

00579



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

SIMULACIÓN DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN REACTIVA
COMPARANDO LOS MODELOS DE EQUILIBRIO Y NO EQUILIBRIO PARA
LA PLANTA DE MTBE

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN INGENIERÍA QUÍMICA
(P R O C E S O S)
P R E S E N T A :
JUAN ROSENDO DÍAZ MENDOZA



MÉXICO D. F.

2004



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.

17203

ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE MÉXICO

BIOL. FRANCISCO J. INCERA UGALDE.
Jefe de la Unidad de Administración del Posgrado.
Presente.

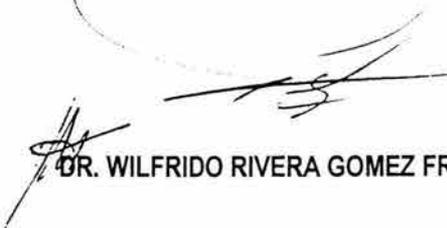
Me es grato informarle que el alumno **JUAN ROSENDO DIAZ MENDOZA** presentará próximamente su examen para obtener el grado de Maestría en Ingeniería Campo de Conocimiento Ingeniería Química Área Procesos Campo Disciplinario Ingeniería de Procesos (Clave 4039), con la tesis **"SIMULACION DE UNA COLUMNA DE DESTILACION REACTIVA COMPARANDO LOS MODELOS DE EQUILIBRIO Y NO EQUILIBRIO PARA LA PLANTA DE MTBE"**, ante el siguiente jurado:

Presidente:	M. en C. Manuel Vázquez Islas (FQ)
Vocal:	Dr. Mario Bravo Medina (U Iberoamericana)
Secretario:	Dr. Martín Guillermo Hernández Luna (FQ)
Primer Suplente:	Dr. Pedro Roquero Tejeda (FQ)
Segundo Suplente:	Dr. Daniel Salazar Sotelo (IMP)

Sin otro particular de momento, aprovecho la ocasión para enviarle un cordial saludo.

Atentamente
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"
Ciudad Universitaria, D. F., 27 de noviembre de 2003.

El Coordinador



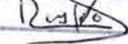
DR. WILFRIDO RIVERA GOMEZ FRANCO

C.c.p. Integrantes del Jurado.
C.c.p. Departamento de Control Escolar de la Facultad de Química.
C.c.p. Interesado.
*ggm.

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.

NOMBRE: Juan Rosendo
Díaz Mendoza

FECHA: 12 - Febrero - 2004

FIRMA: 

Jurado asignado:

Presidente: M. en C. Manuel Vázquez Islas (FQ)
Vocal: Dr. Mario Bravo Medina (U Iberoamericana)
Secretario: Dr. Martín Guillermo Hernández Luna (FQ)
1er. Suplente: Dr. Pedro Roquero Tejeda (FQ)
2do. Suplente: Dr. Daniel Salazar Sotelo (IMP)

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

Asesor:
M. en C. Celestino Montiel Maldonado



Sustentante: Juan Rosendo Díaz Mendoza



DEDICATORIAS

A mi Mamá, a Su Señoría. Gracias por Todo.

Índice

1	Introducción.....	1
2	El Modelo de Etapa en Equilibrio.....	4
3	El Fenómeno de la Transferencia de Masa.....	9
3.1	Transferencia de Masa Interfacial.....	12
3.2	Difusión.....	16
3.2.1	Ley de Fick.....	16
3.2.2	Ecuaciones de Maxwell' Stefan.....	18
3.2.3	Cálculo de los Coeficientes de Difusividad.....	24
3.2.4	Coeficientes de Transferencia de Masa.....	24
3.3	El Problema Bootstrap.....	27
3.3.1	La Matriz Bootstrap.....	31
3.4	Modelos de Transferencia de Masa.....	31
3.5	Transferencia de Masa y de Energía.....	39
3.6	Modelos de Transferencia de Masa y Energía.....	46
4	El Modelo de Etapa en No Equilibrio.....	51
4.1	Modelo de Primera Generación.....	52
4.2	Modelo de Segunda Generación.....	55
4.3	Destilación Reactiva.....	60
4.4	Coeficientes de Transferencia de Masa.....	63
4.4.1	Columnas de Platos.....	64
4.4.2	Columnas Empacadas.....	66
5	Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio.....	72
6	Conclusiones.....	160
7	Bibliografía.....	163
	Apéndice A.....	169
	Apéndice B.....	171
	Apéndice C.....	173
	Apéndice D.....	178
	Apéndice E.....	181
	Apéndice F.....	183
	Apéndice G.....	192

Lista de Tablas

4.1	Correlaciones existentes para calcular los k_{ij} para columnas de platos.....	63
4.2	Correlaciones existentes para calcular los k_{ij} para columnas empacadas.....	64
5.1	Resultados obtenidos usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=17.....	80
5.2	Resultados obtenidos usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=17.....	80
5.3	Resultados obtenidos usando el Modelo de No Equilibrio. N=17.....	80
5.4	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=17.....	81
5.5	Resultados obtenidos usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=17.....	82
5.6	Resultados obtenidos usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=17.....	82
5.7	Resultados obtenidos usando el Modelo de No Equilibrio. N=17.....	82
5.8	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=17.....	83
5.9	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 9 y en la etapa 10 para los Modelos de No Equilibrio y de Equilibrio.....	83
5.10	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=20.....	93
5.11	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=20.....	93
5.12	Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=20.....	93
5.13	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=20.....	94
5.14	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=20.....	95
5.15	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=20.....	95
5.16	Resultados usando el Modelo No Equilibrio. N=20.....	95
5.17	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=20.....	96
5.18	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 12 y en la etapa 13 para los Modelos de No Equilibrio y de Equilibrio.....	96
5.19	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=25.....	107
5.20	Resultados usando el Modelo de Etapa Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=25.....	107
5.21	Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=25.....	108
5.22	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=25.....	108
5.23	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=25.....	109
5.24	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=25.....	109

5.25	Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=25	110
5.26	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=25.....	110
5.27	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=25	111
5.28	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=25	111
5.29	Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=25	112
5.30	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=25.....	112
5.31	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 14, 15 y 16 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=25.....	113
5.32	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 14, 15 y 16 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=25.....	113
5.33	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 14, 15 y 16 para el Modelo de No Equilibrio. N=25.....	114
5.34	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=30.....	123
5.35	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=30	124
5.36	Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=30	124
5.37	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=30.....	124
5.38	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=30	125
5.39	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=30	126
5.40	Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=30	126
5.41	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=30.....	126
5.42	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=30	127
5.43	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=30	128
5.44	Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=30	128
5.45	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=30	128
5.46	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 17, 18 y 19 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=30.....	129
5.47	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 17, 18 y 19 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=30.....	129
5.48	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 17, 18 y 19 para el Modelo de No Equilibrio. N=30.....	130
5.49	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=35	139
5.50	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=35	140
5.51	Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=35	140
5.52	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=35.....	140
5.53	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=35	141

5.54	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=35	142
5.55	Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=35	142
5.56	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=30.....	142
5.57	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=35	143
5.58	Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=35	144
5.59	Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=35	144
5.60	Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=35.....	144
5.61	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 19, 20 y 21 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=35.....	145
5.62	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 19, 20 y 21 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=35.....	145
5.63	Error entre los resultados de alimentar en la etapa 19, 20 y 21 para el Modelo de No Equilibrio. N=35.....	146

Lista de Figuras

1.1	Modelo de etapa en no equilibrio	2
2.1	Modelo de etapa ideal en equilibrio.....	4
2.2	Representación de una columna.....	5
2.3	Representación de una etapa ideal en equilibrio.....	5
3.1	Un ejemplo de difusión	9
3.2	Sistema de dos fases conectadas por medio de una interfase.....	12
3.3	Volumen de control.....	18
3.4	Fenómenos que se pueden presentar en un sistema multicomponente	23
3.5	Perfiles de las fracciones mol en un proceso de transferencia de masa.....	25
3.6	Modelo de película.....	32
3.7	Modelo de penetración	35
3.8	Distribución de edades $\psi(t)$ para el modelo de Higbie	37
3.9	Distribución de edades $\psi(t)$ para el modelo de Danckwerts	37
3.10	Transporte de Masa y de Energía Interfacial	43
4.1	Representación de una etapa en no equilibrio	51
4.2	Representación de una etapa del modelo de segunda generación	55
4.3	Etapa en No Equilibrio con reacción química homogénea	60
4.4	Etapa en No Equilibrio con reacción química heterogénea	61
5.1	Configuración de la columna.....	72
5.2	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 4 a 11. N=17.....	77
5.3	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 5 a 12. N=17.....	78
5.4	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 6 a 13. N=17.....	78
5.5	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 7 a 14. N=17.....	78
5.6	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 8 a 15. N=17.....	79
5.7	Configuración de la columna. Reacción de 4 a 11, alimentaciones en 9 y 11. N=17	79
5.8	Configuración de la columna. Reacción de 4 a 11, alimentaciones en 10 y 11. N=17	81
5.9	Comparación para las Temperaturas para los 2 modelos. N=17.....	84
5.10	Comparación para los Flujos de Líquido para los 2 modelos. N=17.....	84
5.11	Comparación para los Flujos de Vapor para los 2 modelos. N=17.....	84

5.12	Comparación para la Fracción Mol Líquido del Isobuteno para los 2 modelos. N=17.....	85
5.13	Comparación para la Fracción Mol Líquido del 1-Buteno para los 2 modelos. N=17.....	85
5.14	Comparación para la Fracción Mol Líquido del MTBE para los 2 modelos. N=17.....	85
5.15	Comparación para la Fracción Mol Líquido del Metanol para los 2 modelos. N=17.....	86
5.16	Comparación para la Fracción Mol Vapor del Isobuteno para los 2 modelos. N=17.....	86
5.17	Comparación para la Fracción Mol Vapor del 1-Buteno para los 2 modelos. N=17.....	86
5.18	Comparación para la Fracción Mol Vapor del MTBE para los 2 modelos. N=17.....	87
5.19	Comparación para la Fracción Mol Vapor del Metanol para los 2 modelos. N=17.....	87
5.20	Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=17.....	87
5.21	Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=17.	88
5.22	Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa para cada uno de los componentes. N=17.	88
5.23	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 4 a 11. N=20.....	89
5.24	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 5 a 12. N=20.....	89
5.25	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 6 a 13. N=20.....	90
5.26	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 7 a 14. N=20.....	90
5.27	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 8 a 15. N=20.....	90
5.28	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 9 a 16. N=20.....	91
5.29	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 10 a 17. N=20.....	91
5.30	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 11 a 18. N=20.....	91
5.31	Configuración de la columna. Reacción de 7 a 14, alimentaciones en 12 y 14. N=20.....	92
5.32	Configuración de la columna. Reacción de 7 a 14, alimentaciones en 13 y 14. N=20.....	94
5.33	Comparación para las Temperaturas para los 2 modelos. N=20.....	97
5.34	Comparación para los Flujos de Líquido para los 2 modelos. N=20.....	97
5.35	Comparación para los Flujos de Vapor para los 2 modelos. N=20.....	97
5.36	Comparación para la Fracción Mol Líquido del Isobuteno para los 2 modelos. N=20.....	98

5.37	Comparación para la Fracción Mol Líquido del 1-Buteno para los 2 modelos. N=20.....	98
5.38	Comparación para la Fracción Mol Líquido del MTBE para los 2 modelos. N=20.....	98
5.39	Comparación para la Fracción Mol Líquido del Metanol para los 2 modelos. N=20.....	99
5.40	Comparación para la Fracción Mol Vapor del Isobuteno para los 2 modelos. N=20.....	99
5.41	Comparación para la Fracción Mol Vapor del 1-Buteno para los 2 modelos. N=20.....	99
5.42	Comparación para la Fracción Mol Vapor del MTBE para los 2 modelos. N=20.....	100
5.43	Comparación para la Fracción Mol Vapor del Metanol para los 2 modelos. N=20.....	100
5.44	Comparación para la Rapidez de Reacción MTBE para los 2 modelos. N=20.....	100
5.45	Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=20.....	101
5.46	Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa para cada uno de los componentes. N=20.....	101
5.47	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 4 a 11. N=25.....	102
5.48	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 5 a 12. N=25.....	102
5.49	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 6 a 13. N=25.....	103
5.50	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 7 a 14. N=25.....	103
5.51	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 8 a 15. N=25.....	103
5.52	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 9 a 16. N=25.....	104
5.53	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 10 a 17. N=25.....	104
5.54	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 11 a 18. N=25.....	104
5.55	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 12 a 19. N=25.....	105
5.56	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 13 a 20. N=25.....	105
5.57	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 14 a 21. N=25.....	105
5.58	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 15 a 22. N=25.....	106
5.59	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 16 a 23. N=25.....	106
5.60	Configuración de la columna. Reacción de 9 a 16. Alimentaciones en 14 y 16. N=25.....	107

5.61	Configuración de la columna. Reacción de 9 a 16. Alimentaciones en 15 y 16. N=25	109
5.62	Configuración de la columna. Reacción de 9 a 16. Alimentaciones en 16 y 16. N=25	111
5.63	Comparación para las Temperaturas para los 2 modelos. N=25.....	115
5.64	Comparación para los Flujos de Líquido para los 2 modelos. N=25.....	115
5.65	Comparación para los Flujos de Vapor para los 2 modelos. N=25.....	115
5.66	Comparación para la Fracción Mol Líquido del Isobuteno para los 2 modelos. N=25.....	116
5.67	Comparación para la Fracción Mol Líquido del 1-Buteno para los 2 modelos. N=25.....	116
5.68	Comparación para la Fracción Mol Líquido del MTBE para los 2 modelos. N=25.....	116
5.69	Comparación para la Fracción Mol Líquido del Metanol para los 2 modelos. N=25.....	117
5.70	Comparación para la Fracción Mol Vapor del Isobuteno para los 2 modelos. N=25.....	117
5.71	Comparación para la Fracción Mol Vapor del 1-Buteno para los 2 modelos. N=25.....	117
5.72	Comparación para la Fracción Mol Vapor del MTBE para los 2 modelos. N=25.....	118
5.73	Comparación para la Fracción Mol Vapor del Metanol para los 2 modelos. N=25.....	118
5.74	Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=25.....	118
5.75	Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=25	119
5.76	Comparación para los Flujos de Líquido y Vapor para los 2 modelos. N=25.....	119
5.77	Comparación para la Fracción Mol Líquido para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=25.....	119
5.78	Comparación para la Fracción Mol Vapor para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=25.....	120
5.79	Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=25.....	121
5.80	Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa para cada uno de los componentes. N=25	121
5.81	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 4 a 11. N=30.....	122
5.82	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 12 a 19. N=30.....	122
5.83	Configuración de la columna. Reacción de 12 a 19. Alimentaciones en 17 y 19. N=30	123
5.84	Configuración de la columna. Reacción de 12 a 19. Alimentaciones en 18 y 19. N=30	125
5.85	Configuración de la columna. Reacción de 12 a 19. Alimentaciones en 19 y 19. N=30	127
5.86	Comparación para las Temperaturas para los 2 modelos. N=30.....	131

5.87	Comparación para los Flujos de Líquido para los 2 modelos. N=30.....	131
5.88	Comparación para los Flujos de Vapor para los 2 modelos. N=30.....	131
5.89	Comparación para la Fracción Mol Líquido del Isobuteno para los 2 modelos. N=30.....	132
5.90	Comparación para la Fracción Mol Líquido del 1-Buteno para los 2 modelos. N=30.....	132
5.91	Comparación para la Fracción Mol Líquido del MTBE para los 2 modelos. N=30.....	132
5.92	Comparación para la Fracción Mol Líquido del Metanol para los 2 modelos. N=30.....	133
5.93	Comparación para la Fracción Mol Vapor del Isobuteno para los 2 modelos. N=30.....	133
5.94	Comparación para la Fracción Mol Vapor del 1-Buteno para los 2 modelos. N=30.....	133
5.95	Comparación para la Fracción Mol Vapor del MTBE para los 2 modelos. N=30.....	134
5.96	Comparación para la Fracción Mol Vapor del Metanol para los 2 modelos. N=30.....	134
5.97	Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=30.....	134
5.98	Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=30.....	135
5.99	Comparación para los Flujos de Líquido y Vapor para los 2 modelos. N=30.....	135
5.100	Comparación para la Fracción Mol Líquido para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=30.....	135
5.101	Comparación para la Fracción Mol Vapor para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=30.....	136
5.102	Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=30.....	137
5.103	Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa para cada uno de los componentes. N=30.....	137
5.104	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 4 a 11. N=35.....	138
5.105	Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 14 a 21. N=35.....	138
5.106	Configuración de la columna. Reacción de 14 a 21. Alimentaciones en 19 y 21. N=35.....	139
5.107	Configuración de la columna. Reacción de 14 a 21. Alimentaciones en 20 y 21. N=35.....	141
5.108	Configuración de la columna. Reacción de 14 a 21. Alimentaciones en 21 y 21. N=35.....	143
5.109	Comparación para las Temperaturas para los 2 modelos. N=35.....	147
5.110	Comparación para los Flujos de Líquido para los 2 modelos. N=35.....	147
5.111	Comparación para los Flujos de Vapor para los 2 modelos. N=35.....	147
5.112	Comparación para la Fracción Mol Líquido del Isobuteno para los 2 modelos. N=35.....	148

5.113	Comparación para la Fracción Mol Líquido del 1-Buteno para los 2 modelos. N=35.....	148
5.114	Comparación para la Fracción Mol Líquido del MTBE para los 2 modelos. N=35.....	148
5.115	Comparación para la Fracción Mol Líquido del Metanol para los 2 modelos. N=35.....	149
5.116	Comparación para la Fracción Mol Vapor del Isobuteno para los 2 modelos. N=35.....	149
5.117	Comparación para la Fracción Mol Vapor del 1-Buteno para los 2 modelos. N=35.....	149
5.118	Comparación para la Fracción Mol Vapor del MTBE para los 2 modelos. N=35.....	150
5.119	Comparación para la Fracción Mol Vapor del Metanol para los 2 modelos. N=35.....	150
5.120	Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=35.....	150
5.121	Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=35.....	151
5.122	Comparación para los Flujos de Líquido y Vapor para los 2 modelos. N=35.....	151
5.123	Comparación para la Fracción Mol Líquido para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=35.....	151
5.124	Comparación para la Fracción Mol Vapor para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=35.....	152
5.125	Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=35.....	153
5.126	Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa para cada uno de los componentes. N=35.....	153
5.127	Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en la Conversión. N=17.....	156
5.128	Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en las Temperaturas del Líquido y del Vapor. N=17.....	156
5.129	Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en los Flujos del Líquido y del Vapor. N=17.....	156
5.130	Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en las Composiciones del Líquido. N=17.....	157
5.131	Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en las Composiciones del Vapor. N=17.....	157
5.132	Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en la Rapidez de Reacción del MTBE. N=17.....	157
5.133	Comparación entre la Rapidez de Consumo del Isobuteno y la Rapidez de Transferencia de Masa del Isobuteno para el Modelo de Equilibrio (Rama de Alta y Baja Conversión) y para el Modelo de No Equilibrio.....	158

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. Una de las operaciones más usadas es la destilación.

El término destilación reactiva es usado para referirse a un proceso que combina 2 de las operaciones claves de la industria química, reacción y separación, en el mismo equipo. Las ventajas de incorporar una reacción química a una columna de destilación son las siguientes:

- 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 los productos.
- En algunos casos la reacción puede involucrar a los azeótropos, los cuales de esta manera son eliminados del sistema.
- Se evita la formación de subproductos porque se eliminan los productos y los reactivos de la zona de reacción, de manera que la selectividad aumenta.
- Si la reacción es exotérmica, el calor generado puede ser aprovechado para vaporizar las corrientes, lo que se traduce en una integración térmica.

Algunas de las aplicaciones más importantes de la destilación reactiva son: producción de metil acetato a partir de metanol y ácido acético, esterificación de iso-olefinas C_4 y C_5 con metanol o con etanol para producir aditivos para gasolina como el metil ter butil eter (MTBE), etil ter butil eter (ETBE) o ter amil metil eter (TAME).

Una columna de destilación reactiva está dividida en 3 zonas: la zona de reacción, la zona de rectificación y la zona de agotamiento. En la zona de reacción los reactivos son convertidos a productos, la función de la zona de rectificación y de la zona de agotamiento depende del punto de ebullición del producto. 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, mientras que 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 la función de las zonas de rectificación y de agotamiento se intercambia.

En estos procesos es necesario conocer el valor y el comportamiento de: los flujos, las composiciones, las temperaturas y las presiones, ya que a partir de estos datos se podrá saber si la operación alcanzará los objetivos deseados, (tanto de la separación como de la conversión de la reacción) o es necesario cambiar algún parámetro para lograrlos. La manera de conocer esos valores es a través de un modelo que describa adecuadamente 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 simplifica los fenómenos fundamentales por lo que no proporciona resultados reales, una manera en la que se puede mejorar el modelo para que proporcione resultados más apegados a los reales es con el uso del concepto 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 la manera en la que se van a calcular, hay muchas correlaciones empíricas para sistemas particulares o que comparten elementos comunes, pero en el 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 esté basado en los fenómenos fundamentales y 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 entre el transporte de masa y energía y toma en cuenta los aspectos internos del equipo en el cual se va a llevar a cabo la separación y la reacción, por lo que los resultados que son obtenidos están mas apegados a la realidad.

El modelo de etapa en no equilibrio considera que el único lugar en el que hay equilibrio termodinámico es en la interfase y que existe un conjunto de resistencias a la transferencia de masa y energía que provocan una serie de gradientes.

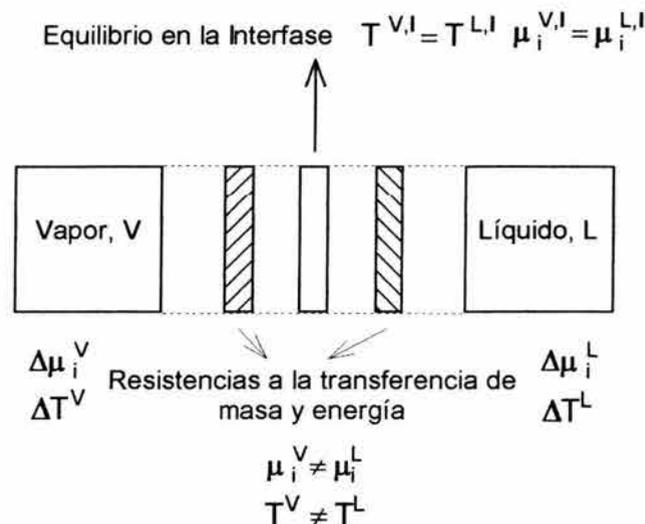


Figura 1.1 Modelo de etapa en no equilibrio

Los procesos de separación involucran el transporte de masa y energía entre diferentes fases con una rapidez que depende de qué 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 qué tan alejado del equilibrio se encuentra el sistema.

En la destilación reactiva, debido a la interacción que existe entre la reacción química y la destilación, es posible que se presenten Múltiples Estados Estacionarios (MEE), los cuales pueden ser estables o inestables. Cuando se presentan MEE no hay una relación 1 a 1 entre las variables de entrada y las variables de salida del proceso. La presencia de MEE tiene muchas implicaciones en la operación y en el control del proceso, ya que ciertos cambios en la operación de la columna pueden provocar el cambio de un estado aceptable (en términos de conversión y de separación), a un estado no aceptable.

Los MEE que se pueden presentar en una columna de destilación son de 3 tipos:

1. MEE de entrada: se presentan cuando hay 2 ó más valores de una variable de entrada que producen el mismo valor de una variable de salida.
2. MEE internos: se presentan cuando, especificando las variables necesarias para satisfacer los grados de libertad del sistema (variables de entrada), hay diferencias entre los flujos internos de la columna que dan origen al mismo valor de las variables de salida.
3. MEE de salida: se presentan cuando, especificando las variables necesarias para satisfacer los grados de libertad del sistema (variables de entrada), hay 2 ó más valores que pueden tomar las variables de salida y los flujos internos.

Como es importante saber el comportamiento de una columna de destilación reactiva, para saber si va a cumplir con los objetivos deseados y si presenta MEE, esta tesis tiene como objetivos:

- Hacer una comparación entre los resultados que se obtienen al simular una columna de destilación reactiva, usando el modelo de etapa en equilibrio y usando el modelo de etapa en no equilibrio.
- Hacer un análisis y comparación de los resultados de la columna en aquellos casos en los que se presenten MEE.

2 El Modelo de Etapa en Equilibrio

El modelo de etapa ideal en equilibrio toma en cuenta las siguientes consideraciones:

- La operación llega al estado estacionario.
- El sistema alcanza el equilibrio mecánico (la presión de la fase vapor es igual a la presión de la fase líquida).
- El vapor y el líquido están perfectamente mezclados y se considera que están en equilibrio termodinámico.
- El calor de mezclado puede ser despreciado.
- La reacción se lleva a cabo en la fase líquida.

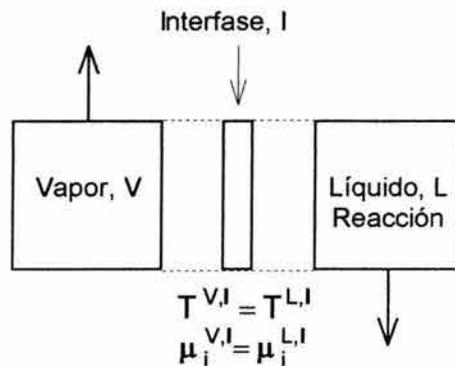


Figura 2.1 Modelo de etapa ideal en equilibrio

Las operaciones de separación como la destilación, se llevan a cabo en columnas que están constituidas internamente por una serie de platos o pueden estar empacadas de manera aleatoria o con un empaque estructurado, 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 y la reacción, en el caso de que se necesite un catalizador, los platos o el material de empaque pueden servir como el medio de soporte para el catalizador.

Cuando se usa el modelo de etapa en equilibrio se considera que los flujos están en equilibrio termodinámico, 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, las cuales sirven para cuantificar qué 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 $+\infty$. Además en la zona de reacción de una columna de destilación

reactiva no hay un concepto de eficiencia que pueda ser utilizado, ya que ninguno considera la presencia de una reacción química. 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 el de altura equivalente a un plato teórico (HETP).

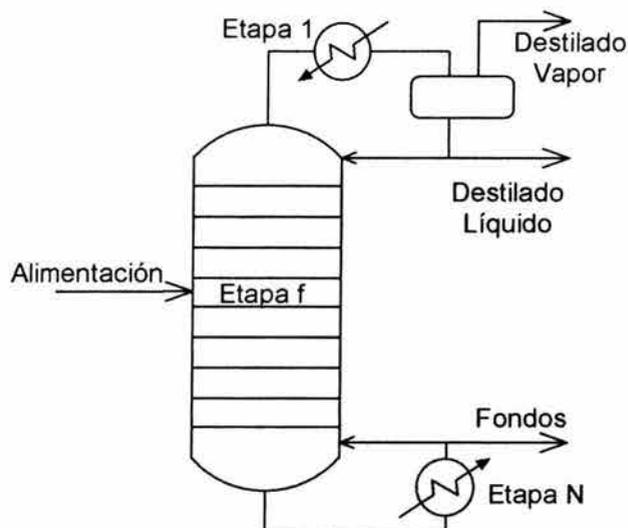


Figura 2.2 Representación de una columna

La columna está 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.

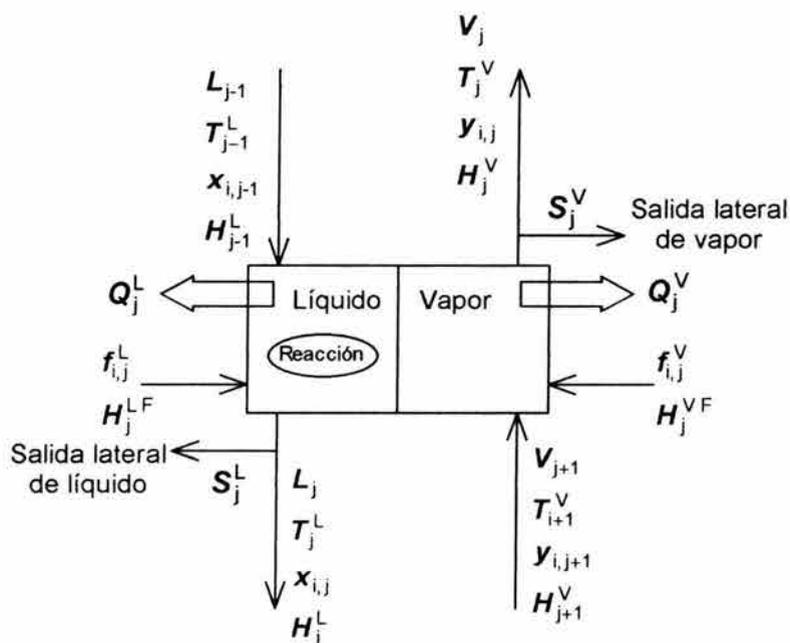


Figura 2.3 Representación de una etapa ideal en equilibrio

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

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

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

$$M_j^T \equiv (1+r_j^V)V_j + (1+r_j^L)L_j - V_{j+1} - L_{j-1} - F_j^V - F_j^L - \sum_{m=1}^r \sum_{i=1}^C v_{i,m} R_{m,j} \epsilon_j = 0 \quad (2-2)$$

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

→ las relaciones de equilibrio

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

→ las relaciones que establecen que la suma de las fracciones mol del vapor y del líquido deben 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

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

si el estado de referencia de las entalpías es el elemental, entonces no es necesario escribir el término del calor de reacción porque ya estaría considerado.

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 las ecuaciones de la suma 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, y además no hay ninguna eficiencia para la zona de reacción de las columnas.

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. Los resultados de este modelo representan el caso límite al que se podría llegar, además pueden ser utilizados como estimados iniciales para modelos más estrictos como el de etapa en no equilibrio.

Nomenclatura

C	número de componentes [-]
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	número de reacciones [-]
r	relación de la corriente lateral al flujo interetapa [-]

R	rapidez de reacción [$\text{mol}/\text{m}^3\text{s}$]
S	ecuación de suma de las fracciones mol
S	flujo lateral [kmol/s]
T	temperatura [K]
V	flujo molar del vapor [kmol/s]
x	fracción mol en la fase líquida [-]
y	fracción mol en la fase vapor [-]

Letras Griegas

ϵ	volumen de reacción [m^3]
ν	coeficiente estequiométrico [-]

Subíndice

<i>i</i>	número de componente [-]
<i>j</i>	número de etapa [-]

Superíndice

L	líquido
V	vapor

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 existir 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.

