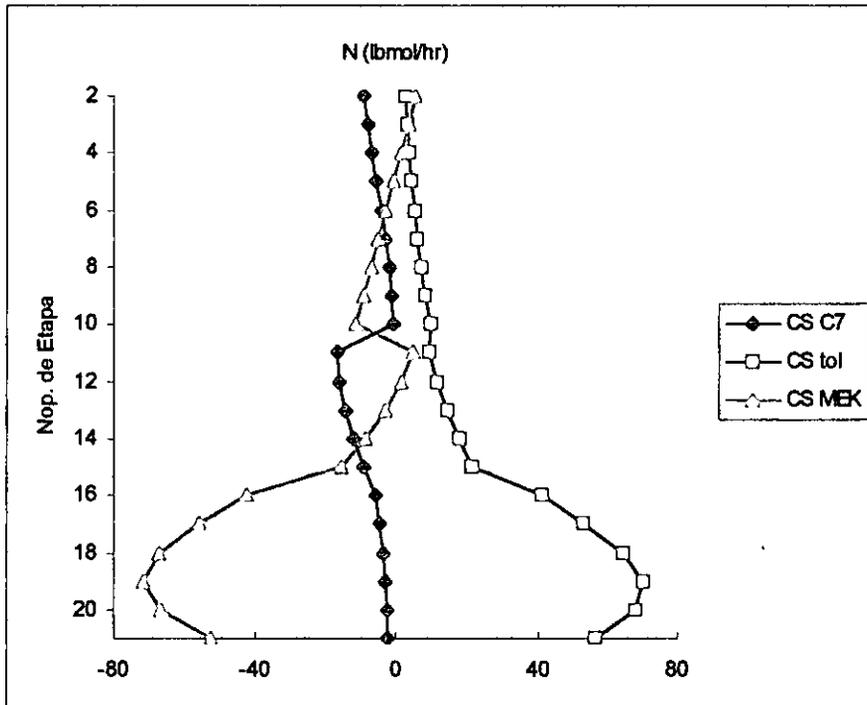


Figura 5.12 Comparación de la rapidez de transferencia de masa en Chemsep para el sistema 1

Como el MEK se va a recuperar en la corriente del destilado la rapidez de transferencia de masa es negativa, como la alimentación es líquida el MEK tiene que ser transferido de la fase líquida a la fase vapor, por eso el flujo de vapor aumenta en las etapas superiores de la columna.

En cambio el tolueno es recuperado en la corriente de fondos y desde la etapa 11 su concentración en el líquido y en el vapor va aumentando, como la concentración del tolueno en la etapas inferiores es alta eso explica porque su rapidez de transferencia de masa también es alta en la etapas inferiores, porque se está transfiriendo de la fase vapor a la fase líquida.

Sistema 2

Operación	Destilación
Componentes	etano propano n-butano n-pentano
K de equilibrio	EOS Peng Robinson
No. de Etapas	35

Alimentación	
Etapa de Alimentación	16
Presión (atm)	15
Líquido Saturado	
Flujos (mol/s)	
etano	100
propano	300
n-butano	500
n-pentano	100
Columna	
Tipo de Columna	Columna de Platos de Malla
Diámetro de la columna (m)	7
Reflujo	2.5
Flujo de los fondos (mol/s)	600
Presión etapa 1 (atm)	15

	Alimentación	Destilado	Fondos
Temperatura (°C)	60.8	22.5	105.1
Presión (bar)	15.1990	15.1990	15.1990
Fracción de vapor	0	0	0
Flujo Molar (kmol/hr)	3600.0000	1440.0000	2160.0000
Flujos Molares (kmol/hr)			
Etano	360.0000	360.0000	0.0000
Propano	1080.0000	1079.1660	0.8340
n-Butano	1800.0000	0.8340	1799.1660
n-Pentano	360.0000	0.0000	360.0000
Fracciones Mol			
Etano	0.1000	0.2500	0.0000
Propano	0.3000	0.7490	0.0004
n-Butano	0.5000	0.0006	0.8330
n-Pentano	0.1000	0.0000	0.1670

Tabla 5.15 Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Aspen Plus para el sistema 2

	Alimentación	Destilado	Fondos
Temperatura (°C)	60.8	22.8	104.5
Presión (bar)	15.1990	15.1990	15.1990
Fracción de vapor	0	0	0
Flujo Molar (kmol/hr)	3600.0000	1440.0000	2160.0000
Flujos Molares (kmol/hr)			
Etano	360.0000	360.0000	0.0000
Propano	1080.0000	1063.9790	16.0210
n-Butano	1800.0000	15.9720	1784.0280
n-Pentano	360.0000	0.0490	359.9510
Fracciones Mol			
Etano	0.1000	0.2500	0.0000
Propano	0.3000	0.7390	0.0070
n-Butano	0.5000	0.0110	0.8260
n-Pentano	0.1000	0.0000	0.1670

Tabla 5.16 Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Aspen Plus para el sistema 2

	Alimentación	Destilado	Fondos
Temperatura (°C)	61.24	22.35	105.7
Presión (bar)	15.19	15.19	15.19
Fracción de vapor	0	0	0
Flujo Molar (kmol/hr)	3600.0000	1439.9892	2159.9892
Flujos Molares (kmol/hr)			
Etano	360.0000	360.0000	2.2504E-07
Propano	1080.0000	1078.9200	1.0692
n-Butano	1800.0000	1.0692	1798.9200
n-Pentano	360.0000	4.1724E-07	360.0000
Fracciones Mol			
Etano	0.1000	0.2500	1.042E-10
Propano	0.3000	0.7493	0.0005
n-Butano	0.5000	0.0007	0.8328
n-Pentano	0.1000	2.898E-10	0.1667

Tabla 5.17 Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Chemsep para el sistema 2

	Alimentación	Destilado	Fondos
Temperatura (°C)	61.24	22.35	105.5
Presión (bar)	15.19	15.19	15.19
Fracción de vapor	0	0	0
Flujo Molar (kmol/hr)	3600.0000	1440.0763	2160.0756
Flujos Molares (kmol/hr)			
Etano	360.0000	360.0000	9.5832E-06
Propano	1080.0000	1074.6000	5.4756
n-Butano	1800.0000	5.4756	1794.6000
n-Pentano	360.0000	0.00068328	360.0000
Fracciones Mol			
Etano	0.1000	0.2500	4.44E-09
Propano	0.3000	0.7462	0.0025
n-Butano	0.5000	0.0038	0.8308
n-Pentano	0.1000	4.75E-07	0.1667

Tabla 5.18 Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Chemsep para el sistema 2

	Destilado	Fondos
	Error %	Error %
Temperatura	1.32	0.57
Flujos Molares		
Etano	0.00	0.00
Propano	1.43	94.79
n-Butano	94.78	0.85
n-Pentano	100.00	0.01
Fracciones Mol		
Etano	0.00	100.00
Propano	1.35	94.49
n-Butano	94.74	0.85
n-Pentano	99.99	0.00

Tabla 5.19 Error entre los dos modelos usando Aspen Plus para el sistema 2

	Destilado	Fondos
	Error %	Error %
Temperatura	0.00	0.19
Flujos Molares		
Etano	0.00	97.65
Propano	0.40	80.47
n-Butano	80.47	0.24
n-Pentano	99.94	0.00
Fracciones Mol		
Etano	0.00	97.65
Propano	0.42	80.47
n-Butano	80.48	0.24
n-Pentano	99.94	0.00

Tabla 5.20 Error entre los dos modelos usando Chemsep para el sistema 2

En este sistema pasa algo similar al sistema 1, los resultados obtenidos con el modelo de equilibrio indican que las corrientes de salida son más puras que las obtenidas con el modelo de no equilibrio.

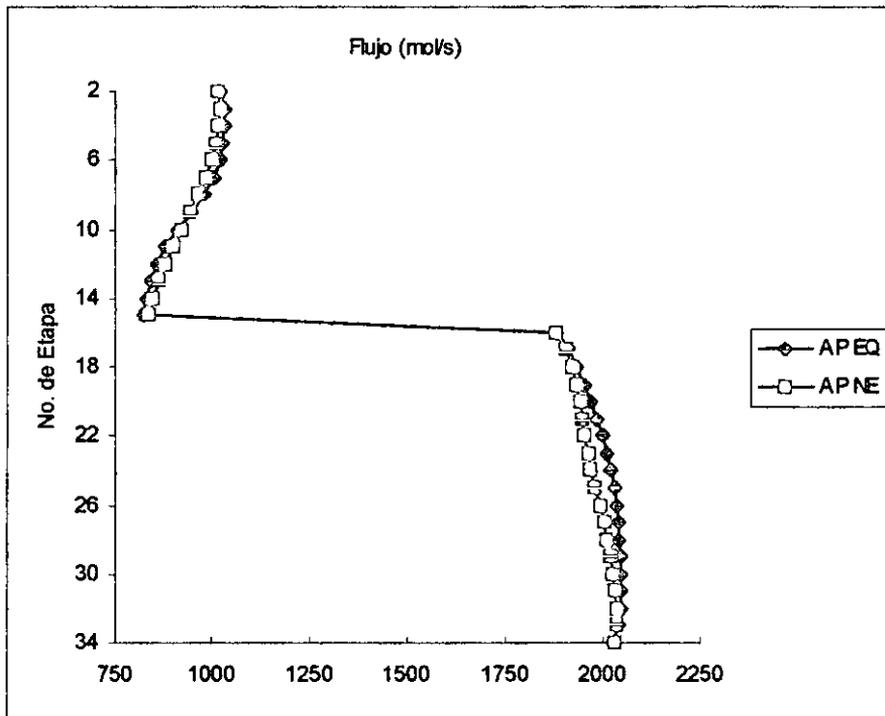


Figura 5.13 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Aspen Plus para el sistema 2

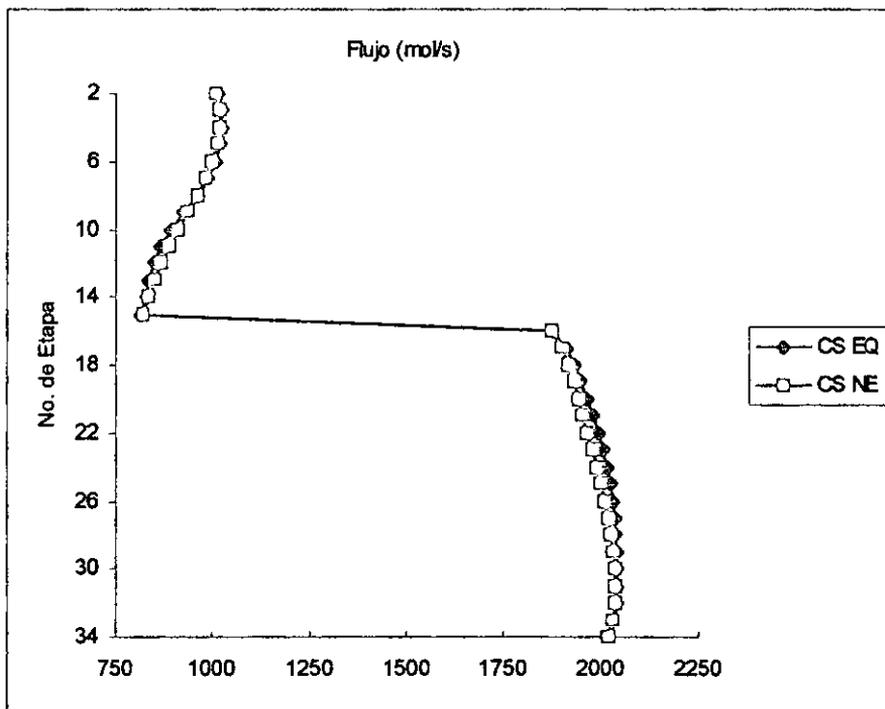


Figura 5.14 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Chemsep para el sistema 2

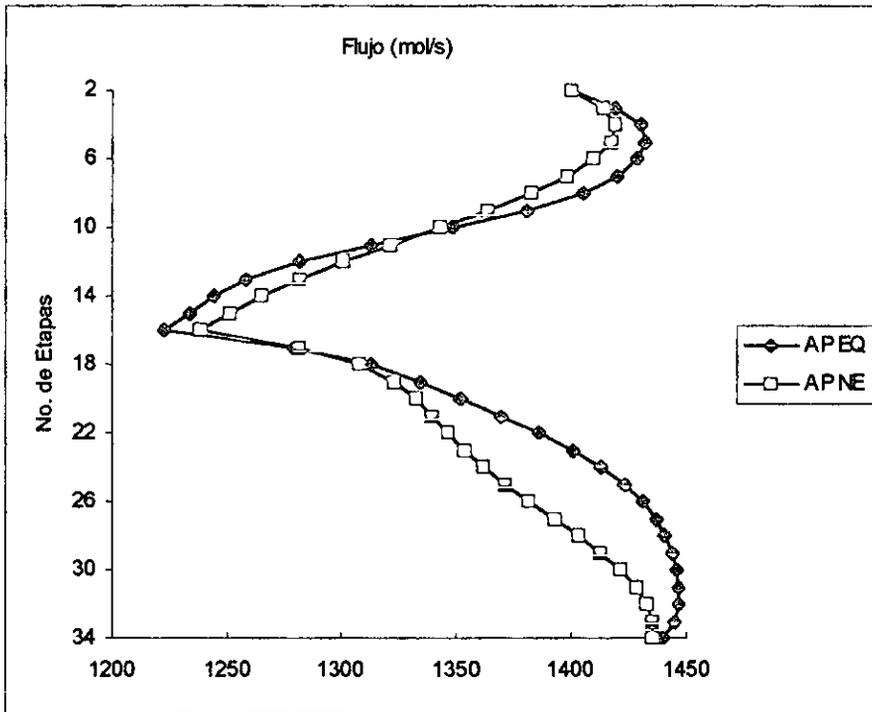


Figura 5.15 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Aspen Plus para el sistema 2

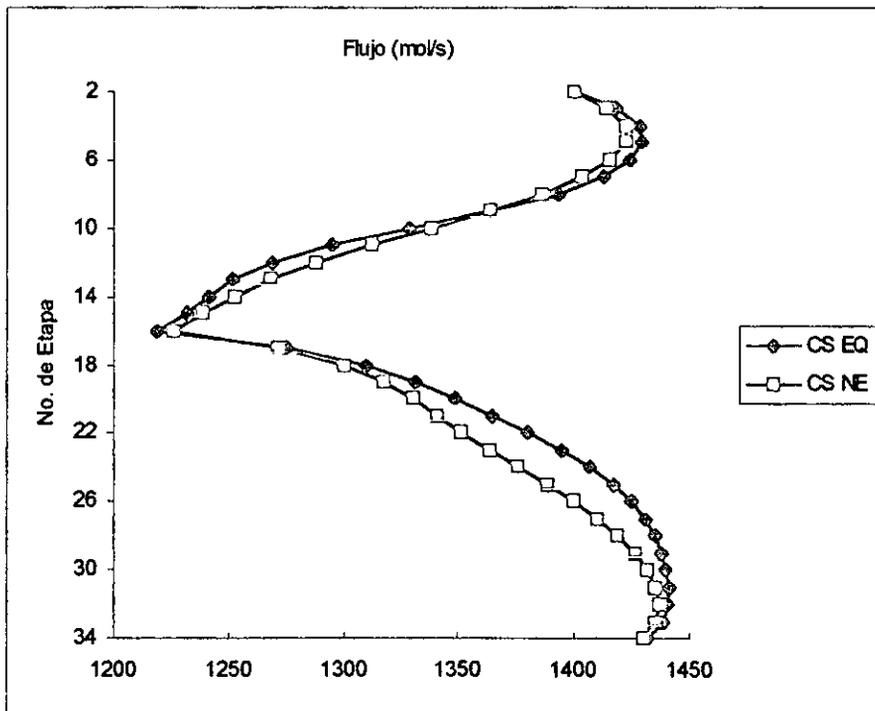


Figura 5.16 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Chemsep para el sistema 2

Etapa	Flujo Líquido	Flujo Líquido	Error
	mol/s	mol/s	%
	EQ	NE	
1	1000.00	1400.00	28.57
2	1018.73	1013.70	0.50
3	1029.85	1018.87	1.08
4	1031.88	1017.15	1.45
5	1028.42	1009.62	1.86
6	1019.88	997.59	2.23
7	1004.65	981.92	2.31
8	980.81	963.36	1.81
9	948.62	942.81	0.62
10	912.96	921.46	0.92
11	881.37	900.64	2.14
12	858.56	881.42	2.59
13	844.29	865.53	2.45
14	833.80	851.43	2.07
15	822.62	838.37	1.88
16	1878.58	1881.89	0.18
17	1912.42	1907.44	0.26
18	1934.18	1923.14	0.57
19	1952.10	1933.02	0.99
20	1969.16	1940.11	1.50
21	1985.52	1946.51	2.00
22	2000.36	1953.51	2.40
23	2012.98	1961.72	2.61
24	2023.09	1971.21	2.63
25	2030.84	1981.64	2.48
26	2036.57	1992.47	2.21
27	2040.69	2003.09	1.88
28	2043.56	2012.89	1.52
29	2045.43	2021.38	1.19
30	2046.43	2028.17	0.90
31	2046.39	2032.93	0.66
32	2044.69	2035.33	0.46
33	2039.71	2035.06	0.23
34	2027.74	2032.09	0.21
35	600.00	600.00	0.00

Tabla 5.21 Comparación entre los flujos de líquido usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2

Etapa	Flujo Líquido		Error %
	mol/s		
	EQ	NE	
1	1000.00	1000.00	0.00
2	1018.12	1013.64	0.44
3	1028.61	1022.42	0.60
4	1029.59	1022.57	0.69
5	1024.24	1015.83	0.83
6	1012.49	1003.43	0.90
7	992.60	985.86	0.68
8	963.71	963.72	0.00
9	928.76	938.47	1.03
10	894.91	912.52	1.93
11	868.85	888.62	2.22
12	852.04	868.58	1.90
13	841.32	852.55	1.32
14	831.96	839.06	0.85
15	819.00	825.70	0.81
16	1875.68	1871.54	0.22
17	1909.73	1900.37	0.49
18	1931.35	1918.04	0.69
19	1948.61	1930.28	0.95
20	1964.78	1940.88	1.23
21	1980.28	1951.80	1.46
22	1994.50	1963.59	1.57
23	2006.77	1976.02	1.56
24	2016.80	1988.39	1.43
25	2024.63	2000.03	1.23
26	2030.54	2010.35	1.00
27	2034.87	2019.25	0.77
28	2037.94	2026.45	0.57
29	2039.98	2031.90	0.40
30	2041.06	2035.49	0.27
31	2040.91	2036.92	0.20
32	2038.65	2035.44	0.16
33	2031.98	2029.77	0.11
34	2016.00	2018.92	0.14
35	600.00	600.00	0.00

Tabla 5.22 Comparación entre los flujos de líquido usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2

Etapa	Flujo Vapor	Flujo Vapor	Error
	mol/s	mol/s	%
	EQ	NE	
1	0.00	0.00	0.00
2	1400.00	1400.00	0.00
3	1418.73	1413.70	0.36
4	1429.85	1418.87	0.77
5	1431.88	1417.15	1.04
6	1428.42	1409.62	1.33
7	1419.88	1397.59	1.59
8	1404.65	1381.92	1.64
9	1380.81	1363.36	1.28
10	1348.62	1342.81	0.43
11	1312.96	1321.46	0.64
12	1281.37	1300.64	1.48
13	1258.56	1281.42	1.78
14	1244.29	1265.53	1.68
15	1233.80	1251.43	1.41
16	1222.59	1238.34	1.27
17	1278.58	1281.89	0.26
18	1312.42	1307.44	0.38
19	1334.18	1323.14	0.83
20	1352.10	1333.02	1.43
21	1369.16	1340.11	2.17
22	1385.52	1346.51	2.90
23	1400.36	1353.51	3.46
24	1412.98	1361.72	3.76
25	1423.09	1371.21	3.78
26	1430.84	1381.64	3.56
27	1436.57	1392.47	3.17
28	1440.69	1403.09	2.68
29	1443.56	1412.89	2.17
30	1445.43	1421.38	1.69
31	1446.43	1428.17	1.28
32	1446.39	1432.93	0.94
33	1444.69	1435.33	0.65
34	1439.71	1435.06	0.32
35	1427.74	1432.09	0.30

Tabla 5.23 Comparación entre los flujos de vapor usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2

Etapa	Flujo Vapor	Flujo Vapor	Error
	mol/s	mol/s	%
	EQ	NE	
1	400.00	400.00	0.00
2	1400.00	1400.00	0.00
3	1418.12	1413.64	0.32
4	1428.61	1422.42	0.43
5	1429.59	1422.57	0.49
6	1424.24	1415.83	0.59
7	1412.49	1403.43	0.65
8	1392.60	1385.86	0.49
9	1363.71	1363.72	0.00
10	1328.76	1338.47	0.72
11	1294.91	1312.52	1.34
12	1268.85	1288.62	1.53
13	1252.04	1268.58	1.30
14	1241.32	1252.55	0.90
15	1231.96	1239.06	0.57
16	1219.00	1225.70	0.55
17	1275.68	1271.54	0.33
18	1309.73	1300.37	0.72
19	1331.35	1318.04	1.01
20	1348.61	1330.28	1.38
21	1364.78	1340.88	1.78
22	1380.28	1351.80	2.11
23	1394.50	1363.59	2.27
24	1406.77	1376.02	2.24
25	1416.80	1388.39	2.05
26	1424.63	1400.03	1.76
27	1430.54	1410.35	1.43
28	1434.87	1419.25	1.10
29	1437.94	1426.45	0.81
30	1439.98	1431.90	0.56
31	1441.06	1435.49	0.39
32	1440.91	1436.92	0.28
33	1438.65	1435.44	0.22
34	1431.98	1429.77	0.15
35	1416.00	1418.92	0.21

Tabla 5.24 Comparación entre los flujos de vapor usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2

Cuando se compran los flujos de líquido y de vapor obtenidos con los dos modelos se puede ver que la diferencia no es mayor del 4%, de manera que se puede decir que los dos modelos proporcionan resultados casi idénticos. Los picos corresponden a la etapa de alimentación, como la alimentación es líquida entonces el flujo de líquido en la etapa de alimentación aumenta, mientras que el flujo de vapor disminuye por la entrada de esa corriente.