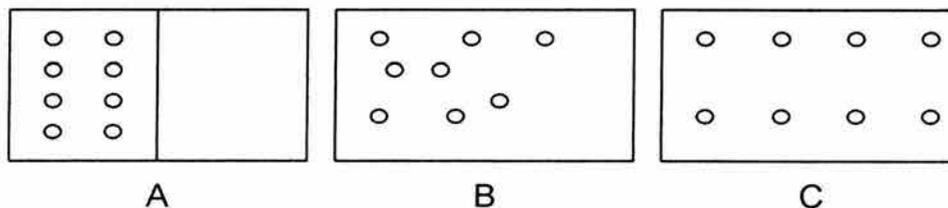


Figura 3.1 Un ejemplo de difusión. A) La concentración en el sistema es distinta, y hay una barrera que impide la difusión; B) la barrera es retirada y el compuesto se empieza a difundir hasta que; en C) la concentración es la misma en todo el sistema

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 u_i es la velocidad media del componente "i" en la dirección "x" con respecto a un sistema de coordenadas estacionario, se define el flux molar difusivo como

$$J_i = c_i(u_i - u^A) \quad (3-1)$$

y el flux másico difusivo se define como

$$j_i = \rho_i(u_i - u^A) \quad (3-2)$$

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 está en moles, en la cual la velocidad de referencia u^A es la velocidad molar promedio

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

en donde

$$c_t = \sum_{i=1}^n c_i \quad (3-10)$$

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

$$u^A = v = \frac{1}{\rho_t} \sum_{i=1}^n \rho_i u_i = \sum_{i=1}^n w_i u_i \quad (3-11)$$

en donde

$$\rho_t = \sum_{i=1}^n \rho_i \quad (3-12)$$

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

$$N_t = \sum_{i=1}^n N_i = c_t \bar{u} \quad (3-13)$$

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

$$n_t = \sum_{i=1}^n n_i = \rho_t v \quad (3-14)$$

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

$$J_i = c_i(u_i - \bar{u}) = c_i u_i - c_i \bar{u} \quad (3-15)$$

$$\sum_{i=1}^n J_i = N_t - N_t = 0 \quad (3-16)$$

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 N_i está relacionado con el flux molar difusivo J_i a través de

$$N_i = J_i + c_i \bar{u} \quad (3-17)$$

$$N_i = J_i + x_i N_t \quad (3-18)$$

lo que proporciona una relación para calcular el flux molar N_i a través de J_i y de 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

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

$$\sum_{i=1}^n j_i = n_t - n_t = 0 \quad (3-20)$$

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

$$n_i = j_i + \rho_i v \quad (3-21)$$

$$n_i = j_i + w_i n_t \quad (3-22)$$

La ecuación (3-22) es equivalente a (3-18) 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.

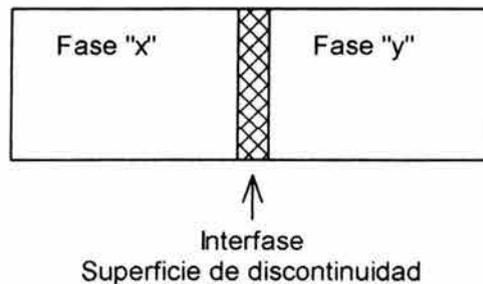


Figura 3.2 Sistema de dos fases conectadas por medio de una interfase

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:

$$\frac{\partial(\rho_t \Psi)}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho_t \Psi \mathbf{v}\} + \nabla \cdot \Phi = \zeta \quad (3-23)$$

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 "I" se tienen condiciones de salto, o condiciones a la frontera, que tienen que cumplir la siguiente ecuación

$$\zeta \cdot \{\Phi^y + \rho_t^y \Psi^y (\mathbf{v}^y - \mathbf{u}^I) - \Phi^x - \rho_t^x \Psi^x (\mathbf{v}^x - \mathbf{u}^I)\} = \zeta^I \quad (3-24)$$

en donde

- ζ = la unidad normal a "I" que va de la fase "x" a la fase "y"
- ζ^I = la rapidez de producción de la cantidad del campo por unidad de área en la interfase "I"
- \mathbf{u}^I = la velocidad de la interfase "I"

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)

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

- 2. Conservación de la masa total de la mezcla

$$\psi = 1 \quad ; \quad \Phi = 0 \quad ; \quad \zeta = 0 \quad ; \quad \zeta^I = 0$$

- 3. Conservación del momentum lineal

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

en donde

$\rho = pI + \tau$ es el tensor de presión

p = es la presión termodinámica

τ = el tensor de fuerza

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

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

en donde

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

\mathbf{q} = el flux de calor conductivo

H_i = la entalpia parcial específica del componente "i"

El juego de ecuaciones anteriores (3-23) y (3-24) 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 (3-23) y es

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \{ \rho_i \mathbf{v} \} + \nabla \cdot \mathbf{j}_i = \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \rho_i \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_i + \nabla \cdot \mathbf{j}_i = 0 \quad (3-25)$$

y para la mezcla total la ecuación queda como

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \nabla \cdot \{ \rho_t \mathbf{v} \} = \frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \rho_t \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \rho_t = 0 \quad (3-26)$$

Como $\rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ la ecuación (3-25) se puede simplificar si se usa la siguiente ecuación

$$\frac{d}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \quad (3-27)$$

$$\rho_t \frac{d \mathbf{w}_i}{dt} \equiv \rho_t \left\{ \frac{\partial \mathbf{w}_i}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{w}_i \right\} + \nabla \cdot \mathbf{j}_i = 0 \quad (3-28)$$

en donde

$$\rho_i = \rho_t w_i \quad (3-29)$$

La velocidad de referencia \mathbf{v} se puede eliminar de la ecuación (3-28) si se expresa en términos de los fluxes másicos \mathbf{n}_i quedando

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{n}_i = 0 \quad (3-30)$$

La ecuación (3-30) se puede sumar para todos los compuestos presentes obteniendo así el balance diferencial que determina la continuidad de la masa total de la mezcla

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{n}_t = 0 \quad (3-31)$$

Las ecuaciones (3-30) y (3-31) 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

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_i = 0 \quad (3-32)$$

$$\frac{\partial c_t}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_t = 0 \quad (3-33)$$

En la interfase, la ecuación que se aplica se obtiene a partir de (3-24) y es

$$\xi \cdot \mathbf{c}_i^x (\mathbf{u}_i^x - \mathbf{u}^l) = \xi \cdot \mathbf{c}_i^y (\mathbf{u}_i^y - \mathbf{u}^l) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3-34)$$

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 (3-34) queda como

$$\xi \cdot \mathbf{N}_i^x = \xi \cdot \mathbf{N}_i^y \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3-35)$$

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 (3-35) indica que si la interfase no está en movimiento, entonces los fluxes de la fase "x" y de la fase "y" deben ser iguales.

Con las ecuaciones (3-30), (3-31), (3-32), (3-33) y (3-35) se obtiene el valor de los fluxes molares, los cuales se pueden conocer a través 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 N_i que son iguales a $N_i = J_i + x_i N_t$, si se reescribe la ecuación anterior se tiene que

$$N_i = J_i + x_i \sum_{i=1}^n N_i \quad (3-36)$$

de donde se puede ver que es necesario calcular el valor del 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, 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 [18, 36, 62, 68] 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:

$$J_A = -c_t D_{FbAB} \nabla x_A \quad (3-37)$$

$$j_A = -\rho_t D_{FbAB} \nabla w_A \quad (3-38)$$

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

Si se usan (3-15) y (3-37) para un sistema binario, se tiene que

$$J_1 = c_1(u_1 - \bar{u}) = -c_t D_{Fb12} \nabla x_1 \quad (3-39)$$

y como únicamente hay un flux independiente, pues de la ecuación (3-16) se sabe que $\sum_{i=1}^n J_i = 0$ el flux molar difusivo para la especie 2 queda como

$$J_2 = -J_1 = c_2(u_2 - \bar{u}) = -c_t D_{Fb21} \nabla x_2 \quad (3-40)$$

y para un sistema binario se cumple que

$$D_{Fb12} = D_{Fb21} \quad (3-41)$$

– Sistemas Multicomponentes

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

$$J_1 = -c_t D_{F11} \nabla x_1 - c_t D_{F12} \nabla x_2 \quad (3-42)$$

$$J_2 = -c_t D_{F21} \nabla x_1 - c_t D_{F22} \nabla x_2 \quad (3-43)$$

$$J_3 = -J_1 - J_2 \quad (3-44)$$

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

$$\begin{aligned} J_1 &= -c_t D_{F11} \nabla x_1 - c_t D_{F12} \nabla x_2 \dots - c_t D_{F1,n-1} \nabla x_{n-1} \\ J_2 &= -c_t D_{F21} \nabla x_1 - c_t D_{F22} \nabla x_2 \dots - c_t D_{F2,n-1} \nabla x_{n-1} \\ &\vdots \\ J_i &= -c_t D_{Fi1} \nabla x_1 - c_t D_{Fi2} \nabla x_2 \dots - c_t D_{Fi,n-1} \nabla x_{n-1} \\ &\vdots \\ J_{n-1} &= -c_t D_{F_{n-1,1}} \nabla x_1 - c_t D_{F_{n-1,2}} \nabla x_2 \dots - c_t D_{F_{n-1,n-1}} \nabla x_{n-1} \end{aligned} \quad (3-45)$$

si la ecuación (3-45) se escribe en forma matricial queda como

$$(J) = -c_t [D_F](\nabla x) \quad (3-46)$$

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 experimentales, 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 [36, 62, 68] 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 que exista una resistencia al movimiento de las moléculas.

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

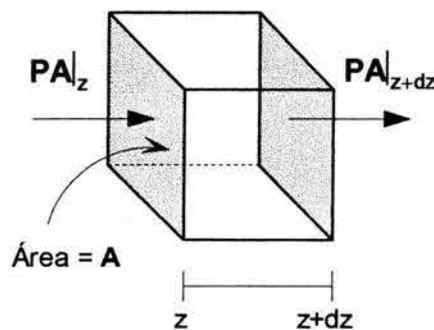


Figura 3.3 Volumen de control

$$\sum \text{Fuerzas actuando en el sistema} \propto \text{Rapidez de cambio del momentum del sistema} \quad (3-47)$$

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 \bar{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

$$\begin{aligned} \text{Número de choques entre 1 y 2} &\propto x_1 x_2 & (3-48) \\ \text{por unidad de volumen por} & & \\ \text{unidad de tiempo} & & \end{aligned}$$

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 (3-47) 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 $\mathbf{PA}|_z$ y la que es ejercida sobre la pared derecha que es $\mathbf{PA}|_{z+dz}$.

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 $\mathbf{p}_1 \mathbf{A}|_z$, en donde $\mathbf{p}_1 = \mathbf{P} x_1$, y la fuerza que es ejercida por las moléculas de 1 sobre la pared derecha es $\mathbf{p}_1 \mathbf{A}|_{z+dz}$.

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

$$\begin{aligned} \text{Fuerza neta ejercida por las moléculas de la especie 1} &= \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{(\mathbf{p}_1|_z - \mathbf{p}_1|_{z+dz})}{\Delta z} \\ \text{por unidad de volumen en la dirección } z & & (3-49) \end{aligned}$$

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

$$\text{Fuerza neta actuando sobre las moléculas de 1} = -\nabla p_1 \quad (3-50)$$

por unidad de volumen

y la ecuación (3-47) queda como

$$-\nabla p_1 \propto (x_1 x_2 (u_1 - u_2)) \quad (3-51)$$

para quitar la proporcionalidad se multiplica por una constante

$$\nabla p_1 = -f_{12} x_1 x_2 (u_1 - u_2) \quad (3-52)$$

$$d_1 = \left(\frac{1}{P}\right) \nabla p_1 = -\frac{x_1 x_2 (u_1 - u_2)}{D_{MS12}} \quad (3-53)$$

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

$$d_2 = \left(\frac{1}{P}\right) \nabla p_2 = -\frac{x_1 x_2 (u_2 - u_1)}{D_{MS21}} \quad (3-54)$$

– 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

$$d_1 = -\frac{x_1 x_2 (u_1 - u_2)}{D_{MS12}} - \frac{x_1 x_3 (u_1 - u_3)}{D_{MS13}} \quad (3-55)$$

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

$$d_2 = -\frac{x_2 x_1 (u_2 - u_1)}{D_{MS21}} - \frac{x_2 x_3 (u_2 - u_3)}{D_{MS23}} \quad (3-56)$$

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

$$d_3 = -\frac{x_3 x_1 (u_3 - u_1)}{D_{MS31}} - \frac{x_3 x_2 (u_3 - u_2)}{D_{MS32}} \quad (3-57)$$

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

$$d_i = -\sum_{j=1}^n \frac{x_i x_j (u_i - u_j)}{D_{MSij}} \quad (3-58)$$

$$d_i = \sum_{j=1}^n \frac{(x_i N_j - x_j N_i)}{c_t D_{MSij}} \quad (3-59)$$

$$d_i = \sum_{j=1}^n \frac{(x_i J_j - x_j J_i)}{c_t D_{MSij}} \quad (3-60)$$

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 (3-60) expresada de esta manera queda como

$$c_t d_i = -B_{ii} J_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n-1} B_{ij} J_j \quad (3-61)$$

y los coeficientes de B están definidos por

$$B_{ii} = \frac{x_i}{D_{MSin}} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n \frac{x_k}{D_{MSik}} \quad (3-62)$$

$$B_{ij} = -x_i \left(\frac{1}{D_{MSij}} - \frac{1}{D_{MSin}} \right) \quad (3-63)$$

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 (3-61) que use los N_i en lugar de los J_i .

Si la ecuación (3-61) se escribe en forma matricial en (n-1) dimensiones se tiene que

$$\mathbf{c}_t(\mathbf{d}) = -[\mathbf{B}](\mathbf{J}) \quad (3-64)$$

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

Si se despeja (\mathbf{J}) se tiene que

$$(\mathbf{J}) = -\mathbf{c}_t[\mathbf{B}]^{-1}(\mathbf{d}) \quad (3-65)$$

de manera que conociendo el valor de $[\mathbf{B}]$ y de (\mathbf{d}) es posible calcular el valor de \mathbf{J}_i .

– Ecuación de Maxwell-Stefan para fluidos No Ideales

Para un fluido no ideal, \mathbf{d}_i es un gradiente que está definido como

$$\mathbf{d}_i \equiv \frac{\mathbf{x}_i}{RT} \nabla_{T,P} \mu_i \quad (3-66)$$

donde μ_i es el potencial químico de la especie "i" y los subíndices T y P indican que al hacer el gradiente T y P se consideran constantes.

\mathbf{d}_i en función de los gradientes de las fracciones mol queda como

$$\mathbf{d}_i = \sum_{j=1}^{n-1} \Gamma_{ij} \nabla \mathbf{x}_j \quad (3-67)$$

en donde Γ es

$$\Gamma_{ij} = \delta_{ij} + \mathbf{x}_i \left. \frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial \mathbf{x}_j} \right|_{T,P,\Sigma} \quad (3-68)$$

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 .

$$\Gamma_{ij} = \delta_{ij} + \mathbf{x}_i \left. \frac{\partial \ln \phi_i}{\partial \mathbf{x}_j} \right|_{T,P,\Sigma} \quad (3-69)$$

si la ecuación (3-67) se escribe en forma matricial en "n-1" dimensiones queda de la siguiente forma

$$(\mathbf{d}) = [\Gamma](\nabla \mathbf{x}) \quad (3-70)$$

y sustituyendo en la ecuación (3-64) se tiene

$$c_i[\Gamma](\nabla \mathbf{x}) = -[\mathbf{B}](\mathbf{J}) \quad (3-71)$$

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

$$(\mathbf{J}) = -c_i[\mathbf{B}]^{-1} [\Gamma](\nabla \mathbf{x}) \quad (3-72)$$

La ecuación (3-72) es otra manera distinta a (3-63) para calcular J_i con una diferencia sustancial, la presencia de la matriz de factores de corrección Γ , por lo que el N_i calculado es más exacto que el calculado con (3-63).

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 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.

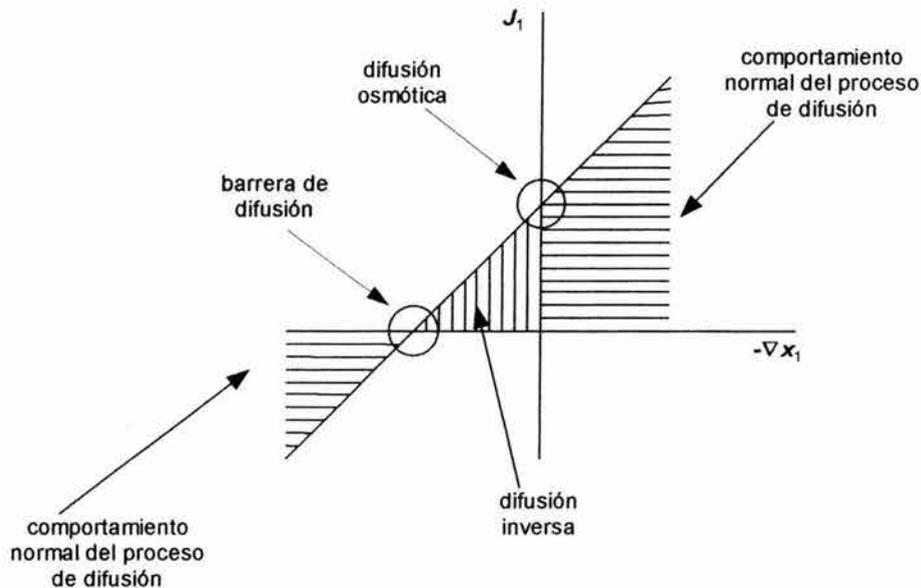


Figura 3.4 Fenómenos que se pueden presentar en un sistema multicomponente

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

$$[D_F] = [B]^{-1} [\Gamma] \quad (3-73)$$

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 [36, 53, 62, 68].

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_{il} e y_{il} . 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".

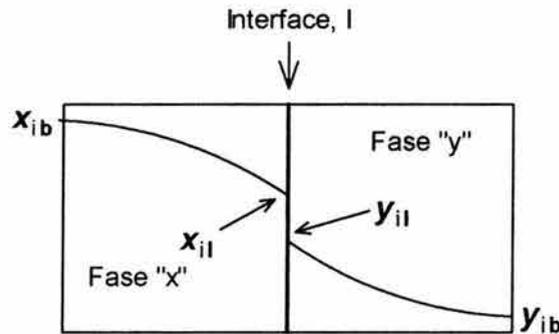


Figura 3.5 Perfiles de las fracciones mol en un proceso de transferencia de masa

– Coeficientes de Transferencia de Masa Binarios

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

$$k_b = \lim_{N_i \rightarrow 0} \frac{N_{ib} - x_{ib} N_t}{c_t (x_{ib} - x_{il})} = \frac{J_{ib}}{c_t \Delta x_i} \tag{3-74}$$

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 $J_i = c_t x_i (u_i - \bar{u})$ y la ecuación (3-74) queda como

$$k_b = \frac{c_t x_i (u_i - \bar{u})}{c_t \Delta x_i} = \frac{(u_i - \bar{u})}{\Delta x_i / x_i} \tag{3-75}$$

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 (3-74), los perfiles no son alterados. En condiciones reales el coeficiente de transferencia de masa es

$$k_b^* = \frac{N_{ib} - x_{ib} N_t}{c_t (x_{ib} - x_{il})} = \frac{J_{ib}}{c_t \Delta x_i} \quad (3-76)$$

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

$$k_b^* = k_b \Xi_b \quad (3-77)$$

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

$$(J_b) = (N) - (x_b) N_t = c_t [k_b^*] (x_b - x_i) = c_t [k_b^*] (\Delta x) \quad (3-78)$$

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

$$[k_b^*] = [k_b] [\Xi_b] \quad (3-79)$$

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

En la ecuación (3-78) se definió una matriz $[k_b^*]$ de $(n-1) \times (n-1)$ elementos, pero puede haber varios grupos de coeficientes k_{bij}^* 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 $AB=C$ y si $AD=C$ no se cumple necesariamente que $B=D$, como se puede ver en el siguiente ejemplo:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \text{ pero también se cumple que } \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

– Correlaciones de Coeficientes de Transferencia de Masa

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

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 característica 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 correlaciones fluido-fluido se usan en destilación, absorción, extracción líquido-líquido 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 [62, 68], 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.

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

$$\sum_{i=1}^n v_i N_i = 0 \quad (3-80)$$

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 (3-80) que contenga a los v_i , la expresión parte de relacionar los N_i , los J_i y los v_i mediante la ecuación

$$v_i N_i = v_i J_i + v_i x_i N_t \quad (3-81)$$

si la ecuación (3-81) se suma para todos los componentes se tiene

$$\sum_{i=1}^n v_i J_i + N_t \sum_{i=1}^n v_i x_i = 0 \quad (3-82)$$

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

$$N_t = -\left(\frac{\sum_{i=1}^n v_i J_i}{\sum_{i=1}^n v_i x_i} \right) = -\sum_{k=1}^{n-1} \Lambda_k J_k \quad (3-83)$$

y en donde los coeficientes Λ_k son

$$\Lambda_k = (v_k - v_n) / \sum_{j=1}^n v_j x_j \quad (3-84)$$

La ecuación (3-84) 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 (3-83) en (3-18)

$$N_i = \sum_{k=1}^{n-1} \beta_{ik} J_k \quad (3-85)$$

en donde el valor de los β_{ik} es

$$\beta_{ik} \equiv \delta_{ik} - x_i \Lambda_k \quad (3-86)$$

y δ_{ik} es la delta de Kronecker. La ecuación (3-85) 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

$$N_i = J_i \quad (N_t = 0) \quad (3-87)$$

y además todas las v_i tienen el mismo valor

$$v_i = v_n \quad (N_t = 0) \quad i = 1, 2, \dots, n-1 \quad (3-88)$$

y β_{ik} se reduce a δ_{ik} .

- Destilación Multicomponente

En este caso se tiene que

$$\sum_{i=1}^n N_i \Delta H_{vap,i} = 0 \quad (3-89)$$

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

$$v_i = \Delta H_{vap,i} \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3-90)$$

- 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

$$N_n = J_n + x_n N_t = 0 \quad (3-91)$$

y despejando el flux total se tiene que

$$N_t = \frac{-J_n}{x_n} \quad (3-92)$$

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

$$N_i = J_i + x_i N_t = J_i - \frac{x_i J_n}{x_n} \quad (3-93)$$

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

En este caso todos los v_i valen cero excepto el v_n

$$v_i = 0 \quad v_n \neq 0 \quad (N_n = 0) \quad (3-94)$$

y la ecuación (3-86) puede ser simplificada y queda como

$$\beta_{ik} = \delta_{ik} + x_i/x_n \quad (N_n = 0) \quad (3-95)$$

- Relación entre los fluxes

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

$$N_i = z_i N_t \quad (3-96)$$

y la relación entre el N_i y el J_i es

$$N_i = \frac{J_i}{(1 - x_i/z_i)} \quad (3-97)$$

y β_{ik} es

$$\beta_{ik} = \delta_{ik} / (1 - x_i / z_i) \quad (3-98)$$

3.3.1 La Matriz Bootstrap

Cuando se trabaja con sistemas multicomponentes es más fácil y útil escribir las ecuaciones (3-83) y (3-85) en forma matricial

$$N_t = -(\Lambda)^T (J) \quad (3-99)$$

$$(N) = [\beta](J) \quad (3-100)$$

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

$$(N) = [\beta_b](J_b) = c_t [\beta_b] [k_b^*] (\Delta x) \quad (3-101)$$

y si se aplica en la interfase queda como

$$(N) = [\beta_i](J_i) = c_t [\beta_i] [k_i^*] (\Delta x) \quad (3-102)$$

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

$$(N) = c_t^L [k_L^*] (x^L - x^I) + N_t (x^L) = c_t^L [\beta^L] [k_L^*] (x^L - x^I) \quad (3-103)$$

$$(N) = c_t^V [k_V^*] (y^I - y^V) + N_t (y^V) = c_t^V [\beta^V] [k_V^*] (y^I - y^V) \quad (3-104)$$

Las ecuaciones (3-103) y (3-104) 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 [62]

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.

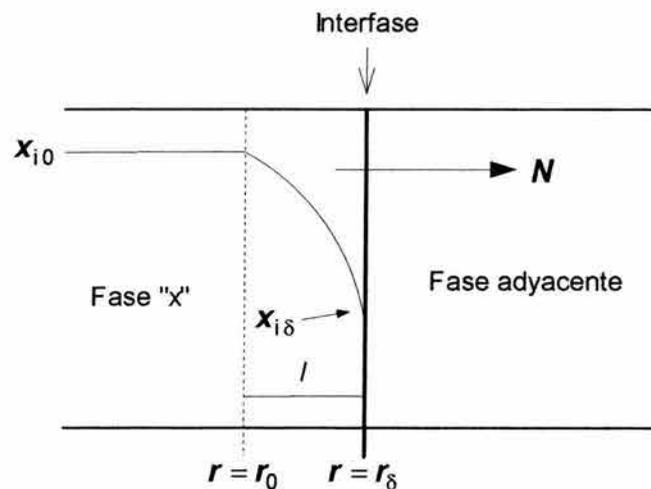


Figura 3.6 Modelo de película

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 (3-32) $\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_i = 0$ y (3-33) $\frac{\partial c_t}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_t = 0$, pero como se considera que el proceso llega al estado estacionario y que la transferencia es unidimensional, las ecuaciones se simplifican en

$$\frac{dN_i}{dr} = 0 \quad (3-105)$$

y

$$\frac{dN_t}{dr} = 0 \quad (3-106)$$

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 (3-46) $(J) = -c_t [D_F](\nabla x)$ o las ecuaciones de Maxwell-Stefan ecuación (3-72) $(J) = -c_t [B]^{-1} [\Gamma](\nabla x)$.

→ La condición de determinación ecuación (3-80) $\sum_{i=1}^n v_i N_i = 0$.

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

$$\begin{aligned} r = r_0 \quad x_i = x_{i0} \\ r = r_\delta \quad x_i = x_{i\delta} \end{aligned} \quad (3-107)$$

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

$$\begin{aligned} d_i &= -\sum_{j=1}^n \frac{x_i x_j (u_i - u_j)}{D_{MSij}} \\ d_i &= -\sum_{j=1}^n \frac{(x_i N_j - x_j N_i)}{c_t D_{MSij}} \end{aligned} \quad (3-108)$$

en donde

$$d_i = \frac{x_i}{RT} \frac{d\mu_i}{dr} \quad (3-109)$$

Para resolver el modelo la ecuación (3-108) se escribe en forma matricial en (n-1) dimensiones como

$$[\Gamma] \frac{d(\mathbf{x})}{d\eta} = [\Phi](\mathbf{x}) + (\phi) \quad (3-110)$$

en donde

$$\eta = \frac{(r-r_0)}{l} \quad (3-111)$$

$$\Phi_{ii} = \frac{N_i}{c_t D_{MSin}/l} + \sum_{\substack{k=1 \\ i \neq k}}^n \frac{N_k}{c_t D_{MSik}/l} \quad (3-112)$$

$$\Phi_{ij} = -N_i \left(\frac{1}{c_t D_{MSij}/l} - \frac{1}{c_t D_{MSin}/l} \right) \quad (3-113)$$

$$\phi_i = -\frac{N_i}{c_t D_{MSin}/l} \quad (3-114)$$

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

$$(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = [\exp[\Theta]\eta - [\mathbf{I}]] [\exp[\Theta] - [\mathbf{I}]]^{-1} (\mathbf{x}_s - \mathbf{x}_0) \quad (3-115)$$

en donde

$$[\Theta] = [\Gamma_{av}]^{-1} [\Phi] \quad (3-116)$$

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

$$\begin{aligned} (N) &= c_t [\beta_0] [k_0] [\Xi_0] (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_s) \\ (N) &= c_t [\beta_s] [k_s] [\Xi_s] (\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_s) \end{aligned} \quad (3-117)$$

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

$$\begin{aligned} [k_0] &= [D_F]/l = [B_0]^{-1} [\Gamma_{av}]/l \\ [k_s] &= [D_F]/l = [B_s]^{-1} [\Gamma_{av}]/l \end{aligned} \quad (3-118)$$

Y el valor de los factores de corrección está dado por

$$\begin{aligned} [\Xi_0] &= [\Theta][\exp[\Theta] - [\mathbf{I}]]^{-1} \\ [\Xi_s] &= [\Theta]\exp[\Theta][\exp[\Theta] - [\mathbf{I}]]^{-1} \end{aligned} \quad (3-119)$$

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

Si se quiere considerar la presencia de una reacción química en el modelo de película las ecuaciones anteriores tienen que considerar el termino que describe la reacción, la manera en la que se resuelve este modelo se puede encontrar en [33] y en [54].

– Modelos de Penetración [62]

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.

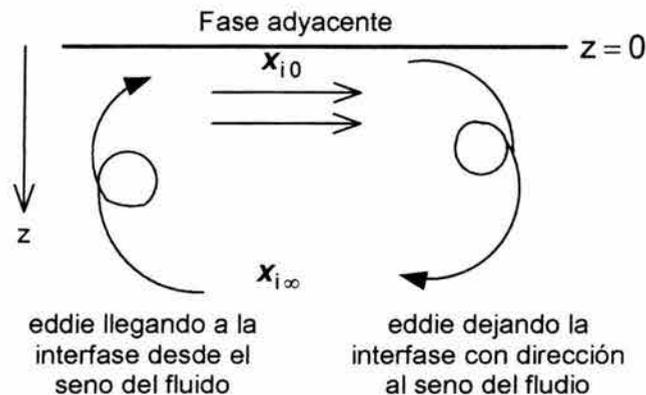


Figura 3.7 Modelo de penetración

Las ecuaciones que describen el proceso son:

→ La ecuación (3-32) $\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_i = 0$, y considerando que el proceso es unidimensional la ecuación se puede simplificar y queda como

$$c_t \frac{\partial x_i}{\partial t} + \frac{\partial N_i}{\partial z} = 0 \quad (3-120)$$

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

Si se suma la ecuación (3-120) para todas las especies presentes se obtiene

$$\frac{\partial N_t}{\partial z} = 0 \quad (3-121)$$

por lo que N_t sólo es función del tiempo.