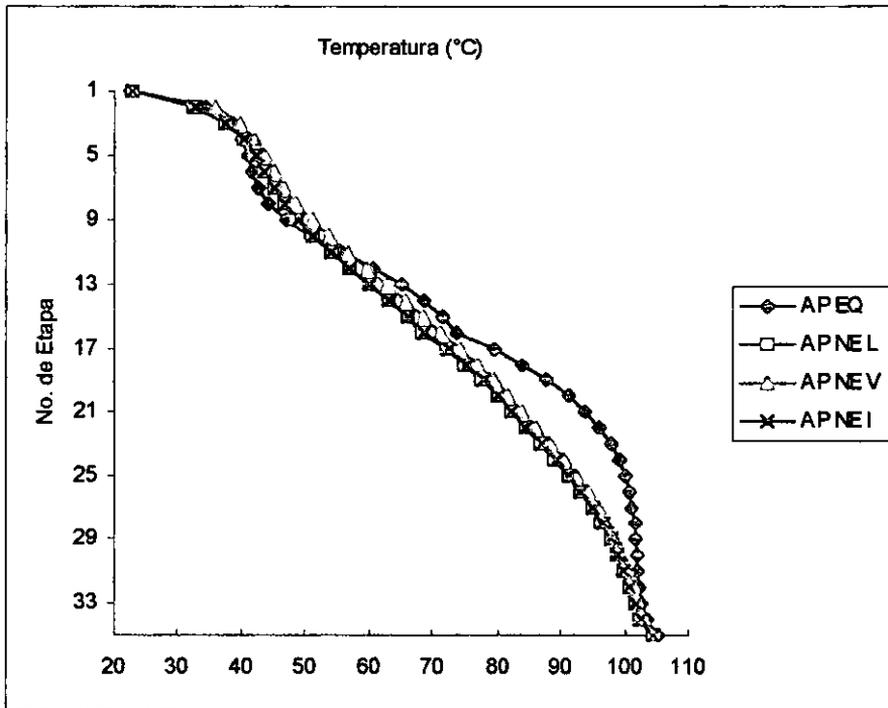


Figura 5.17 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Aspen Plus para el sistema 2

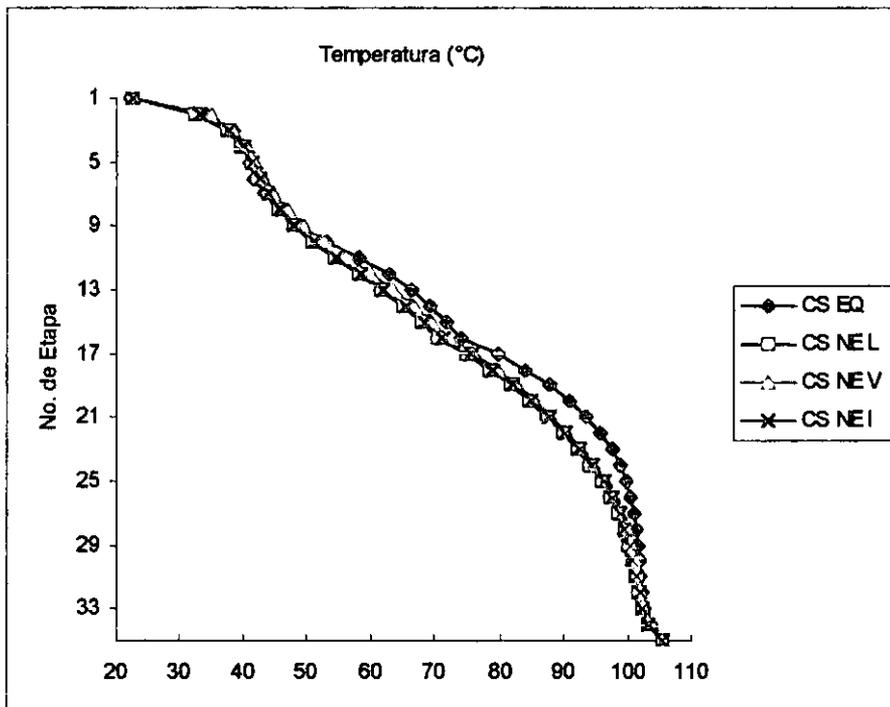


Figura 5.18 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Chemsep para el sistema 2

Las tres temperaturas que son obtenidas con el modelo de no equilibrio, temperatura de la fase líquida, temperatura de la fase vapor y temperatura de la interfase son muy parecidas entre si, además la temperatura de la fase líquida es la que más se aproxima a el valor que tiene la temperatura de la interfase.

En la columna el modelo de equilibrio y el de no equilibrio dan perfiles similares en las primeras 16 etapas, la etapa de alimentación que es la etapa 16 altera el perfil de la temperatura en el modelo de equilibrio, por este motivo el error empieza a crecer hasta que llega a un punto en donde el error empieza a disminuir, y el perfil de temperaturas se empieza a parecer al perfil que hubiera resultado de no existir una alimentación. En cambio el modelo de no equilibrio da un perfil de temperaturas que no es alterado por la alimentación, además a ese perfil tiende el modelo de equilibrio después de que sufrió la alteración por la alimentación.

Etapa	T	T Líquido	T Vapor	T Interfase	Error
	°C	°C	°C	°C	%
	EQ	NE	NE	NE	
1	22.55	22.81	22.81	22.81	1.14
2	34.24	32.30	36.00	32.56	5.14
3	38.60	37.40	39.57	37.54	2.82
4	40.17	40.25	41.81	40.34	0.43
5	40.91	42.07	43.48	42.13	2.90
6	41.58	43.53	45.05	43.58	4.57
7	42.60	45.01	46.76	45.05	5.44
8	44.31	46.70	48.75	46.75	5.23
9	47.04	48.73	51.08	48.79	3.60
10	50.95	51.14	53.75	51.21	0.52
11	55.76	53.90	56.68	53.99	3.27
12	60.72	56.94	59.76	57.03	6.48
13	65.11	60.08	62.87	60.18	8.19
14	68.60	63.18	65.78	63.28	8.41
15	71.37	66.10	68.57	66.19	7.82
16	73.87	68.47	71.26	68.69	7.55
17	79.58	72.18	74.35	72.34	10.00
18	84.03	75.10	76.97	75.23	11.70
19	87.83	77.62	79.36	77.73	12.99
20	91.11	79.97	81.65	80.08	13.77
21	93.88	82.29	83.93	82.39	13.94
22	96.11	84.60	86.19	84.70	13.46
23	97.84	86.89	88.41	87.00	12.46
24	99.14	89.12	90.53	89.23	11.11
25	100.09	91.24	92.50	91.34	9.58
26	100.77	93.19	94.30	93.28	8.03
27	101.25	94.93	95.89	95.01	6.56
28	101.59	96.46	97.28	96.53	5.24
29	101.84	97.77	98.47	97.84	4.09
30	102.02	98.90	99.52	98.95	3.10
31	102.19	99.87	100.45	99.92	2.27
32	102.40	100.75	101.33	100.79	1.60
33	102.76	101.59	102.24	101.63	1.11
34	103.50	102.50	103.28	102.54	0.93
35	105.13	104.55	104.55	104.55	0.56

Tabla 5.25 Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2

Etapa	T	T Líquido	T Vapor	T Interfase	Error
	°C	°C	°C	°C	%
	EQ	NE	NE	NE	
1	22.34	22.42	22.42	22.42	0.35
2	34.01	32.45	34.81	33.10	2.76
3	38.40	37.39	38.60	37.73	1.78
4	40.02	39.80	40.56	39.97	0.12
5	40.87	41.22	41.89	41.32	1.09
6	41.75	42.42	43.20	42.50	1.77
7	43.12	43.79	44.81	43.89	1.77
8	45.35	45.60	46.89	45.72	0.80
9	48.75	47.97	49.55	48.13	1.28
10	53.21	50.95	52.75	51.15	4.03
11	58.17	54.42	56.32	54.66	6.42
12	62.79	58.14	59.99	58.40	7.52
13	66.55	61.80	63.51	62.05	7.25
14	69.43	65.16	66.71	65.39	6.18
15	71.79	68.15	69.61	68.35	5.03
16	74.21	70.64	72.36	71.25	4.15
17	79.77	75.11	76.43	75.56	5.58
18	84.07	78.63	79.76	78.99	6.43
19	87.71	81.70	82.73	82.02	6.93
20	90.87	84.57	85.54	84.87	7.07
21	93.56	87.30	88.20	87.59	6.83
22	95.77	89.85	90.67	90.12	6.27
23	97.52	92.18	92.90	92.43	5.50
24	98.85	94.23	94.85	94.45	4.65
25	99.84	95.98	96.49	96.17	3.81
26	100.56	97.42	97.84	97.58	3.05
27	101.08	98.60	98.93	98.72	2.38
28	101.45	99.53	99.79	99.63	1.82
29	101.72	100.26	100.48	100.35	1.37
30	101.92	100.86	101.04	100.92	0.99
31	102.11	101.37	101.54	101.42	0.68
32	102.34	101.86	102.08	101.92	0.42
33	102.76	102.46	102.77	102.52	0.23
34	103.65	103.34	103.82	103.44	0.20
35	105.65	105.49	105.49	105.49	0.16

Tabla 5.26 Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2

Etapa	Fraccion Mol							
	Líquido							
	etano	propano	n-butano	n-pentano	etano	propano	n-butano	n-pentano
	EQ	EQ	EQ	EQ	NE	NE	NE	NE
1	0.25000	0.74942	5.794E-04	2.909E-09	0.25000	0.73887	0.01109	3.435E-05
2	0.11034	0.88788	0.00178	1.869E-08	0.14334	0.83721	0.01938	7.139E-05
3	0.06307	0.93293	0.00399	8.039E-08	0.08846	0.88115	0.03026	1.329E-04
4	0.04781	0.94405	0.00814	3.172E-07	0.06198	0.89329	0.04450	2.348E-04
5	0.04287	0.94124	0.01589	1.217E-06	0.04949	0.88699	0.06312	4.031E-04
6	0.04110	0.92868	0.03021	4.586E-06	0.04354	0.86855	0.08722	6.792E-04
7	0.04019	0.90392	0.05588	1.690E-05	0.04055	0.84040	0.11792	0.00113
8	0.03929	0.86119	0.09946	5.998E-05	0.03883	0.80329	0.15603	0.00185
9	0.03810	0.79470	0.16699	2.005E-04	0.03760	0.75763	0.20179	0.00298
10	0.03654	0.70457	0.25827	6.140E-04	0.03652	0.70436	0.25438	0.00474
11	0.03478	0.60194	0.36159	0.00169	0.03547	0.64552	0.31164	0.00737
12	0.03311	0.50482	0.45791	0.00416	0.03442	0.58422	0.37013	0.01123
13	0.03172	0.42660	0.53237	0.00932	0.03340	0.52424	0.42563	0.01673
14	0.03067	0.37024	0.57964	0.01945	0.03242	0.46882	0.47437	0.02438
15	0.02992	0.33166	0.59983	0.03859	0.03155	0.42029	0.51336	0.03481
16	0.02939	0.30440	0.59270	0.07351	0.04019	0.36259	0.52670	0.07052
17	0.01198	0.27178	0.64118	0.07506	0.02263	0.35719	0.54905	0.07114
18	0.00470	0.22894	0.68961	0.07675	0.01242	0.34235	0.57326	0.07197
19	0.00179	0.18416	0.73568	0.07837	0.00668	0.32078	0.59957	0.07297
20	6.680E-04	0.14259	0.77697	0.07977	0.00353	0.29452	0.62787	0.07408
21	2.441E-04	0.10698	0.81187	0.08091	0.00184	0.26520	0.65771	0.07526
22	8.781E-05	0.07826	0.83987	0.08179	9.422E-04	0.23424	0.68836	0.07646
23	3.122E-05	0.05613	0.86140	0.08244	4.754E-04	0.20295	0.71892	0.07765
24	1.100E-05	0.03965	0.87742	0.08291	2.363E-04	0.17254	0.74841	0.07881
25	3.853E-06	0.02770	0.88904	0.08326	1.158E-04	0.14399	0.77595	0.07994
26	1.343E-06	0.01918	0.89730	0.08352	5.605E-05	0.11806	0.80081	0.08108

Tabla 5.27 Comparación entre las fracciones mol del líquido usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2

27	4.666E-07	0.01318	0.90308	0.08374	2.680E-05	0.09519	0.82250	0.08228
28	1.617E-07	0.00900	0.90701	0.08399	1.268E-05	0.07555	0.84076	0.08367
29	5.595E-08	0.00611	0.90950	0.08439	5.947E-06	0.05907	0.85547	0.08545
30	1.933E-08	0.00411	0.91071	0.08519	2.767E-06	0.04550	0.86656	0.08794
31	6.668E-09	0.00273	0.91033	0.08694	1.278E-06	0.03450	0.87388	0.09162
32	2.292E-09	0.00179	0.90730	0.09091	5.853E-07	0.02571	0.87703	0.09726
33	7.818E-10	0.00114	0.89887	0.09999	2.654E-07	0.01875	0.87518	0.10607
34	2.606E-10	6.945E-04	0.87867	0.12064	1.182E-07	0.01329	0.86679	0.11992
35	8.095E-11	3.862E-04	0.83295	0.16667	3.676E-08	0.00742	0.82594	0.16664

Etapa	Error %	Error %	Error %	Error %	Etapa	Error %	Error %	Error %	Error %
	etano	propano	n-butano	n-pentano		etano	propano	n-butano	n-pentano
1	0.00	1.43	94.78	99.99	19	73.16	42.59	22.70	7.40
2	23.02	6.05	90.82	99.97	20	81.09	51.59	23.75	7.68
3	28.70	5.88	86.80	99.94	21	86.73	59.66	23.44	7.51
4	22.85	5.68	81.72	99.86	22	90.68	66.59	22.01	6.97
5	13.38	6.12	74.82	99.70	23	93.43	72.34	19.82	6.16
6	5.61	6.92	65.36	99.32	24	95.34	77.02	17.24	5.20
7	0.90	7.56	52.61	98.50	25	96.67	80.76	14.57	4.15
8	1.20	7.21	36.26	96.76	26	97.60	83.76	12.05	3.01
9	1.34	4.89	17.24	93.28	27	98.26	86.15	9.80	1.78
10	0.06	0.03	1.53	87.04	28	98.72	88.09	7.88	0.38
11	1.93	6.75	16.03	77.10	29	99.06	89.66	6.32	1.25
12	3.80	13.59	23.72	63.00	30	99.30	90.97	5.09	3.13
13	5.04	18.63	25.08	44.33	31	99.48	92.07	4.17	5.11
14	5.41	21.03	22.19	20.23	32	99.61	93.04	3.45	6.53
15	5.14	21.09	16.84	10.87	33	99.71	93.91	2.71	5.73
16	26.89	16.05	12.53	4.25	34	99.78	94.77	1.37	0.60
17	47.08	23.91	16.78	5.52	35	99.78	94.79	0.85	0.01
18	62.14	33.13	20.30	6.64					

Tabla 5.27 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del líquido usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2

Etapa	Fraccion Mol							
	Líquido							
	etano	propano	n-butano	n-pentano	etano	propano	n-butano	n-pentano
	EQ	EQ	EQ	EQ	NE	NE	NE	NE
1	0.25000	0.74926	7.425E-04	2.898E-10	0.25000	0.74620	0.00380	4.745E-07
2	0.11071	0.88698	0.00231	2.303E-09	0.13050	0.86123	0.00827	1.529E-06
3	0.06339	0.93136	0.00525	1.211E-08	0.07777	0.90729	0.01494	4.027E-06
4	0.04805	0.94115	0.01081	5.863E-08	0.05563	0.91942	0.02494	9.915E-06
5	0.04303	0.93571	0.02126	2.758E-07	0.04641	0.91372	0.03985	2.370E-05
6	0.04118	0.91829	0.04053	1.267E-06	0.04244	0.89574	0.06176	5.562E-05
7	0.04014	0.88532	0.07453	5.622E-06	0.04050	0.86625	0.09312	1.283E-04
8	0.03908	0.83074	0.13016	2.358E-05	0.03926	0.82426	0.13618	2.900E-04
9	0.03773	0.75130	0.21088	9.080E-05	0.03817	0.76919	0.19200	6.381E-04
10	0.03611	0.65322	0.31037	3.126E-04	0.03702	0.70254	0.25908	0.00136
11	0.03444	0.55271	0.41190	9.519E-04	0.03580	0.62887	0.33256	0.00277
12	0.03297	0.46626	0.49818	0.00259	0.03455	0.55492	0.40511	0.00541
13	0.03180	0.40131	0.56041	0.00648	0.03338	0.48725	0.46925	0.01012
14	0.03093	0.35638	0.59755	0.01515	0.03233	0.42999	0.51950	0.01819
15	0.03025	0.32579	0.61032	0.03364	0.03143	0.38418	0.55283	0.03155
16	0.02965	0.30322	0.59623	0.07090	0.03580	0.34084	0.55396	0.06940
17	0.01218	0.27266	0.64311	0.07205	0.01790	0.32637	0.58562	0.07011
18	0.00483	0.23192	0.68987	0.07339	0.00871	0.30076	0.61946	0.07107
19	0.00186	0.18884	0.73461	0.07469	0.00415	0.26855	0.65513	0.07218
20	7.030E-04	0.14828	0.77517	0.07585	0.00194	0.23312	0.69162	0.07332
21	2.605E-04	0.11297	0.80997	0.07680	8.910E-04	0.19716	0.72753	0.07442
22	9.513E-05	0.08397	0.83839	0.07754	4.028E-04	0.16276	0.76143	0.07541
23	3.434E-05	0.06121	0.86066	0.07810	1.796E-04	0.13143	0.79211	0.07628
24	1.229E-05	0.04394	0.87753	0.07851	7.907E-05	0.10407	0.81885	0.07700
25	4.369E-06	0.03118	0.89001	0.07881	3.444E-05	0.08099	0.84136	0.07761
26	1.546E-06	0.02191	0.89904	0.07904	1.481E-05	0.06204	0.85980	0.07814

Tabla 5.28 Comparación entre las fracciones mol del líquido usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2

27	5.451E-07	0.01529	0.90548	0.07923	6.330E-06	0.04692	0.87444	0.07863
28	1.917E-07	0.01059	0.90997	0.07944	2.692E-06	0.03508	0.88572	0.07920
29	6.731E-08	0.00728	0.91295	0.07977	1.140E-06	0.02594	0.89405	0.08001
30	2.359E-08	0.00497	0.91458	0.08045	4.808E-07	0.01896	0.89966	0.08137
31	8.253E-09	0.00335	0.91462	0.08203	2.021E-07	0.01369	0.90241	0.08390
32	2.876E-09	0.00222	0.91195	0.08583	8.452E-08	0.00972	0.90151	0.08877
33	9.929E-10	0.00143	0.90358	0.09499	3.502E-08	0.00674	0.89502	0.09824
34	3.341E-10	8.814E-04	0.88235	0.11677	1.423E-08	0.00451	0.87893	0.11655
35	1.042E-10	4.950E-04	0.83284	0.16667	4.437E-09	0.00254	0.83080	0.16667

Etapa	Error % etano	Error % propano	Error % n-butano	Error % n-pentano	Etapa	Error % etano	Error % propano	Error % n-butano	Error % n-pentano
1	0.00	0.41	80.47	99.94	19	55.12	29.68	12.13	3.49
2	15.16	2.99	72.05	99.85	20	63.76	36.39	12.08	3.45
3	18.49	2.65	64.86	99.70	21	70.76	42.70	11.33	3.20
4	13.63	2.36	56.67	99.41	22	76.38	48.41	10.11	2.83
5	7.29	2.41	46.65	98.84	23	80.88	53.43	8.65	2.39
6	2.97	2.52	34.38	97.72	24	84.46	57.78	7.17	1.96
7	0.90	2.20	19.96	95.62	25	87.31	61.51	5.78	1.55
8	0.46	0.79	4.42	91.87	26	89.56	64.68	4.56	1.16
9	1.16	2.33	9.83	85.77	27	91.39	67.42	3.55	0.76
10	2.48	7.02	19.80	76.96	28	92.88	69.81	2.74	0.30
11	3.79	12.11	23.86	65.63	29	94.09	71.92	2.11	0.30
12	4.59	15.98	22.97	52.06	30	95.09	73.81	1.66	1.13
13	4.72	17.64	19.43	36.01	31	95.92	75.54	1.35	2.23
14	4.34	17.12	15.03	16.71	32	96.60	77.15	1.16	3.31
15	3.75	15.20	10.40	6.63	33	97.17	78.75	0.96	3.31
16	17.19	11.04	7.63	2.16	34	97.65	80.46	0.39	0.18
17	31.98	16.46	9.82	2.78	35	97.65	80.48	0.25	0.00
18	44.60	22.89	11.37	3.26					

Tabla 5.28 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del líquido usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2