Como $N_i = J_i + x_i N_t$ la ecuación (3-120) se puede escribir como

$$c_t \frac{\partial x_i}{\partial t} + N_t \frac{\partial x_i}{\partial z} = \frac{\partial J_{iz}}{\partial z} \quad (3-122)$$

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}

$$z = 0 \quad t > 0 \quad x_i = x_{i0} \quad (3-123)$$

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 $x_{i\infty}$

$$z \geq 0 \quad t = 0 \quad x_i = x_{i\infty} \quad (3-124)$$

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

$$z \rightarrow \infty \quad t > 0 \quad x_i = x_{i\infty} \quad (3-125)$$

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

$$\psi(t) = 1/t_e \text{ si } t \leq t_e \quad (3-126)$$

$$\psi(t) = 0 \text{ si } t > t_e \quad (3-127)$$

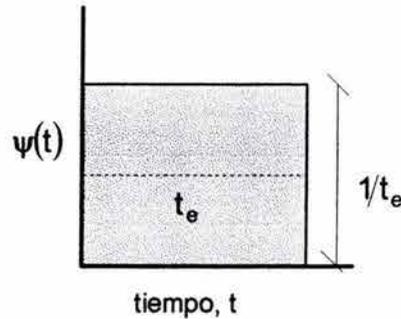


Figura 3.8 Distribución de edades $\psi(t)$ para el modelo de Higbie

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

$$\psi(t) = s \exp(-s t) \quad (3-128)$$

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

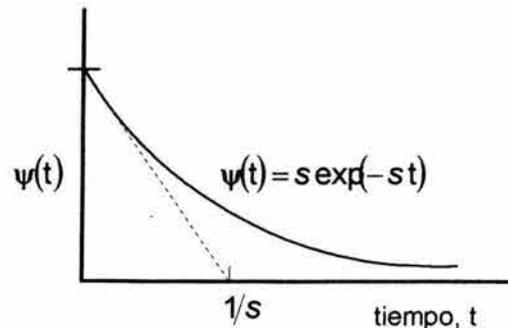


Figura 3.9 Distribución de edades $\psi(t)$ para el modelo de Danckwerts

– 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 (3-120) queda como

$$c_t \frac{\partial(x)}{\partial t} + N_t \frac{\partial(x)}{\partial z} = c_t [D_{F_{av}}] \frac{\partial^2(x)}{\partial z^2} \quad (3-129)$$

resolviendo (3-129) se obtiene la siguiente ecuación para calcular el perfil de composiciones

$$(x - x_\infty) = \left[[I] - \operatorname{erf}[(\eta - \phi) [D_{F_{av}}]^{-1/2}] \right] \times \left[[I] + \operatorname{erf}[\phi [D_{F_{av}}]^{-1/2}] \right]^{-1} (x_0 - x_\infty) \quad (3-130)$$

y el valor del flux difusional se calcula con

$$(J_0) = \frac{c_t}{\sqrt{\pi t}} [D_{F_{av}}]^{1/2} \exp[\phi [D_{F_{av}}]^{-1/2}] \left[[I] + \operatorname{erf}[\phi [D_{F_{av}}]^{-1/2}] \right]^{-1} (x_0 - x_\infty) \quad (3-131)$$

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

$$\operatorname{erf}[\zeta [M]] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\zeta [M] - \frac{\zeta^3}{3 \times 1!} [M]^3 + \frac{\zeta^5}{5 \times 2!} [M]^5 - \frac{\zeta^7}{7 \times 3!} [M]^7 + \dots \right] \quad (3-132)$$

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

$$(x - x_0) = \left[[I] - \operatorname{erf}\left[z [D_{F_{av}}]^{-1/2} / 2\sqrt{t} \right] \right] (x_0 - x_\infty) \quad N_t = 0 \quad (3-133)$$

y el flux difusional es

$$(J_0) = \frac{c_t}{\sqrt{\pi t}} [D_{F_{av}}]^{1/2} (x_0 - x_\infty) \quad N_t = 0 \quad (3-134)$$

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

$$[k] = \frac{[D_{F_{av}}]^{1/2}}{\sqrt{\pi t}} \quad (3-135)$$

y la matriz de factores de corrección es

$$[\Xi] = \exp\left[-\frac{[\Phi]^2}{\sqrt{\pi}}\right] \left[[I] + \operatorname{erf}[\Phi]/\pi \right]^{-1} \quad (3-136)$$

en donde Φ es igual a

$$[\Phi] = u [D_{F,av}]^{1/2} \sqrt{\pi t} = N_t [k]^{-1} / c_t \quad (3-137)$$

La matriz $[k]$ de la ecuación (3-135) 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

$$[k] = 2 \frac{[D_{F,av}]^{1/2}}{\sqrt{\pi t}} \quad (3-138)$$

y para el modelo de Dankwerts se tiene

$$[k] = \sqrt{s} [D_{F,av}]^{1/2} \quad (3-139)$$

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

$$(J_0) = c_t [k] [\Xi] (x_0 - x_\infty) \quad (3-140)$$

$$(N_0) = c_t [\beta_0] [k] [\Xi] (x_0 - x_\infty) \quad (3-141)$$

La ecuación (3-140) es la expresión que se usa para conocer el valor de los N_t usando el modelo de penetración. La diferencia entre usar el modelo de Higbie o el de Danckwerts está 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 Masa 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 [62, 68]. La energía puede ser transferida por convección y por conducción, si se considera que existe equilibrio mecánico (la presión de la fase "x" es igual a la presión de la fase "y"), el balance de energía se puede escribir de las siguientes dos maneras

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^n c_i H_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \left\{ \mathbf{q} + \sum_{i=1}^n H_i \mathbf{N}_i \right\} \quad (3-142)$$

$$\frac{\partial \{c_t c_p T\}}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot \{c_t c_p T \mathbf{u}\} - \sum_{i=1}^n \mathbf{J}_i \cdot \nabla H_i \quad (3-143)$$

en donde \mathbf{q} es el flux de calor conductivo, la ecuación (3-138) es muy parecida a la ecuación (3-26) las cuales se obtuvieron a partir de la ecuación general (3-23).

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

$$\xi \cdot \mathbf{e}^x = \xi \cdot \mathbf{e}^y \quad (3-144)$$

en donde \mathbf{e}^x y \mathbf{e}^y son los fluxes de energía de las fases adyacentes a la interfase, la ecuación (3-144) 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

$$\mathbf{e} = \mathbf{q} + \sum_{i=1}^n H_i \mathbf{N}_i \quad (3-145)$$

– 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

$$\sigma = \mathbf{q} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right) - \frac{c_t \mathbf{R}}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \mathbf{d}_i \cdot (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \quad (3-146)$$

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

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + c_t \mathbf{R} T \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x_i x_j}{D_{MSij}} \left(\frac{D_i^T}{\rho_i} \right) (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \quad (3-147)$$

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \frac{1}{2} c_t \mathbf{R} T \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x_i x_j}{D_{MSij}} \left(\frac{D_i^T}{\rho_i} - \frac{D_j^T}{\rho_j} \right) (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \quad (3-148)$$

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 desarrollan las ecuaciones 3-147 y 3-148 se puede ver que son equivalentes.

Si se definen los factores de difusión térmica multicomponentes como

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{D_{MSij}} \left(\frac{D_i^T}{\rho_i} - \frac{D_j^T}{\rho_j} \right) \quad i \neq j = 1, 2, \dots, n \quad (3-149)$$

la ecuación (3-148) queda como

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \frac{1}{2} c_t \mathbf{R} T \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n x_i x_j \alpha_{ij} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \quad (3-150)$$

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

$$\alpha_{ij} = -\alpha_{ji} \quad i \neq j = 1, 2, \dots, n \quad (3-151)$$

El término $\frac{1}{2} c_t RT \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n x_i x_j \alpha_{ij} (u_i - u_j)$ de la ecuación (3-150) 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 másicos 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

$$d_i = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{x_i x_j (u_i - u_j)}{D_{MS\ ij}} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n x_i x_j \alpha_{ij} \frac{\nabla T}{T} \quad (3-152)$$

Las ecuaciones (3-150) y (3-152) son las ecuaciones que describen el transporte simultáneo 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

$$\tilde{h} = \lim_{N_i \rightarrow 0} \left[\frac{e - \sum_{i=1}^n H_i N_i}{c_t C_p (T_b - T_1)} = \frac{q}{c_t C_p \Delta T} \right] \quad (3-153)$$

en donde \tilde{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

$$h = \lim_{N_i \rightarrow 0} \left(\frac{q}{\Delta T} \right) \quad (3-154)$$

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

$$h^* = \frac{q}{\Delta T} \quad (3-155)$$

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

$$h^* = h \Xi_H \quad (3-156)$$

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 (3-35) y para la transferencia de energía se usa una ecuación similar.

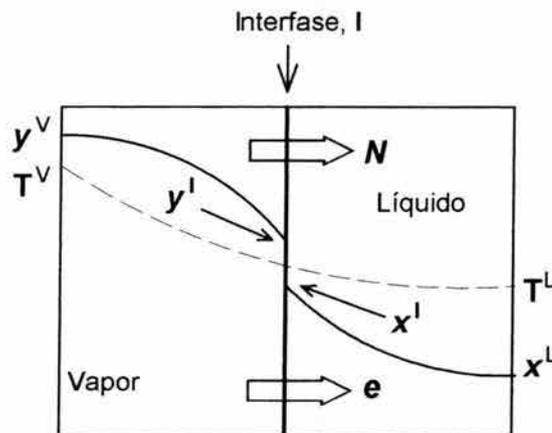


Figura 3.10 Transporte de Masa y de Energía Interfacial

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

$$N_i^L = N_i = N_i^V \quad (3-157)$$

$$N_i^L = J_i^L + x_i N_t^L = N_i = J_i^V + y_i N_t^V = N_i^V \quad (3-158)$$

$$N_t^L = N_t = N_t^V \quad (3-159)$$

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

$$e^V = e = e^L \quad (3-160)$$

en donde e^V y e^L son las componentes normales del flux de energía en la interfase, usando la ecuación (3-145), la ecuación (3-160) se puede escribir como

$$q^V + \sum_{i=1}^n N_i^V \bar{H}_i^V = q^L + \sum_{i=1}^n N_i^L \bar{H}_i^L \quad (3-161)$$

en donde los fluxes de calor están dados por

$$q^V = h_v^*(T^V - T^I) \quad (3-162)$$

$$q^L = h_l^*(T^I - T^L) \quad (3-163)$$

– 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 rescribe la ecuación (3-161)

$$q^L - q^V = \sum_{i=1}^n (H_i^V - H_i^L) N_i = \sum_{i=1}^n \lambda_i N_i \quad (3-164)$$

$$q^L - q^V = \sum_{i=1}^{n-1} (\lambda_i - \lambda_n) J_i^V + \lambda_y N_t = \sum_{i=1}^{n-1} (\lambda_i - \lambda_n) J_i^L + \lambda_x N_t \quad (3-165)$$

en donde

$$\lambda_y = \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i \quad ; \quad \lambda_x = \sum_{i=1}^n \lambda_i x_i \quad ; \quad \lambda_i = H_i^V - H_i^L \quad (3-166)$$

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 (3-157) a (3-159) y (3-164) a (3-166) se obtiene el flux molar total N_t como

$$-\frac{J_i^L - J_i^V}{x_i - y_i} = \frac{q^L - q^V}{\lambda_y} - \frac{\sum_{k=1}^n (\lambda_k - \lambda_n) J_k^V}{\lambda_y} = N_t \quad (3-167)$$

la ecuación (3-167) 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 (3-167) se elimina N_t de la ecuación (3-158) para obtener una ecuación muy parecida a la ecuación (3-85) con la diferencia de que esta nueva ecuación considera el transporte de energía

$$N_i = J_i^V - y_i \sum_{k=1}^{n-1} \Lambda_k J_k^V + y_i \frac{\Delta q}{\lambda_y} \quad (3-169)$$

en donde

$$\Lambda_k = (\lambda_k - \lambda_n) / \lambda_y \quad \Delta q = q^L - q^V \quad (3-170)$$

La ecuación (3-1705) se puede escribir en notación matricial en (n-1) dimensiones como

$$(N) = [\beta^V](J^V) + (y) \frac{\Delta q}{\lambda_x} \quad (3-171)$$

los elementos de la matriz β^V son

$$\beta_{ik}^V = \delta_{ik} - y_i \Lambda_k \quad i, k = 1, 2, \dots, n-1 \quad (3-172)$$

se puede obtener una expresión similar a la ecuación (3-171) para la fase líquida quedando en este caso

$$(N) = [\beta^L](J^L) + (x) \frac{\Delta q}{\lambda_x} \quad (3-173)$$

Los términos $(y) \frac{\Delta q}{\lambda_x}$ de la ecuación (3-171) y $(x) \frac{\Delta q}{\lambda_x}$ de la ecuación (3-173) toman en cuenta la contribución de la transferencia de energía a la transferencia de masa.

3.6 Modelos de Transferencia de Masa y Energía

Siguiendo el mismo procedimiento que se usó para analizar la transferencia de masa 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 Masa y Energía [62]

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

$$\frac{de}{dr} = 0 \quad (3-174)$$

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

$$e = -\lambda \nabla T + \sum_{i=1}^n H_i N_i \quad (3-175)$$

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

$$H_i = C_{pi} (T - T_{ref}) \quad (3-176)$$

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

$$\Phi_H = \frac{\sum_{i=1}^n N_i C_{pi}}{\lambda / \ell} \quad (3-177)$$

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 (3-176) y (3-177), (3-175) queda como

$$\frac{d(T - T_{ref})}{d\eta} = \Phi_H (T - T_{ref}) - \frac{e}{\lambda / \ell} \quad (3-178)$$

Si se considera que el Calor Específico y que las Conductividades Térmicas son constantes entonces se puede resolver (3-178) y se obtiene

$$\frac{(T - T_0)}{(T_s - T_0)} = \frac{\exp(\Phi_H \eta) - 1}{\exp(\Phi_H) - 1} \quad (3-179)$$

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 (3-179) para obtener el gradiente de temperaturas y poder identificar el coeficiente de transferencia de energía h y el factor de corrección Ξ_H

$$q_0 = h \Xi_H (T_0 - T_s) \quad (3-180)$$

en donde el coeficiente de transferencia de calor es

$$h = \lambda / \ell \quad (3-181)$$

y el factor de corrección está dado por

$$\Xi_H = \frac{\Phi_H}{(\exp \Phi_H - 1)} \quad (3-182)$$

Ξ_H se conoce como el factor de corrección de Ackerman.

– Modelo de Penetración para Transferencia de Masa y Energía [62]

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

$$h = 2\rho C_p \sqrt{\frac{\lambda}{\rho C_p \pi t_e}} \quad (3-183)$$

El factor de corrección que se usa generalmente es el del modelo de película, ecuación (3-182), o se puede calcular con las siguientes ecuaciones

$$\Xi_H = \frac{\exp(-\Phi_H^2/\pi)}{1 + \operatorname{erf}(\Phi_H/\sqrt{\pi})} \quad (3-184)$$

con Φ_H definido como

$$\Phi_H = \frac{\sum_{i=1}^n N_i C_{pi}}{h} \quad (3-185)$$

y

$$\operatorname{erf} x = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz \quad (3-186)$$

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 que se obtienen son muy complicadas de resolver.

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]
h	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 [$\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$]
I	flux molar convectivo [$\text{kmol}/\text{m}^2\text{s}$]
$[I]$	matriz identidad [-]
j	flux másico difusivo [$\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$]
J	flux molar difusivo [$\text{kmol}/\text{m}^2\text{s}$]
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 [$\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$]
N	flux molar [$\text{kmol}/\text{m}^2\text{s}$]
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 [$\text{J}/\text{mol K}$]
s	frecuencia de renovación de superficie [s^{-1}]
t	tiempo [s]
t_e	tiempo de exposición [s]
T	temperatura [K]
u	velocidad [m/s]
\bar{u}	velocidad molar promedio [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 [$\text{J}/\text{m}^3\text{sK}$]
ϕ	coeficiente de fugacidad [-]
$[\phi]$	matriz de parámetros de transferencia de masa [-]

- [Φ] matriz de factores de rapidez de transferencia de masa [-]
- $\psi(t)$ distribución de edades [s^{-1}]
- [Θ] 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
- I** interfase
- t total
- x referente a la fase x
- y referente a la fase y

Superíndice

- I** interfase
- L** líquido
- V** vapor

Matrices

- () matriz columna
- [] matriz cuadrada

Símbolos Matemáticos

- ∇ gradiente
- Δ 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.

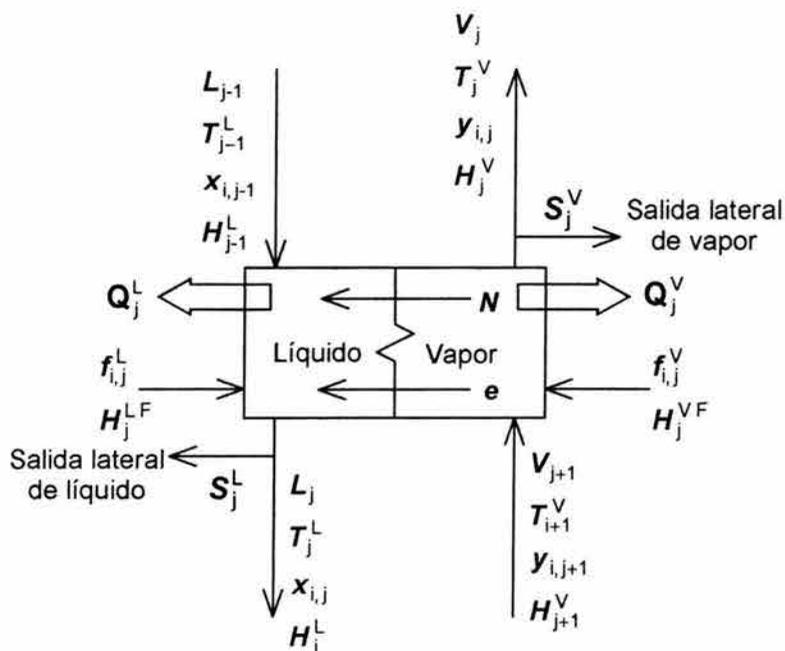


Figura 4.1 Representación de una etapa en no equilibrio

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.

El modelo de etapa en no equilibrio se basa en las ecuaciones de transporte, las ecuaciones de conservación, las ecuaciones de rapidez de transferencia de masa y las ecuaciones que representan el comportamiento de la interfase. El hecho de considerar las ecuaciones de transporte hace que el modelo sea más estricto, y que considere todas las posibles interacciones que pueden existir en la operación.

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 [37] 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 $r_j^V = \frac{S_j^V}{V_j}$, $r_j^L = \frac{S_j^L}{L_j}$, "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 de 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 que describe el comportamiento de la interfase 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 sólo 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

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

$$E_j^I, Q_{1j}^I, Q_{2j}^I, \dots, Q_{Cj}^I, R_{1j}^L, R_{2j}^L, \dots, R_{C-1j}^L)$$

y un vector de incógnitas que queda como

$$(\mathbf{x}_j)^T \equiv (v_{1j}, v_{2j}, \dots, v_{Cj}, T_j^V, T_j^L, I_{1j}, I_{2j}, \dots, I_{Cj}, N_{1j}, N_{2j}, \dots, N_{Cj}, \quad (4-14)$$

$$y_{1j}^I, y_{2j}^I, \dots, y_{C-1j}^I, T_j^I, x_{1j}^I, x_{2j}^I, \dots, x_{C-1j}^I)$$

Las ecuaciones que corresponden a toda la columna son

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

$$(\mathbf{x})^T \equiv ((\mathbf{x}_1)^T, (\mathbf{x}_2)^T, \dots, (\mathbf{x}_N)^T) \quad (4-16)$$

El sistema lineal que tiene que ser resuelto es

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

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

$$J_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \quad (4-18)$$

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 [61] 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 $P_j^V = P_j^L = P$.

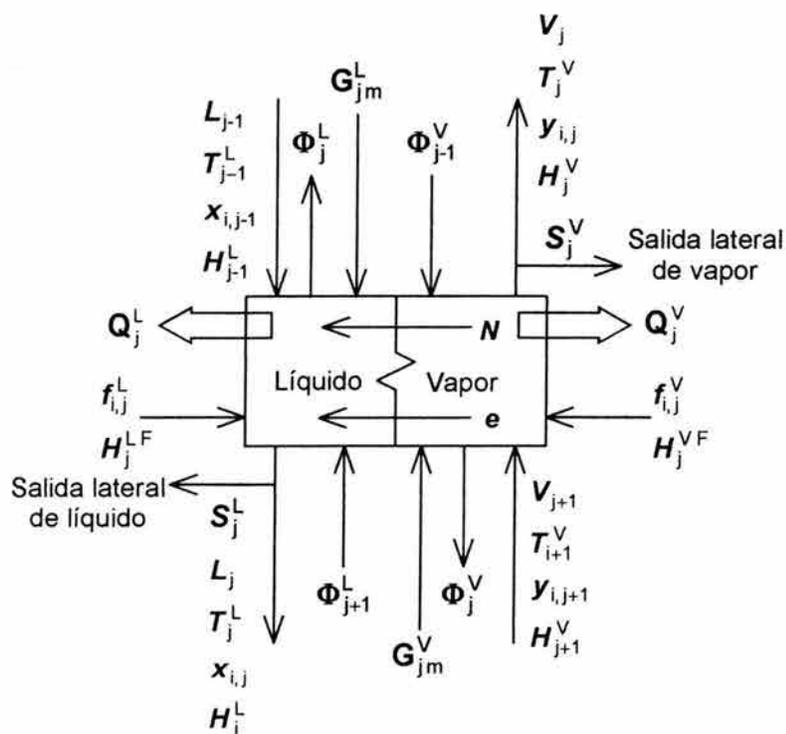


Figura 4.2 Representación de una etapa del modelo de segunda generación

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

$$E_j^l \equiv E_j^v - E_j^l = 0 \quad (4-9)$$

→ 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

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

→ Las ecuaciones de suma de las fracciones mol sirven para asegurar que la suma de las fracciones mol 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 $P_j \equiv p_j - p_{j-1} - (\Delta p_{j-1})$ (4-29)
- 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

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

$$M_{1j}^L, M_{1j}^L, M_{2j}^L, \dots, M_{Cj}^L, E_j^L, R_{1j}^L, R_{2j}^L, \dots, R_{C-1j}^L, S_j^L, P_j)$$

y vector de incógnitas queda como

$$(\mathbf{x}_j)^T \equiv (\mathbf{V}_j, \mathbf{y}_{1j}, \mathbf{y}_{2j}, \dots, \mathbf{y}_{Cj}, T_j^V, \mathbf{y}_{1j}^L, \mathbf{y}_{2j}^L, \dots, \mathbf{y}_{Cj}^L, \mathbf{x}_{1j}, \mathbf{x}_{2j}, \dots, \mathbf{x}_{Cj}, T_j^L, L_j, \mathbf{x}_{1j}, \mathbf{x}_{2j}, \dots, \mathbf{x}_{Cj}, T_j^L, N_{1j}, N_{2j}, \dots, N_{Cj}, p_j) \quad (4-35)$$

y el sistema 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 Destilación Reactiva

La destilación reactiva [63] 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 que se lleva a cabo es en la fase líquida y es necesario agregar una cantidad de reactivo arriba de la estequiométrica.

En el caso de que la reacción sea heterogénea se debe contar con un modelo que describa adecuadamente el proceso de difusión dentro del catalizador, la rapidez de reacción y el proceso de salida de los productos.

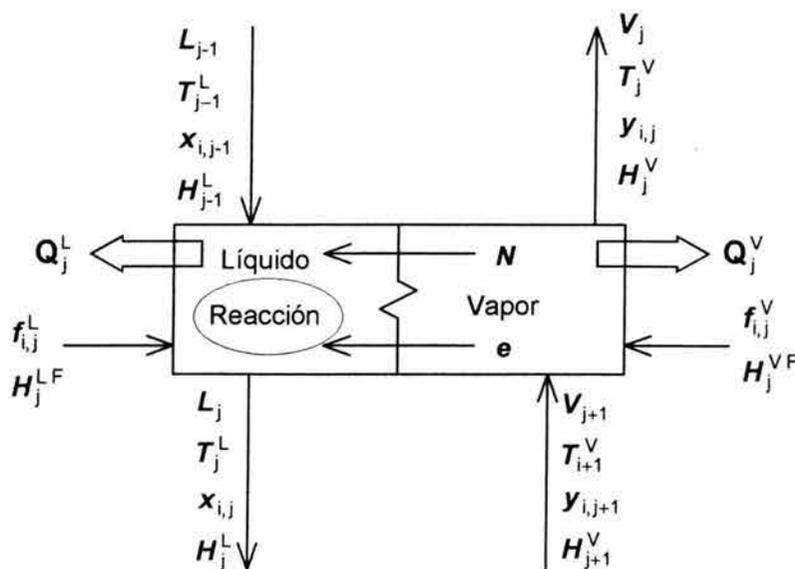


Figura 4.3 Etapa en No Equilibrio con reacción química homogénea

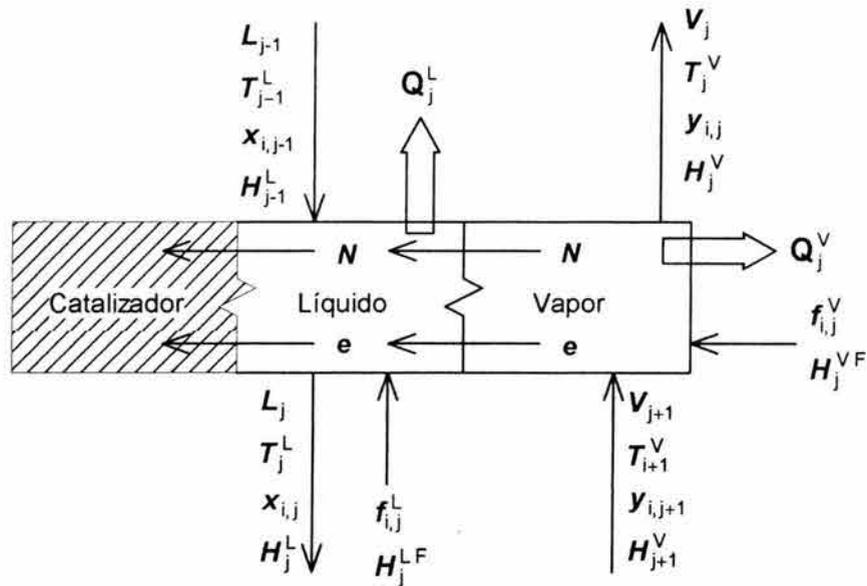


Figura 4.4 Etapa en No Equilibrio con reacción química heterogénea

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

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

$$L_j x_{ij} - L_{j-1} x_{i,j-1} - f_{ij}^L - N_{ij}^L - \sum_{m=1}^r v_{im} R_{mj} \varepsilon = 0 \quad (4-37)$$

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 se modelen pseudohomogeneamente el término ε es la cantidad total de catalizador que está en la etapa que se está considerando.

– Los balances de energía son

$$V_j H_j^V - V_{j+1} H_{j+1}^V - F_j^V H_j^{VF} + E_j^V + Q_j^V = 0 \quad (4-38)$$

$$L_j H_j^L - L_{j-1} H_{j-1}^L - F_j^L H_j^{LF} - E_j^L + Q_j^L = 0 \quad (4-39)$$

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 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.

El sistema de ecuaciones que se tiene que resolver es el de las ecuaciones 4-34 y 4-35.

4.4 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 la 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 (3-103) para la fase líquida $(N) = c_t^L [k_L^*] (x^L - x^I) + N_t(x^L) = c_t^L [\beta^L] [k_L^*] (x^L - x^I)$ o con la ecuación (3-104) $(N) = c_t^V [k_V^*] (y^I - y^V) + N_t(y^V) = c_t^V [\beta^V] [k_V^*] (y^I - y^V)$ 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 [48] 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

$$[k] = [R]^{-1} [\Gamma] \quad (4-40)$$

en donde

$$R_{ii} = \frac{z_i}{k_{ic}} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^c \frac{z_j}{k_{ij}} \quad (4-41)$$

$$R_{ij} = -z_i \left(\frac{1}{k_{ij}} - \frac{1}{k_{ic}} \right) \quad (4-42)$$

y $[\Gamma]$ es una matriz de factores de corrección que es igual a la ecuación (3-68) para líquidos y a la ecuación (3-69) 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 [1] Hughmark [26]	AICHe [1] Chan-Fair [13] Zuidweg [69] Chen-Chuang [14]	AICHe [1]

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

Empaque Aleatorio	Empaque Estructurado
Onda (1968) [44]	Bravo (1985) [12]
Bravo (1982) [11]	Bravo (1996) [50]

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.

$$k_{ij} = \frac{NTU_{ij}^V}{t_v a^V} \quad (4-43)$$

$$k_{ij} = \frac{NTU_{ij}^L}{t_L a^L} \quad (4-44)$$

a^L y a^V se definen como

$$a^V = \frac{a_d}{E h_f} \quad (4-45)$$

$$a^L = \frac{a_d}{\alpha h_f} \quad (4-46)$$

4.4.1 Columnas de Platos

– Correlación del AIChE para platos de cachucha, de malla y de válvula

$$NUT_{ij}^V = \frac{(0.776 + 4.57 h_w - 0.238 F_s + 104.8 Q_L/W_l)}{\sqrt{Sc_{ij}^V}} \quad (4-47)$$

$$F_s = u_s \sqrt{\rho_t^V} \quad (4-48)$$

$$Sc_{ij}^V = \frac{\mu^V}{\rho_t^V D_{Fij}^V} \quad (4-49)$$

$$NUT_{ij}^L = 19700 \sqrt{D_{Fij}^L} (0.4 F_s + 0.17) t_L \quad (4-50)$$

$$t_L = \frac{h_L Z W_l}{Q_L} \quad (4-51)$$

la altura del líquido claro h_L [m] se calcula mediante el método de Bennett [9]

$$h_L = \alpha_e \left(h_w + C \left(\frac{Q_L}{\alpha_e W_l} \right)^{0.67} \right) \quad (4-52)$$

$$\alpha_e = \exp \left(-12.55 \left(u_s \left(\frac{\rho^v}{\rho^L - \rho^v} \right)^{0.5} \right)^{0.91} \right) \quad (4-53)$$

$$C = 0.50 + 0.438 \exp(-137.8 h_w) \quad (4-54)$$

– 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

$$NUT_{ij}^v = (10300 - 8760 F_f) F_f t^v \sqrt{D_{Fij}^v} / \sqrt{h_L} \quad (4-55)$$

$$t_v = \frac{(1 - \alpha_e) h_L}{\alpha_e u_s} \quad (4-56)$$

h_L y α_e también se calculan con la correlación de Bennett.