Etapa	Fraccion Mol Vapor etano EQ	Fraccion Mol Vapor propano EQ	Fraccion Mol Vapor n-butano EQ	Fraccion Mol Vapor n-pentano EQ	Fraccion Mol Vapor etano NE	Fraccion Mol Vapor propano NE	Fraccion Mol Vapor n-butano NE	Fraccion Mol Vapor n-pentano NE
1	0.49156	0.50830	1.414E-04	3.121E-10	0.49378	0.50350	0.00272	3.700E-06
2	0.25000	0.74942	5.794E-04	2.909E-09	0.25000	0.73887	0.01109	3.435E-05
3	0.14972	0.84884	0.00144	1.424E-08	0.17352	0.80938	0.01703	6.091E-05
4	0.11537	0.88160	0.00304	5.872E-08	0.13400	0.84104	0.02485	1.051E-04
5	0.10429	0.88968	0.00603	2.294E-07	0.11505	0.84970	0.03507	1.782E-04
6	0.10087	0.88753	0.01160	8.770E-07	0.10639	0.84496	0.04836	2.984E-04
7	0.09995	0.87818	0.02186	3.295E-06	0.10263	0.83144	0.06543	4.947E-04
8	0.09994	0.85992	0.04013	1.209E-05	0.10118	0.81102	0.08700	8.116E-04
9	0.10033	0.82881	0.07081	4.260E-05	0.10078	0.78439	0.11351	0.00132
10	0.10095	0.78127	0.11764	1.410E-04	0.10087	0.75204	0.14498	0.00211
11	0.10157	0.71824	0.17976	4.269E-04	0.10114	0.71481	0.18074	0.00331
12	0.10197	0.64797	0.24890	0.00116	0.10145	0.67423	0.21921	0.00511
13	0.10204	0.58256	0.31256	0.00284	0.10171	0.63250	0.25805	0.00774
14	0.10189	0.53037	0.36142	0.00632	0.10186	0.59208	0.29460	0.01146
15	0.10178	0.49317	0.39191	0.01314	0.10197	0.55514	0.32629	0.01660
16	0.10192	0.46834	0.40378	0.02596	0.10210	0.52319	0.35113	0.02357
17	0.04318	0.44706	0.47997	0.02980	0.05900	0.52884	0.38664	0.02552
18	0.01745	0.39586	0.55351	0.03318	0.03302	0.51770	0.42198	0.02731
19	0.00682	0.33172	0.62515	0.03632	0.01805	0.49423	0.45868	0.02904
20	0.00259	0.26571	0.69252	0.03918	0.00969	0.46183	0.49768	0.03081
21	9.608E-04	0.20491	0.75244	0.04169	0.00511	0.42306	0.53918	0.03264
22	3.497E-04	0.15314	0.80274	0.04377	0.00266	0.38006	0.58274	0.03454
23	1.254E-04	0.11162	0.84284	0.04542	0.00136	0.33478	0.62737	0.03648
24	4.448E-05	0.07980	0.87349	0.04667	6.848E-04	0.28911	0.67176	0.03844
25	1.564E-05	0.05621	0.89617	0.04760	3.397E-04	0.24479	0.71449	0.04038
26	5.469E-06	0.03915	0.91256	0.04828	1.661E-04	0.20330	0.75424	0.04229

Tabla 5.29 Comparación entre las fracciones mol del vapor usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2

27	1.904E-06	0.02702	0.92418	0.04879	8.019E-05	0.16574	0.78998	0.04421
28	6.608E-07	0.01851	0.93229	0.04920	3.825E-05	0.13273	0.82103	0.04620
29	2.289E-07	0.01258	0.93779	0.04963	1.805E-05	0.10449	0.84706	0.04844
30	7.915E-08	0.00848	0.94128	0.05024	8.442E-06	0.08087	0.86794	0.05118
31	2.732E-08	0.00565	0.94296	0.05139	3.913E-06	0.06150	0.88363	0.05487
32	9.400E-09	0.00371	0.94243	0.05386	1.797E-06	0.04584	0.89395	0.06020
33	3.211E-09	0.00237	0.93818	0.05945	8.146E-07	0.03336	0.89839	0.06826
34	1.074E-09	0.00146	0.92634	0.07221	3.609E-07	0.02349	0.89577	0.08074
35	3.361E-10	8.241E-04	0.89788	0.10129	1.523E-07	0.01575	0.88391	0.10034

Etapa	Error % etano	Error % propano	Error % n-butano	Error % n-pentano	Etapa	Error % etano	Error % propano	Error % n-butano	Error % n-pentano
1	0.45	0.95	94.80	99.99	19	62.24	32.88	36.29	25.06
2	0.00	1.43	94.78	99.99	20	73.27	42.47	39.15	27.19
3	13.72	4.88	91.55	99.98	21	81.21	51.57	39.55	27.73
4	13.91	4.82	87.77	99.94	22	86.84	59.71	37.75	26.74
5	9.35	4.70	82.82	99.87	23	90.78	66.66	34.34	24.49
6	5.19	5.04	76.00	99.71	24	93.51	72.40	30.03	21.41
7	2.61	5.62	66.59	99.33	25	95.40	77.04	25.43	17.88
8	1.23	6.03	53.87	98.51	26	96.71	80.74	20.99	14.16
9	0.45	5.66	37.61	96.76	27	97.63	83.70	16.99	10.37
10	0.08	3.89	18.86	93.30	28	98.27	86.06	13.55	6.50
11	0.43	0.48	0.54	87.12	29	98.73	87.96	10.71	2.46
12	0.51	3.89	13.54	77.30	30	99.06	89.51	8.45	1.85
13	0.32	7.90	21.12	63.36	31	99.30	90.81	6.72	6.36
14	0.03	10.42	22.68	44.82	32	99.48	91.91	5.42	10.54
15	0.19	11.16	20.11	20.82	33	99.61	92.89	4.43	12.90
16	0.18	10.49	15.00	10.13	34	99.70	93.80	3.41	10.57
17	26.83	15.46	24.14	16.75	35	99.78	94.77	1.58	0.95
18	47.14	23.54	31.17	21.52					

Tabla 5.29 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del vapor usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 2

Etapa	Fraccion Mol							
	Vapor							
	etano	propano	n-butano	n-pentano	etano	propano	n-butano	n-pentano
	EQ	EQ	EQ	EQ	NE	NE	NE	NE
1	0.49040	0.50942	1.782E-04	2.532E-11	0.49103	0.50805	9.141E-04	4.153E-08
2	0.25000	0.74926	7.425E-04	2.898E-10	0.25000	0.74620	0.00380	4.745E-07
3	0.15000	0.84813	0.00187	1.735E-09	0.16431	0.82868	0.00701	1.231E-06
4	0.11564	0.88037	0.00399	8.799E-09	0.12620	0.86199	0.01181	3.028E-06
5	0.10455	0.88746	0.00799	4.231E-08	0.11028	0.87071	0.01900	7.261E-06
6	0.10116	0.88335	0.01550	1.984E-07	0.10393	0.86639	0.02966	1.714E-05
7	0.10031	0.87042	0.02926	9.082E-07	0.10160	0.85312	0.04524	3.990E-05
8	0.10042	0.84624	0.05334	4.007E-06	0.10097	0.83160	0.06734	9.143E-05
9	0.10095	0.80684	0.09220	1.666E-05	0.10108	0.80137	0.09735	2.051E-04
10	0.10163	0.75068	0.14762	6.347E-05	0.10148	0.76232	0.13576	4.475E-04
11	0.10218	0.68288	0.21472	2.160E-04	0.10193	0.71584	0.18128	9.433E-04
12	0.10240	0.61467	0.28228	6.518E-04	0.10229	0.66529	0.23051	0.00191
13	0.10231	0.55667	0.33926	0.00177	0.10249	0.61523	0.27858	0.00370
14	0.10211	0.51343	0.38006	0.00439	0.10255	0.56994	0.32061	0.00689
15	0.10206	0.48394	0.40378	0.01023	0.10260	0.53207	0.35302	0.01232
16	0.10236	0.46474	0.41029	0.02260	0.10276	0.50232	0.37366	0.02126
17	0.04359	0.44560	0.48495	0.02586	0.05270	0.50047	0.42332	0.02350
18	0.01776	0.39734	0.55620	0.02871	0.02617	0.47578	0.47250	0.02555
19	0.00700	0.33621	0.62543	0.03135	0.01268	0.43651	0.52325	0.02755
20	0.00269	0.27263	0.69090	0.03377	0.00602	0.38852	0.57590	0.02956
21	0.00101	0.21325	0.74981	0.03592	0.00281	0.33630	0.62934	0.03155
22	3.737E-04	0.16186	0.80003	0.03774	0.00129	0.28355	0.68170	0.03347
23	1.361E-04	0.11989	0.84078	0.03920	5.800E-04	0.23326	0.73090	0.03526
24	4.899E-05	0.08710	0.87252	0.04033	2.579E-04	0.18764	0.77524	0.03686
25	1.749E-05	0.06234	0.89646	0.04118	1.132E-04	0.14795	0.81369	0.03825
26	6.209E-06	0.04410	0.91408	0.04181	4.920E-05	0.11462	0.84589	0.03945

Tabla 5.30 Comparación entre las fracciones mol del vapor usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2

27	2.194E-06	0.03090	0.92681	0.04229	2.111E-05	0.08736	0.87215	0.04047
28	7.730E-07	0.02147	0.93586	0.04267	9.004E-06	0.06569	0.89289	0.04142
29	2.717E-07	0.01480	0.94216	0.04304	3.822E-06	0.04877	0.90882	0.04241
30	9.532E-08	0.01011	0.94633	0.04356	1.615E-06	0.03575	0.92056	0.04369
31	3.337E-08	0.00683	0.94862	0.04455	6.799E-07	0.02583	0.92844	0.04572
32	1.165E-08	0.00454	0.94867	0.04679	2.846E-07	0.01834	0.93231	0.04935
33	4.032E-09	0.00294	0.94494	0.05212	1.180E-07	0.01272	0.93107	0.05622
34	1.365E-09	0.00182	0.93321	0.06496	4.786E-08	0.00850	0.92197	0.06953
35	4.316E-10	0.00105	0.90333	0.09563	1.837E-08	0.00535	0.89929	0.09537

Etapa	Error % etano	Error % propano	Error % n-butano	Error % n-pentano	Etapa	Error % etano	Error % propano	Error % n-butano	Error % n-pentano
1	0.13	0.27	80.50	99.94	19	44.77	22.98	19.53	13.77
2	0.00	0.41	80.47	99.94	20	55.31	29.83	19.97	14.27
3	8.71	2.35	73.32	99.86	21	63.96	36.59	19.14	13.87
4	8.37	2.13	66.23	99.71	22	70.95	42.92	17.36	12.74
5	5.19	1.92	57.94	99.42	23	76.54	48.60	15.03	11.17
6	2.67	1.96	47.76	98.84	24	81.00	53.58	12.55	9.40
7	1.26	2.03	35.33	97.72	25	84.55	57.86	10.17	7.65
8	0.55	1.76	20.79	95.62	26	87.38	61.53	8.06	6.00
9	0.13	0.68	5.30	91.87	27	89.61	64.63	6.27	4.48
10	0.15	1.53	8.74	85.82	28	91.42	67.31	4.81	3.02
11	0.24	4.60	18.45	77.10	29	92.89	69.65	3.67	1.49
12	0.11	7.61	22.46	65.87	30	94.10	71.71	2.80	0.31
13	0.18	9.52	21.78	52.35	31	95.09	73.57	2.17	2.56
14	0.43	9.92	18.54	36.28	32	95.91	75.27	1.75	5.17
15	0.53	9.05	14.38	16.94	33	96.58	76.89	1.49	7.28
16	0.39	7.48	9.80	6.35	34	97.15	78.54	1.22	6.57
17	17.28	10.96	14.56	10.01	35	97.65	80.45	0.45	0.27
18	32.14	16.49	17.71	12.35					

Tabla 5.30 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del vapor usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 2

Al igual que en el sistema 1 las composiciones del líquido y del vapor varían mucho de un sistema a otro, la variación provoca que los flujos de las corrientes de salida sean distintos y únicamente el perfil de composiciones tiene una influencia directa en las corrientes de salida, ya que los demás valores que son flujo y temperaturas varía pero no de manera considerable para alterar el comportamiento de la columna.

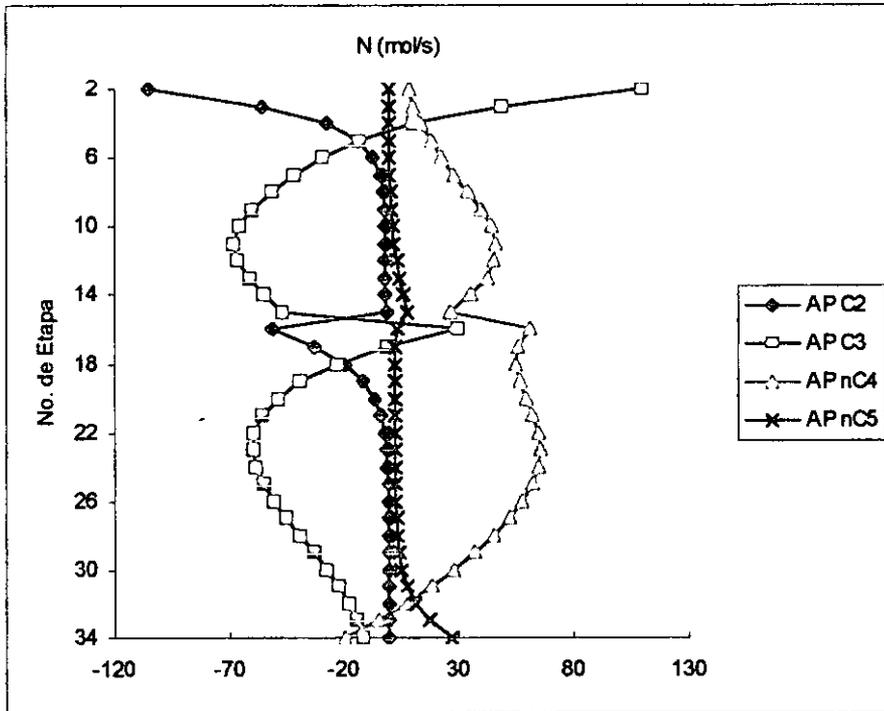


Figura 5.23 Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Aspen Plus para el sistema 2

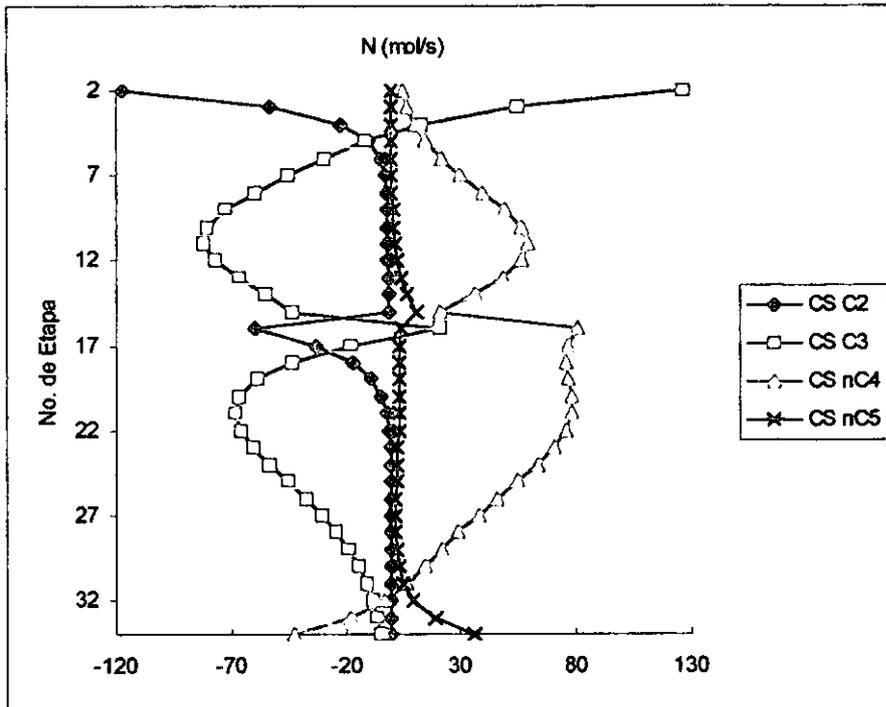


Figura 5.24 Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Chemsep para el sistema 2

El propano se transfiere del líquido al vapor en las etapas 5 a la 15, en las etapas 2 a 4 el propano se empieza a transferir de una corriente de vapor que ya esta enriquecida con propano hacia el líquido con el objeto de que el etano se transmita del líquido hacia el vapor.

El n-butano tiene el efecto contrario, en las etapas superiores a la de alimentación se transfiere de la fase vapor a la fase líquida, en las etapas inferiores a la de alimentación esa fase líquida que esta enriquecida con n-butano cae y la transferencia entonces se da de la fase líquida a la fase vapor.

Sistema 3

Operación	Absorción
Componentes	metano etano propano n-butano n-pentano n-tridecano
K de equilibrio	EOS Peng Robinson
No. de Etapas	12

Alimentación 1	
Etapa de Alimentación	1
Temperatura (K)	305.2
Presión (atm)	4
Flujos (kmol/s)	
n-butano	0.001104
n-pentano	0.002760
n-tridecano	0.05134
Alimentación 2	
Etapa de Alimentación	12
Temperatura (K)	300
Presión (atm)	4
Flujos (kmol/s)	
metano	0.01430
etano	0.007850
propano	0.012
n-butano	0.008450
n-pentano	0.0074
Columna	
Tipo de Columna	Columna de Platos de Malla
Diámetro de la columna (m)	1.5
Presión etapa 1 (atm)	4

	Alim. 1	Alim. 2	Gas	Líquido
Temperatura (°C)	32.0	26.9	47.5	49.0
Presión (bar)	4.0530	4.0530	4.0530	4.0530
Fracción de vapor	0	0.97	1	0
Flujo Molar (kmol/hr)	198.7340	180.0000	119.4230	259.3120
Flujos Molares (kmol/hr)				
Metano	0.0000	51.4800	49.9400	1.5400
Etano	0.0000	28.2600	24.0280	4.2320
Propano	0.0000	43.2000	25.5950	17.6050
n-Butano	3.9740	30.4200	3.9150	30.4790
n-Pentano	9.9360	26.6400	2.2270	34.3490
n-Tridecano	184.8240	0.0000	13.7190	171.1050
Fracciones Mol				
Metano	0.0000	0.2860	0.4180	0.0060
Etano	0.0000	0.1570	0.2010	0.0160
Propano	0.0000	0.2400	0.2140	0.0680
n-Butano	0.0200	0.1690	0.0330	0.1180
n-Pentano	0.0500	0.1480	0.0190	0.1320
n-Tridecano	0.9300	0.0000	0.1150	0.6600

Tabla 5.31 Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Aspen Plus para el sistema 3

	Alim. 1	Alim. 2	Gas	Líquido
Temperatura (°C)	32.0	26.9	36.4	49.2
Presión (bar)	4.0530	4.0530	4.0530	4.0530
Fracción de vapor	0	0.97	1	0
Flujo Molar (kmol/hr)	198.7340	180.0000	95.4850	283.2490
Flujos Molares (kmol/hr)				
Metano	0.0000	51.4800	49.4240	2.0560
Etano	0.0000	28.2600	23.1970	5.0630
Propano	0.0000	43.2000	19.3980	23.8020
n-Butano	3.9740	30.4200	2.2580	32.1360
n-Pentano	9.9360	26.6400	1.2030	35.3730
n-Tridecano	184.8240	0.0000	0.0050	184.8190
Fracciones Mol				
Metano	0.0000	0.2860	0.5180	0.0070
Etano	0.0000	0.1570	0.2430	0.0180
Propano	0.0000	0.2400	0.2030	0.0840
n-Butano	0.0200	0.1690	0.0240	0.1130
n-Pentano	0.0500	0.1480	0.0130	0.1250
n-Tridecano	0.9300	0.0000	0.0001	0.6520

Tabla 5.32 Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Aspen Plus para el sistema

	Alim. 1	Alim. 2	Gas	Líquido
Temperatura (°C)	32.05	26.85	36.82	47.81
Presión (bar)	4.0530	4.0530	4.0530	4.0530
Fracción de vapor	0	0.9558	1	0
Flujo Molar (kmol/hr)	198.7100	180.0000	97.9394	280.7770
Flujos Molares (kmol/hr)				
Metano	0.0000	51.4800	49.7100	1.7710
Etano	0.0000	28.2600	23.7000	4.5560
Propano	0.0000	43.2000	21.3500	21.8500
n-Butano	3.9740	30.4200	1.8570	32.5400
n-Pentano	9.9360	26.6400	1.3170	35.2600
n-Tridecano	184.8000	0.0000	0.0054	184.8000
Fracciones Mol				
Metano	0.0000	0.2860	0.5075	0.0063
Etano	0.0000	0.1570	0.2420	0.0162
Propano	0.0000	0.2400	0.2180	0.0778
n-Butano	0.0200	0.1690	0.0190	0.1159
n-Pentano	0.0500	0.1480	0.0135	0.1256
n-Tridecano	0.0930	0.0000	0.0001	0.6582

Tabla 5.33 Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Chemsep para el sistema 3

	Alim. 1	Alim. 2	Gas	Líquido
Temperatura (°C)	32.05	26.85	36.10	47.82
Presión (bar)	4.0530	4.0530	4.0530	4.0530
Fracción de vapor	0	0.9558	1	0
Flujo Molar (kmol/hr)	198.7100	180.0000	98.0222	280.6970
Flujos Molares (kmol/hr)				
Metano	0.0000	51.4800	49.7100	1.7740
Etano	0.0000	28.2600	23.6500	4.6130
Propano	0.0000	43.2000	21.0100	22.1900
n-Butano	3.9740	30.4200	2.3510	32.0400
n-Pentano	9.9360	26.6400	1.2960	35.2800
n-Tridecano	184.8000	0.0000	0.0052	184.8000
Fracciones Mol				
Metano	0.0000	0.2860	0.5071	0.0063
Etano	0.0000	0.1570	0.2413	0.0164
Propano	0.0000	0.2400	0.2143	0.0791
n-Butano	0.0200	0.1690	0.0240	0.1141
n-Pentano	0.0500	0.1480	0.0132	0.1257
n-Tridecano	0.0930	0.0000	0.0001	0.6584

Tabla 5.34 Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Chemsep para el sistema 3

	Gas	Líquido
	Error %	Error %
Temperatura	30.49	0.41
Flujos Molares		
Metano	1.04	25.10
Etano	3.58	16.41
Propano	31.95	26.04
n-Butano	73.38	5.16
n-Pentano	85.12	2.89
n-Tridecano	274280	7.42
Fracciones Mol		
Metano	19.31	14.29
Etano	17.28	11.11
Propano	5.42	19.05
n-Butano	37.50	4.42
n-Pentano	46.15	5.60
n-Tridecano	201654	1.23

Tabla 5.35 Error entre los dos modelos usando Aspen Plus para el sistema 3

	Gas	Líquido
	Error %	Error %
Temperatura	1.99	0.02
Flujos Molares		
Metano	0.00	0.17
Etano	0.21	1.24
Propano	1.62	1.53
n-Butano	21.01	1.56
n-Pentano	1.62	0.06
n-Tridecano	3.35	0.00
Fracciones Mol		
Metano	0.08	0.19
Etano	0.29	1.22
Propano	1.73	1.58
n-Butano	20.93	1.58
n-Pentano	1.74	0.08
n-Tridecano	3.42	0.03

Tabla 5.36 Error entre los dos modelos usando Chemsep para el sistema 3

En Chemsep los dos modelos proporcionan resultados que son muy parecidos, pero al usar Aspen Plus se puede ver que si se usa el modelo de equilibrio la cantidad de compuestos ligeros y pesados que hay en la corriente de gas es

mayor que la que se obtiene usando el modelo de no equilibrio, y en el caso del líquido la cantidad de compuestos pesados usando el modelo de no equilibrio es mayor que la obtenida usando el modelo de equilibrio. Si esta operación tenía como objetivo reducir la cantidad de propano de la corriente de alimentación, se puede ver que usando el modelo de equilibrio la corriente de salida gaseosa tiene más propano, mientras que la misma corriente usando el modelo de no equilibrio contiene una cantidad menor de propano.