– Correlación de Zuidweg para platos de malla

$$k^v = \frac{0.13}{\rho_t^v} - \frac{0.065}{(\rho_t^v)^2} \quad (4-57)$$

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

$$k^L = 2.6 \times 10^5 (\mu^L)^{-0.25} \quad (4-58)$$

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

$$k_{ij}^L = 0.024(D_{Fij}^L)^{0.25} \quad (4-59)$$

en donde k_{ij} es función del coeficiente de difusión

- Correlación de Hughmark para platos de cachucha

$$NUT^V = (0.051 + 0.0105 F_s) \sqrt{\frac{\rho^L}{F_s}} \quad (4-60)$$

$$NUT_{ij}^L = \frac{-44 + 10.7747 \times 10^4 Q_L}{W_i + 127.1457 F_s} \sqrt{D_{Fij}^L} \frac{A_{bub}}{Q_L} \quad (4-61)$$

- Correlación de Chen-Chuang para platos de malla

$$NUT_{ij}^V = 11 \frac{1}{\mu_L^{0.1} \beta^{0.14}} \left(\frac{\rho_L F_s^2}{\sigma^2} \right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{D_{Fij}^V t^V} \quad (4-62)$$

$$t_V = \frac{h_l}{u_s} \quad (4-63)$$

F_s se calcula con la ecuación 4-48

$$NUT_{ij}^L = 14 \frac{1}{\mu_L^{0.1} \beta^{0.14}} \left(\frac{\rho_L F_s^2}{\sigma^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{V}{L} \right) \sqrt{D_{Fij}^L t^L} \quad (4-64)$$

$$t_L = \frac{\rho_L}{\rho_V} t_V \quad (4-65)$$

4.4.2 Columnas Empacadas

- Correlación de Onda para columnas empacadas aleatoriamente

$$k_{ij}^V = A (Re^V)^{0.7} (Sc_{ij}^V)^{0.333} (a_p D_{Fij}^V) (a_p d_p)^{-2} \quad (4-66)$$

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

$$k_{ij}^L = 0.0051(\text{Re}_L^i)^{\frac{2}{3}}(\text{Sc}_{ij}^L)^{-0.5}(a_p d_p)^{0.4}\left(\frac{\mu^L g}{\rho^L}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (4-67)$$

$$\text{Re}^v = \frac{\rho^v u_v}{\eta^v a_p} \quad (4-68)$$

$$\text{Re}_L^i = \frac{\rho^L u_L}{\eta^L a_d} \quad (4-69)$$

$$\text{Fr}^L = \frac{a_p u_L^2}{g} \quad (4-70)$$

$$\text{We}^L = \frac{\rho^L u_L^2}{a_p \sigma} \quad (4-71)$$

y el área interfacial a_d se calcula con

$$a_d = a_p \left(1 - \exp \left(-1.45 \left(\frac{\sigma_c}{\sigma} \right)^{0.75} (\text{Re}^L)^{0.1} (\text{Fr}^L)^{-0.05} (\text{We}^L)^{0.2} \right) \right) \quad (4-72)$$

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

$$a_d = 19.78(C_{al} \text{Re}^v)^{0.392} H^{-0.4} a_p \sqrt{\sigma} \quad (4-73)$$

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

$$C_{al} = \frac{u_L \mu^L}{\rho^L \sigma} \quad (4-74)$$

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 $a_d = a_p$

$$k_{ij}^V = \frac{Sh^V D_{Fij}^V}{d_{eq}} \quad (4-75)$$

$$Sh^V = 0.0338(Re^V)^{0.8} (Sc^V)^{0.333} \quad (4-76)$$

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

$$d_{eq} = B h_c \left(\frac{1}{B+2S} + \frac{1}{2S} \right) \quad (4-77)$$

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

$$Re^V = \frac{d_{eq} \rho^V (u_{V,eff} + u_{L,eff})}{\mu^V} \quad (4-78)$$

y la velocidad efectiva del vapor a través del canal es

$$u_{V,eff} = \frac{u_V}{\epsilon \sin \theta} \quad (4-79)$$

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

$$u_{L,eff} = \frac{3T}{2\rho^L} \left(\frac{(\rho^L)^2 g}{3\mu^L T} \right) \quad (4-80)$$

y T es el flujo de líquido por unidad de perímetro

$$T = \frac{\rho^L u^L}{P} \quad (4-81)$$

P es el perímetro por unidad de área cruzada

$$P = \frac{4S + B}{B h_c} \quad (4-82)$$

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

$$t_L = \frac{S}{u_{L, \text{eff}}} \quad (4-83)$$

$$k_{ij}^L = 2 \sqrt{\frac{D_{Fij}^L}{\pi t_L}} \quad (4-84)$$

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

Nomenclatura

a	área [m ²]
a	área interfacial [m ²]
a_d	densidad de área interfacial [m ² /m ³]
A_h	área del agujero [m ²]
A_{bub}	área de burbujeo [m ²]
C	número de componente [-]
D	coeficiente de difusión binario [m ² /s]
d_{eq}	diámetro equivalente
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
Fr	número de Froude
F_f	factor de inundación [m]
F_s	factor superficial [kg ^{0.5} /m ^{0.5} s]
g	constante de la gravedad 9.81 [m/s ²]
h_f	altura de la espuma [m]
h_l	altura del líquido claro [m]
h_w	altura del vertedero [m]
H	entalpía [J/kmol]
J	acobiano
k	coeficiente de transferencia de masa binario [m/s]
K	constante de equilibrio [-]
I	flujo por componente del líquido [kmol/s]

L	flujo del líquido [kmol/s]
M	ecuación de balance de materia
N	flux molar [kmol/m ² s]
N	rapidez de transferencia de masa interfacial [kmol/s]
NUT	número de unidades de transferencia [-]
p	presión [Pa]
P	ecuación hidráulica
Q	flujo volumétrico [m ³ /s]
Q	ecuación de balance de energía
Q	entrada/salida de calor [J/s]
r	relación de la salida lateral al flujo interetapa
R	ecuación de rapidez de transferencia de masa
R	rapidez de reacción [kmol/m ³ s]
Re	número de Reynolds [-]
S	ecuación de suma
S	salida lateral [kmol/s]
Sc	número de Schmidt
Sh	número de Sherwood
t	tiempo de residencia [s]
T	temperatura [K]
u	velocidad [m/s]
u_s	velocidad superficial [m/s]
v	flujo por componente del vapor [kmol/s]
V	flujo del vapor [kmol/s]
W_e	número de Weber
W_l	longitud del vertedero [m]
x	composición del líquido [-]
χ	vector de variables
y	composición del vapor [-]
z	composición [-]

Letras Griegas

α	fracción del líquido en la espuma [-]
β	fracción del área libre A_h/A_{bub} [-]
ε	volumen de reacción [m ³]
E	fracción de vacío [-]
μ	viscosidad [Pa s]
ρ	densidad [kg/m ³]
σ	tensión superficial [N/m]
φ	fracción de arrastre [-]
v	coeficiente estequiométrico [-]

Subíndice

i	número de componente
j, v	número de etapa
L	líquido
M	número de reacción
T	total
V	vapor

Superíndice

I	interfase
k	número de iteración
L	líquido
V	vapor

Matrices

$()$	matriz columna
$()^T$	matriz renglón
$[]$	matriz cuadrada

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de 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 esta basado en los fenómenos fundamentales y considera que únicamente existe equilibrio termodinámico en la interfase de la etapa que se esta estudiando.

Para demostrar las diferencias entre los dos modelos se simuló una columna de destilación reactiva para la producción de MTBE en el simulador comercial Aspen Plus. El primer objetivo es ver si hay diferencias entre los resultados obtenidos (flujos, composiciones, temperaturas, rapidez de reacción) cuando se usan los dos modelos. El segundo objetivo consiste en revisar si la columna presenta Múltiples Estados Estacionarios (MEE) y en caso de que los presente, examinar cuales son los resultados entre los distintos MEE.

La columna que será estudiada tiene las siguientes características [15]:

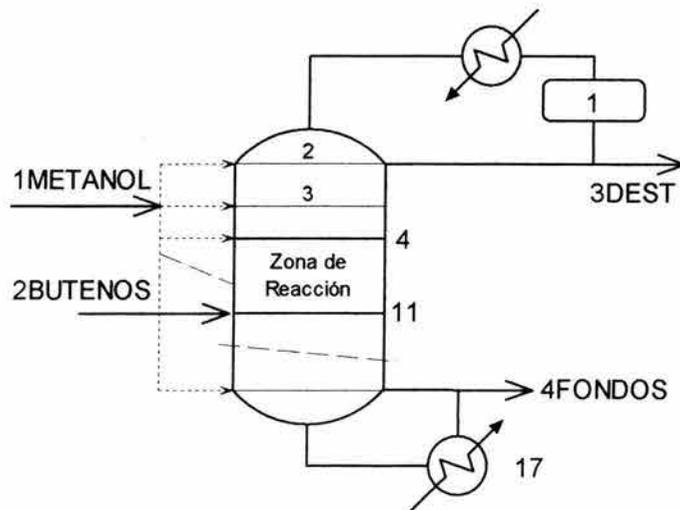


Figura 5.1 Configuración de la columna

Operación	Destilación Reactiva
Componentes	Isobuteno 1-Buteno MTBE Metanol
K Equilibrio	Modelo γ - ϕ γ UNIFAC ϕ EOS Redlich-Kwong

Alimentación	1METANOL
Etapa de Alimentación	Varia de la etapa 2 a la etapa 16
Temperatura (°C)	46.8
Presión (bar)	11.146
Flujo (kmol/hr)	
Isobuteno	0
1-Buteno	0
MTBE	0
Metanol	775.8

Alimentación	2BUTENOS
Etapa de Alimentación	Etapa 11
Temperatura (°C)	76.8
Presión (bar)	11.146
Flujo (kmol/hr)	
Isobuteno	702
1-Buteno	1274.4
MTBE	0
Metanol	0

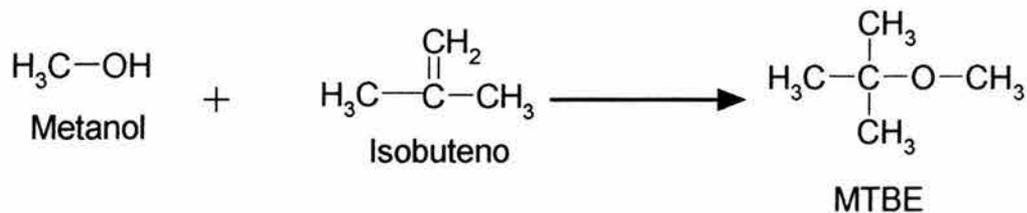
Columna	Sección 1 (Rectificación)
Etapa Inicial	2
Etapa Final	3
Tipo de Platos	Malla
Número de Platos	2
Diámetro de la columna (m)	10

Columna	Sección 2 (Reacción)
Etapa Inicial	4
Etapa Final	11
Tipo de Empaque	Rasching
Material del Empaque	Cerámica
Arreglo del Empaque	Aleatorio
Diámetro del Empaque (in)	0.25
Altura del Empaque (m)	0.7
Diámetro de la Columna (m)	13.5
Catalizador X Etapa (kg)	1000

Columna	Sección 3 (Agotamiento)
Etapas Inicial	11
Etapas Final	16
Tipo de Platos	Malla
Número de Platos	6
Diámetro de la Columna (m)	10

Columna	Características
Reflujo B (kmol/hr)	1.0 709.2
Presión (bar) Etapas 1	11.146

La reacción que se lleva a cabo es:



La rapidez de reacción se calcula con [26]:

$$r = k(T^*) \exp\left(-\frac{E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^*}\right)\right) \left(\frac{a_{\text{isobuteno}}}{a_{\text{metanol}}} - \frac{1}{k_a} \frac{a_{\text{MTBE}}}{a_{\text{metanol}}^2}\right) \quad (5-1)$$

en donde:

$$\ln\left[\frac{k_a(T)}{k_a(T_o)}\right] = A_1\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_o}\right) + A_2 \ln\left(\frac{T}{T_o}\right) + A_3(T - T_o) + A_4(T^2 - T_o^2) + A_5(T^3 - T_o^3) + A_6(T^4 - T_o^4) \quad (5-2)$$

y

a	actividad [-]
A_1	-1.49277×10^3 [K]
A_2	-7.74002×10^1 [-]
A_3	5.07563×10^{-1} [K^{-1}]
A_4	-9.12739×10^{-4} [K^{-2}]

A_5	$1.10649 \times 10^{-6} \text{ [K}^{-3}\text{]}$
A_6	$-6.27996 \times 10^{-10} \text{ [K}^{-4}\text{]}$
E	energía de activación 92.4 [kJ/mol]
$k(T^*)$	constante de rapidez a T^* 243.8 [mmol/s eq]
$k_a(T)$	constante de equilibrio químico a T [-]
$K_a(T_o)$	constante de equilibrio químico a T_o 284 [-]
R	constante universal de los gases 8.31451 [J/mol K]
r	rapidez de reacción [mmol/s eq]
T	temperatura de la etapa (modelo de equilibrio) [K]
T	temperatura de la fase líquida (modelo de no equilibrio) [K]
T_o	298.15 [K]
T^*	363.15 [K]

El catalizador que va a ser utilizado es el Amberlyst 15 que tiene 4.9 meq/g. Las ecuaciones anteriores fueron programadas como subrutinas en Lenguaje Fortran, y después fueron compiladas para que el simulador las utilizara para hacer el cálculo de la rapidez de reacción. El código fuente de las subrutinas se encuentra en los Apéndices C para el modelo de equilibrio, y D para el modelo de no equilibrio.

El simulador necesita estimados iniciales para empezar a iterar, la manera en la que obtiene esos estimados es la siguiente:

1. Mezcla la corriente de 1METANOL y la de 2BUTENOS.
2. Hace una serie de flashes reactivos P(V/F) a la mezcla resultante del paso 1.
 - 2.1. El primer flash reactivo lo hace a la presión del domo y con una (V/F)=1, los resultados generados (Troció y composición del líquido) son considerados como la temperatura y la composición del líquido de la etapa 1.
 - 2.2. El siguiente flash reactivo lo hace a la presión del fondo y con una (V/F)=0, los resultados generados (Tburbuja y composición del vapor) son considerados como la temperatura y composición del vapor de la última etapa.
3. Genera los estimados iniciales, al considerar, que el perfil de temperaturas y de composiciones tanto del líquido como del vapor es un perfil lineal.

El método de cálculo del simulador, ya que cuenta con los estimados iniciales, es el siguiente:

1. Calcula los coeficientes de transferencia de masa, de acuerdo a las características de la columna.
 - 1.1. Para la sección 1 y 3 utiliza la correlación de Chan-Fair [13].
 - 1.2. Para la sección 2 utiliza la correlación de Onda [44].
2. Los valores de los coeficientes de transferencia de masa los utiliza en las ecuaciones 4-41 y 4-42, para obtener la matriz R.

3. Calcula la matriz Γ , para la fase líquida utiliza la ecuación 3-68 y para la fase vapor usa la ecuación 3-69.
4. Con R y con Γ obtiene la matriz k a partir de la ecuación 4-40.
5. Con k puede calcular el valor de N , para la fase líquida y para la fase vapor, mediante el uso de las ecuaciones 3-103 y 3-104 respectivamente.
6. Calcula N con la ecuación 4-3 ó 4-4.
7. Calcula los coeficientes de transferencia de calor utilizando la analogía de Chilton-Colburn mediante la ecuación $h = \bar{k}(Sc)^{2/3} C_{p_{mezcla}}$.
8. Con h calcula q con la ecuación 3-155.
9. El valor de q lo utiliza en la ecuación 3-145 para calcular e .
10. Calcula E con la ecuación 4-7 ó 4-8.
11. Si en la etapa que se esta considerando hay reacción química, el simulador utiliza la subrutina para calcular la rapidez de reacción.
12. Con la información que se le proporcione al simulador, y con la información obtenida en los pasos anteriores, se genera el sistema de ecuaciones que se tiene que resolver.
13. Se resuelve el sistema de ecuaciones.

La manera en la que se verificó la presencia de MEE, al variar la etapa de alimentación de la corriente de 1METANOL, fue la siguiente:

1. En la primera parte del procedimiento, se varía la etapa de alimentación de la corriente de 1METANOL de la etapa 2 a la etapa "n-1". Los pasos que describen este procedimiento son los 2, 3, 4 y 5.
2. La primera simulación considera que la corriente es alimentada en la etapa 2.
3. Se utilizan los resultados de la simulación anterior como estimados iniciales para la siguiente simulación, en donde la corriente se alimenta en la etapa 3.
4. El paso 3 se repite cambiando la etapa de alimentación, de manera que en la siguiente simulación, se alimenta en la etapa 4, después en la etapa 5 y así sucesivamente, hasta la etapa "n-1".
 - 4.1. Ejemplo: en caso de que n=17 etapas, en la última simulación, la etapa de alimentación es la etapa 16.
5. Con los resultados de las simulaciones anteriores, se genera una gráfica de Conversión vs. No. de Etapa.
6. En la segunda parte del procedimiento, se vuelve a variar la etapa de alimentación de la corriente 1METANOL, pero en este caso, la variación es de la etapa "n-1" a la etapa 2. Los pasos que describen este procedimiento son los 7, 8, 9 y 10.
7. Se hace una simulación en donde se alimenta en la etapa "n-1".
 - 7.1. Ejemplo: en caso de que n=17 etapas, en la simulación del paso 7 se considera, que la etapa de alimentación es la 16.
8. Se utilizan los resultados de la simulación anterior, como estimados iniciales para la siguiente simulación, en donde se alimenta en la etapa "n-2".

9. El paso 8 se repite cambiando la etapa de alimentación, de manera que en la siguiente simulación se alimenta en la etapa “n-3”, luego en la “n-4” y así sucesivamente, en la última simulación se alimenta en la etapa 2.
10. Con los resultados de las simulaciones anteriores, se genera una nueva gráfica de Conversión vs. No. de Etapa.
11. Utilizando los resultados de las simulaciones, en caso de que, para una etapa en particular, existan 2 valores de conversión distintos, para esa etapa en específico hay un MEE.

Al seguir el procedimiento descrito anteriormente se obtuvieron 2 soluciones. Una que corresponde a una alta conversión del isobutano, la cual se denominará Rama de Alta Conversión. Y otra que corresponde a una baja conversión del isobutano, la cual se llamará Rama de Baja Conversión.

Después se varió la zona de reacción y el número de etapas de la columna para ver que sucede con los MEE.

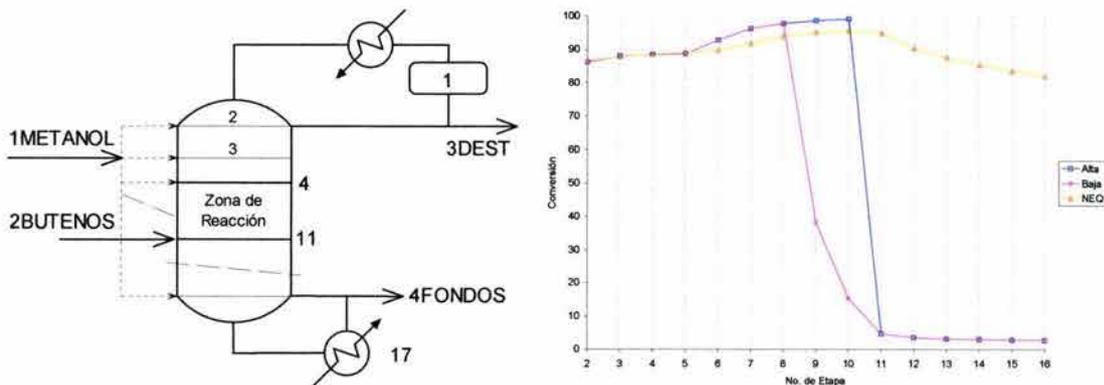


Figura 5.2 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 4 a 11. N=17

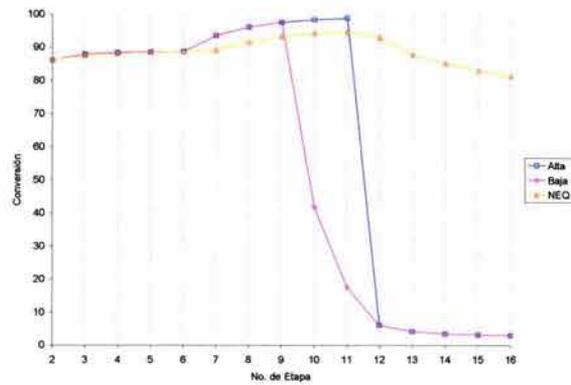
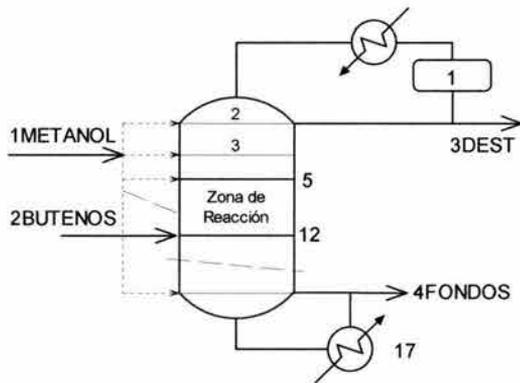


Figura 5.3 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 5 a 12. N=17

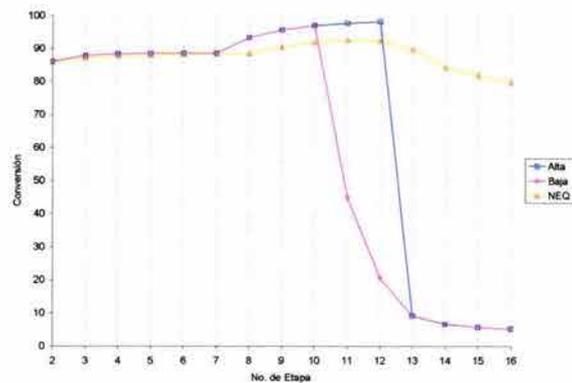
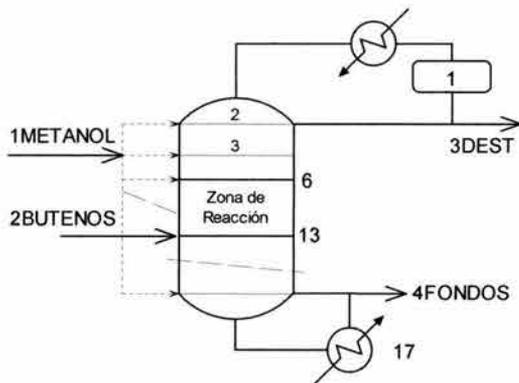


Figura 5.4 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 6 a 13. N=17

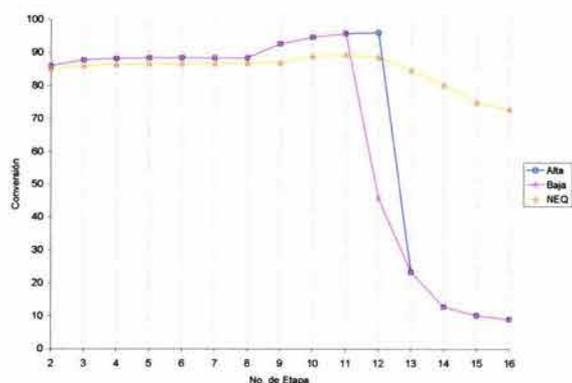
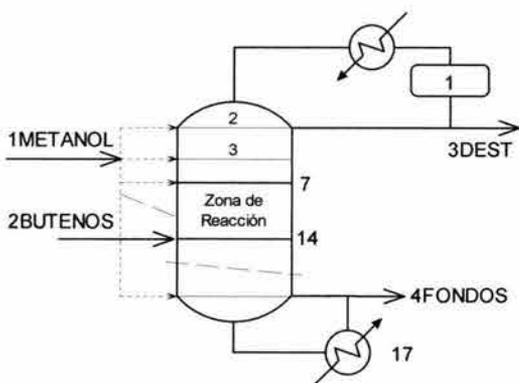


Figura 5.5 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 7 a 14. N=17

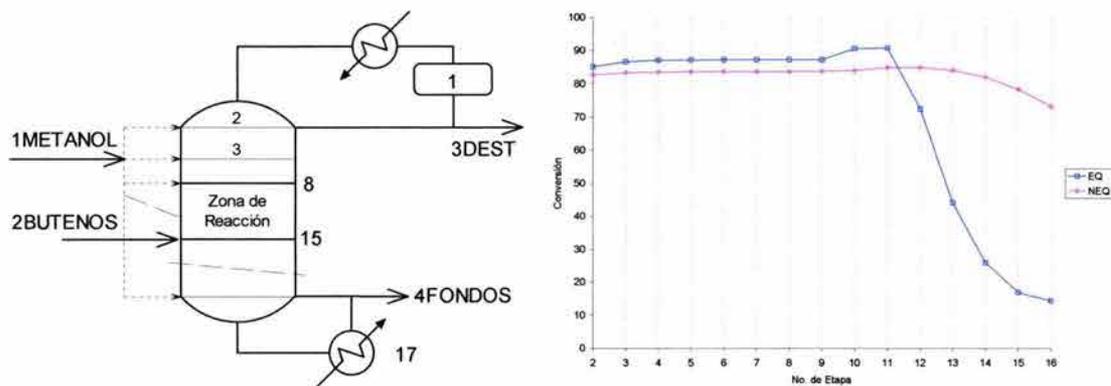


Figura 5.6 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 8 a 15. N=17

En los resultados anteriores se puede ver que si se utiliza el modelo de etapa en equilibrio, sí hay MEE, en cambio si se utiliza el modelo de etapa en no equilibrio no hay MEE. Además cuando la zona de reacción va bajando los MEE se van recorriendo, hasta que si la reacción es de 7 a 14, únicamente existe una solución y cuando la reacción es de 8 a 15 desaparecen los MEE.

Cuando se utiliza el modelo de etapa en no equilibrio se puede ver que en las últimas etapas la conversión no baja del 80%, en cambio con el modelo de etapa en equilibrio la conversión baja hasta cerca del 0%.

Para ver las diferencias entre los dos modelos y entre los MEE se hizo la simulación de aquellas etapas en donde hay presencia de MEE, para el caso donde la reacción es de 4 a 11.

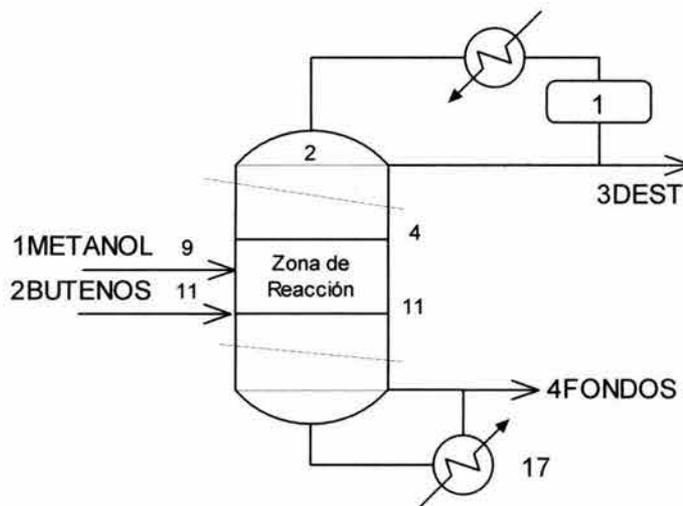


Figura 5.7 Configuración de la columna. Reacción de 4 a 11, alimentaciones en 9 y 11. N=17

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio

Alimentación en 9	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	150.8
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	8.298	1.885
1-Buteno	0	1274.4	1258.721	15.679
MTBE	0	0	0.26	691.558
Metanol	775.8	0	83.904	0.078
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.006	0.003
1-Buteno	0	0.645	0.932	0.022
MTBE	0	0	0.000192	0.975
Metanol	1	0	0.062	0.00011

Tabla 5.1 Resultados obtenidos usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=17

Alimentación en 9	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.5	133
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	433.022	0.004
1-Buteno	0	1274.4	1274.398	0.002
MTBE	0	0	9.534	259.44
Metanol	775.8	0	57.071	449.755
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.244	0.000005
1-Buteno	0	0.645	0.718	0.000002
MTBE	0	0	0.005	0.366
Metanol	1	0	0.032	0.634

Tabla 5.2 Resultados obtenidos usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=17

Alimentación en 9	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	146
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	31.584	3.25
1-Buteno	0	1274.4	1232.538	41.862
MTBE	0	0	4.424	662.742
Metanol	775.8	0	107.288	1.345
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.023	0.005
1-Buteno	0	0.645	0.896	0.059
MTBE	0	0	0.003	0.934
Metanol	1	0	0.078	0.002

Tabla 5.3 Resultados obtenidos usando el Modelo de No Equilibrio. N=17

Alimentación en 9	Error	Error	Error	Error
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.00	3.29	0.68	8.90
Flujos Molares				
Isobuteno	73.73	42.00	>100	99.88
1-Buteno	2.12	62.55	3.40	100.00
MTBE	94.12	4.35	>100	60.85
Metanol	21.80	94.20	46.81	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	73.91	40.00	>100	99.90
1-Buteno	4.02	62.71	19.87	100.00
MTBE	93.60	4.39	66.67	60.81
Metanol	20.51	94.50	58.97	>100

Tabla 5.4 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=17

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 95.0%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.5% y 38.3%. De aquí se puede ver que si se quisiera alcanzar la misma conversión usando el modelo de no equilibrio se tendría que cambiar alguna de las variables de operación (reflujo). La mayor diferencia entre los resultados se obtiene entre el modelo de no equilibrio y la rama de baja conversión del modelo de equilibrio, esto se debe a que se comparan los resultados entre una conversión de 95.0% contra una de 38.3%.

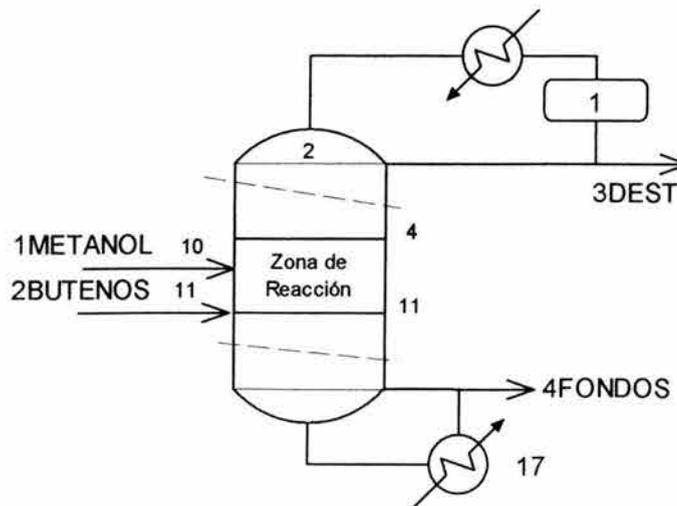


Figura 5.8 Configuración de la columna. Reacción de 4 a 11, alimentaciones en 10 y 11. N=17

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio

Alimentación en 10	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	151.3
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	6.151	0.891
1-Buteno	0	1274.4	1261.053	13.347
MTBE	0	0	0.192	694.766
Metanol	775.8	0	80.646	0.196
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.005	0.001
1-Buteno	0	0.645	0.935	0.019
MTBE	0	0	0.000143	0.98
Metanol	1	0	0.06	0.000276

Tabla 5.5 Resultados obtenidos usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=17

Alimentación en 10	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.6	135.6
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	595.202	0.001
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	11.392	95.405
Metanol	775.8	0	55.209	613.794
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.307	9.18E-07
1-Buteno	0	0.645	0.658	3.35E-07
MTBE	0	0	0.006	0.135
Metanol	1	0	0.029	0.865

Tabla 5.6 Resultados obtenidos usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=17

Alimentación en 10	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	146.4
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	29.246	2.067
1-Buteno	0	1274.4	1238.329	36.071
MTBE	0	0	4.377	666.31
Metanol	775.8	0	100.36	4.753
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.021	0.003
1-Buteno	0	0.645	0.902	0.051
MTBE	0	0	0.003	0.94
Metanol	1	0	0.073	0.007

Tabla 5.7 Resultados obtenidos usando el Modelo de No Equilibrio. N=17

Alimentación en 10	Error		Error	
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.00	3.35	0.81	7.38
Flujos Molares				
Isobuteno	78.97	56.89	>100	99.95
1-Buteno	1.84	63.00	2.91	100.00
MTBE	95.61	4.27	>100	85.68
Metanol	19.64	95.88	44.99	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	76.19	66.67	>100	99.97
1-Buteno	3.66	62.75	27.05	100.00
MTBE	95.23	4.26	100.00	85.64
Metanol	17.81	96.06	60.27	>100

Tabla 5.8 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=17

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 95.5%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.9% y 15.2%. En este caso también la conversión del modelo de no equilibrio es menor debido a las resistencias a la transferencia de masa.

	EQ Alta		EQ Baja		NEQ	
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura	0.00	0.33	0.13	1.95	0.00	0.27
Flujos Molares						
Isobuteno	25.87	52.73	37.45	75.00	7.40	36.40
1-Buteno	0.19	14.87	0.00	100.00	0.47	13.83
MTBE	26.15	0.46	19.49	63.23	1.06	0.54
Metanol	3.88	>100	3.26	36.47	6.46	>100
Fracciones Mol						
Isobuteno	16.67	66.67	25.82	81.64	8.70	40.00
1-Buteno	0.32	13.64	8.36	83.25	0.67	13.56
MTBE	25.52	0.51	20.00	63.11	0.00	0.64
Metanol	3.23	>100	9.38	36.44	6.41	>100

Tabla 5.9 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 9 y en la etapa 10 para los Modelos de No Equilibrio y de Equilibrio

Al comparar los resultados entre los modelos cuando se alimenta en las etapas donde hay MEE se ve que la menor diferencia se obtiene usando el modelo de no equilibrio. En cambio la mayor diferencia se presenta en la rama de baja conversión del modelo de etapa en equilibrio, lo anterior se debe a que se comparan resultados cuando la conversión es de 38.3% y de 15.2%.

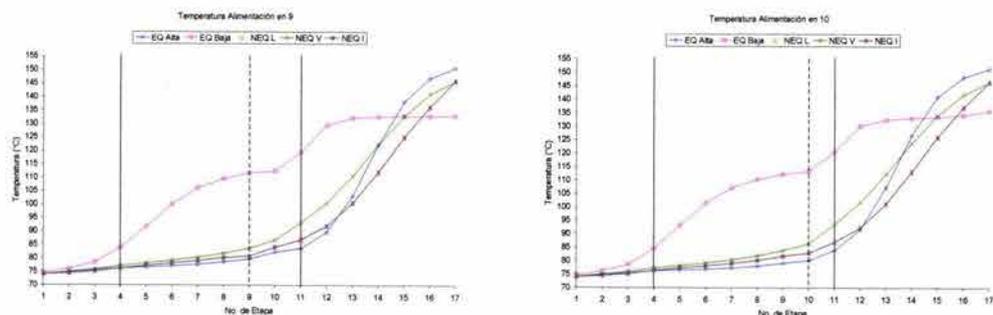


Figura 5.9 Comparación para la Temperatura para los 2 modelos. N=17

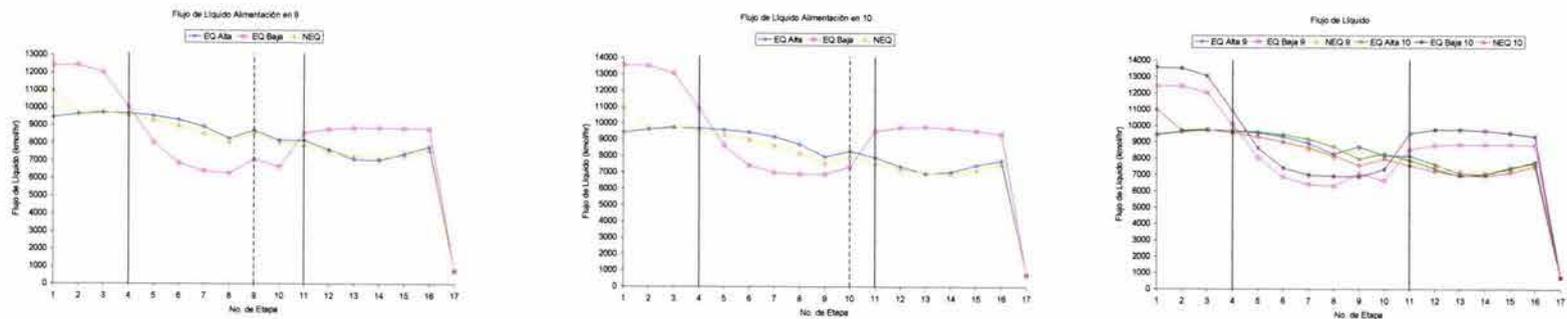


Figura 5.10 Comparación para los Flujos de Líquido para los 2 modelos. N=17

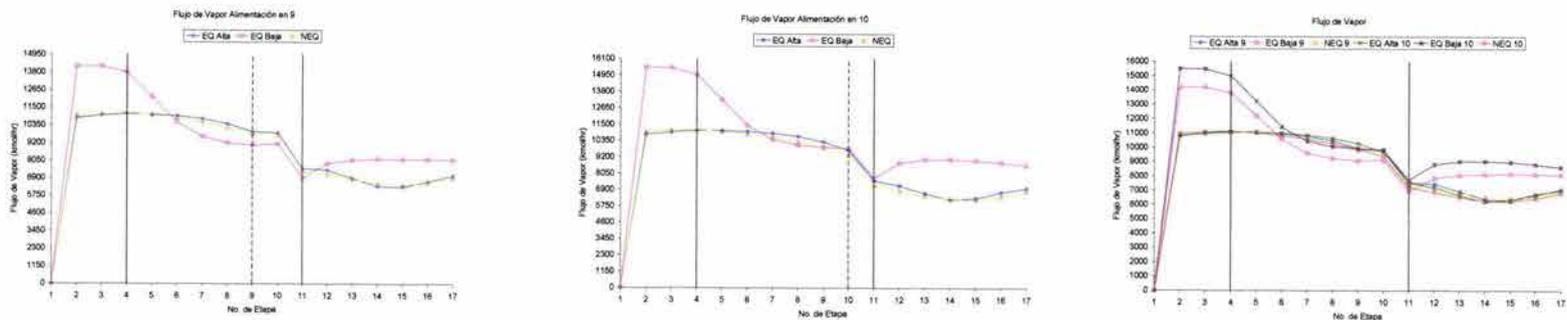


Figura 5.11 Comparación para los Flujos de Vapor para los 2 modelos. N=17

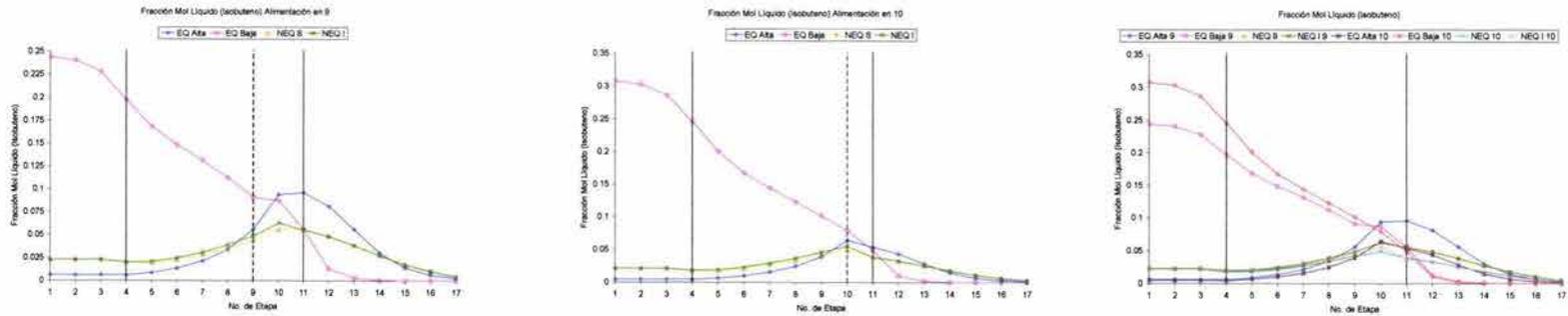


Figura 5.12 Comparación para la Fracción Mol Líquido del Isobuteno para los 2 modelos. N=17

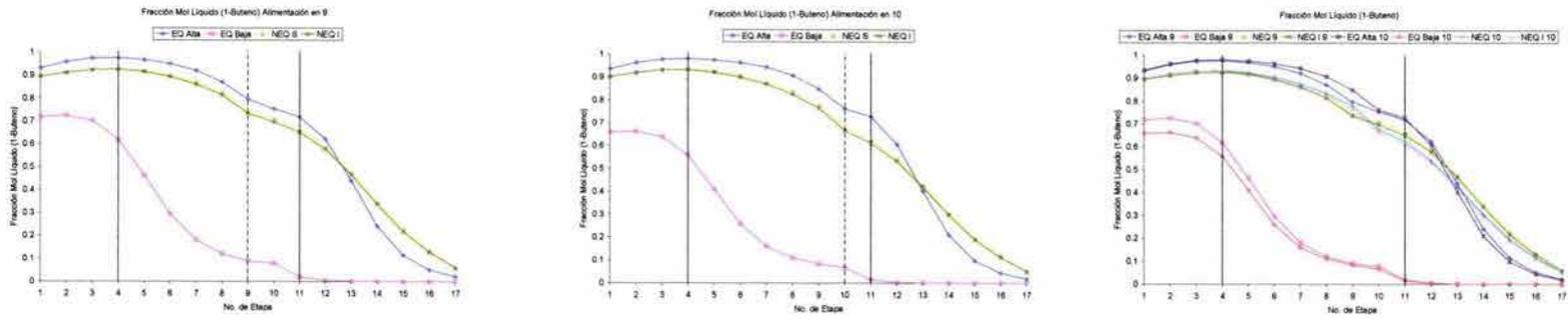


Figura 5.13 Comparación para la Fracción Mol Líquido del 1-Buteno para los 2 modelos. N=17

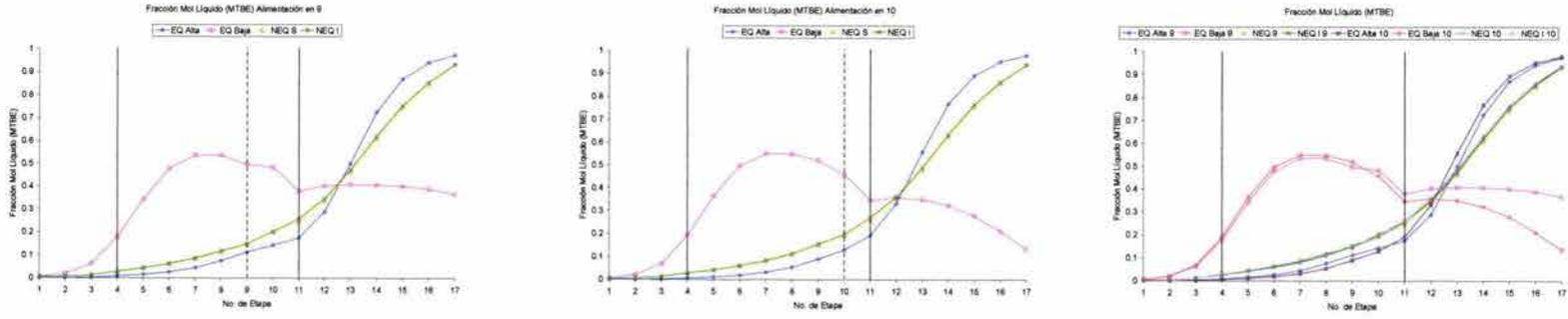


Figura 5.14 Comparación para la Fracción Mol Líquido del MTBE para los 2 modelos. N=17

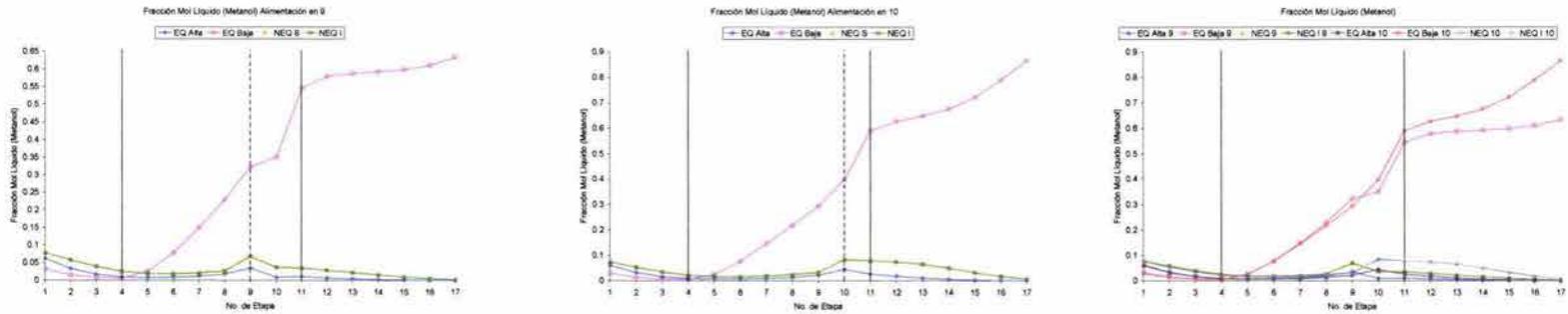


Figura 5.15 Comparación para la Fracción Mol Líquido del Metanol para los 2 modelos. N=17

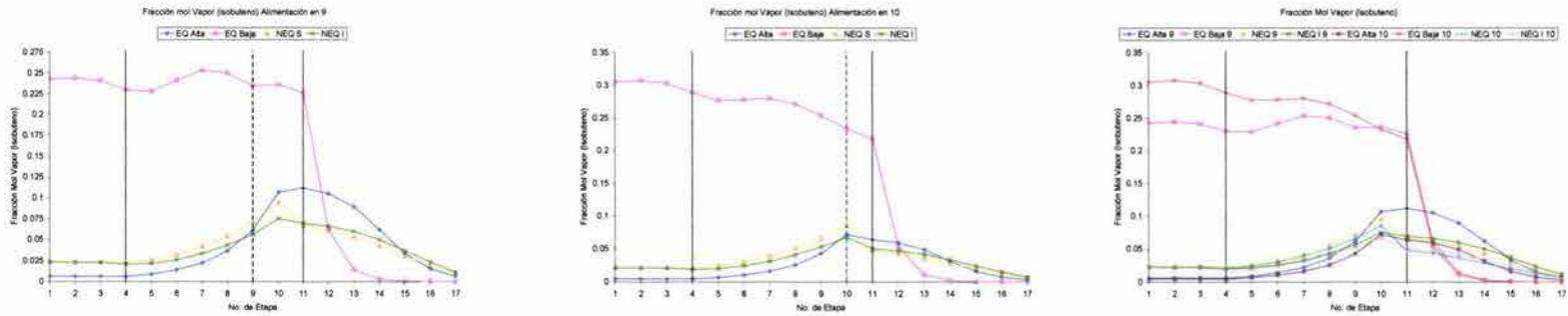


Figura 5.16 Comparación para la Fracción Mol Vapor del Isobuteno para los 2 modelos. N=17

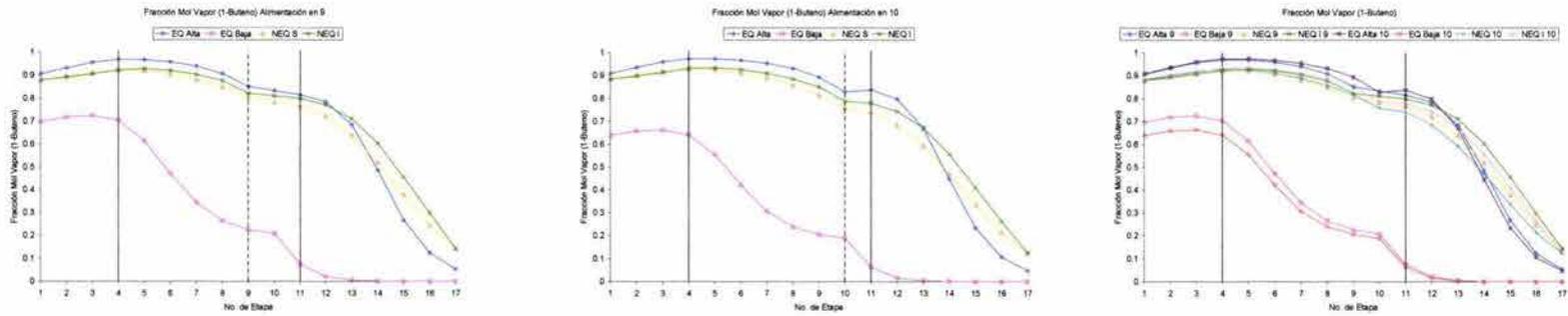


Figura 5.17 Comparación para la Fracción Mol Vapor del 1-Buteno para los 2 modelos. N=17

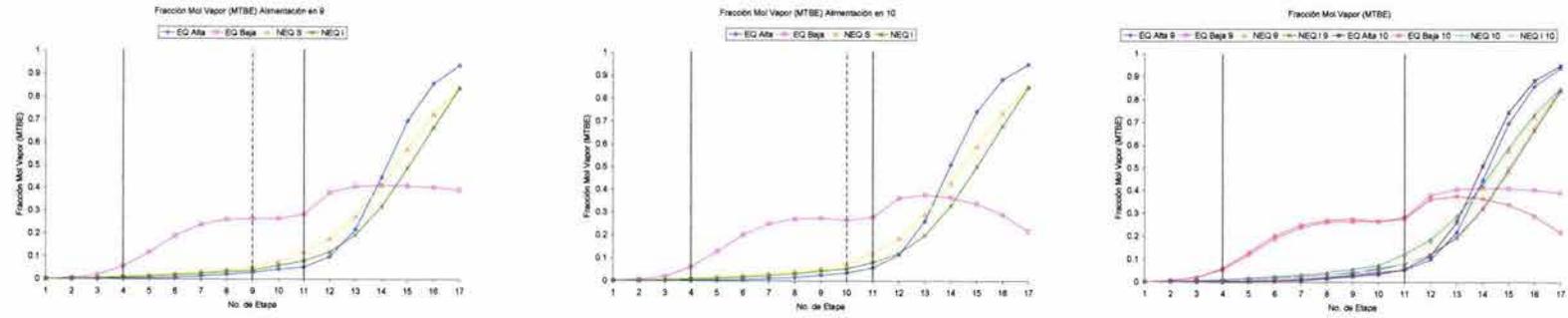


Figura 5.18 Comparación para la Fracción Mol Vapor del MTBE para los 2 modelos. N=17

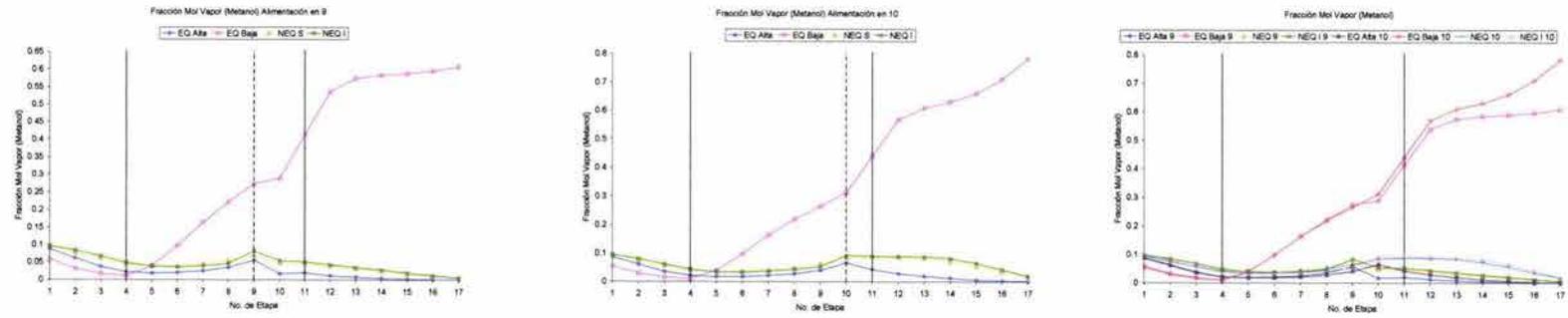


Figura 5.19 Comparación para la Fracción Mol Vapor del Metanol para los 2 modelos. N=17

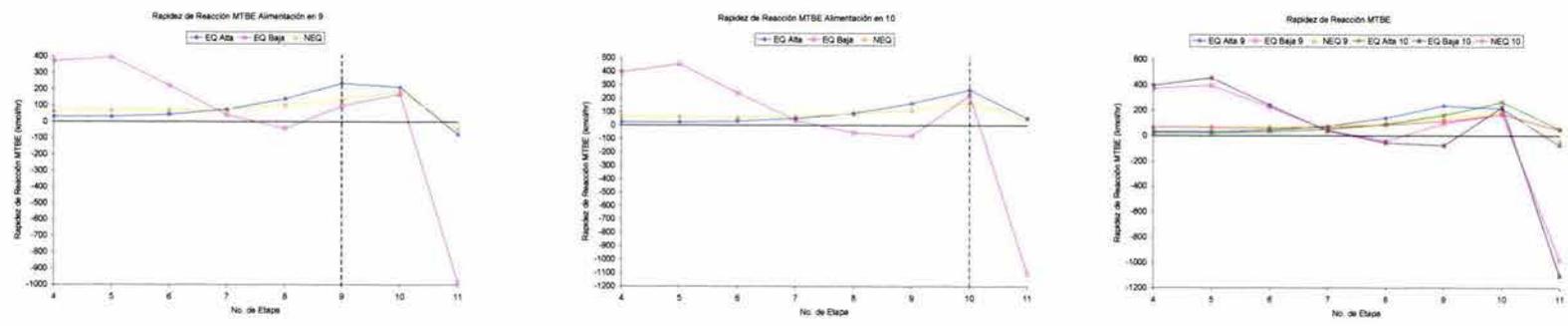


Figura 5.20 Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=17

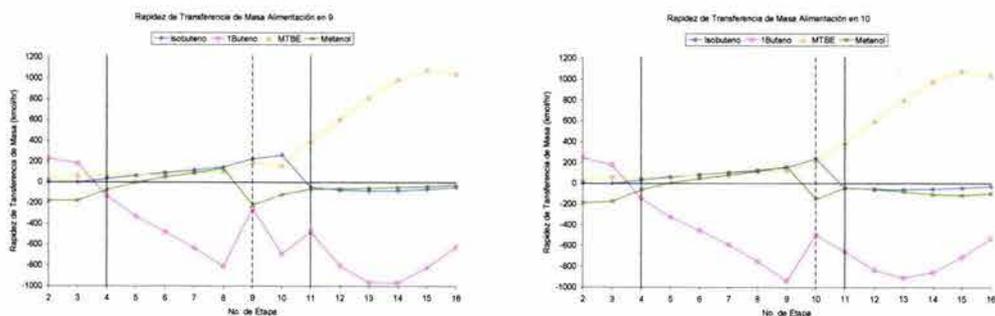


Figura 5.21 Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=17

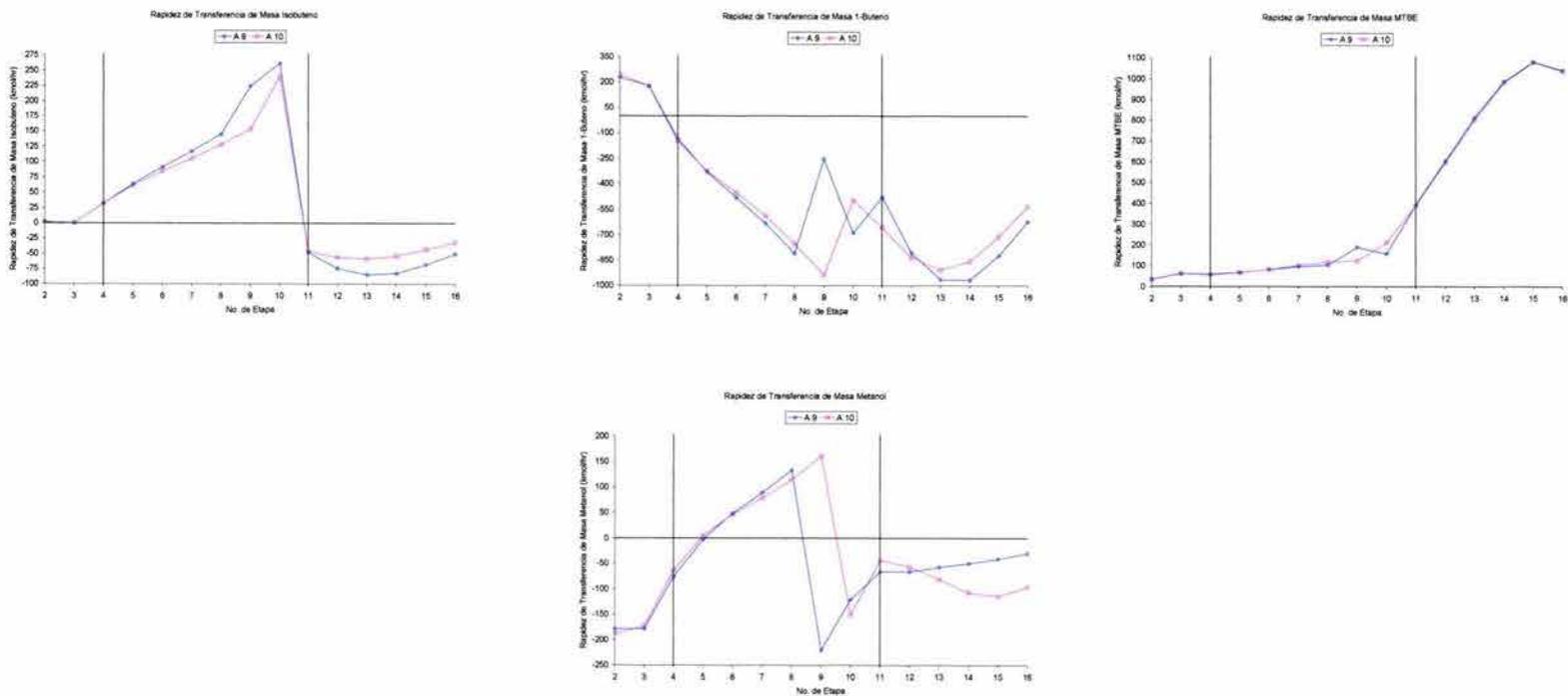


Figura 5.22 Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa para cada uno de los componentes. N=17

En las gráficas se puede ver, que los resultados entre la rama de alta conversión del modelo de equilibrio y el de no equilibrio son muy parecidos, aun cuando son modelos distintos, en cambio en los resultados de la rama de baja conversión es donde se presentan las mayores diferencias.

La diferencia entre la rama de alta conversión y la de baja conversión esta relacionada con la temperatura y con las composiciones en la zona de reacción. Para la rama de alta conversión, los valores de la temperatura y las composiciones del isobuteno, MTBE y metanol, en la zona de reacción son menores que los valores de la rama de baja conversión. El efecto que producen las altas temperaturas y composiciones en la zona de reacción, en la rama de baja conversión, es que la reacción que se lleve a cabo sea de descomposición del MTBE, que previamente se había formado en las etapas superiores.

En las siguientes simulaciones, se va a aumentar el número de etapas y se va a variar la zona de reacción, con el objetivo de ver qué pasa con la columna cuando se hacen estos cambios y además para conocer el comportamiento de los MEE en caso de que existan. En la siguiente sección el número de etapas aumento a 20.