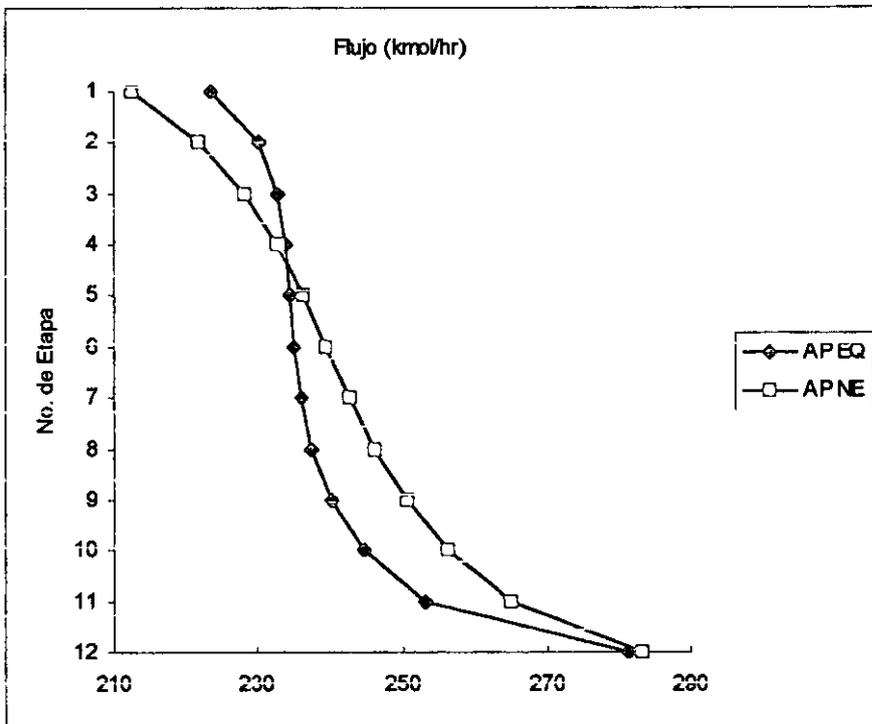


Figura 5.25 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Aspen Plus para el sistema 3

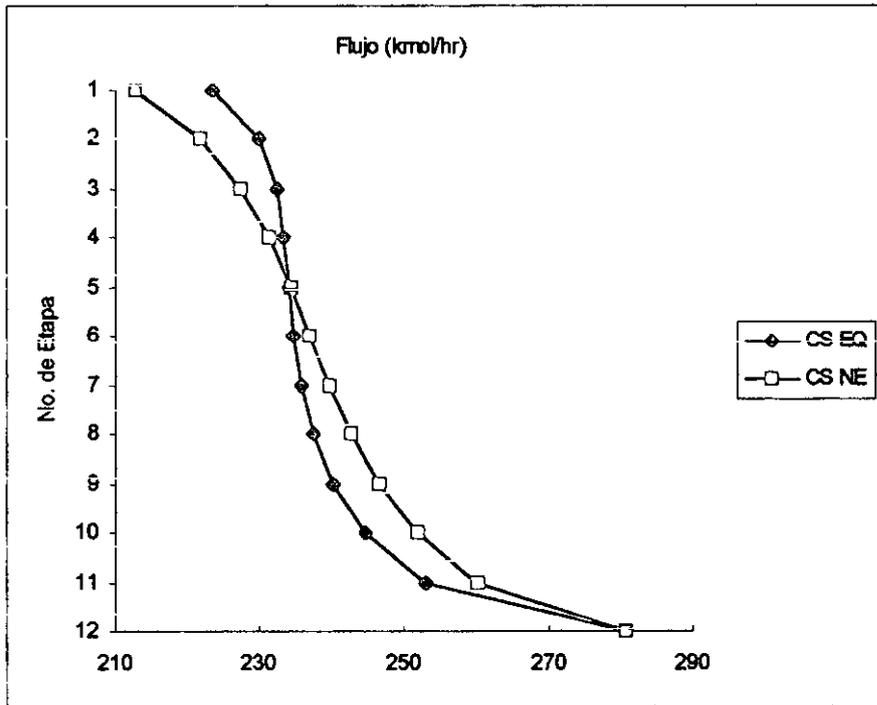


Figura 5.26 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Chemsep para el sistema 3

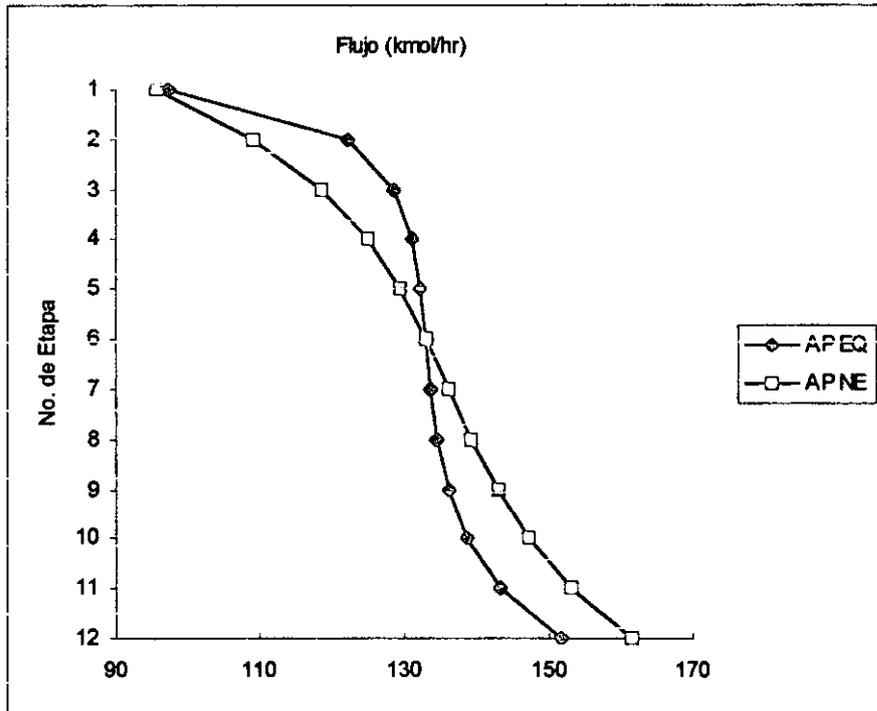


Figura 5.27 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Aspen Plus para el sistema 3

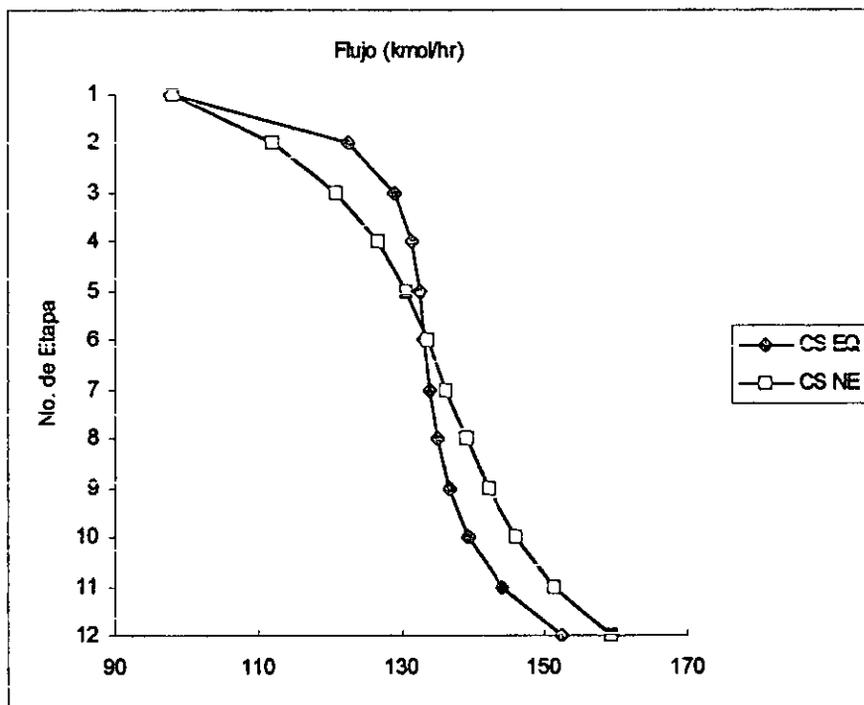


Figura 5.28 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Chemsep para el sistema 3

Al comparar los perfiles de los flujos de líquido y de vapor se puede ver que el modelo de no equilibrio da perfiles más lineales, en este modelo los flujos de líquido y de vapor van aumentando de la parte superior a la inferior. En cambio en el modelo de equilibrio los perfiles aumentan en la parte superior de la columna hasta que llegan a un valor, a partir de ese punto los flujos son casi constantes y no cambian apreciablemente a lo largo de la parte intermedia de la columna, hasta que finalmente en las etapas inferiores el flujo vuelve a aumentar.

Aspen Plus	Flujo Líquido	Flujo Líquido	Error
	kmol/hr	kmol/hr	%
Etapa	EQ	NE	
1	223.57	212.43	5.24
2	230.11	221.80	3.74
3	232.65	228.21	1.94
4	233.75	232.82	0.40
5	234.42	236.43	0.85
6	235.09	239.59	1.88
7	236.06	242.74	2.75
8	237.65	246.24	3.49
9	240.28	250.57	4.11
10	244.71	256.39	4.55
11	253.11	264.94	4.47
12	281.31	283.25	0.69

Chemsep	Flujo Líquido	Flujo Líquido	Error
	kmol/hr	kmol/hr	%
Etapa	EQ	NE	
1	223.41	212.75	5.01
2	229.86	221.67	3.69
3	232.33	227.41	2.16
4	233.42	231.35	0.90
5	234.10	234.37	0.11
6	234.81	237.03	0.93
7	235.85	239.73	1.62
8	237.52	242.81	2.18
9	240.24	246.70	2.62
10	244.75	252.03	2.89
11	253.15	260.14	2.69
12	280.79	280.72	0.02

Tabla 5.37 Comparación entre los flujos de líquido usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema

Aspen Plus	Flujo Vapor	Flujo Vapor	Error
	kmol/hr	kmol/hr	%
Etapa	EQ	NE	
1	97.43	95.49	2.04
2	122.26	109.18	11.98
3	128.80	118.55	8.64
4	131.34	124.97	5.10
5	132.45	129.57	2.22
6	133.11	133.18	0.05
7	133.78	136.34	1.88
8	134.76	139.49	3.39
9	136.34	143.00	4.65
10	138.97	147.32	5.67
11	143.41	153.14	6.36
12	151.81	161.70	6.12

Chemsep	Flujo Vapor	Flujo Vapor	Error
	kmol/hr	kmol/hr	%
Etapa	EQ	NE	
1	97.94	98.01	0.07
2	122.62	112.02	9.46
3	129.07	120.95	6.71
4	131.54	126.69	3.83
5	132.63	130.63	1.53
6	133.31	133.64	0.25
7	134.02	136.30	1.67
8	135.06	139.00	2.84
9	136.72	142.09	3.78
10	139.45	145.98	4.47
11	143.96	151.31	4.86
12	152.36	159.41	4.43

Tabla 5.38 Comparación entre los flujos de vapor usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema

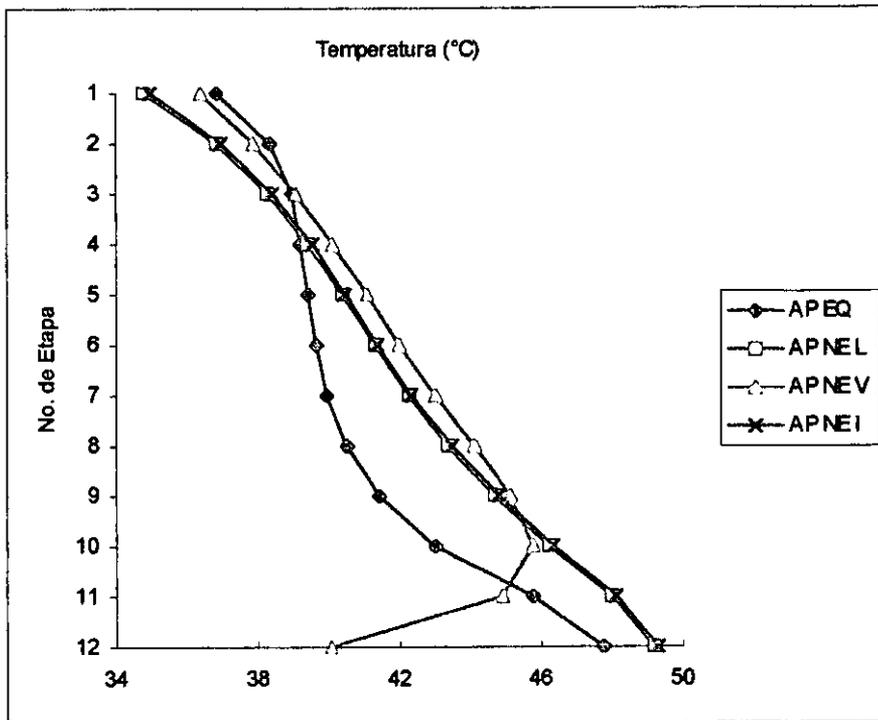


Figura 5.29 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Aspen Plus para el sistema 3

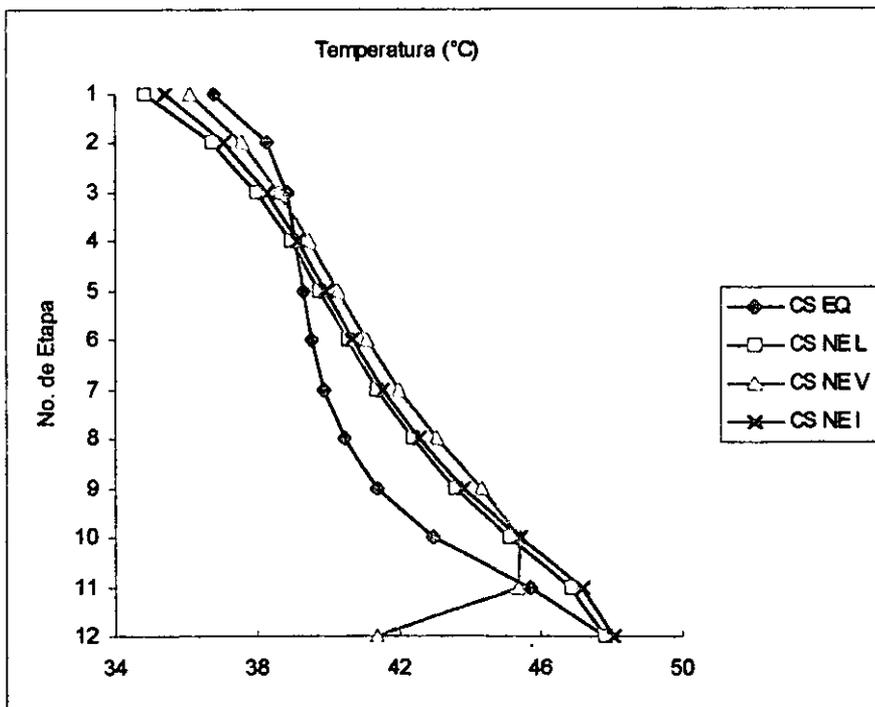


Figura 5.30 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Chemsep para el sistema 3

Etapa	T	T Líquido	T Vapor	T Interfase	Error
	°C	°C	°C	°C	%
	EQ	NE	NE	NE	
1	36.88	34.81	36.40	34.99	5.41
2	38.37	36.83	37.89	36.96	3.80
3	38.96	38.31	39.10	38.40	1.43
4	39.23	39.45	40.12	39.52	0.75
5	39.42	40.41	41.06	40.48	2.62
6	39.63	41.33	42.00	41.39	4.24
7	39.96	42.29	43.01	42.35	5.65
8	40.51	43.39	44.10	43.46	6.79
9	41.43	44.69	45.16	44.78	7.48
10	43.03	46.25	45.79	46.35	7.17
11	45.76	47.98	44.90	48.10	4.87
12	47.79	49.20	40.05	49.30	3.07

Tabla 5.39 Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 3

Etapa	T	T Líquido	T Vapor	T Interfase	Error
	°C	°C	°C	°C	%
	EQ	NE	NE	NE	
1	36.82	34.83	36.10	35.40	4.00
2	38.26	36.72	37.58	37.10	3.15
3	38.83	38.01	38.64	38.27	1.47
4	39.10	38.97	39.50	39.16	0.16
5	39.29	39.78	40.28	39.94	1.61
6	39.52	40.55	41.09	40.70	2.90
7	39.87	41.39	42.02	41.55	4.05
8	40.43	42.38	43.10	42.58	5.03
9	41.38	43.61	44.32	43.85	5.64
10	42.98	45.13	45.41	45.43	5.39
11	45.70	46.87	45.38	47.21	3.20
12	47.81	47.82	41.35	48.06	0.52

Tabla 5.40 Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 3

Al analizar el perfil de temperaturas se puede ver que en el modelo de no equilibrio la temperatura del líquido y de la interfase son muy parecidas, además ocurre algo parecido al caso de los flujos de líquido y vapor, en el modelo de no equilibrio las temperaturas van aumentando de la parte superior de la columna a la inferior, en cambio en el modelo de equilibrio en la parte superior de la columna la temperatura aumenta hasta llegar a un valor a lo largo de la parte intermedia de la columna la temperatura es casi constante, y al llegar a la parte inferior de la columna la temperatura vuelve a aumentar y tiende a tomar el valor de la temperatura de la interfase.