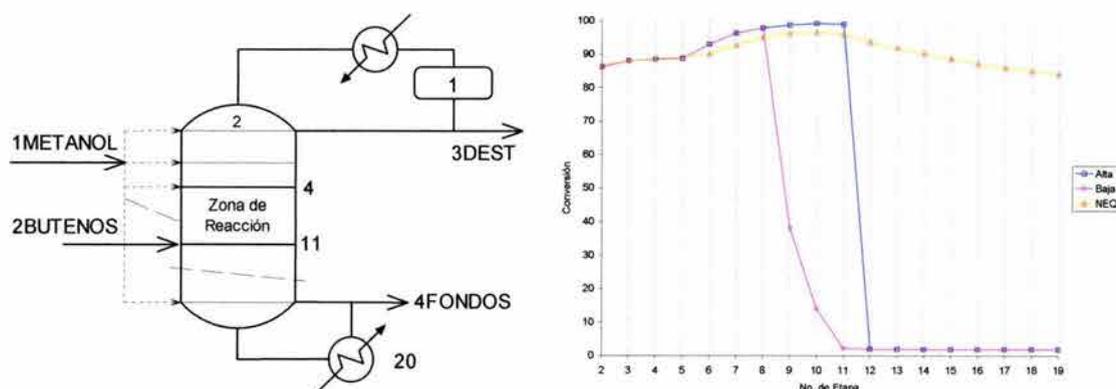


Figura 5.23 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 4 a 11. N=20

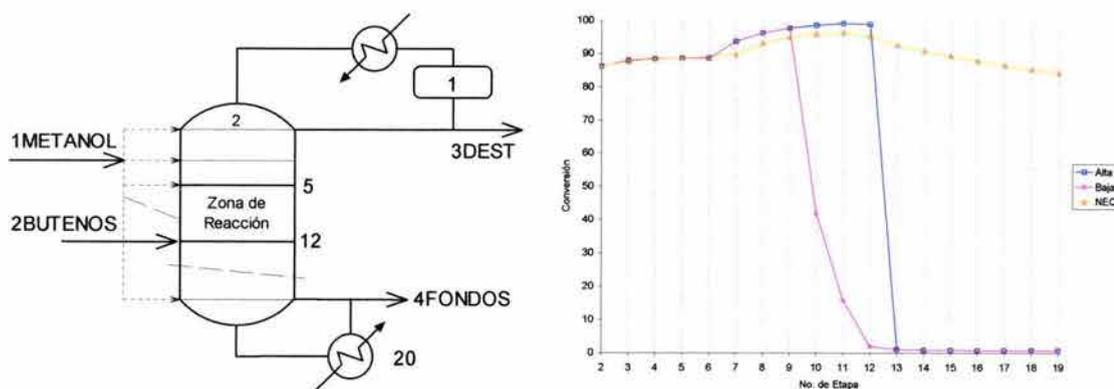


Figura 5.24 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 5 a 12. N=20

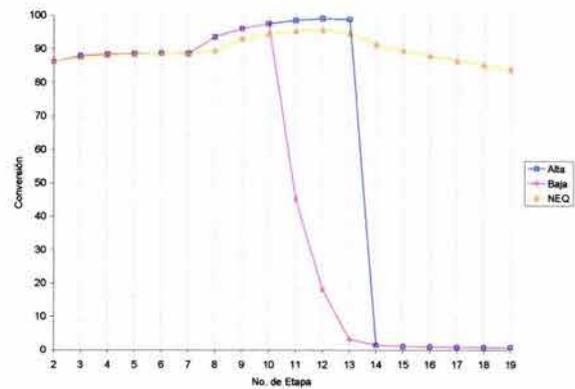
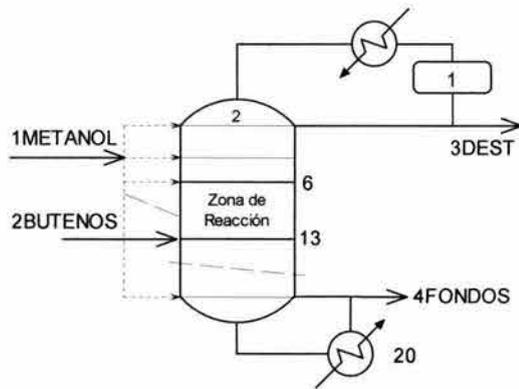


Figura 5.25 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 6 a 13. N=20

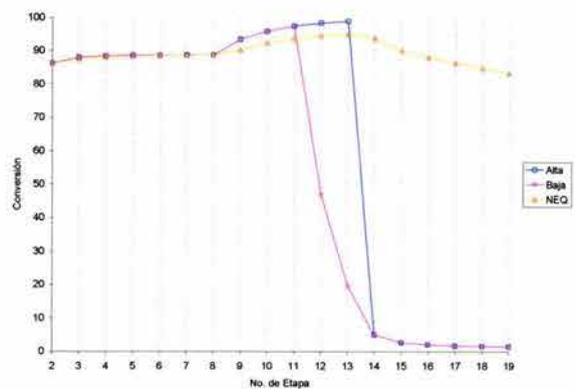
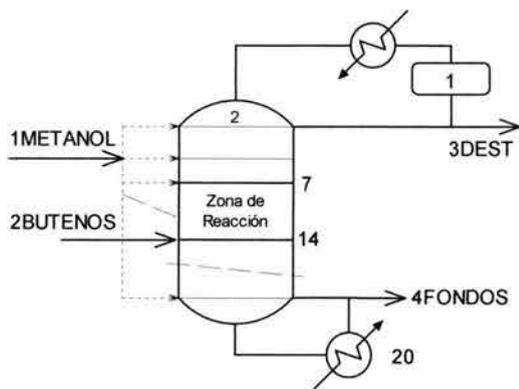


Figura 5.26 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 7 a 14. N=20

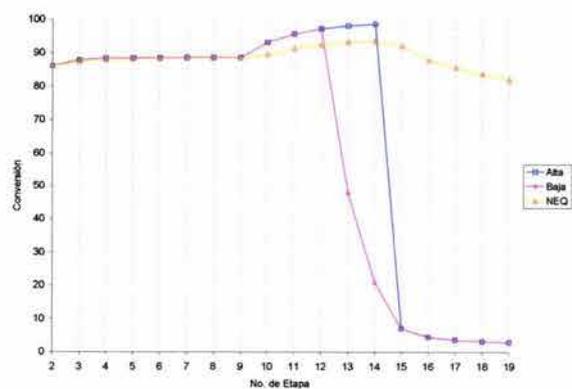
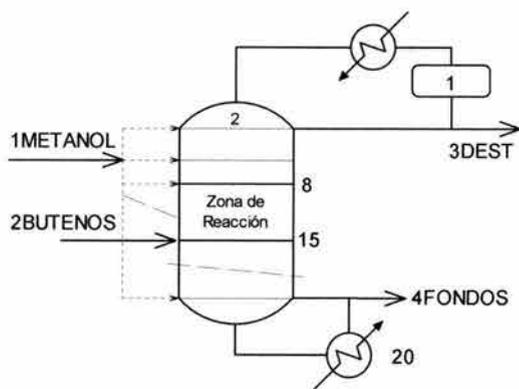


Figura 5.27 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 8 a 15. N=20

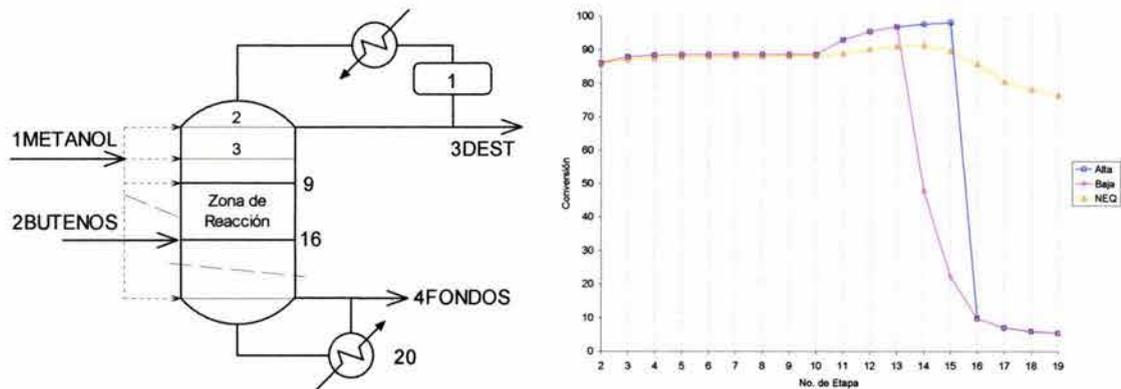


Figura 5.28 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 9 a 16. N=20

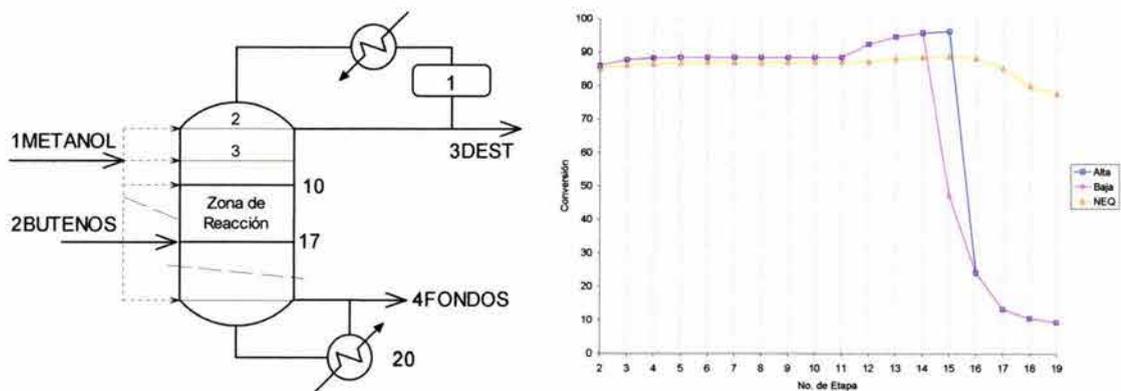


Figura 5.29 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 10 a 17. N=20

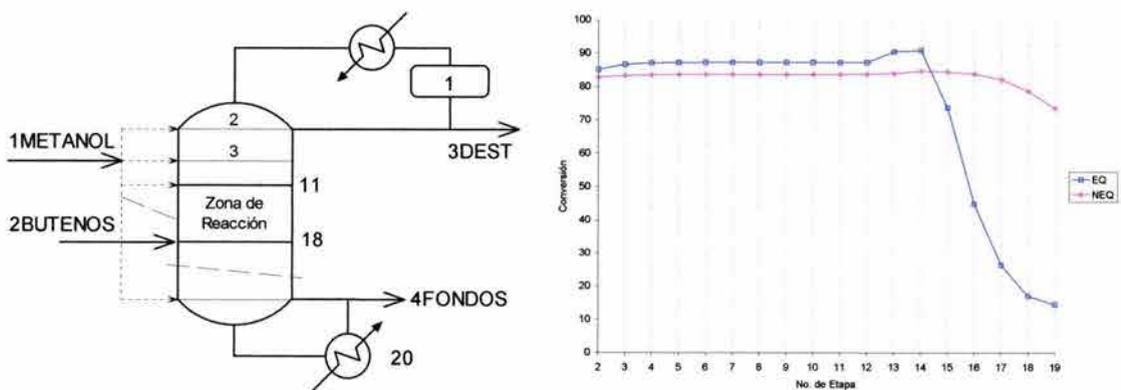


Figura 5.30 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 11 a 18. N=20

En los resultados anteriores se puede ver que si se utiliza el modelo de etapa en equilibrio, sí hay MEE, además en el caso donde la reacción se lleva a cabo de la etapa 4 a 11 hay 3 MEE en lugar de 2 cuando son 17 etapas. En este caso también cuando la zona de reacción va bajando, los MEE se van recorriendo, hasta que si la reacción es de 10 a 17 únicamente existe una solución y de 11 a 18 desaparecen los MEE.

Cuando se utiliza el modelo de etapa en no equilibrio se puede ver que en las últimas etapas la conversión no baja del 80%, en cambio con el modelo de etapa en equilibrio, la conversión baja hasta cerca del 0%.

Para ver las diferencias entre los dos modelos y entre los MEE se hizo la simulación de aquellas etapas en donde hay presencia de MEE, para el caso donde la reacción es de 7 a 14.

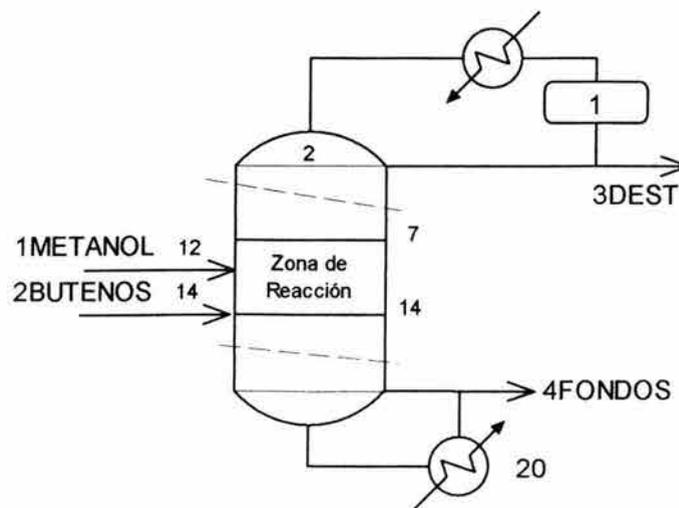


Figura 5.31 Configuración de la columna. Reacción de 7 a 14, alimentaciones en 12 y 14. N=20

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio

Alimentación en 12	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	150.6
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	9.779	2.007
1-Buteno	0	1274.4	1257.489	16.911
MTBE	0	0	0.009	690.206
Metanol	775.8	0	85.51	0.076
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.007	0.003
1-Buteno	0	0.645	0.93	0.024
MTBE	0	0	0.000006	0.973
Metanol	1	0	0.063	0.000107

Tabla 5.10 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=20

Alimentación en 12	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.1	133
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	372.483	0.007
1-Buteno	0	1274.4	1274.397	0.003
MTBE	0	0	0.217	329.294
Metanol	775.8	0	66.393	379.897
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.217	0.000009
1-Buteno	0	0.645	0.744	0.000004
MTBE	0	0	0.000126	0.464
Metanol	1	0	0.039	0.536

Tabla 5.11 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=20

Alimentación en 12	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	73.8	146
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	35.311	3.401
1-Buteno	0	1274.4	1232.368	42.032
MTBE	0	0	0.754	662.533
Metanol	775.8	0	111.279	1.233
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.026	0.005
1-Buteno	0	0.645	0.893	0.059
MTBE	0	0	0.000547	0.934
Metanol	1	0	0.081	0.002

Tabla 5.12 Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=20

Alimentación en 12	Error	Error	Error	Error
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.27	3.15	0.41	8.90
Flujos Molares				
Isobuteno	72.31	40.99	>100	99.79
1-Buteno	2.04	59.77	3.41	99.99
MTBE	98.81	4.18	71.22	50.30
Metanol	23.16	93.84	40.34	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	73.08	40.00	>100	99.82
1-Buteno	4.14	59.32	16.69	99.99
MTBE	98.90	4.18	76.97	50.32
Metanol	22.22	94.65	51.85	>100

Tabla 5.13 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=20

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 94.4%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.3% y 46.9%. De aquí se puede ver que si se quisiera alcanzar la misma conversión usando el modelo de no equilibrio se tendría que cambiar alguna de las variables de operación.

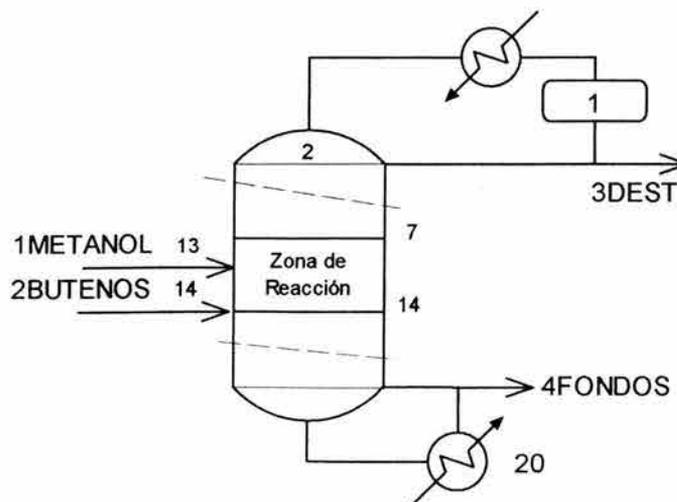


Figura 5.32 Configuración de la columna. Reacción de 7 a 14, alimentaciones en 13 y 14. N=20

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio

Alimentación en 13	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	151.2
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	7.322	0.936
1-Buteno	0	1274.4	1260.062	14.338
MTBE	0	0	0.006	693.736
Metanol	775.8	0	81.867	0.191
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.005	0.001
1-Buteno	0	0.645	0.934	0.02
MTBE	0	0	0.000005	0.978
Metanol	1	0	0.061	0.000269

Tabla 5.14 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=20

Alimentación en 13	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.2	134.5
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	564.686	0.001
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0.288	137.025
Metanol	775.8	0	66.314	572.174
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.296	0.000002
1-Buteno	0	0.645	0.669	0.0000062
MTBE	0	0	0.000151	0.193
Metanol	1	0	0.035	0.807

Tabla 5.15 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=20

Alimentación en 13	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	73.9	146.3
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	33.852	2.172
1-Buteno	0	1274.4	1236.705	37.695
MTBE	0	0	0.718	665.258
Metanol	775.8	0	105.749	4.075
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.025	0.003
1-Buteno	0	0.645	0.898	0.053
MTBE	0	0	0.000521	0.938
Metanol	1	0	0.077	0.006

Tabla 5.16 Resultados usando el Modelo No Equilibrio. N=20

Alimentación en 13	Error		Error	
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.14	3.35	0.41	8.07
Flujos Molares				
Isobuteno	78.37	56.91	>100	99.95
1-Buteno	1.89	61.96	3.05	100.00
MTBE	99.16	4.28	59.89	79.40
Metanol	22.58	95.31	37.29	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	80.00	66.67	>100	99.93
1-Buteno	4.01	62.26	25.50	100.00
MTBE	99.04	4.26	71.02	79.42
Metanol	20.78	95.52	54.55	>100

Tabla 5.17 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=20

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 94.8%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.8% y 19.5%. En este caso también los resultados del modelo de no equilibrio son menores debido a que hay resistencias a la transferencia de masa. Además en este caso, la diferencia entre las ramas de baja conversión es menor que en el caso de 17 etapas.

	EQ Alta		EQ Baja		NEQ	
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura	0.00	0.40	0.13	1.13	0.14	0.21
Flujos Molares						
Isobuteno	25.13	53.36	51.60	85.71	4.13	36.14
1-Buteno	0.20	15.21	0.00	100.00	0.35	10.32
MTBE	33.33	0.51	32.72	58.39	4.77	0.41
Metanol	4.26	>100	0.12	50.61	4.97	>100
Fracciones Mol						
Isobuteno	28.57	66.67	36.41	77.78	3.85	40.00
1-Buteno	0.43	16.67	10.08	84.50	0.56	10.17
MTBE	16.67	0.51	19.84	58.41	4.75	0.43
Metanol	3.17	>100	10.26	50.56	4.94	>100

Tabla 5.18 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 12 y en la etapa 13 para los Modelos de No Equilibrio y de Equilibrio

Al comparar los resultados entre los modelos cuando se alimenta en las etapas donde hay MEE, se ve que la menor diferencia se obtiene usando el modelo de no equilibrio, y además la corriente de 3DEST es la que tiene el menor error para todos los modelos. En cambio, la mayor diferencia se presenta en la rama de baja conversión del modelo de etapa en equilibrio, porque se comparan resultados cuando la conversión es de 46.9% y de 19.5%.

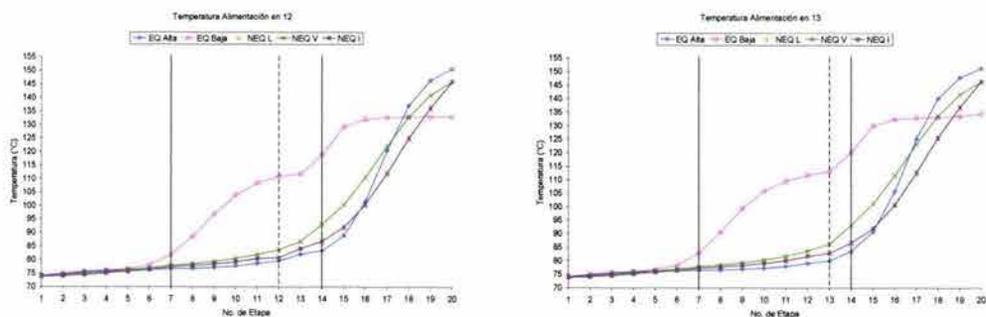


Figura 5.33 Comparación para la Temperatura para los 2 modelos. N=20

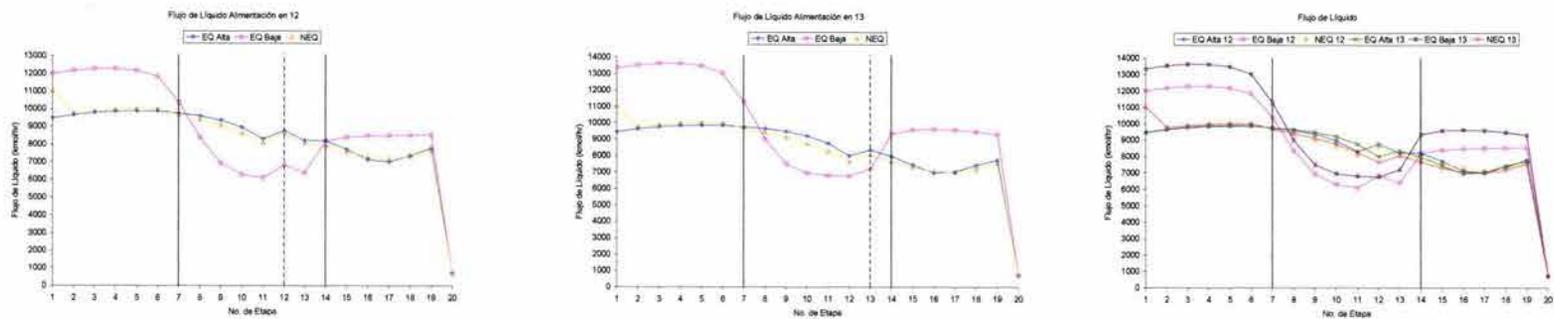


Figura 5.34 Comparación para los Flujos de Líquido para los 2 modelos. N=20

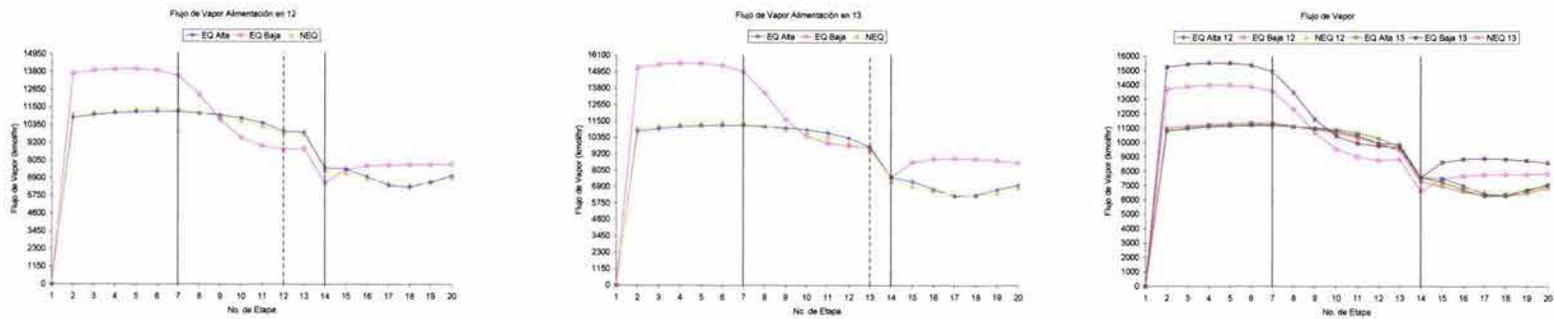


Figura 5.35 Comparación para los Flujos de Vapor para los 2 modelos. N=20

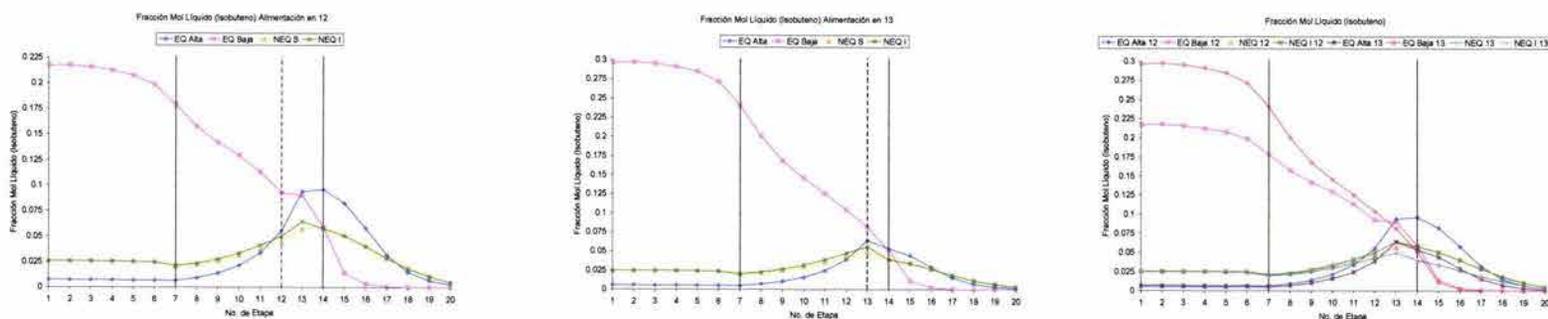


Figura 5.36 Comparación para los Fracción Mol Líquido del Isobuteno para los 2 modelos. N=20

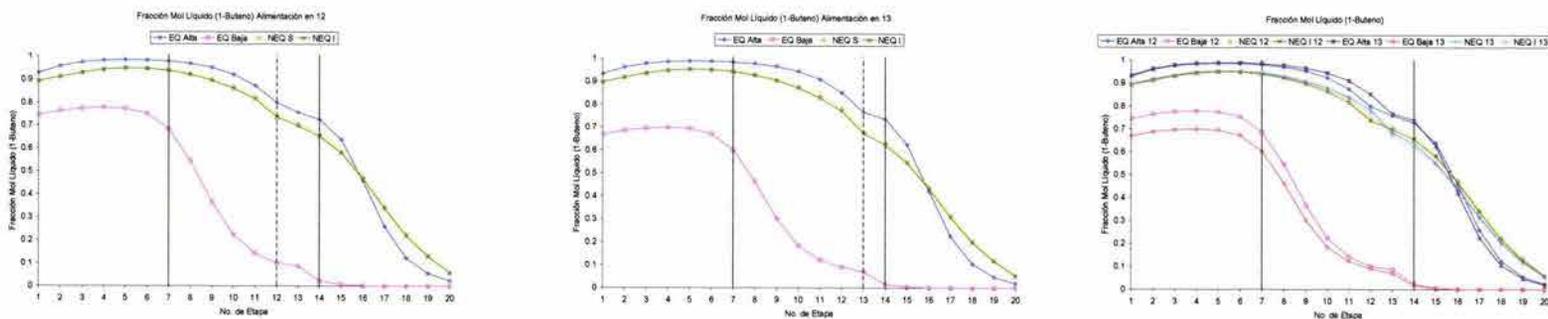


Figura 5.37 Comparación para los Fracción Mol Líquido del 1-Buteno para los 2 modelos. N=20

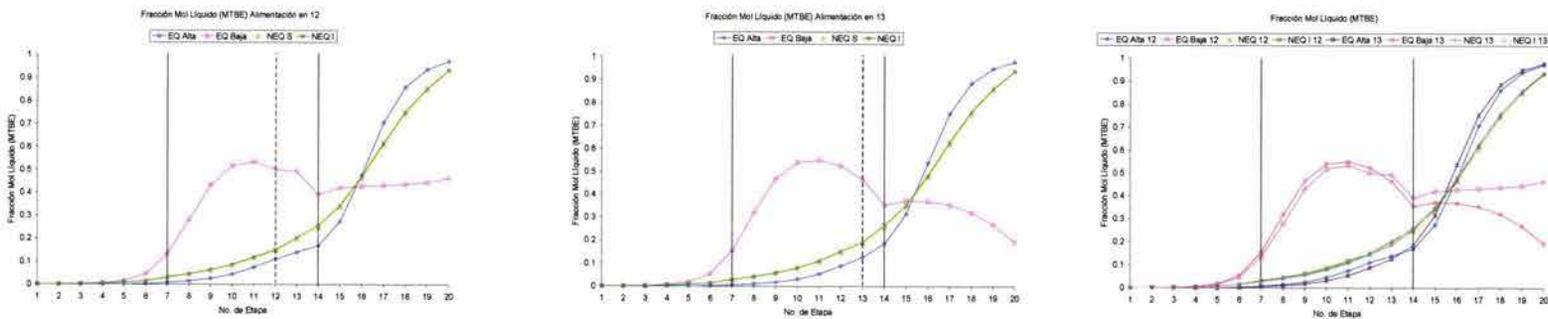


Figura 5.38 Comparación para los Fracción Mol Líquido del MTBE para los 2 modelos. N=20

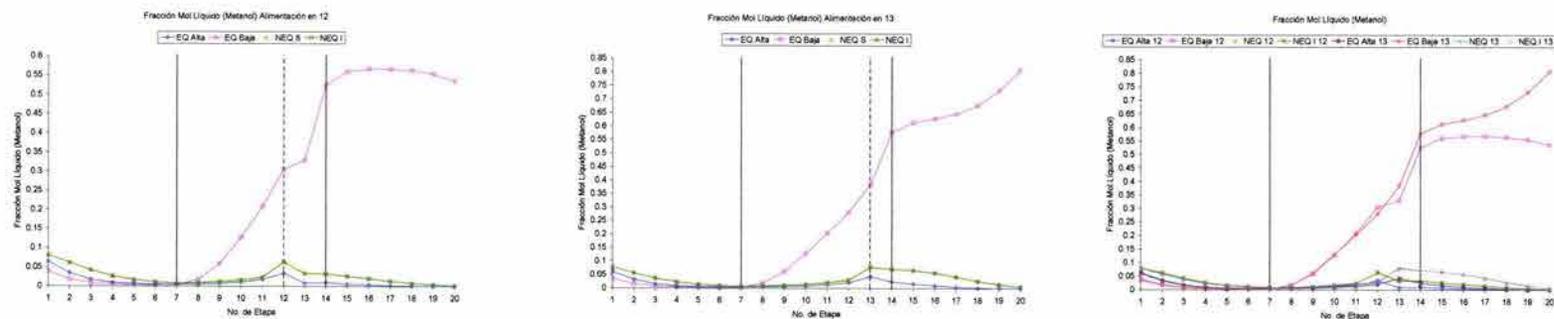


Figura 5.39 Comparación para los Fracción Mol Líquido del Metanol para los 2 modelos. N=20

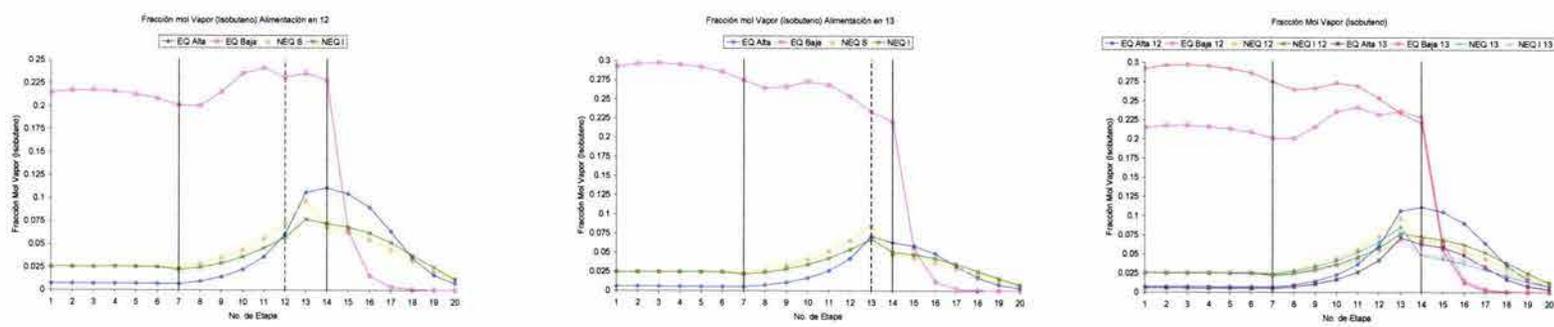


Figura 5.40 Comparación para los Fracción Mol Vapor del Isobuteno para los 2 modelos. N=20

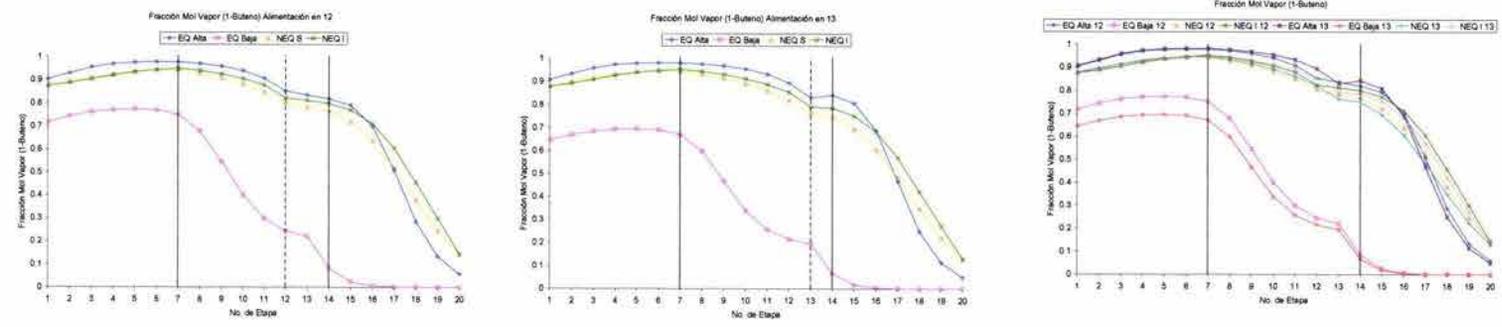


Figura 5.41 Comparación para los Fracción Mol Vapor del 1-Buteno para los 2 modelos. N=20

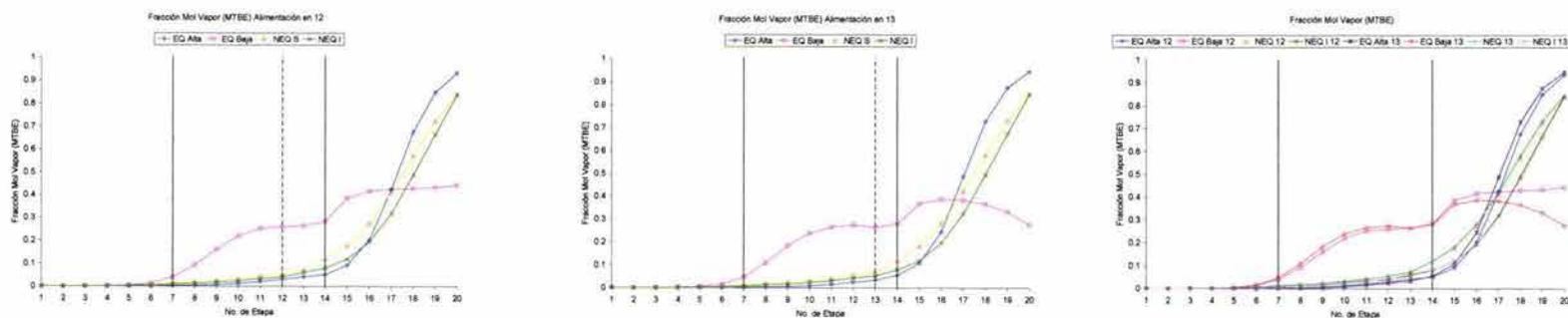


Figura 5.42 Comparación para los Fracción Mol Vapor del MTBE para los 2 modelos. N=20

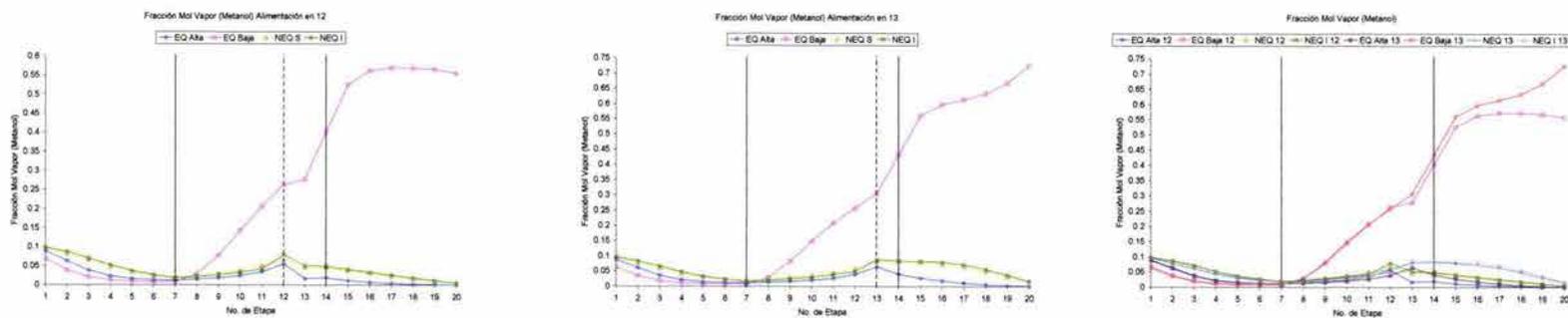


Figura 5.43 Comparación para los Fracción Mol Vapor del Metanol para los 2 modelos. N=20

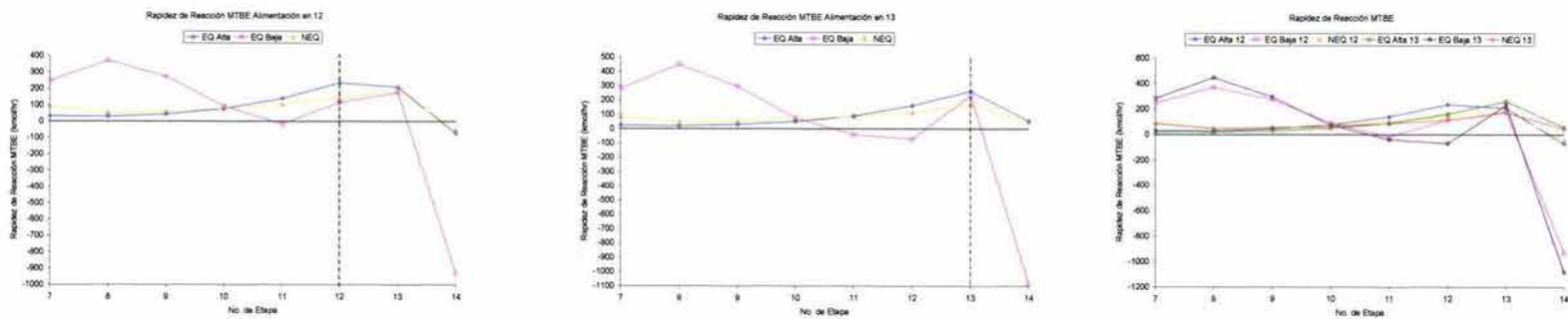


Figura 5.44 Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=20

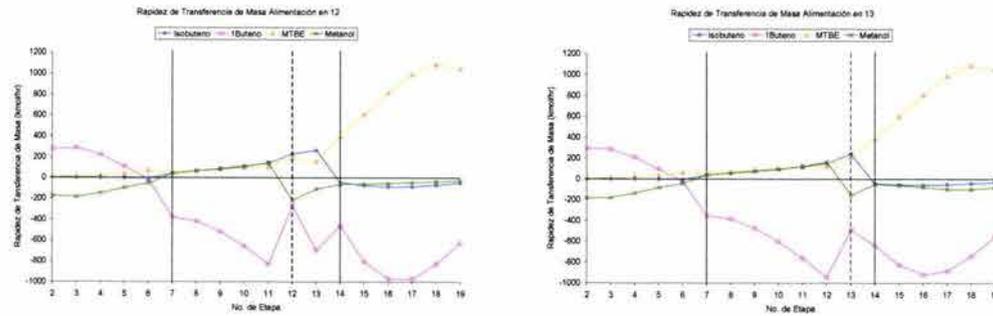


Figura 5.45 Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=20

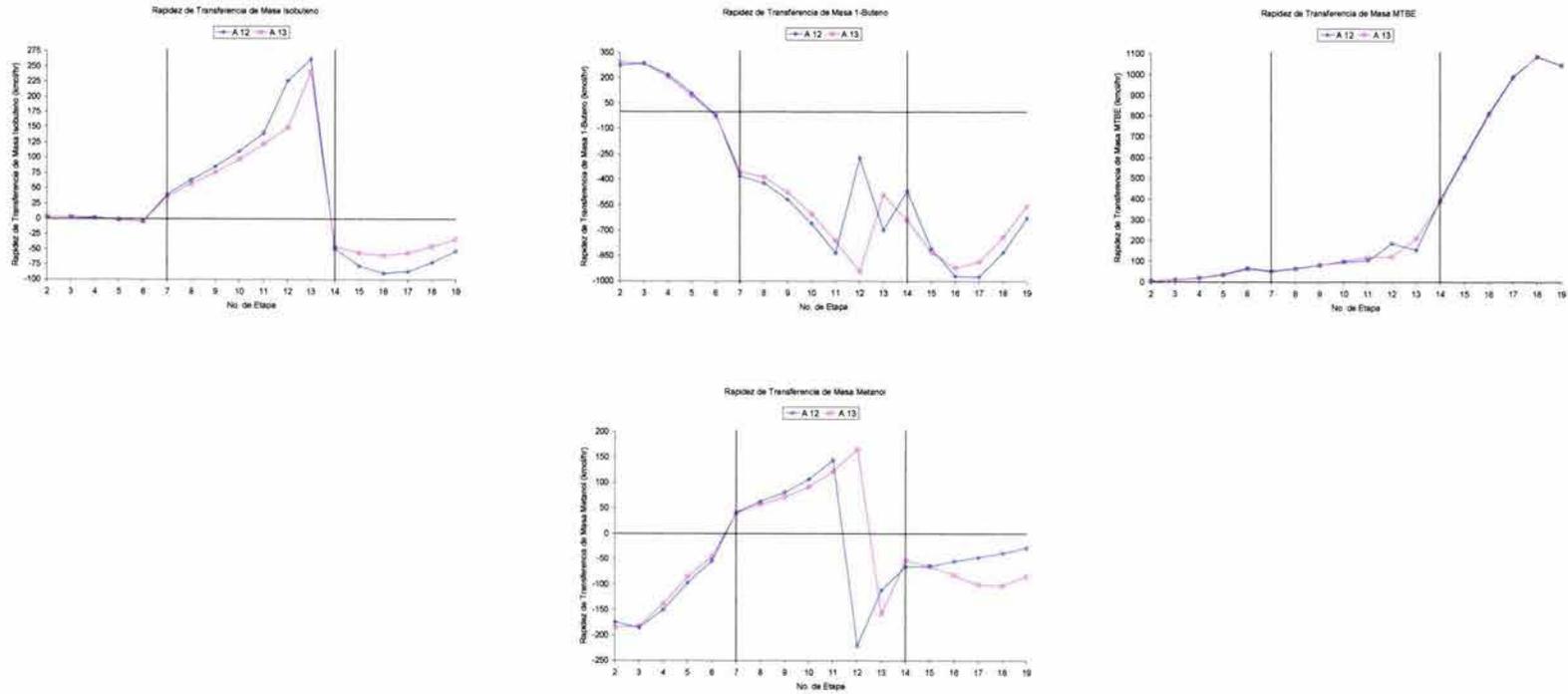


Figura 5.46 Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa para los 2 componentes. N=20

En este caso los resultados entre la rama de alta conversión del modelo de equilibrio y el modelo de no equilibrio también son muy parecidos. Las mayores diferencias se presentan para la rama de baja conversión.

Nuevamente la diferencia entre las ramas de alta conversión y de baja conversión está determinada por la temperatura y por las composiciones prevalecientes en la zona de reacción de la columna.

Para el caso de la rapidez de transferencia de masa se puede ver que el MTBE siempre se está transfiriendo de la fase vapor a la fase líquida. En cambio, para los otros componentes, la transferencia de masa es negativa porque se están transfiriendo a la fase vapor, para que sean recuperados en la corriente de destilado.

En los siguientes resultados el número de etapas se aumento a 25.

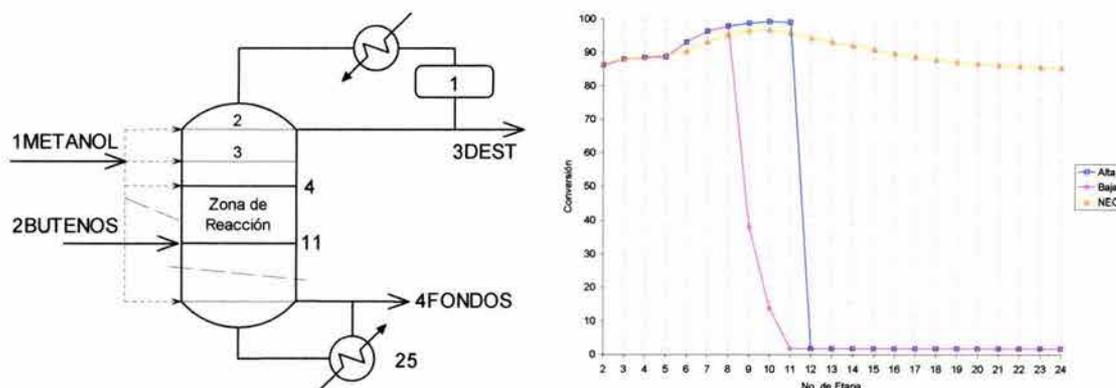


Figura 5.47 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 4 a 11. N=25

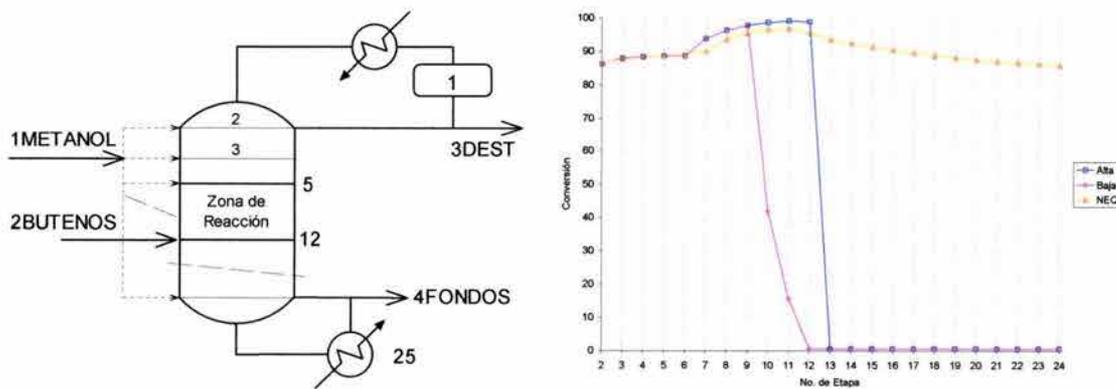


Figura 5.48 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 5 a 12. N=25

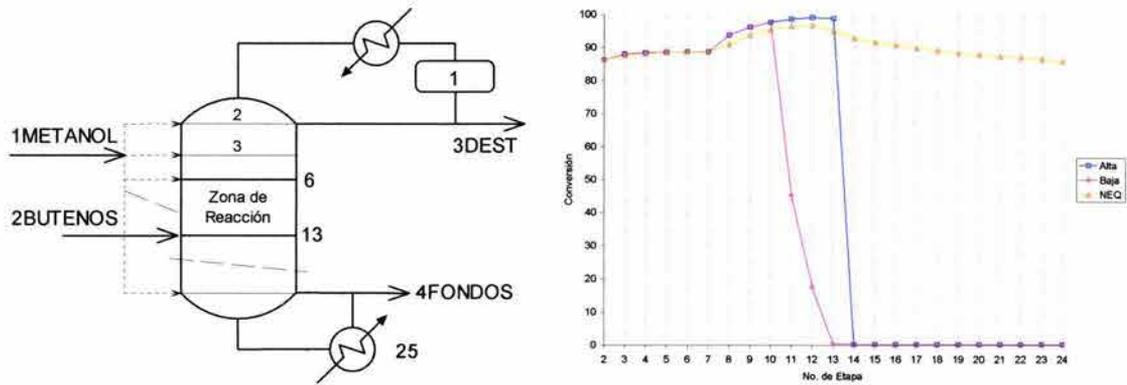


Figura 5.49 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 6 a 13. N=25

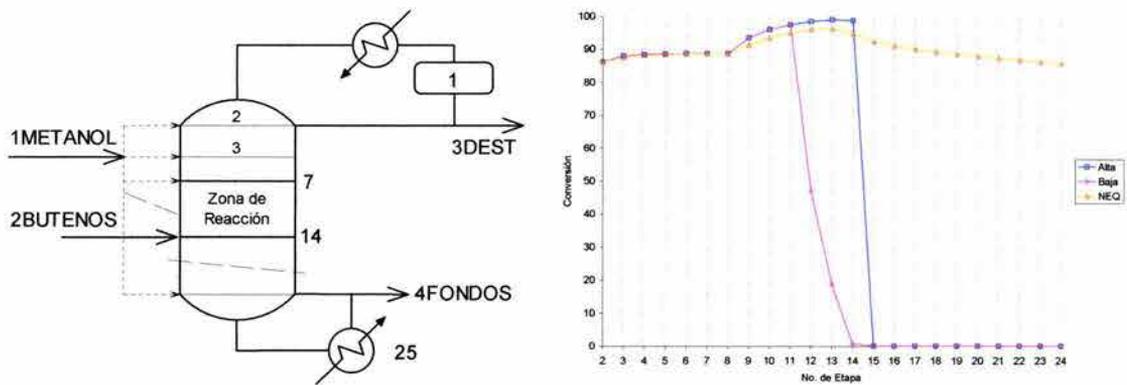


Figura 5.50 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 7 a 14. N=25

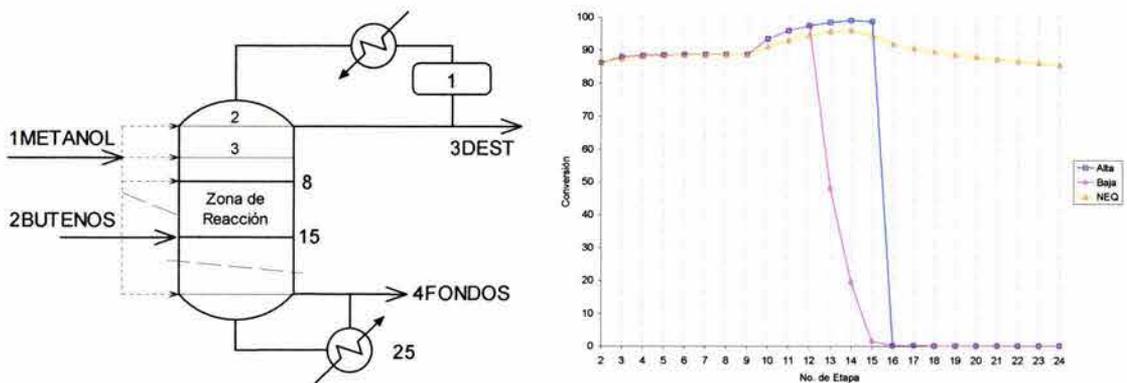


Figura 5.51 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 8 a 15. N=25

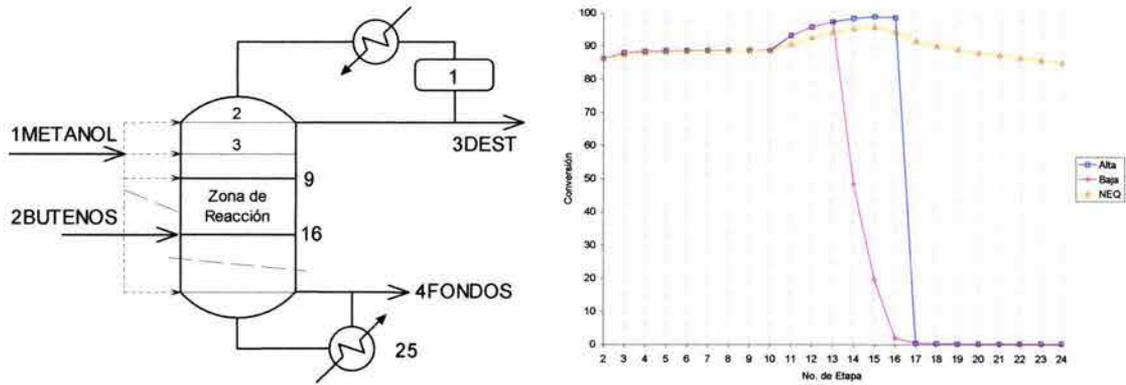
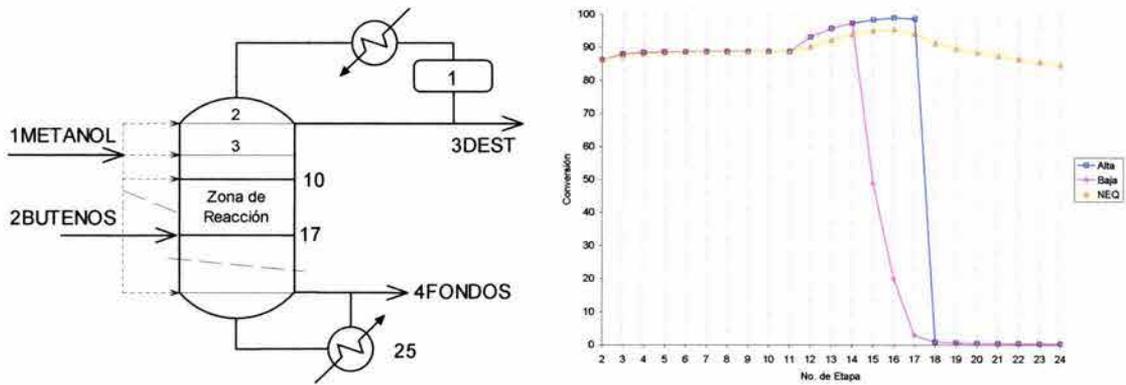


Figura 5.52 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 9 a 16. N=25



Resultados 5.53 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 10 a 17. N=25

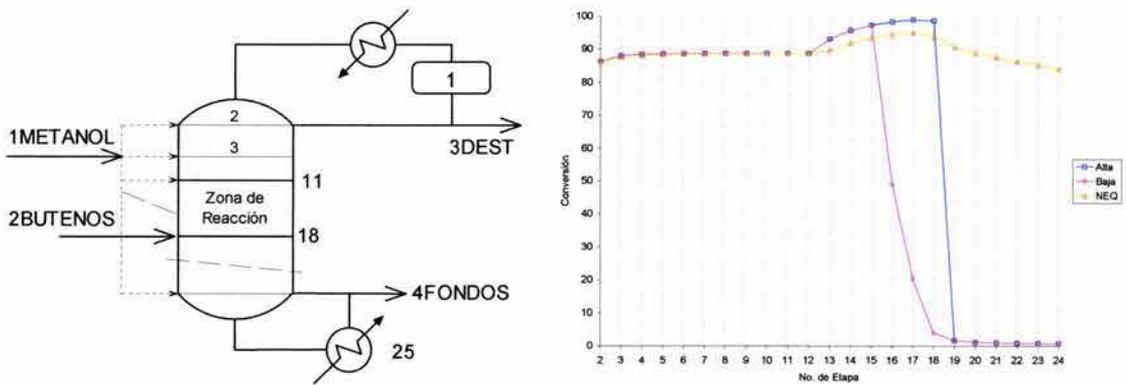


Figura 5.54 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 11 a 18. N=25

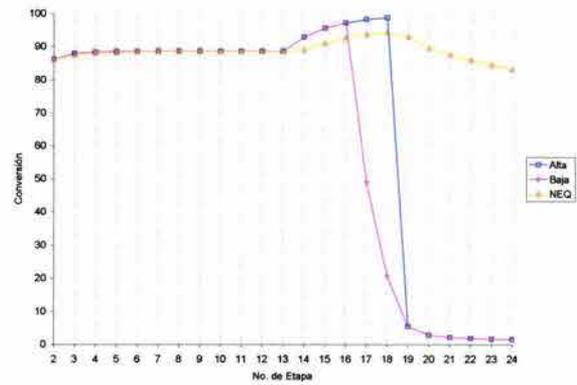
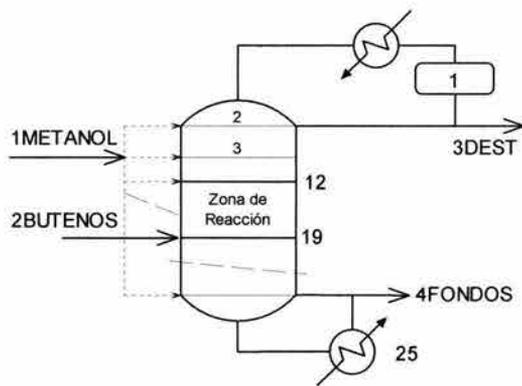


Figura 5.55 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 12 a 19. N=25

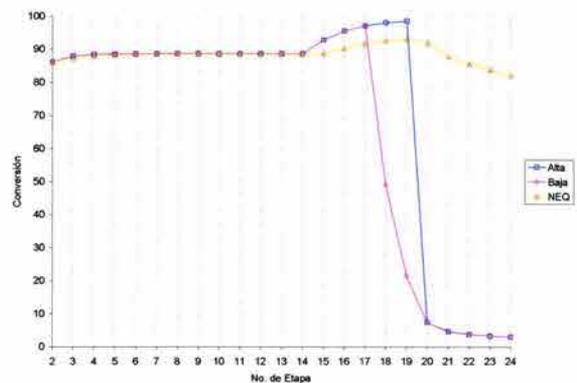
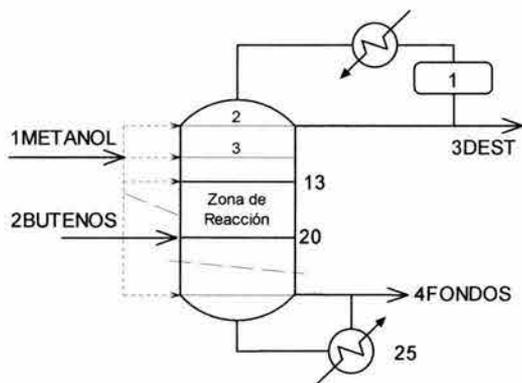


Figura 5.56 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 13 a 20. N=25

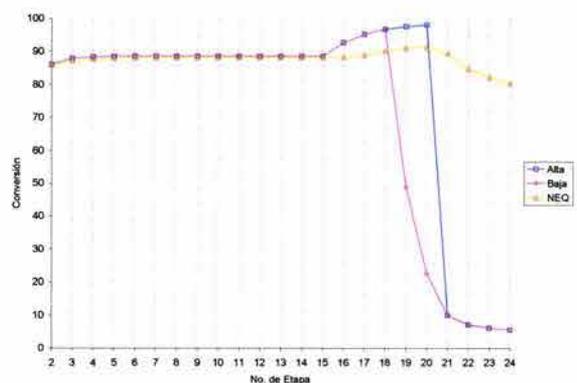
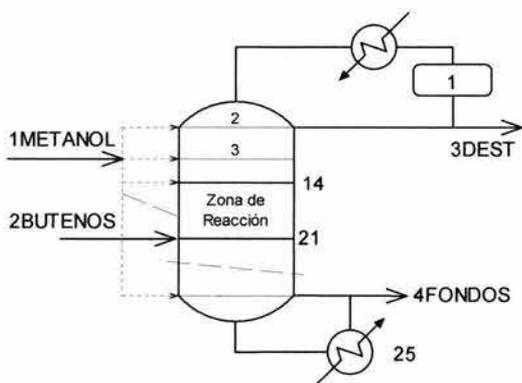


Figura 5.57 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 14 a 21. N=25

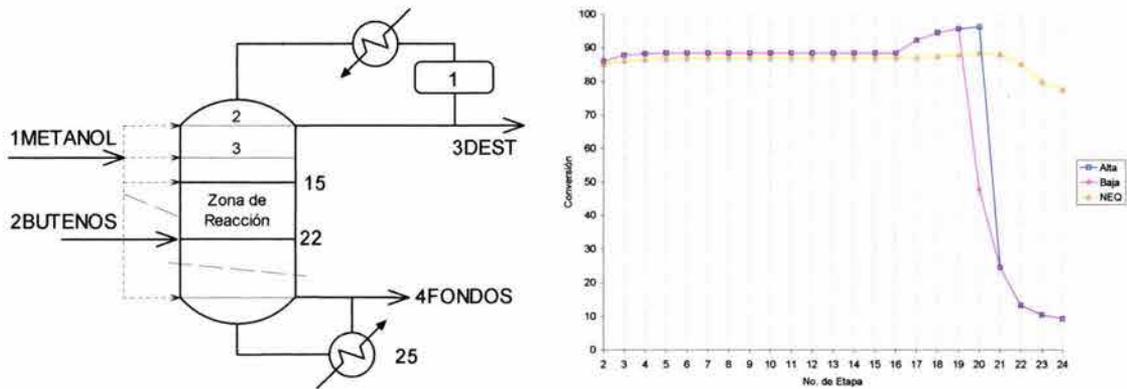


Figura 5.58 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 15 a 22. N=25

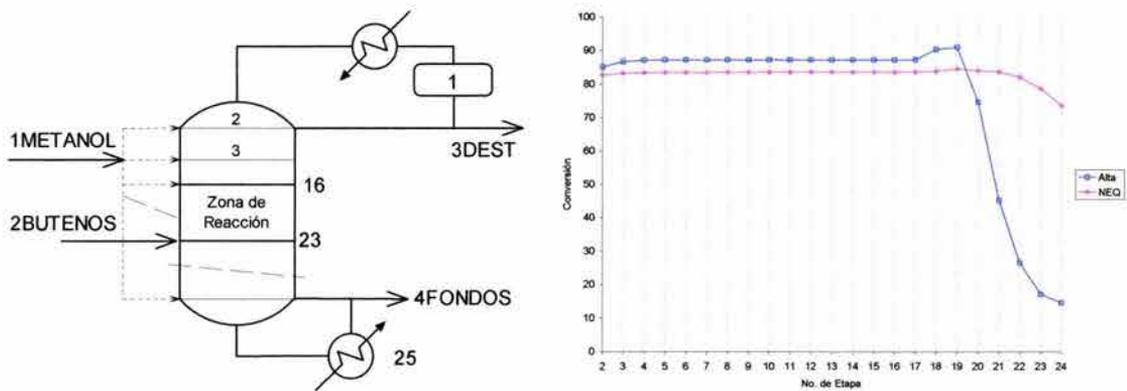


Figura 5.59 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 16 a 23. N=25

Si se utiliza el modelo de etapa en equilibrio, hay presencia de MEE, en este caso desde que la zona de reacción es de la etapa 4 a 11, hasta que la zona de reacción es de 11 a 18 hay 3 MEE. En cambio, en el caso de 20 etapas sólo se presentaron 3 MEE cuando la reacción fue de 4 a 11. Con base en lo anterior se puede ver que si se aumenta el número de etapas aumenta el número de MEE.