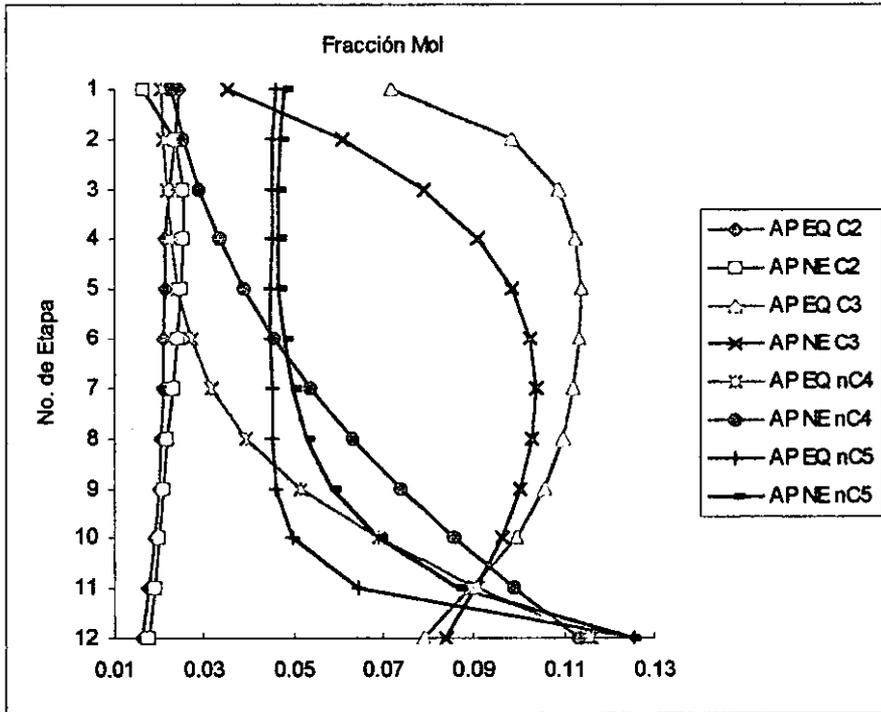


Figura 5.31 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Aspen Plus para el sistema 3

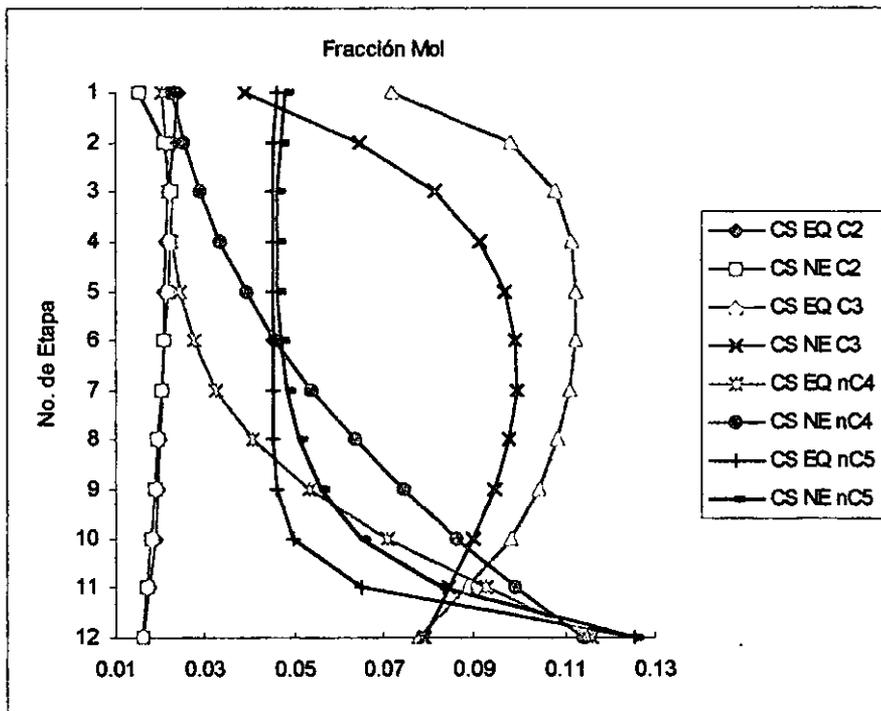


Figura 5.32 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Chemsep para el sistema 3

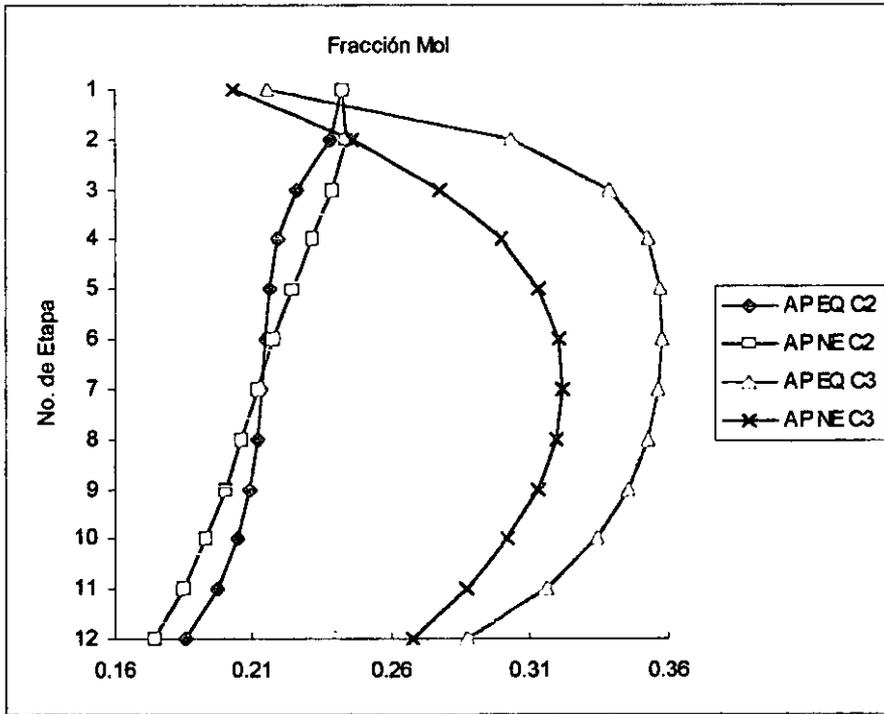


Figura 5.33 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Aspen Plus para el sistema 3

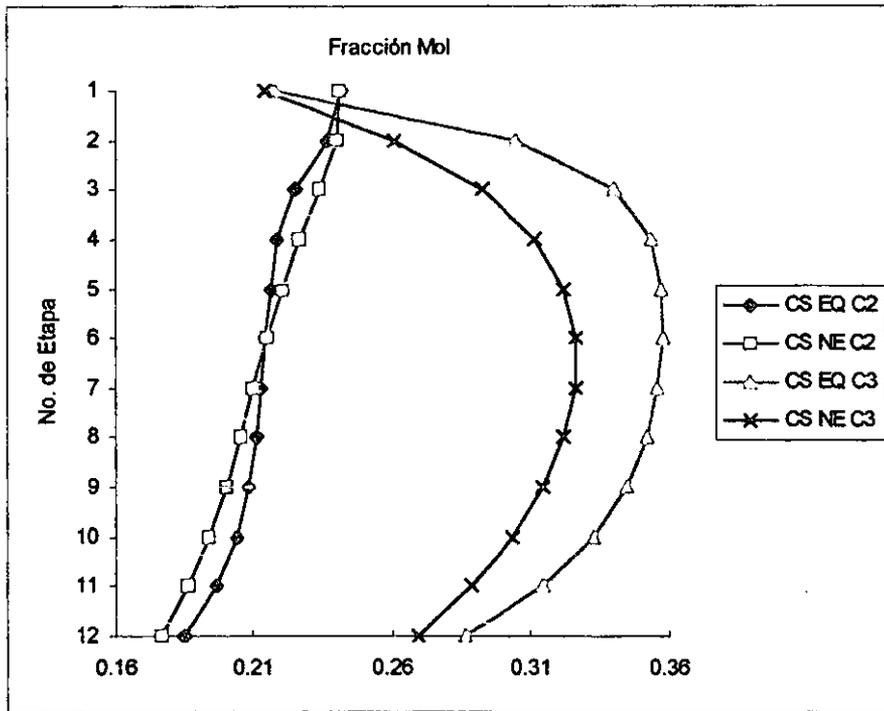


Figura 5.34 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Chemsep para el sistema 3

Tabla 5.41	Fraccion Mol					
	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
Etapa	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ
1	0.01012	0.02444	0.07203	0.02052	0.04618	0.82672
2	0.00841	0.02355	0.09847	0.02099	0.04536	0.80322
3	0.00792	0.02217	0.10879	0.02160	0.04507	0.79445
4	0.00775	0.02148	0.11255	0.02255	0.04497	0.79070
5	0.00768	0.02114	0.11361	0.02416	0.04494	0.78846
6	0.00763	0.02094	0.11335	0.02692	0.04495	0.78621
7	0.00758	0.02072	0.11212	0.03161	0.04500	0.78297
8	0.00751	0.02041	0.10977	0.03936	0.04521	0.77774
9	0.00739	0.01991	0.10580	0.05160	0.04607	0.76924
10	0.00720	0.01910	0.09936	0.06930	0.04974	0.75530
11	0.00689	0.01784	0.08950	0.09096	0.06456	0.73025
12	0.00649	0.01643	0.07888	0.11581	0.12539	0.65700

Tabla 5.41	Fraccion Mol					
	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
Etapa	NE	NE	NE	NE	NE	NE
1	0.00790	0.01647	0.03517	0.02244	0.04798	0.87004
2	0.00999	0.02331	0.06107	0.02544	0.04691	0.83329
3	0.01014	0.02542	0.07905	0.02910	0.04642	0.80988
4	0.00977	0.02547	0.09095	0.03357	0.04636	0.79387
5	0.00935	0.02477	0.09834	0.03905	0.04674	0.78176
6	0.00899	0.02384	0.10235	0.04570	0.04768	0.77144
7	0.00869	0.02288	0.10373	0.05371	0.04953	0.76145
8	0.00843	0.02195	0.10299	0.06316	0.05287	0.75060
9	0.00818	0.02100	0.10039	0.07401	0.05877	0.73765
10	0.00791	0.02002	0.09614	0.08601	0.06903	0.72090
11	0.00761	0.01896	0.09047	0.09871	0.08664	0.69761
12	0.00726	0.01788	0.08403	0.11346	0.12488	0.65249

Tabla 5.41	Error	Error	Error	Error	Error	Error
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
	%	%	%	%	%	%
1	28.13	48.36	104.78	8.55	3.75	4.98
2	15.85	1.03	61.24	17.48	3.29	3.61
3	21.83	12.76	37.63	25.79	2.89	1.91
4	20.68	15.70	23.75	32.84	3.00	0.40
5	17.91	14.63	15.53	38.13	3.84	0.86
6	15.12	12.17	10.75	41.10	5.73	1.91
7	12.75	9.45	8.08	41.16	9.13	2.83

Tabla 5.41 Comparación entre las fracciones mol del líquido en Aspen Plus para el sistema 3

8	10.88	7.00	6.59	37.69	14.49	3.62
9	9.59	5.20	5.38	30.29	21.61	4.28
10	9.00	4.57	3.35	19.43	27.94	4.77
11	9.44	5.92	1.07	7.85	25.48	4.68
12	10.56	8.07	6.13	2.07	0.40	0.69

Tabla 5.41 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del líquido en Aspen Plus para el sistema 3

Tabla 5.42	Fraccion Mol					
	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
Etapa	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ
1	0.00979	0.02411	0.07202	0.02058	0.04620	0.82731
2	0.00814	0.02323	0.09806	0.02110	0.04540	0.80407
3	0.00768	0.02188	0.10802	0.02177	0.04512	0.79553
4	0.00751	0.02121	0.11161	0.02283	0.04502	0.79182
5	0.00744	0.02089	0.11255	0.02459	0.04499	0.78952
6	0.00740	0.02069	0.11221	0.02758	0.04499	0.78713
7	0.00735	0.02046	0.11090	0.03257	0.04505	0.78367
8	0.00728	0.02015	0.10846	0.04069	0.04526	0.77818
9	0.00716	0.01964	0.10442	0.05327	0.04614	0.76937
10	0.00698	0.01884	0.09801	0.07108	0.04989	0.75519
11	0.00669	0.01761	0.08831	0.09235	0.06491	0.73014
12	0.00631	0.01623	0.07781	0.11588	0.12557	0.65821

Tabla 5.42	Fraccion Mol					
	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
Etapa	NE	NE	NE	NE	NE	NE
1	0.00665	0.01537	0.03884	0.02251	0.04788	0.86876
2	0.00823	0.02099	0.06472	0.02551	0.04678	0.83377
3	0.00830	0.02244	0.08113	0.02914	0.04625	0.81274
4	0.00803	0.02233	0.09103	0.03361	0.04608	0.79891
5	0.00776	0.02173	0.09652	0.03911	0.04625	0.78863
6	0.00753	0.02103	0.09895	0.04584	0.04686	0.77979
7	0.00733	0.02034	0.09915	0.05397	0.04820	0.77101
8	0.00716	0.01965	0.09758	0.06358	0.05083	0.76120
9	0.00699	0.01893	0.09450	0.07453	0.05583	0.74922
10	0.00680	0.01814	0.09005	0.08645	0.06518	0.73338
11	0.00657	0.01727	0.08447	0.09875	0.08244	0.71050
12	0.00632	0.01643	0.07906	0.11415	0.12568	0.65837

Tabla 5.42 Comparación entre las fracciones mol del líquido en Chemsep para el sistema 3

Tabla 5.42	Error	Error	Error	Error	Error	Error
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
	%	%	%	%	%	%
1	47.22	56.89	85.43	8.57	3.51	4.77
2	1.06	10.64	51.50	17.25	2.95	3.56
3	7.50	2.50	33.15	25.29	2.44	2.12
4	6.47	5.00	22.60	32.08	2.31	0.89
5	4.02	3.85	16.61	37.11	2.74	0.11
6	1.69	1.64	13.40	39.83	3.99	0.94
7	0.20	0.62	11.85	39.66	6.54	1.64
8	1.60	2.52	11.15	36.00	10.96	2.23
9	2.49	3.76	10.50	28.53	17.35	2.69
10	2.69	3.88	8.84	17.78	23.46	2.97
11	1.78	1.99	4.54	6.49	21.26	2.76
12	0.20	1.27	1.57	1.52	0.08	0.02

Tabla 5.42 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del líquido en Chemsep para el sistema 3

Tabla 5.43	Fraccion Mol					
	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
Etapa	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ
1	0.50964	0.24261	0.21565	0.01866	0.01338	5.85E-05
2	0.42464	0.23803	0.30356	0.01988	0.01384	6.50E-05
3	0.40053	0.22559	0.33904	0.02076	0.01402	6.77E-05
4	0.39208	0.21924	0.35266	0.02183	0.01412	6.90E-05
5	0.38858	0.21637	0.35728	0.02351	0.01420	6.99E-05
6	0.38655	0.21481	0.35793	0.02634	0.01430	7.09E-05
7	0.38457	0.21347	0.35624	0.03118	0.01446	7.25E-05
8	0.38175	0.21171	0.35233	0.03936	0.01478	7.51E-05
9	0.37727	0.20894	0.34544	0.05278	0.01549	7.95E-05
10	0.37007	0.20451	0.33410	0.07369	0.01754	8.77E-05
11	0.35852	0.19742	0.31607	0.10321	0.02468	1.03E-04
12	0.33858	0.18545	0.28763	0.13745	0.05079	1.09E-04

Tabla 5.43	Fraccion Mol					
	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
Etapa	NE	NE	NE	NE	NE	NE
1	0.51761	0.24293	0.20316	0.02365	0.01260	5.741E-05
2	0.46803	0.24451	0.24610	0.02793	0.01336	6.338E-05
3	0.43558	0.23927	0.27787	0.03312	0.01409	6.868E-05
4	0.41401	0.23204	0.29958	0.03941	0.01489	7.343E-05
5	0.39900	0.22480	0.31314	0.04708	0.01591	7.795E-05

Tabla 5.43 Comparación entre las fracciones mol del vapor en Aspen Plus para el sistema 3

6	0.38771	0.21814	0.32023	0.05643	0.01740	8.254E-05
7	0.37830	0.21202	0.32213	0.06772	0.01974	8.733E-05
8	0.36945	0.20612	0.31959	0.08116	0.02358	9.212E-05
9	0.36015	0.20001	0.31300	0.09677	0.02997	9.597E-05
10	0.34939	0.19318	0.30242	0.11424	0.04068	9.638E-05
11	0.33597	0.18498	0.28763	0.13279	0.05854	8.786E-05
12	0.31813	0.17452	0.26820	0.15112	0.08796	5.991E-05

Tabla 5.43	Error	Error	Error	Error	Error	Error
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
	%	%	%	%	%	%
1	1.54	0.13	6.15	21.11	6.21	1.93
2	9.27	2.65	23.35	28.84	3.54	2.61
3	8.05	5.72	22.01	37.31	0.52	1.41
4	5.30	5.52	17.72	44.60	5.17	6.04
5	2.61	3.75	14.10	50.07	10.75	10.33
6	0.30	1.53	11.77	53.32	17.81	14.05
7	1.66	0.68	10.59	53.95	26.73	16.97
8	3.33	2.71	10.24	51.51	37.33	18.50
9	4.76	4.46	10.36	45.46	48.34	17.14
10	5.92	5.87	10.48	35.50	56.89	8.99
11	6.71	6.72	9.89	22.28	57.84	17.67
12	6.43	6.26	7.24	9.05	42.26	81.78

Tabla 5.43 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del vapor en Aspen Plus para el sistema 3

Tabla 5.44	Fraccion Mol					
	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
Etapa	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ
1	0.50753	0.24202	0.21799	0.01896	0.01345	5.506E-05
2	0.42323	0.23724	0.30534	0.02023	0.01389	6.106E-05
3	0.39962	0.22501	0.34005	0.02118	0.01408	6.353E-05
4	0.39145	0.21885	0.35311	0.02236	0.01417	6.470E-05
5	0.38802	0.21606	0.35740	0.02421	0.01425	6.553E-05
6	0.38596	0.21451	0.35781	0.02730	0.01435	6.651E-05
7	0.38387	0.21311	0.35591	0.03252	0.01452	6.802E-05
8	0.38089	0.21125	0.35174	0.04120	0.01485	7.056E-05
9	0.37621	0.20837	0.34457	0.05520	0.01558	7.498E-05
10	0.36881	0.20383	0.33300	0.07658	0.01769	8.309E-05
11	0.35716	0.19670	0.31494	0.10614	0.02496	9.831E-05
12	0.33738	0.18484	0.28686	0.13954	0.05128	1.045E-04

Tabla 5.44 Comparación entre las fracciones mol del vapor en Chemsep para el sistema 3

Tabla 5.44	Fraccion Mol					
	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
Etapa	NE	NE	NE	NE	NE	NE
1	0.50715	0.24126	0.21433	0.02398	0.01322	5.324E-05
2	0.45634	0.24027	0.26128	0.02825	0.01381	5.876E-05
3	0.42603	0.23398	0.29230	0.03332	0.01430	6.314E-05
4	0.40724	0.22694	0.31144	0.03950	0.01482	6.690E-05
5	0.39475	0.22057	0.32204	0.04709	0.01547	7.051E-05
6	0.38553	0.21505	0.32645	0.05643	0.01646	7.438E-05
7	0.37776	0.21006	0.32619	0.06780	0.01811	7.883E-05
8	0.37024	0.20519	0.32212	0.08140	0.02096	8.396E-05
9	0.36205	0.20000	0.31459	0.09722	0.02605	8.930E-05
10	0.35231	0.19398	0.30360	0.11484	0.03517	9.281E-05
11	0.33983	0.18650	0.28883	0.13328	0.05147	8.869E-05
12	0.32253	0.17651	0.26961	0.15096	0.08032	6.344E-05

Tabla 5.44	Error	Error	Error	Error	Error	Error
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-tridecano
	%	%	%	%	%	%
1	0.07	0.31	1.71	20.94	1.73	3.41
2	7.25	1.26	16.86	28.40	0.63	3.93
3	6.20	3.83	16.33	36.43	1.59	0.61
4	3.88	3.56	13.38	43.39	4.36	3.29
5	1.70	2.05	10.98	48.59	7.92	7.06
6	0.11	0.25	9.61	51.61	12.84	10.58
7	1.62	1.45	9.11	52.03	19.79	13.71
8	2.88	2.95	9.20	49.39	29.17	15.96
9	3.91	4.18	9.53	43.22	40.18	16.04
10	4.68	5.08	9.68	33.31	49.70	10.48
11	5.10	5.47	9.04	20.36	51.51	10.85
12	4.60	4.72	6.40	7.57	36.16	64.73

Tabla 5.44 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del vapor en Chemsep para el sistema 3

Las composiciones varían mucho de un modelo a otro, en los compuestos ligeros que son el metano y el etano la diferencia no es tan grande en comparación con la diferencia que se presenta en los compuestos pesados. Al igual que en la destilación la diferencia de composiciones a lo largo de la columna afecta la operación, y como resultado final las composiciones a la salida no son las mismas.

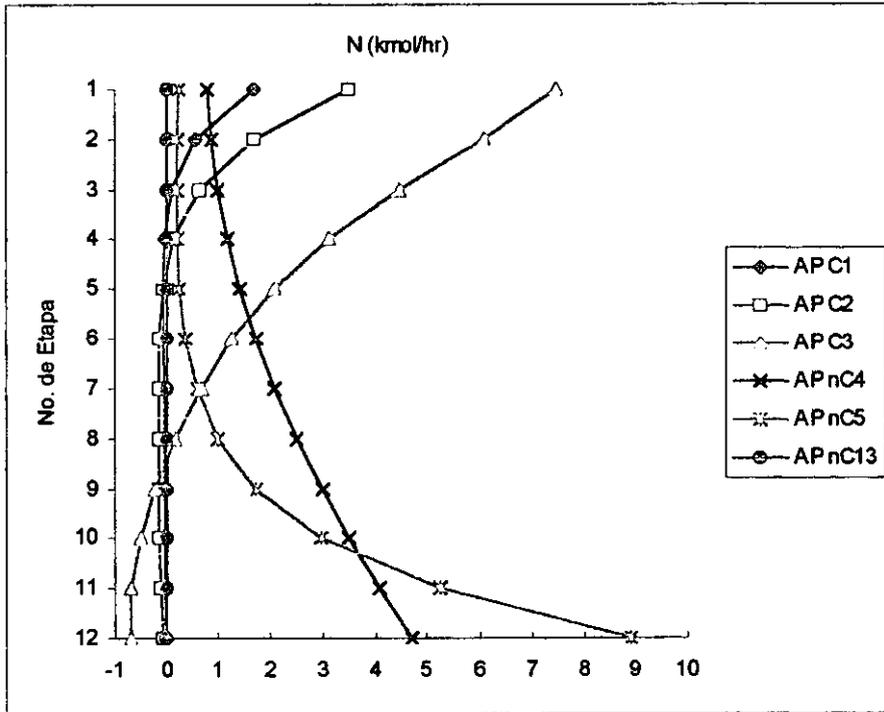


Figura 5.35 Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Aspen Plus para el sistema 3

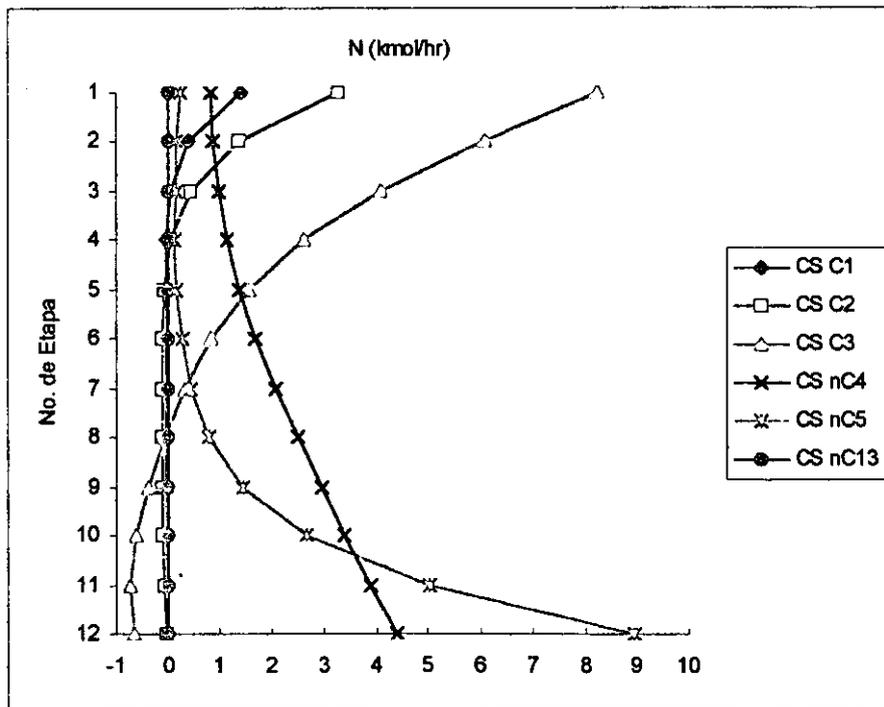


Figura 5.36 Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Chemsep para el sistema 3

En la gráfica de rapidez de transferencia de masa se puede ver que la cantidad de n-tridecano que se transfiere a la fase vapor es muy pequeña. El metano y el etano tienen un comportamiento parecido al del n-tridecano con la excepción de que se transfieren de la fase gas a la fase líquida en las primeras tres etapas. El n-butano y el n-pentano se transfieren de la fase vapor a la fase líquida, y el propano se empieza a transferir de la fase vapor a la fase líquida en la parte inferior de la columna, y el comportamiento es el inverso del que muestran el n-butano y el n-pentano.

Sistema 4

Operación	Absorción
Componentes	metano etano propano n-butano n-pentano n-nonano
K de equilibrio	EOS Peng Robinson
No. de Etapas	6
Alimentación 1	
Etapa de Alimentación	1
Temperatura (K)	305.4
Presión (bar)	27.58
Flujos (kmol/s)	
n-butano	0.0063
n-pentano	0.09828
n-nonano	20.69
Alimentación 2	
Etapa de Alimentación	6
Temperatura (K)	313.7
Presión (atm)	27.58
Flujos (kmol/s)	
metano	20.16
etano	46.62
propano	30.24
n-butano	3.150
n-pentano	0.63
Columna	
Tipo de Columna	Columna de Platos de Malla
Diámetro de la columna (m)	0.8
Presión etapa 1 (bar)	27.58

	Alim. 1	Alim. 2	Líquido	Gas
Temperatura (°C)	40.6	32.3	62.9	68.9
Presión (bar)	27.58	27.58	27.58	27.58
Fracción de vapor	1	0	0	1
Flujo Molar (kmol/hr)	362.88	74.86	200.136	237.604
Flujos Molares (kmol/hr)				
Metano	72.576	0	5.783	66.793
Etano	167.832	0	45.107	122.725
Propano	108.864	0	62.677	46.187
n-Butano	11.34	0.023	10.608	0.755
n-Pentano	2.268	0.354	2.497	0.125
n-Nonano	0	74.484	73.464	1.02
Fracciones Mol				
Metano	0.2000	0.0000	0.0290	0.2810
Etano	0.4630	0.0000	0.2250	0.5170
Propano	0.3000	0.0000	0.3130	0.1940
n-Butano	0.0310	0.0003	0.0530	0.0030
n-Pentano	0.0060	0.0050	0.0120	0.0005
n-Nonano	0.0000	0.9950	0.3670	0.0040

Tabla 5.45 Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Aspen Plus para el sistema 4

	Alim. 1	Alim. 2	Líquido	Gas
Temperatura (°C)	40.6	32.3	62.7	66.7
Presión (bar)	27.58	27.58	27.58	27.58
Fracción de vapor	1	0	0	1
Flujo Molar (kmol/hr)	362.88	74.86	200.136	237.604
Flujos Molares (kmol/hr)				
Metano	72.5760	0.0000	5.6720	66.9040
Etano	167.8320	0.0000	44.4460	123.3860
Propano	108.8640	0.0000	60.7990	48.0650
n-Butano	11.3400	0.0230	9.8830	1.4800
n-Pentano	2.2680	0.3540	2.4540	0.1680
n-Nonano	0.0000	74.4840	73.5610	0.9230
Fracciones Mol				
Metano	0.2000	0.0000	0.0290	0.2780
Etano	0.4630	0.0000	0.2260	0.5120
Propano	0.3000	0.0000	0.3090	0.2000
n-Butano	0.0310	0.0003	0.0500	0.0060
n-Pentano	0.0060	0.0050	0.0120	0.0007
n-Nonano	0.0000	0.9950	0.3740	0.0040

Tabla 5.46 Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Aspen Plus para el sistema 4

	Alim. 1	Alim. 2	Líquido	Gas
Temperatura (°C)	40.55	32.25	61.87	67.27
Presión (bar)	27.5800	27.5800	27.5800	27.5800
Fracción de vapor	1	0	0	1
Flujo Molar (kmol/hr)	362.8880	74.8565	197.6070	240.1531
Flujos Molares (kmol/hr)				
Metano	72.5800	0.0000	5.7550	66.8200
Etano	167.8000	0.0000	43.5500	124.3000
Propano	108.9000	0.0000	61.6700	47.1900
n-Butano	11.3400	0.0227	10.6100	0.7568
n-Pentano	2.2680	0.3538	2.5020	0.1193
n-Nonano	0.0000	74.4800	73.5200	0.9670
Fracciones Mol				
Metano	0.2000	0.0000	0.0291	0.2783
Etano	0.4625	0.0000	0.2204	0.5175
Propano	0.3000	0.0000	0.3121	0.1965
n-Butano	0.0313	0.0003	0.0537	0.0032
n-Pentano	0.0063	0.0047	0.0127	0.0005
n-Nonano	0.0000	0.9950	0.3721	0.0040

Tabla 5.47 Resultados obtenidos usando el modelo de equilibrio en Chemsep para el sistema 4

	Alim. 1	Alim. 2	Líquido	Gas
Temperatura (°C)	40.55	32.25	61.87	67.27
Presión (bar)	27.5800	27.5800	27.5800	27.5800
Fracción de vapor	1	0	0	1
Flujo Molar (kmol/hr)	362.8880	74.9565	194.4020	243.3503
Flujos Molares (kmol/hr)				
Metano	72.5800	0.0000	5.6120	66.9600
Etano	167.8000	0.0000	42.8500	125.0000
Propano	108.9000	0.0000	60.0100	48.8500
n-Butano	11.3400	0.0227	9.8920	1.4710
n-Pentano	2.2680	0.3538	2.4580	0.1635
n-Nonano	0.0000	74.5800	73.5800	0.9058
Fracciones Mol				
Metano	0.2000	0.0000	0.0289	0.2752
Etano	0.4625	0.0000	0.2204	0.5136
Propano	0.3000	0.0000	0.3087	0.2007
n-Butano	0.0313	0.0003	0.0509	0.0060
n-Pentano	0.0063	0.0047	0.0127	0.0007
n-Nonano	0.0000	0.9950	0.3785	0.0037

Tabla 5.48 Resultados obtenidos usando el modelo de no equilibrio en Chemsep para el sistema 4

	Líquido	Gas
	Error %	Error %
Temperatura	0.32	3.30
Flujos Molares		
Metano	1.96	0.17
Etano	1.49	0.54
Propano	3.09	3.91
n-Butano	7.34	48.99
n-Pentano	1.75	25.60
n-Tridecano	0.13	10.51
Fracciones Mol		
Metano	0.00	1.08
Etano	0.44	0.98
Propano	1.29	3.00
n-Butano	6.00	50.00
n-Pentano	0.00	24.57
n-Nonano	1.87	0.00

Tabla 5.49 Error entre los dos modelos usando Aspen Plus para el sistema 4

	Líquido	Gas
	Error %	Error %
Temperatura	0.00	0.00
Flujos Molares		
Metano	2.55	0.21
Etano	1.63	0.56
Propano	2.77	3.40
n-Butano	7.26	48.55
n-Pentano	1.79	27.03
n-Tridecano	0.08	6.76
Fracciones Mol		
Metano	0.87	1.13
Etano	0.00	0.76
Propano	1.10	2.09
n-Butano	5.48	47.84
n-Pentano	0.08	26.03
n-Nonano	1.69	8.19

Tabla 5.50 Error entre los dos modelos usando Chemsep para el sistema 4

Los resultados que se obtienen al usar los dos modelos son distintos, si se usa el modelo de no equilibrio la corriente de gas es más rica en componentes ligeros en el modelo de no equilibrio, en cambio la corriente de líquido es mas pura en

componentes pesados. Lo anterior quiere decir que los dos modelos dan resultados distintos, la pureza que se obtiene con el modelo de no equilibrio es mayor que la que se obtiene con el modelo de equilibrio.

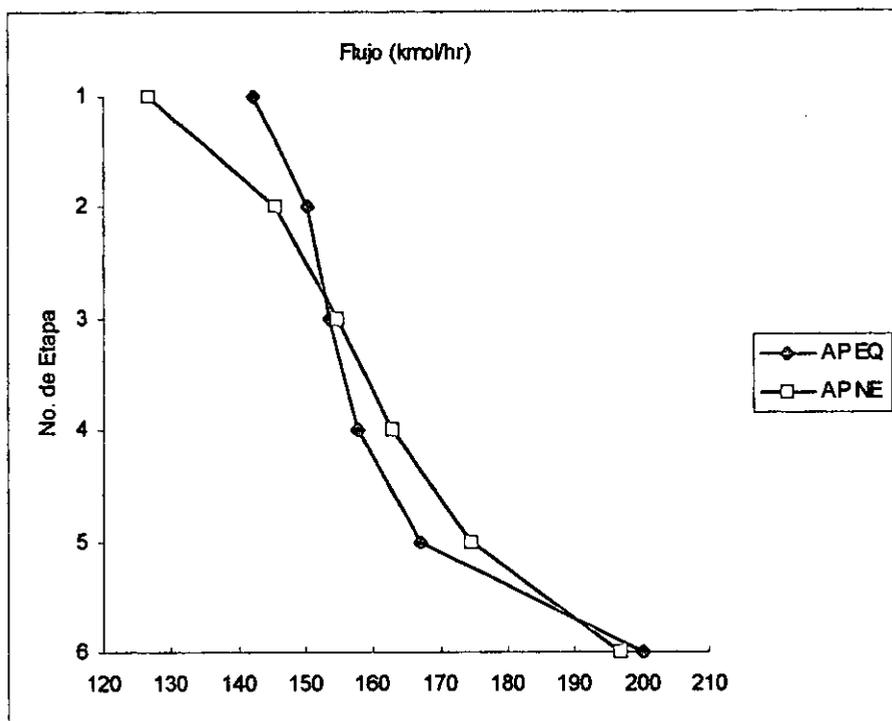


Figura 5.37 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Aspen Plus para el sistema 4

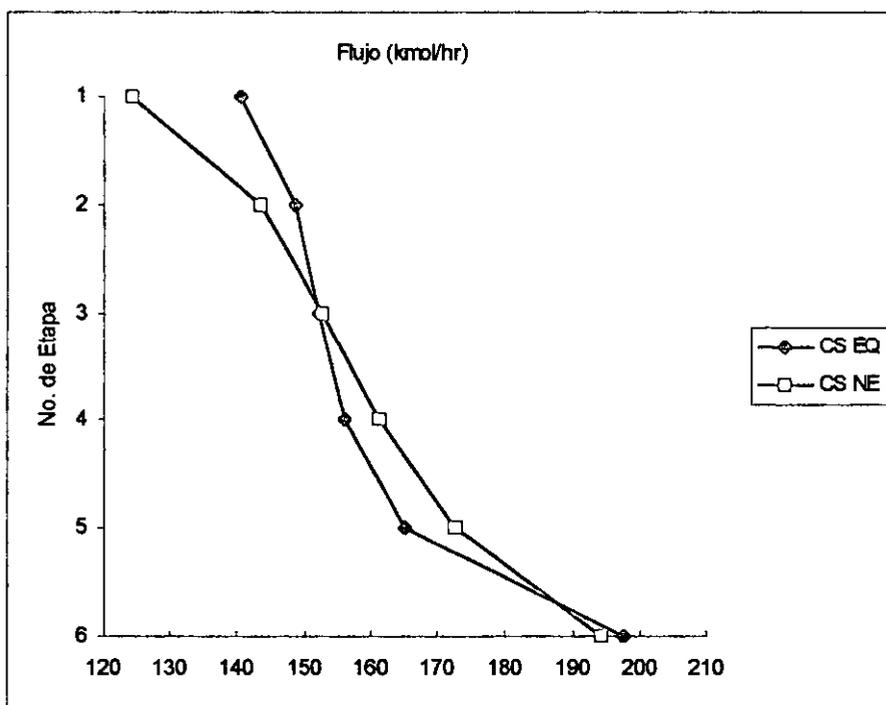


Figura 5.38 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de líquido en Chemsep para el sistema 4

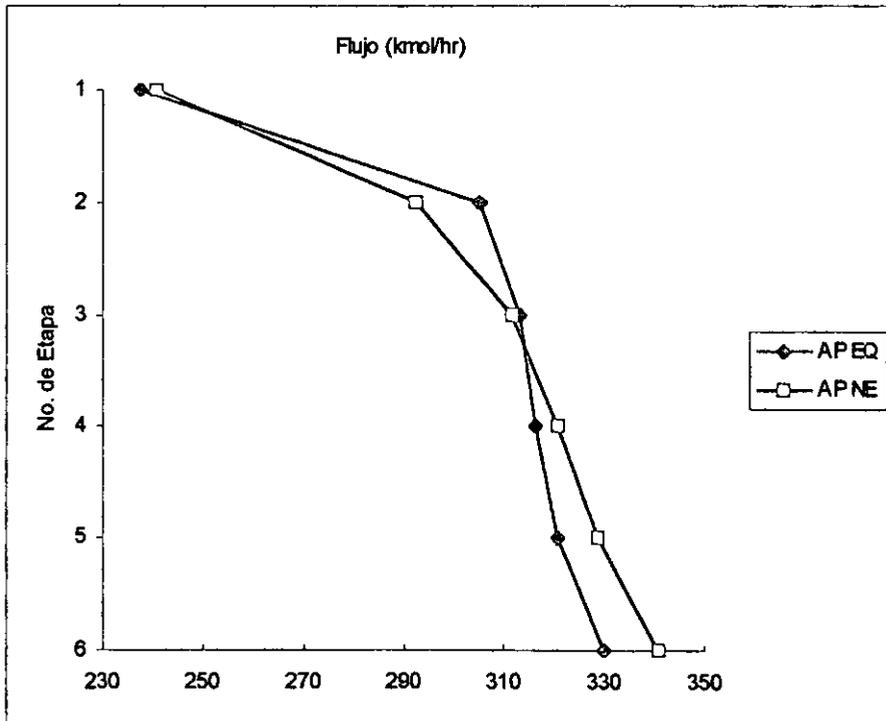


Figura 5.39 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Aspen Plus para el sistema 4

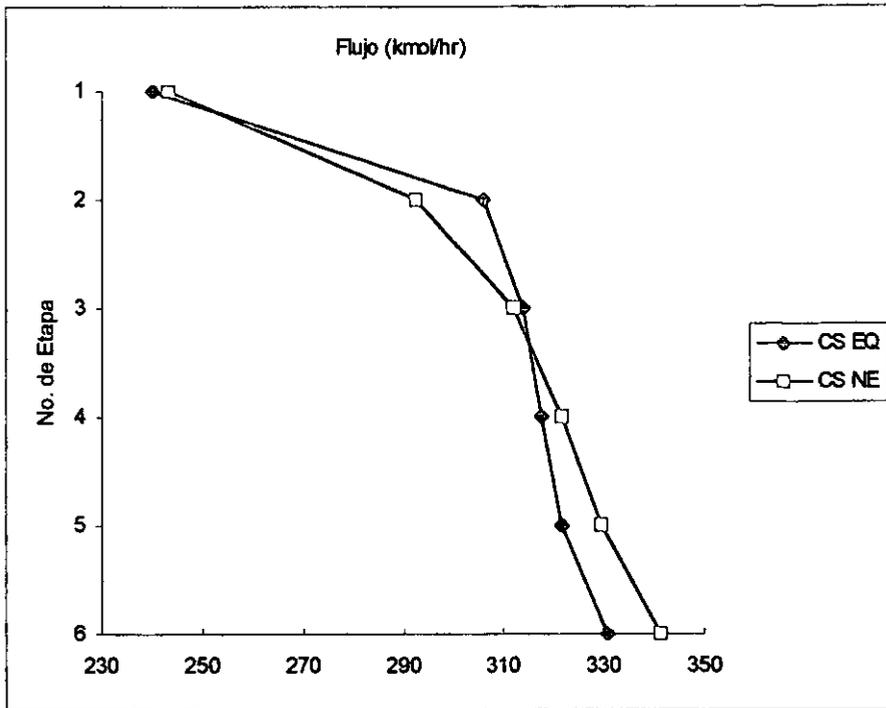


Figura 5.40 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para el flujo de vapor en Chemsep para el sistema 4

Los perfiles de flujos se comportan de manera similar al sistema 3, en el modelo de no equilibrio los perfiles van aumentando de la parte superior de la columna a la parte inferior, en cambio en el modelo de equilibrio los perfiles aumentan hasta llegar a un valor que se mantiene casi constante en la parte intermedia de la columna y al final en la parte inferior de la columna los flujos vuelven a aumentar.

Etapa	Flujo Líquido kmol/hr	Flujo Líquido kmol/hr	Error %
	EQ	NE	
1	142.12	126.65	12.21
2	150.16	145.57	3.15
3	153.74	154.70	0.62
4	157.88	162.81	3.03
5	167.13	174.53	4.24
6	200.14	196.81	1.69

Tabla 5.51 Comparación entre los flujos de líquido usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema 4

Etapa	Flujo Líquido kmol/hr	Flujo Líquido kmol/hr	Error %
	EQ	NE	
1	140.51	124.29	13.05
2	148.48	143.42	3.53
3	152.07	152.94	0.57
4	156.18	161.24	3.13
5	165.26	172.83	4.38
6	197.60	194.40	1.64

Etapa	Flujo Vapor kmol/hr	Flujo Vapor kmol/hr	Error %
	EQ	NE	
1	237.60	240.93	1.38
2	304.86	292.71	4.15
3	312.90	311.64	0.41
4	316.48	320.76	1.33
5	320.63	328.88	2.51
6	329.88	340.60	3.15

Tabla 5.52 Comparación entre los flujos de vapor usando los dos modelos en Aspen Plus y en Chemsep para el sistema 4

Etapa	Flujo Vapor kmol/hr	Flujo Vapor kmol/hr	Error %
	EQ	NE	
1	240.14	243.34	1.31
2	305.79	292.77	4.45
3	313.76	311.90	0.60
4	317.35	321.41	1.26
5	321.46	329.71	2.50
6	330.54	341.30	3.15

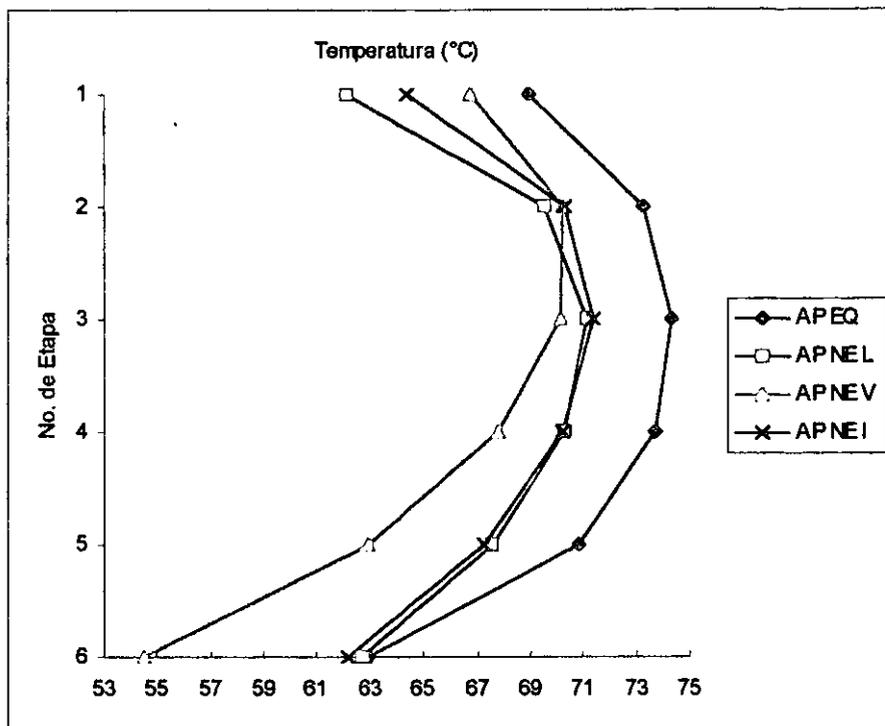


Figura 5.41 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Aspen Plus para el sistema 4

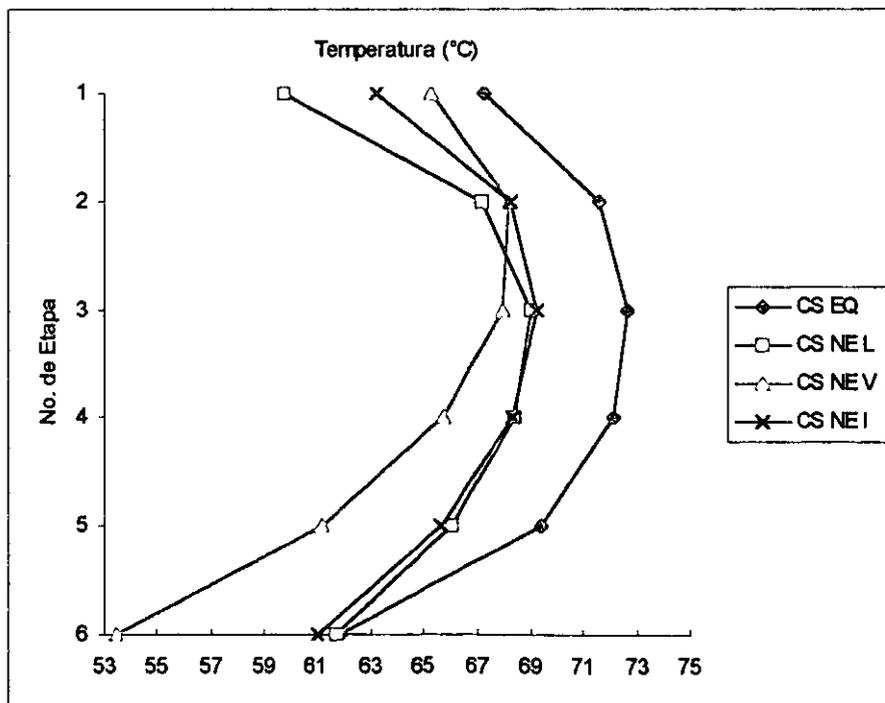


Figura 5.42 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para las temperaturas en Chemsep para el sistema 4

Etapa	T	T Líquido	T Vapor	T Interfase	Error
	°C	°C	°C	°C	%
	EQ	NE	NE	NE	
1	68.90	62.08	66.74	64.35	7.06
2	73.28	69.55	70.25	70.30	4.24
3	74.34	71.17	70.17	71.34	4.20
4	73.71	70.30	67.80	70.20	4.99
5	70.81	67.56	62.94	67.25	5.30
6	62.91	62.73	54.52	62.17	1.18

Tabla 5.53 Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Aspen Plus para el sistema 4

Etapa	T	T Líquido	T Vapor	T Interfase	Error
	°C	°C	°C	°C	%
	EQ	NE	NE	NE	
1	67.27	59.73	65.26	63.28	6.31
2	71.60	67.16	68.15	68.26	4.88
3	72.67	68.98	67.97	69.26	4.92
4	72.10	68.39	65.73	68.29	5.58
5	69.37	66.03	61.21	65.64	5.68
6	61.87	61.74	53.45	61.02	1.40

Tabla 5.54 Comparación entre las temperaturas usando los dos modelos en Chemsep para el sistema 4

En este caso en el modelo de no equilibrio se puede ver que temperatura de la interfase se asemeja mucho a la temperatura del líquido, además en el perfil se puede ver que en la parte superior de la columna la temperatura del vapor es mayor que la temperatura del líquido, pero en la parte inferior la temperatura del líquido es mayor que la temperatura del vapor. La temperatura que es obtenida con el modelo de equilibrio es mayor que cualquiera de las otras temperaturas, además en los dos modelos la temperatura de la parte superior de la columna es mayor que la temperatura de la parte inferior de la columna. La razón por la que los perfiles se comportan de esa manera es por la transferencia de masa.

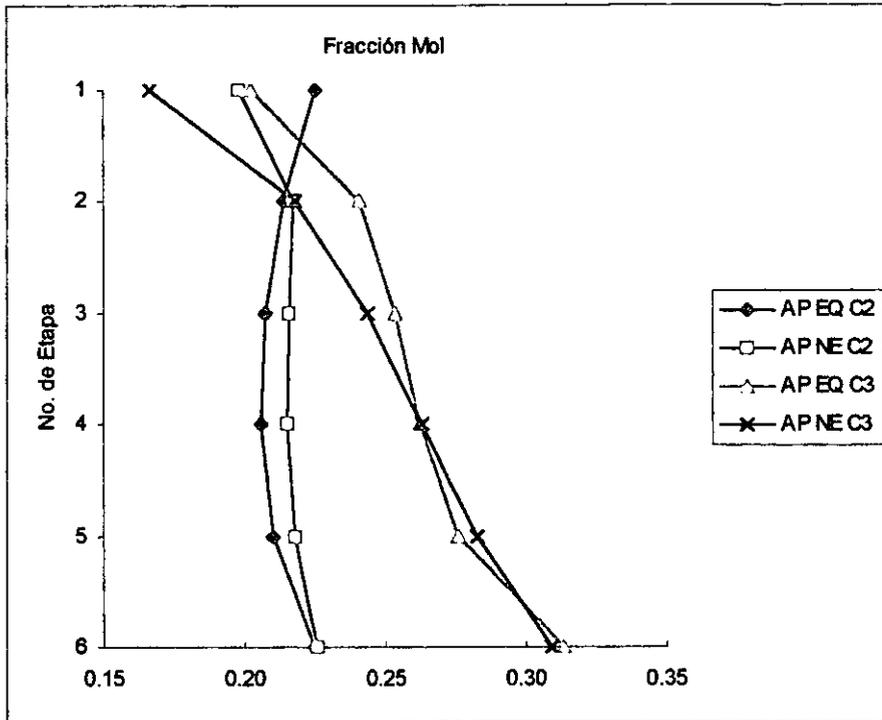


Figura 5.43 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Aspen Plus para el sistema 4

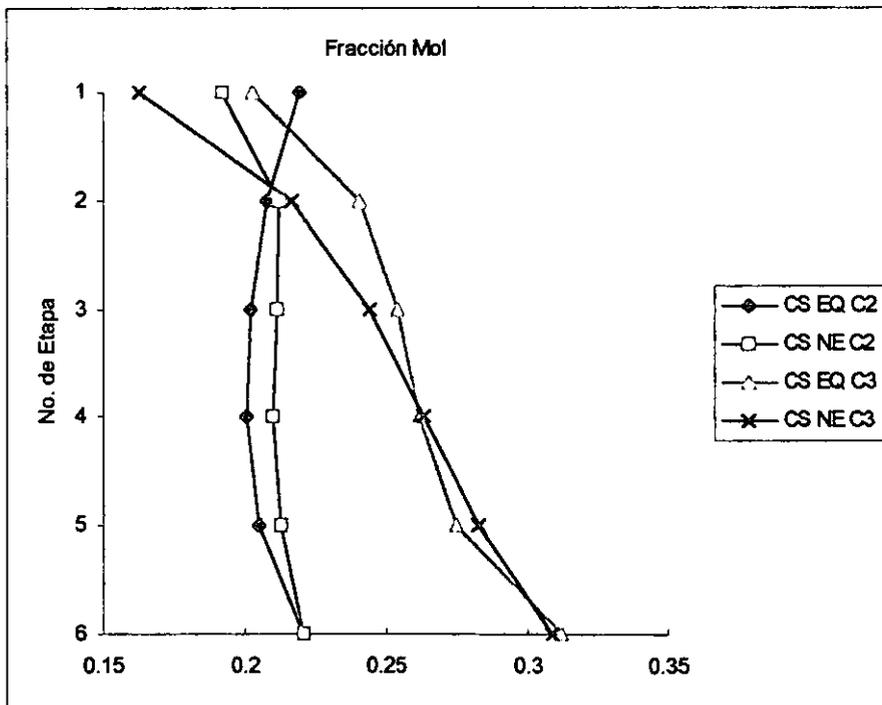


Figura 5.44 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Chemsep para el sistema 4

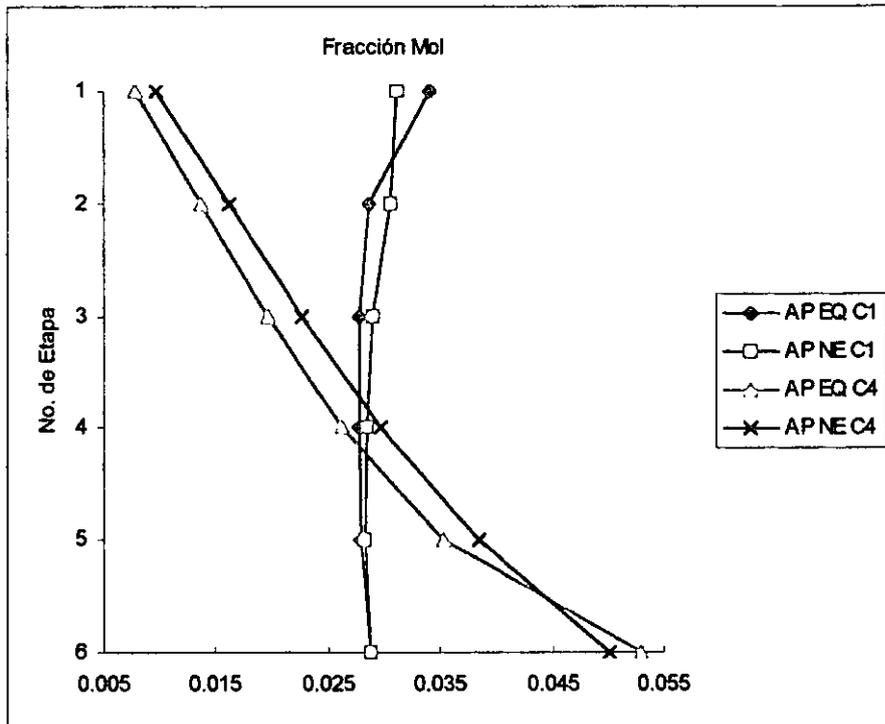


Figura 5.45 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Aspen Plus para el sistema 4

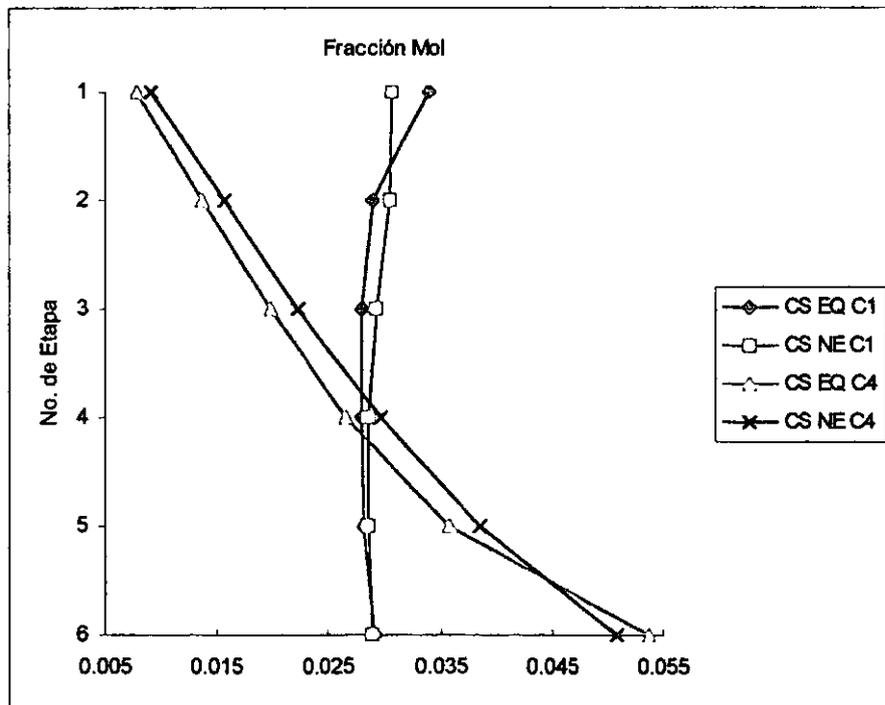


Figura 5.46 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del líquido en Chemsep para el sistema 4

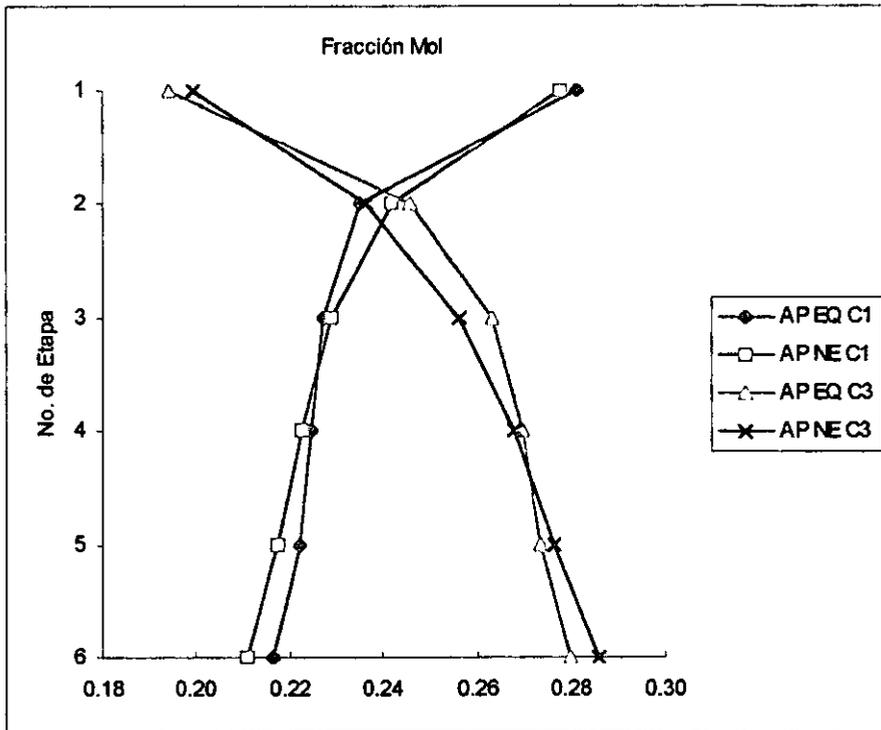


Figura 5.47 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Aspen Plus para el sistema 4

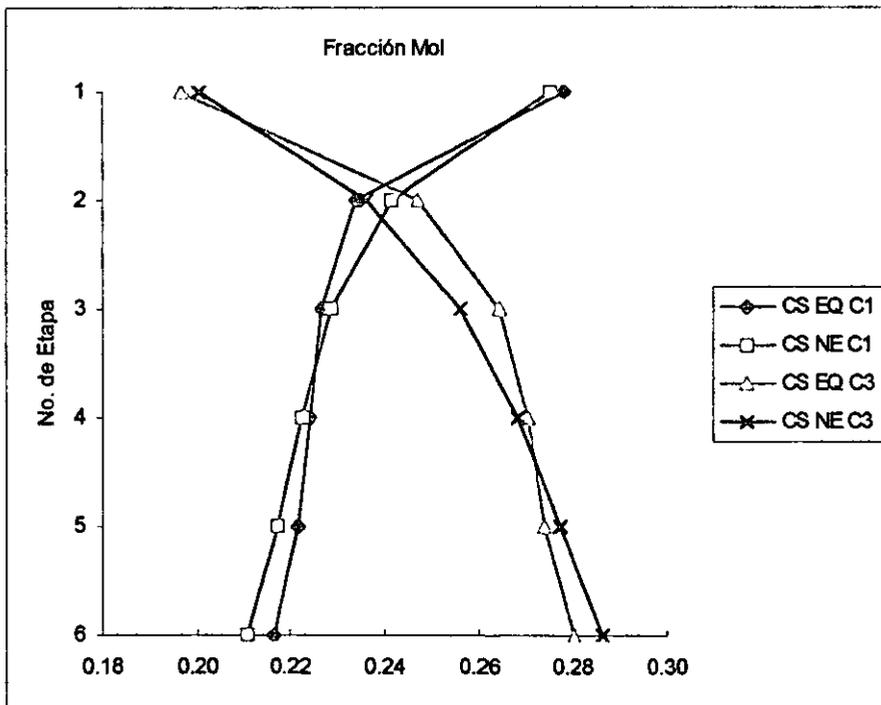


Figura 5.48 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Chemsep para el sistema 4

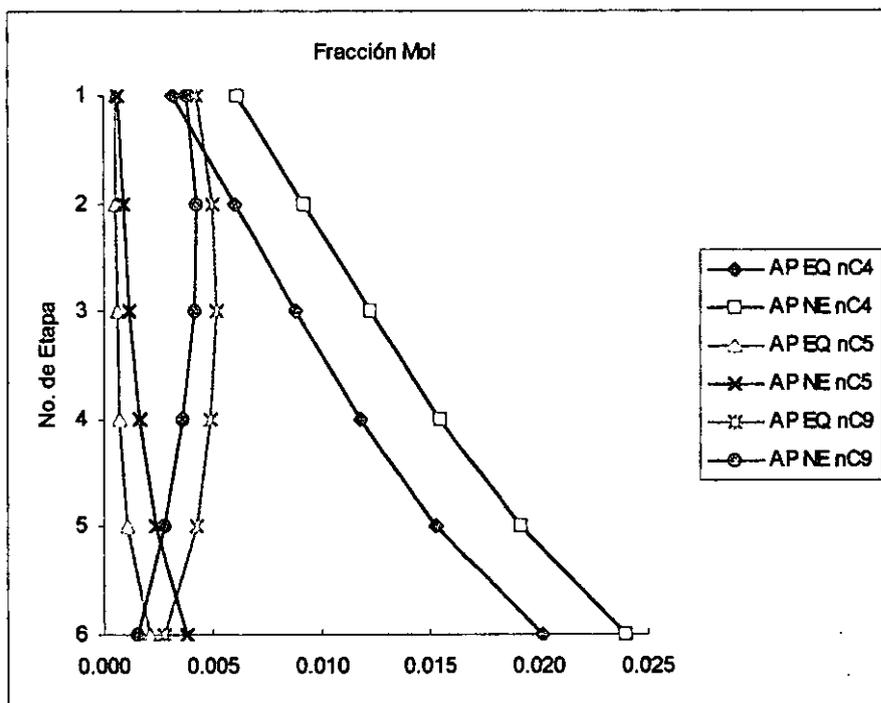


Figura 5.49 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Aspen Plus para el sistema 4

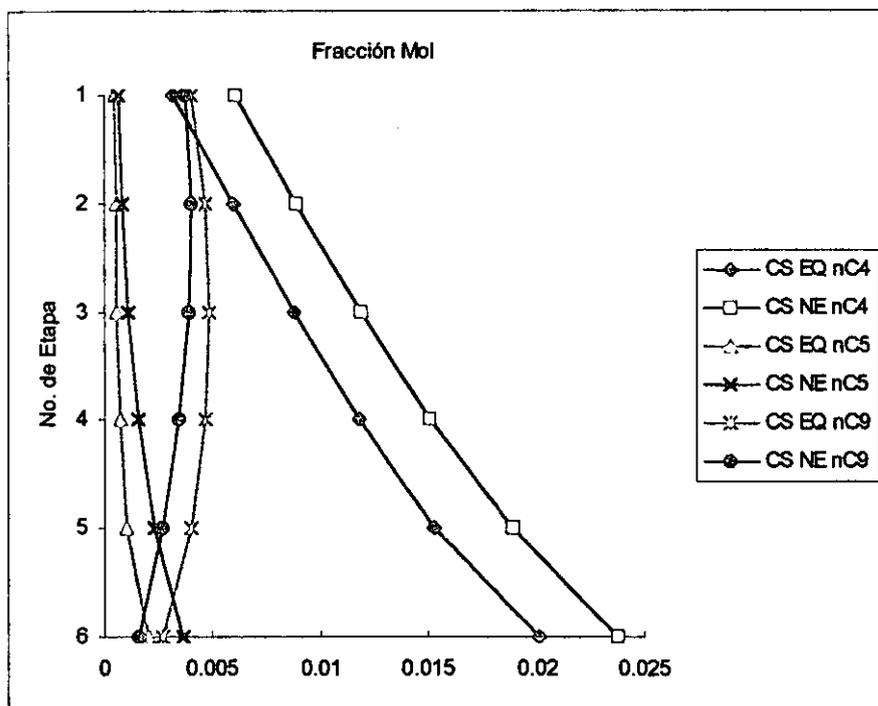


Figura 5.50 Comparación entre Equilibrio y No Equilibrio para la composición del vapor en Chemsep para el sistema 4

Tabla 5.55	Fraccion Mol					
	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
Etapa	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ
1	0.03398	0.22529	0.20236	0.00781	0.00288	0.52768
2	0.02865	0.21399	0.24088	0.01362	0.00289	0.49997
3	0.02783	0.20715	0.25427	0.01959	0.00311	0.48806
4	0.02773	0.20591	0.26230	0.02631	0.00375	0.47401
5	0.02795	0.21006	0.27581	0.03541	0.00567	0.44510
6	0.02890	0.22538	0.31317	0.05300	0.01248	0.36707

Tabla 5.55	Fraccion Mol					
	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
Etapa	NE	NE	NE	NE	NE	NE
1	0.03121	0.19815	0.16661	0.00966	0.00363	0.59074
2	0.03060	0.21725	0.21785	0.01617	0.00393	0.51420
3	0.02908	0.21629	0.24424	0.02264	0.00472	0.48303
4	0.02842	0.21522	0.26309	0.02977	0.00610	0.45740
5	0.02837	0.21783	0.28241	0.03841	0.00843	0.42454
6	0.02882	0.22583	0.30891	0.05021	0.01247	0.37376

Tabla 5.55	Error	Error	Error	Error	Error	Error
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
	%	%	%	%	%	%
1	8.87	13.70	21.46	19.18	20.59	10.67
2	6.39	1.50	10.57	15.80	26.37	2.77
3	4.29	4.23	4.10	13.48	34.17	1.04
4	2.44	4.33	0.30	11.63	38.48	3.63
5	1.50	3.57	2.34	7.82	32.73	4.84
6	0.26	0.20	1.38	5.56	0.06	1.79

Tabla 5.55 Comparación entre las fracciones mol del líquido en Aspen Plus para el sistema 4

Tabla 5.56	Fraccion Mol					
	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
Etapa	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ
1	0.03406	0.21908	0.20271	0.00784	0.00287	0.53343
2	0.02889	0.20821	0.24095	0.01373	0.00286	0.50536
3	0.02808	0.20186	0.25403	0.01980	0.00304	0.49319
4	0.02797	0.20085	0.26181	0.02663	0.00364	0.47910
5	0.02819	0.20504	0.27505	0.03587	0.00555	0.45030
6	0.02912	0.22039	0.31210	0.05367	0.01266	0.37205

Tabla 5.56 Comparación entre las fracciones mol del líquido en Chemsep para el sistema 4

Tabla 5.56	Fraccion Mol					
	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
Etapa	NE	NE	NE	NE	NE	NE
1	0.03065	0.19188	0.16320	0.00924	0.00355	0.60147
2	0.03054	0.21189	0.21659	0.01571	0.00378	0.52149
3	0.02922	0.21129	0.24436	0.02228	0.00452	0.48833
4	0.02861	0.21034	0.26373	0.02960	0.00587	0.46185
5	0.02853	0.21284	0.28289	0.03857	0.00826	0.42891
6	0.02887	0.22040	0.30871	0.05088	0.01265	0.37848

Tabla 5.56	Error	Error	Error	Error	Error	Error
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
	%	%	%	%	%	%
1	11.11	14.17	24.21	15.08	19.22	11.31
2	5.40	1.74	11.25	12.57	24.40	3.09
3	3.88	4.46	3.95	11.13	32.71	1.00
4	2.22	4.51	0.73	10.03	37.93	3.73
5	1.20	3.67	2.77	7.00	32.86	4.99
6	0.88	0.01	1.10	5.48	0.15	1.70

Tabla 5.56 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del líquido en Chemsep para el sistema 4

Tabla 5.57	Fraccion Mol					
	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
Etapa	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ
1	0.28111	0.51651	0.19439	0.00318	0.00052	0.00429
2	0.23493	0.50758	0.24584	0.00604	0.00059	0.00501
3	0.22721	0.49490	0.26320	0.00888	0.00066	0.00516
4	0.22457	0.48840	0.26946	0.01183	0.00079	0.00496
5	0.22197	0.48415	0.27321	0.01524	0.00113	0.00429
6	0.21664	0.47846	0.27975	0.02016	0.00218	0.00281

Tabla 5.57	Fraccion Mol					
	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
Etapa	NE	NE	NE	NE	NE	NE
1	0.27769	0.51213	0.19950	0.00614	0.00070	0.00383
2	0.24207	0.50726	0.23629	0.00916	0.00093	0.00429
3	0.22898	0.49741	0.25600	0.01223	0.00124	0.00415

Tabla 5.57 Comparación entre las fracciones mol del vapor en Aspen Plus para el sistema 4

4	0.22260	0.48898	0.26764	0.01546	0.00170	0.00362
5	0.21750	0.48172	0.27640	0.01917	0.00245	0.00276
6	0.21097	0.47388	0.28583	0.02396	0.00377	0.00158

Tabla 5.57	Error	Error	Error	Error	Error	Error
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
	%	%	%	%	%	%
1	1.23	0.85	2.56	48.30	24.55	12.02
2	2.95	0.06	4.04	34.04	36.64	16.88
3	0.77	0.50	2.81	27.44	47.02	24.33
4	0.88	0.12	0.68	23.51	53.66	36.85
5	2.06	0.51	1.15	20.51	53.81	55.30
6	2.69	0.97	2.13	15.88	42.26	78.19

Tabla 5.57 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del vapor en Aspen Plus para el sistema 4

Tabla 5.58	Fraccion Mol					
	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
Etapa	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ	EQ
1	0.27826	0.51754	0.19652	0.00315	0.00050	0.00403
2	0.23417	0.50710	0.24748	0.00601	0.00055	0.00470
3	0.22664	0.49464	0.26443	0.00884	0.00061	0.00484
4	0.22402	0.48836	0.27044	0.01180	0.00072	0.00467
5	0.22146	0.48420	0.27401	0.01522	0.00104	0.00407
6	0.21625	0.47851	0.28030	0.02015	0.00206	0.00272

Tabla 5.58	Fraccion Mol					
	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
Etapa	NE	NE	NE	NE	NE	NE
1	0.27519	0.51363	0.20075	0.00604	0.00067	0.00372
2	0.24174	0.50837	0.23614	0.00887	0.00086	0.00403
3	0.22874	0.49816	0.25622	0.01186	0.00113	0.00389
4	0.22224	0.48940	0.26825	0.01510	0.00156	0.00344
5	0.21709	0.48193	0.27713	0.01887	0.00229	0.00270
6	0.21065	0.47398	0.28637	0.02377	0.00363	0.00161

Tabla 5.58	Error	Error	Error	Error	Error	Error
	metano	etano	propano	n-butano	n-pentano	n-nonano
	%	%	%	%	%	%
1	1.12	0.76	2.10	47.85	26.04	8.18
2	3.13	0.25	4.80	32.27	35.66	16.69

Tabla 5.58 Comparación entre las fracciones mol del vapor en Chemsep para el sistema 4

3	0.92	0.71	3.21	25.51	46.36	24.46
4	0.80	0.21	0.81	21.88	53.88	35.73
5	2.01	0.47	1.13	19.32	54.61	51.10
6	2.66	0.96	2.12	15.22	43.07	69.39

Tabla 5.58 (continuación) Comparación entre las fracciones mol del vapor en Chemsep para el sistema 4

Quando se comparan los resultados de la fracción mol del vapor con los dos modelos, el error es mayor que el que se obtiene al comparar los resultados para las fracciones mol del líquido. El error es mayor para la fase vapor porque en el modelo de equilibrio la corriente de salida del gas no es tan pura como la que se obtiene con el modelo de no equilibrio, esa composición final esta influenciada por la operación dentro de la columna, de manera que la diferencia de composiciones de un modelo a otro dentro de la columna repercute en la corriente de salida.

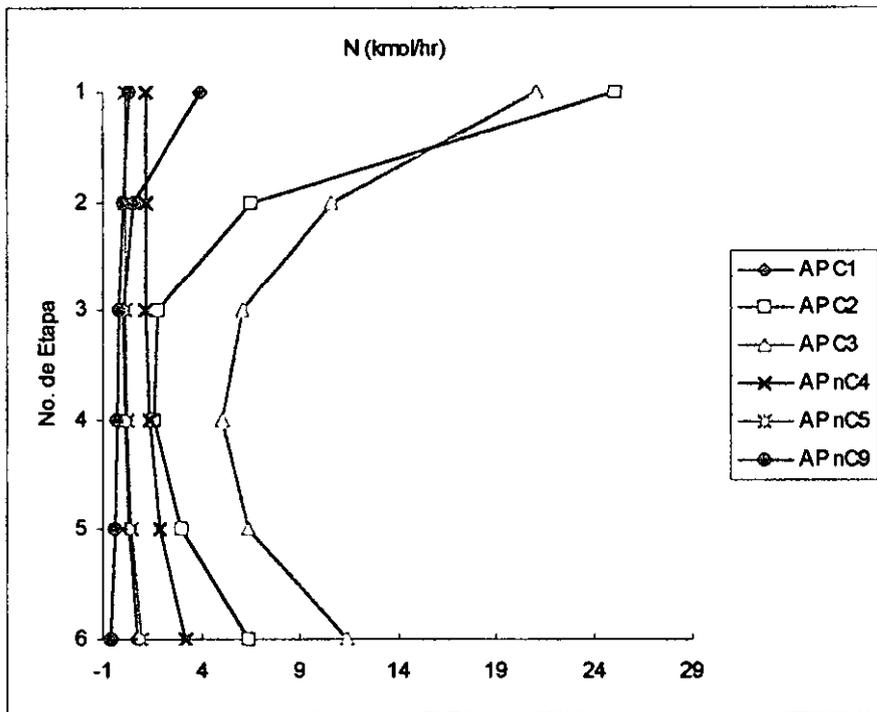


Figura 5.51 Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Aspen Plus para el sistema 4

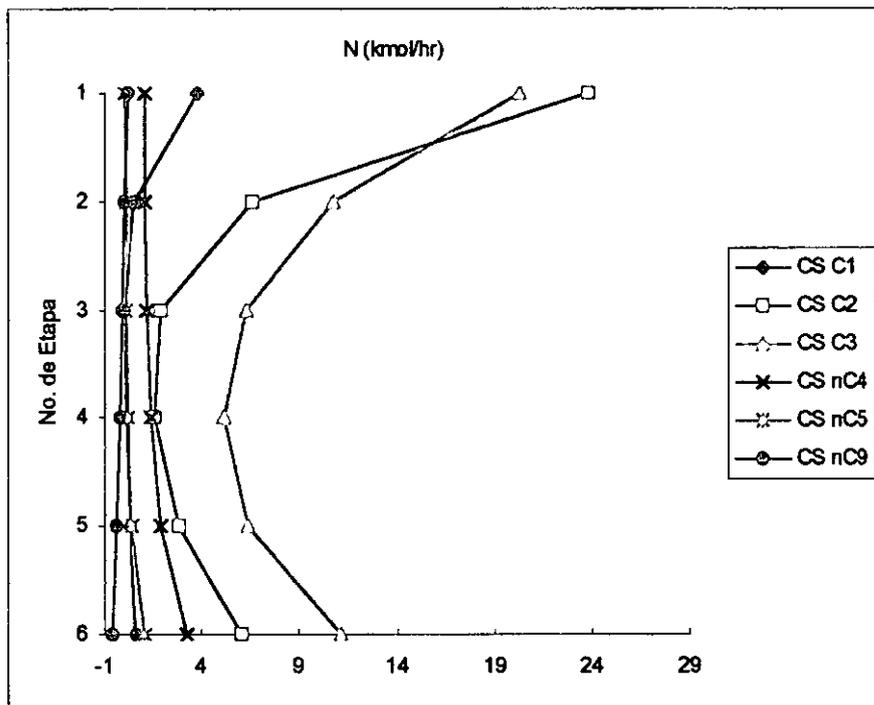


Figura 5.52 Comparación para la rapidez de transferencia de masa en Chemsep para el sistema 4

En las gráficas de rapidez de transferencia de masa se puede ver que los compuestos que se transfieren en mayor cantidad de una fase a la otra son el etano y el propano, por esa razón sus gráficas son más curvas que las de los otros compuestos, todos los demás compuestos se transfieren pero en menor cantidad. El etano se transfiere de la fase vapor a la fase líquida en la parte inferior de la columna, en cambio el propano se transfiere de la fase líquida a la fase vapor en la parte superior de la columna.

Notación

AP	Aspen Plus
C1	metano
C2	etano
C3	propano
C7	n-heptano
CE	Chemsep
EQ	modelo de etapa ideal en equilibrio
I	interfase
L	líquido
MEK	Metil-etil-cetona
nC4	n-butano
nC5	n-pentano

nC9	n-nonano
nC13	n-tridecano
NE	Modelo de etapa en no equilibrio
tol	tolueno
V	vapor

6 Conclusiones

El modelo de etapa ideal en equilibrio considera que las composiciones de los flujos que abandonan las etapas están en equilibrio termodinámico desde el momento en que entran a la etapa, si las etapas estuvieran realmente en equilibrio entonces no habría separación.

Una de las maneras en las que se puede considerar que las etapas no están en equilibrio es con el concepto de las eficiencias, pero surge un nuevo problema porque hay varios conceptos de eficiencia y pueden tomar cualquier valor cuando se trabaja con sistemas multicomponentes.

El modelo de etapa en no equilibrio es nuevo en comparación del modelo de etapa ideal en equilibrio y surge porque las etapas nunca llegan al equilibrio, el modelo se basa en los fenómenos fundamentales y toma en consideración las posibles interacciones que se pueden presentar entre todos los compuestos presentes en el sistema, lo que hace que los resultados obtenidos se apeguen más a la realidad. Además, a diferencia del modelo de etapa ideal en equilibrio, el modelo de etapa en no equilibrio no requiere de eficiencias, porque considera todo lo que ocurre en el proceso de separación y no necesita corregir el error que se comete cuando se considera que los flujos que abandonan las etapas están en equilibrio termodinámico.

El modelo de etapa en no equilibrio es más riguroso. La base que sustenta al modelo es la rapidez de transferencia de masa, las N 's. Las relaciones con las que se obtienen las N 's provienen de los fenómenos fundamentales.

En el modelo de etapa en no equilibrio los balances de materia y de energía se realizan para cada fase presente en el sistema, el único lugar en el que se considera que prevalece el equilibrio es en la interfase. La transferencia de materia y energía que se da a través de la interfase se modela con las ecuaciones de rapidez de transferencia de materia y energía.

Las resistencias que existen a la transferencia de materia y energía se toman en cuenta al separar las ecuaciones de rapidez, de manera que hay una ecuación de rapidez por cada fase presente en el sistema.

En el modelo de etapa en no equilibrio hay 3 temperaturas si el sistema es de 2 fases y hay 6 temperaturas si el sistema es de 3 fases, cuando se usa el modelo de etapa ideal en equilibrio solamente hay una temperatura. Al considerar que hay una temperatura para cada fase se da un primer paso en considerar que el equilibrio no existe.

Si la temperatura de la interfase del modelo de etapa en no equilibrio fuera igual a la temperatura del modelo de etapa ideal en equilibrio entonces los dos modelos

podrían ser equivalentes, pero como se puede ver las temperaturas son distintas y en los sistemas 3 y 4 la diferencia es muy amplia.

El considerar que sólo hay una temperatura lleva a errores que se ven reflejados en los flujos y en las composiciones del líquido y del vapor, ocasionando que los resultados obtenidos no estén apegados a la realidad.

A diferencia del modelo de etapa ideal en equilibrio, en el modelo de etapa en no equilibrio es necesario contar con la información interna de la columna, ya que esa información es necesaria para poder calcular una serie de factores que tienen relación con la rapidez de transferencia de masa. El mejor ejemplo de esto son los coeficientes de transferencia de masa. Lo anterior sugiere que si hay alguna manera en la que se puede mejorar el cálculo de esos factores entonces los resultados obtenidos serán mucho mejores. Un posible uso del modelo de etapa ideal en equilibrio sería proveer una información provisional, proporcionar los estimados iniciales de la columna, que después pueden ser corregidos con el modelo de etapa en no equilibrio.

La rapidez de transferencia de masa sirve para identificar a los compuestos que toman parte en el proceso de separación, y proporciona la información para saber de qué fase a qué fase se lleva a cabo el proceso de transferencia de masa.

El modelo de primera generación es la base de todos los modelos de no equilibrio, de manera que a ese modelo básico se le pueden incorporar los términos que sean necesarios para mejorar el modelo. Los términos que sean considerados, tienen que estar relacionados de alguna manera con la rapidez de transferencia de masa y de energía, ya que si no tienen relación alguna entonces no es necesario incorporarlos al modelo.

7 Bibliografía

1. Baur, R., Higler, A. P., Taylor, R., Krishna, R., "Comparision of equilibrium stage and nonequilibrium stage models for reactive distillation", *Chemical Engineering Journal*, **76**, 33-47, (2000).
2. Bennett, D. L., Agrawal, R., Cook, P. J., "New Pressure Drop Correlation for Sieve Tray Distillation Columns", *AIChE J.*, **29**, 434, (1983).
3. Bravo, J. L., Fair, J. R., "Generalized Correlation for Mass Transfer in Packed Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, **21**, 162, (1982).
4. Bravo, J. L., Rocha, J. A., Fair, J. R., "Mass transfer in gauze packings", *Hydrocarbon Processing*, Enero, **91**, (1985).
5. Chan, H., Fair, J. R., "Prediction of Point Efficiencies on Sieve Trays", *Ind. Eng. Process Des. Develop.*, **23**, (1984).
6. Cussler, E. L., "Diffusion Mass Transfer in Fluid Systems", 2^{da} Edición, Cambridge University Press, Estados Unidos, (1997).
7. Harris, I. J., "Optimum Design of Sieve Trays", *Brit. Chem. Engineering*, **40**, (1965).
8. Higler, A. P., Taylor, R., Krishna, R., "The influence of mass transfer and mixing on the performance of a tray column for reactive distillation", *Che. Eng. Sci.*, **54**, 2873-2881, (1999).
9. <http://www.che.utexas.edu/cache/chemsep.html>
10. <http://www.clarkson.edu/~chengweb/faculty/taylor/chemsep/chemsep.html>
11. <http://www.crsim.utah.edu/~smith/classes/6603>
12. Hugmark, G. A., "Methods for Vapour Phase and Liquid Phase Mass Transfer on Distillation Trays", *AIChE J.*, **17**, (1971).
13. Hung, J., "A Second Generation Nonequilibrium Model for Computer Simulation of Multicomponent Separation Processes", Ph. D. Thesis, Clarkson University, (1991).
14. Kooijman, H. A., Taylor, R., "A Nonequilibrium Model for Dynamic Simulation of Tray Distillation Columns", *AIChE J.*, **41**, 1852-1863, (1995).

15. Kooijman, H. A., Taylor, R., "The Chemsep Book Technical Documentation", CACHE Corporation, 1998.
16. Krishna, R., Wesselingh, J. A., "The Maxwell-Stefan approach to mass transfer", *Che. Eng. Sci.*, **52**, 861-911, (1997).
17. Krishnamurty, R., "Development of a Nonequilibrium Stage Model and its Application to Multicomponent Separation Process Simulation and Design", Ph. D. Thesis, Clarkson University, (1984).
18. Krishnamurty, R., Taylor, R., "A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. I: Model Design and Method of Solution", *AIChE J.*, **31**, 449-456, (1985).
19. Krishnamurty, R., Taylor, R., "A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. II: Comparison with Experiment", *AIChE J.*, **31**, 456-465, (1985).
20. Krishnamurty, R., Taylor, R., "A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. III: The Influence of Unequal Component-Efficiencies in Process Design Problems", *AIChE J.*, **31**, 1973-1985, (1985).
21. Krishnamurty, R., Taylor, R., "Absorber Simulation and Design Using a Nonequilibrium Stage Model", *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, **64**, 96-105, (1986).
22. Lao, M., "Nonequilibrium Models for Multiphase Separation Processes", Ph. D. Thesis, Clarkson University, (1989).
23. Lee, J., Dudukovics, M. P., "A comparison of the equilibrium and nonequilibrium models for a multicomponent reactive distillation column", *Computers and Chemical Engineering*, **23**, 159-172, (1998).
24. Onda, K., Takeuchi, H., Okumoto, Y., "Mass Transfer Coefficients Between Gas and Liquid Phases in Packed Columns", *J. Chem. Eng. Japón*, **1**, 56, (1968)
25. Powers, M. F., Vickery, D. J., Arehole, A., Taylor, R., "A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. V: Computational Methods for Solving the Model Equations", *Computers and Chemical Engineering*, **12**, (1988).
26. Seader, J. D., "The Rate-based Approach for Modeling Staged Separations", *Chemical Engineering Progress*, Octubre, 41-49, (1989).
27. Seader, J. D., Henley, E. J., "Separation Process Principles", John Wiley & Sons, Estados Unidos, (1998).

28. Sorel, M., "La Rectificación de l'alcool", Francia, (1893).
29. Taylor, R., Krishna, R., "Multicomponent Mass Transfer", John Wiley & Sons Inc., Estados Unidos, (1993).
30. Wesselingh, J. A., "Non-Equilibrium Modelling of Distillation", Trans. Institution of Chemical Engineers, parte A, **75**, 529-538, (1997).
31. Wesselingh, J. A., Krishna, R., "Mass Transfer in Multicomponent Mixtures", Delft University Press, Holanda, (2000).
32. Yu, S., Zhou, A., Tan, Q., "Simulation of Multistage Catalytic Stripping with a Nonequilibrium Stage Model", Computers and Chemical Engineering, **21**, 404-415, (1997).
33. Zuiderweg, F. J., "Sieve Trays - A View on the State of the Art", Chem. Eng. Sci., **37**, (1982).