Mientras la zona de reacción esté en las etapas más inferiores, el número de MEE disminuye, hasta que hay una zona en la cual ya no hay presencia de MEE. Lo anterior podría indicar que es favorable alimentar en las etapas inferiores para que se eviten los MEE, pero en el caso donde ya no hay MEE la conversión máxima es del 80 %.

Para ver las diferencias entre los dos modelos y entre los MEE se hizo la simulación de aquellas etapas en donde hay presencia de MEE, para el caso donde la reacción es de 9 a 16.

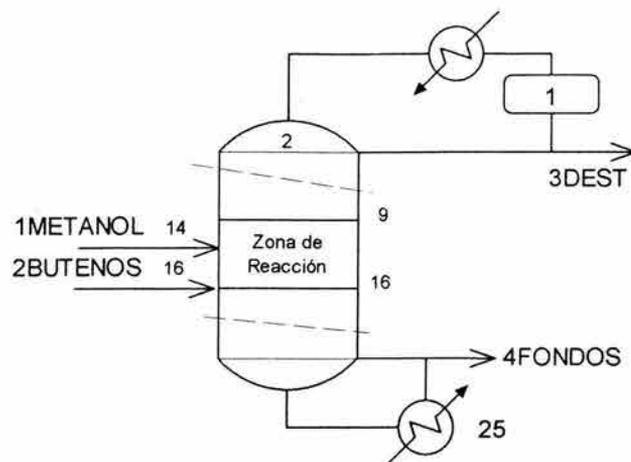


Figura 5.60 Configuración de la columna. Reacción de 9 a 16. Alimentaciones en 14 y 16. N=25

Alimentación en 14	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	150.7
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	9.696	1.67
1-Buteno	0	1274.4	1257.508	16.892
MTBE	0	0	0.001	690.632
Metanol	775.8	0	85.162	0.005
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.007	0.002
1-Buteno	0	0.645	0.93	0.024
MTBE	0	0	6.24E-07	0.974
Metanol	1	0	0.063	0.000007

Tabla 5.19 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=25

Alimentación en 14	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.1	133
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	362.73	0
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0.022	339.249
Metanol	775.8	0	66.578	369.951
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.213	1.17E-07
1-Buteno	0	0.645	0.748	5.8E-08
MTBE	0	0	0.000013	0.478
Metanol	1	0	0.039	0.522

Tabla 5.20 Resultados usando el Modelo de Etapa Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=25

Alimentación en 14	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	73.8	147.2
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	30.478	2.012
1-Buteno	0	1274.4	1236.685	37.715
MTBE	0	0	0.157	669.353
Metanol	775.8	0	106.17	0.12
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.022	0.003
1-Buteno	0	0.645	0.9	0.053
MTBE	0	0	0.000114	0.944
Metanol	1	0	0.077	0.000169

Tabla 5.21 Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=25

Alimentación en 14	Error		Error	
	3DEST Alta Conv.	4FONDOS Alta Conv.	3DEST Baja Conv.	4FONDOS Baja Conv.
Temperatura	0.27	2.38	0.41	9.65
Flujos Molares				
Isobuteno	68.19	17.00	>100	100.00
1-Buteno	1.68	55.21	3.05	100.00
MTBE	99.36	3.18	85.99	49.32
Metanol	19.79	95.83	37.29	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	68.18	33.33	>100	100.00
1-Buteno	3.33	54.72	16.89	100.00
MTBE	99.45	3.18	88.60	49.36
Metanol	18.18	95.86	49.35	>100

Tabla 5.22 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=25

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 95.3%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.3% y 48.3%. Los resultados del modelo de no equilibrio siempre son menores porque hay resistencias a la transferencia de masa. Los errores para el flujo y la composición de los fondos del MTBE, entre la rama de alta conversión y el modelo de etapa en no equilibrio, son los menores porque la conversión es casi la misma y porque en los dos modelos la mayor parte del MTBE sale en la corriente de los fondos.

Cuando se comparan los valores entre la rama de baja conversión y el modelo de no equilibrio, los errores son grandes debido a que se comparan números pequeños.

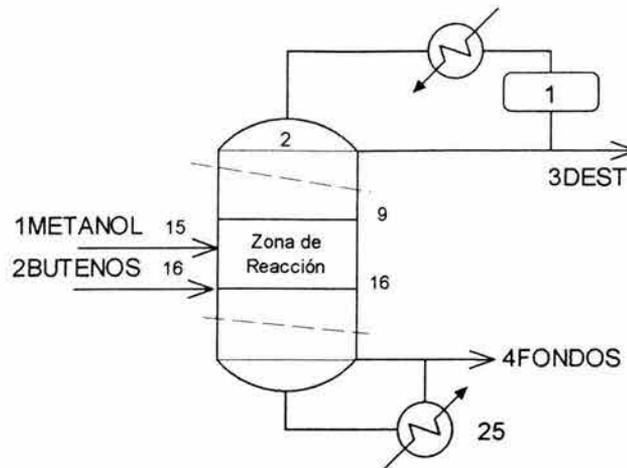


Figura 5.61 Configuración de la columna. Reacción de 9 a 16. Alimentaciones en 15 y 16. N=25

Alimentación en 15	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	151.3
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	6.836	0.663
1-Buteno	0	1274.4	1260.377	14.023
MTBE	0	0	0.001	694.501
Metanol	775.8	0	81.286	0.013
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.005	0.000935
1-Buteno	0	0.645	0.935	0.02
MTBE	0	0	4.37E-07	0.979
Metanol	1	0	0.06	0.000018

Tabla 5.23 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=25

Alimentación en 15	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.2	134.5
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	564.479	0
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0.029	137.492
Metanol	775.8	0	66.571	571.708
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.296	1.5E-08
1-Buteno	0	0.645	0.669	6E-09
MTBE	0	0	0.000015	0.194
Metanol	1	0	0.035	0.806

Tabla 5.24 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=25

Alimentación en 15	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	73.9	147.6
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	28.473	1.381
1-Buteno	0	1274.4	1239.277	35.123
MTBE	0	0	0.147	671.999
Metanol	775.8	0	102.956	0.697
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.021	0.002
1-Buteno	0	0.645	0.904	0.05
MTBE	0	0	0.000107	0.948
Metanol	1	0	0.075	0.000983

Tabla 5.25 Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=25

Alimentación en 15	Error	Error	Error	Error
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.14	2.51	0.41	8.88
Flujos Molares				
Isobuteno	75.99	51.99	>100	100.00
1-Buteno	1.70	60.07	2.83	100.00
MTBE	99.32	3.35	80.27	79.54
Metanol	21.05	98.13	35.34	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	76.19	53.25	>100	100.00
1-Buteno	3.43	60.00	26.00	100.00
MTBE	99.59	3.27	85.98	79.54
Metanol	20.00	98.17	53.33	>100

Tabla 5.26 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=25

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 95.7%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.9% y 19.5%. En este caso la conversión del modelo de equilibrio (rama de alta conversión) y el modelo de no equilibrio aumenta, pero la conversión de la rama de baja conversión disminuye.

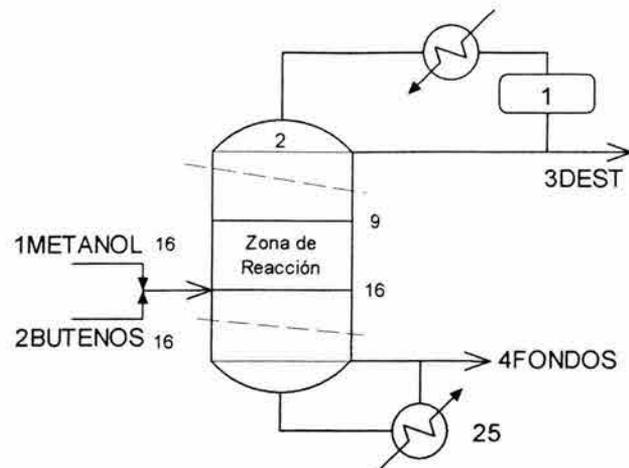


Figura 5.62 Configuración de la columna. Reacción de 9 a 16. Alimentaciones en 16 y 16. N=25

Alimentación en 16	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.2	150.2
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	9.563	0.003
1-Buteno	0	1274.4	1274.344	0.056
MTBE	0	0	0.001	692.433
Metanol	775.8	0	66.658	16.708
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.007	0.000004
1-Buteno	0	0.645	0.944	0.000078
MTBE	0	0	5.81E-07	0.976
Metanol	1	0	0.049	0.024

Tabla 5.27 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=25

Alimentación en 16	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.2	139.9
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	688.132	0
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0.033	13.835
Metanol	775.8	0	66.567	695.365
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.339	0
1-Buteno	0	0.645	0.628	0
MTBE	0	0	0.000016	0.02
Metanol	1	0	0.033	0.98

Tabla 5.28 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=25

Alimentación en 16	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.1	145.4
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	39.474	0.407
1-Buteno	0	1274.4	1264.412	9.988
MTBE	0	0	0.166	661.952
Metanol	775.8	0	76.829	36.853
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.029	0.000575
1-Buteno	0	0.645	0.916	0.014
MTBE	0	0	0.00012	0.933
Metanol	1	0	0.056	0.052

Tabla 5.29 Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=25

Alimentación en 16	Error		Error	
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.13	3.30	0.13	3.78
Flujos Molares				
Isobuteno	75.77	99.26	>100	100.00
1-Buteno	0.79	99.44	0.79	100.00
MTBE	99.40	4.60	80.12	97.91
Metanol	13.24	54.66	13.36	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	75.86	99.30	>100	100.00
1-Buteno	3.06	99.44	31.44	100.00
MTBE	99.52	4.61	86.67	97.86
Metanol	12.50	53.85	41.07	>100

Tabla 5.30 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=25

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 94.3%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.6% y 1.97%. Para este caso la conversión de la rama de baja conversión es mínima, de manera que, la única función de la columna en este caso es la separación de una mezcla de isobuteno, 1-butano y metanol, lo que produce una corriente de fondos con una fracción mol de 98% de metanol.

	EQ Alta	EQ Alta	EQ Alta	EQ Alta
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Comparación	14-15	14-15	14-16	14-16
Temperatura	0.00	0.40	0.27	0.33
Flujos Molares				
Isobuteno	29.50	60.30	1.37	99.82
1-Buteno	0.23	16.98	1.34	99.67
MTBE	0.00	0.56	0.00	0.26
Metanol	4.55	>100	21.73	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	28.57	53.25	0.00	99.80
1-Buteno	0.54	16.67	1.51	99.68
MTBE	29.97	0.51	6.89	0.21
Metanol	4.76	>100	22.22	>100

Tabla 5.31 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 14, 15 y 16 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=25

	EQ Baja	EQ Baja	EQ Baja	EQ Baja
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Comparación	14-15	14-15	14-16	14-16
Temperatura	0.13	1.13	0.13	5.19
Flujos Molares				
Isobuteno	55.62	0	89.71	0
1-Buteno	0.00	0	0.00	0
MTBE	31.82	59.47	50.00	95.92
Metanol	0.01	54.54	0.02	87.96
Fracciones Mol				
Isobuteno	38.97	87.18	59.15	100.00
1-Buteno	10.56	89.66	16.04	100.00
MTBE	15.38	59.41	23.08	95.82
Metanol	10.26	54.41	15.38	87.74

Tabla 5.32 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 14, 15 y 16 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=25

	NEQ	NEQ	NEQ	NEQ
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Comparación	14-15	14-15	14-16	14-16
Temperatura	0.14	0.27	0.41	1.22
Flujos Molares				
Isobuteno	6.58	31.36	29.52	79.77
1-Buteno	0.21	6.87	2.24	73.52
MTBE	6.37	0.40	5.73	1.11
Metanol	3.03	>100	27.64	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	4.55	33.33	31.82	80.83
1-Buteno	0.44	5.66	1.78	73.58
MTBE	6.14	0.42	5.26	1.17
Metanol	2.60	>100	27.27	>100

Tabla 5.33 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 14, 15 y 16 para el Modelo de No Equilibrio. N=25

Para el modelo de equilibrio y para el de no equilibrio el error es mínimo cuando se compara el efecto de alimentar en la etapa 14 ó 15. En cambio, cuando se compara el efecto de alimentar en la etapa 14 ó 16 el error aumenta.

Con base en lo anterior es recomendable alimentar en las etapas 14 ó 15, además la conversión al alimentar la corriente de 1 METANOL en la etapa 14 ó 15 es mayor, que la conversión obtenida si se alimenta en la etapa 16.

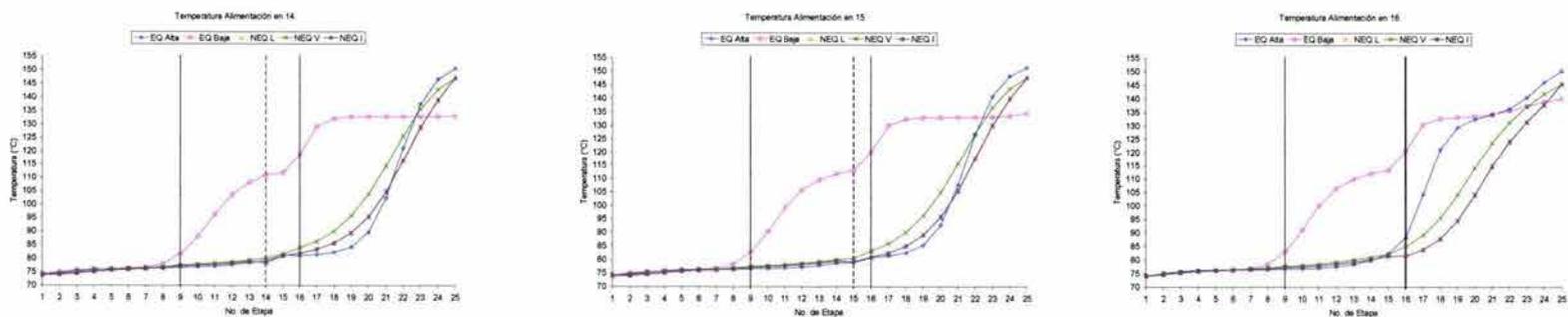


Figura 5.63 Comparación para las Temperaturas para los 2 modelos. N=25

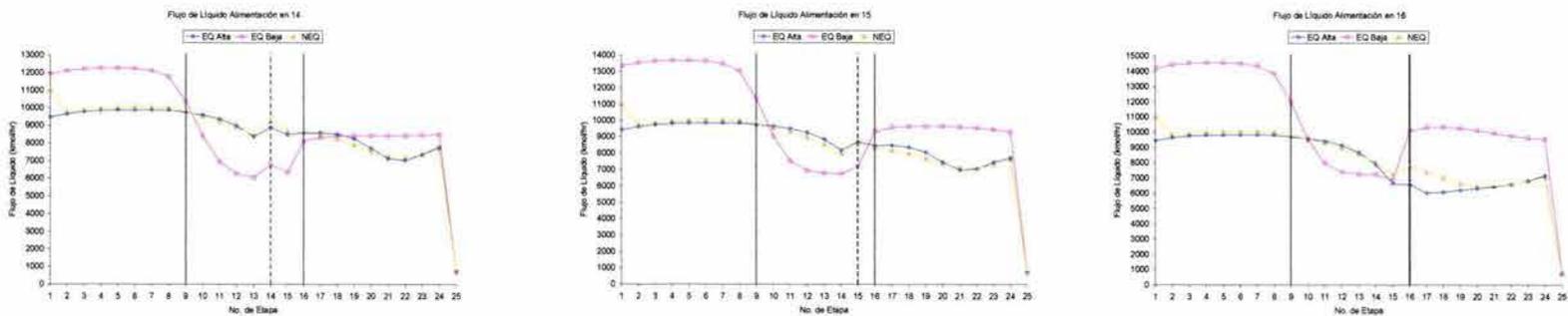


Figura 5.64 Comparación para los Flujos de Líquido para los 2 modelos. N=25

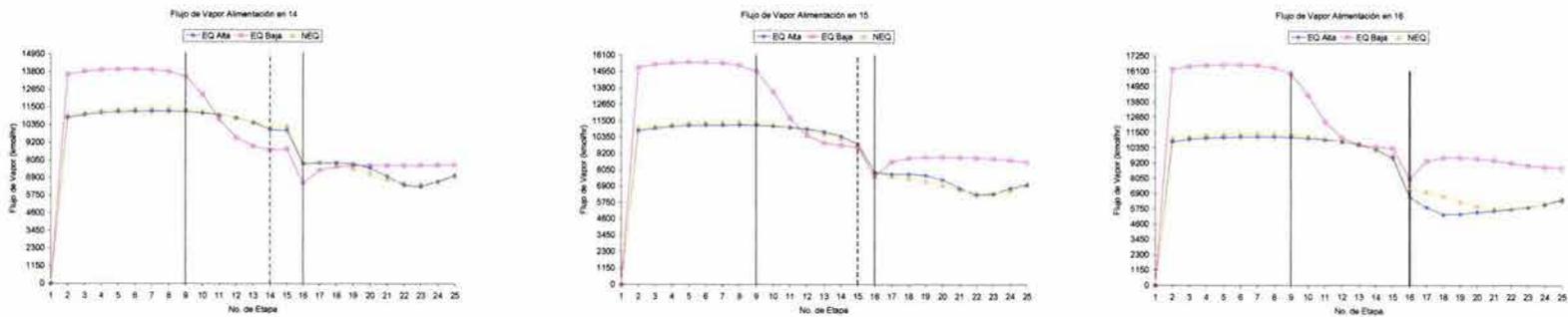


Figura 5.65 Comparación para los Flujos de Vapor para los 2 modelos. N=25

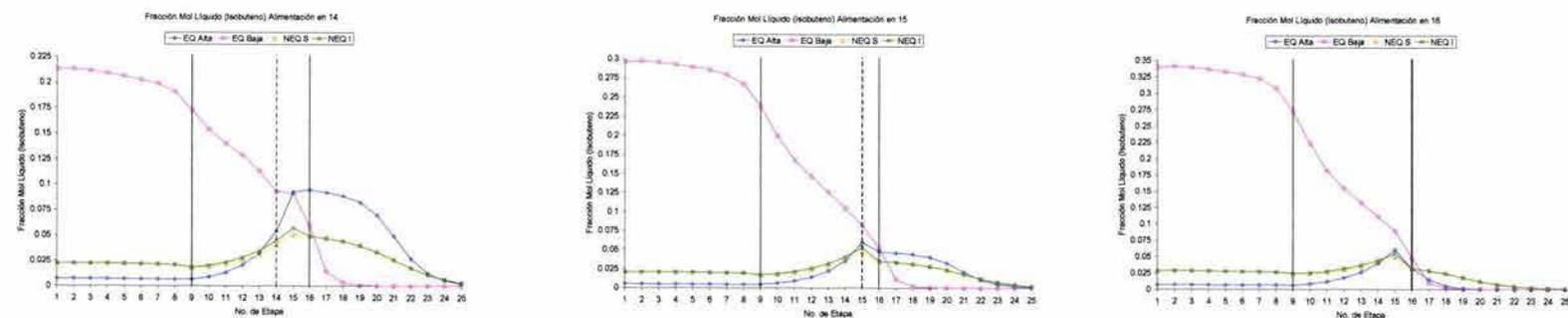


Figura 5.66 Comparación para la Fracción Mol Líquido del Isobuteno para los 2 modelos. N=25

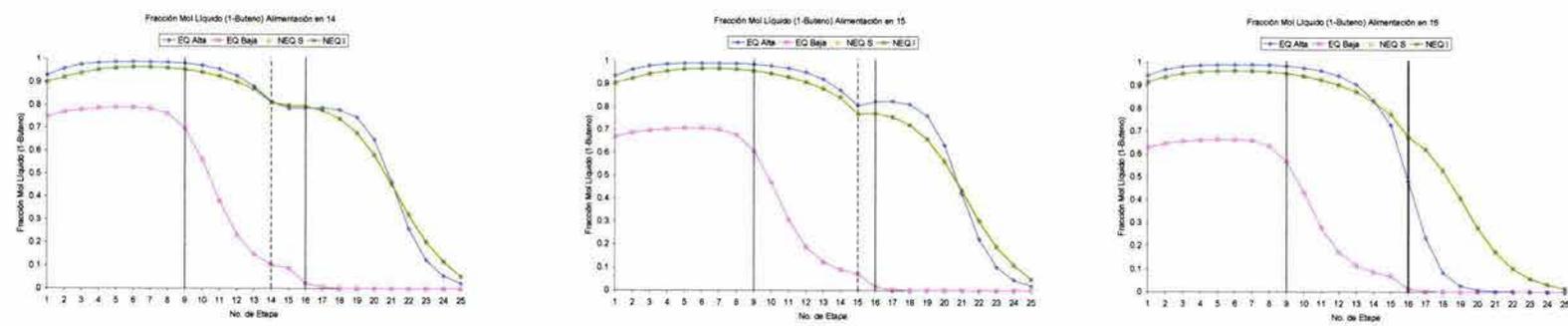


Figura 5.67 Comparación para la Fracción Mol Líquido del 1-Buteno para los 2 modelos. N=25

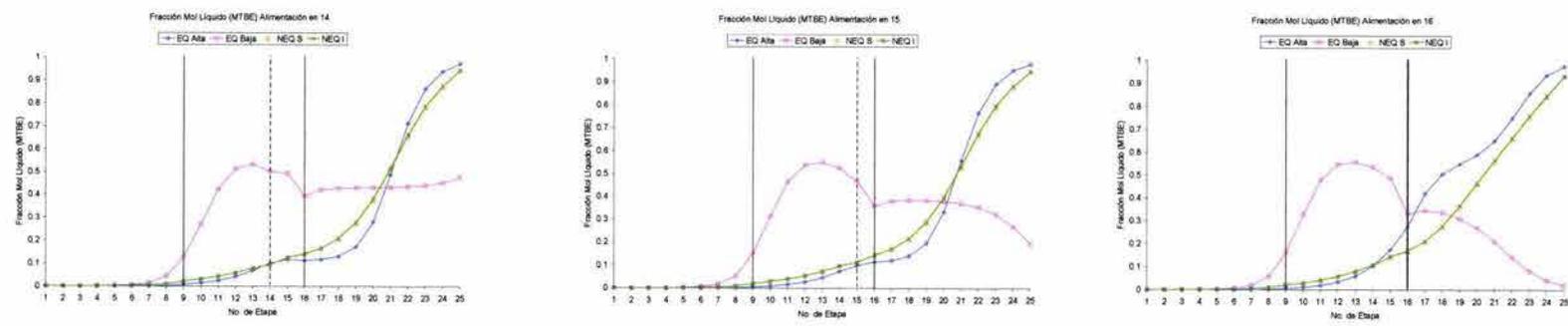


Figura 5.68 Comparación para la Fracción Mol Líquido del MTBE para los 2 modelos. N=25

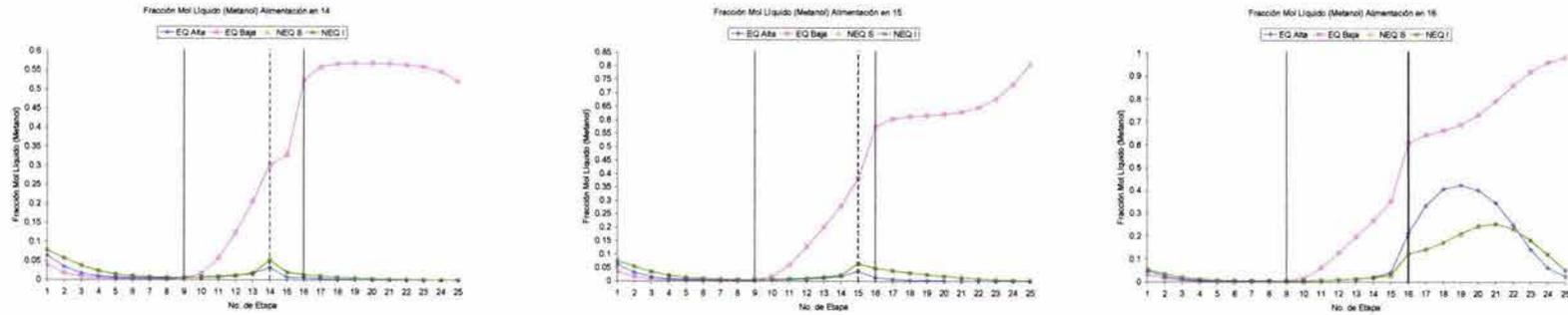


Figura 5.69 Comparación para la Fracción Mol Líquido del Metanol para los 2 modelos. N=25

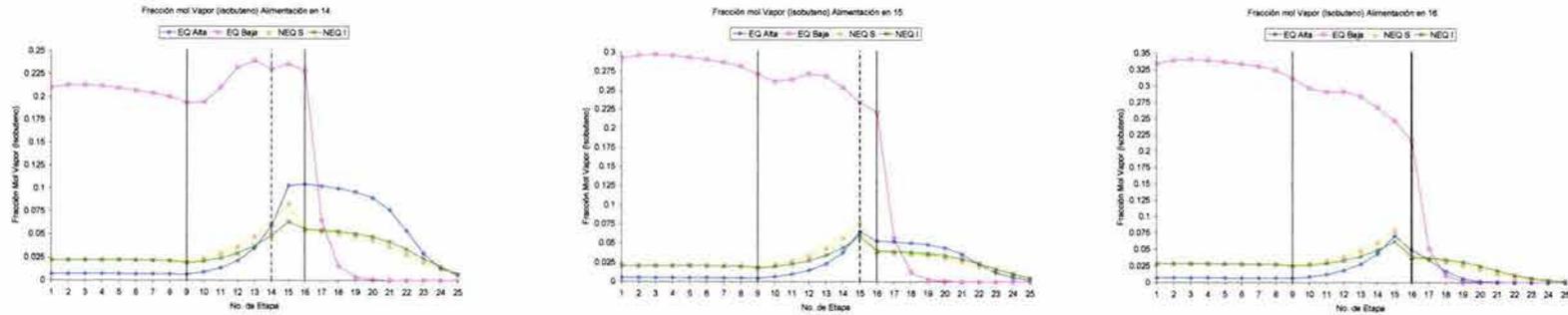


Figura 5.70 Comparación para la Fracción Mol Vapor del Isobuteno para los 2 modelos. N=25

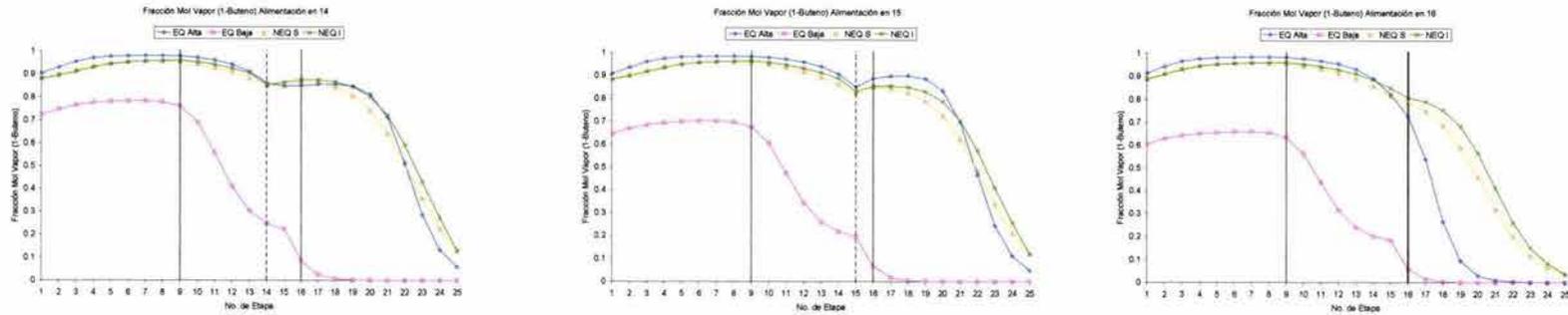


Figura 5.71 Comparación para la Fracción Mol Vapor del 1-Buteno para los 2 modelos. N=25

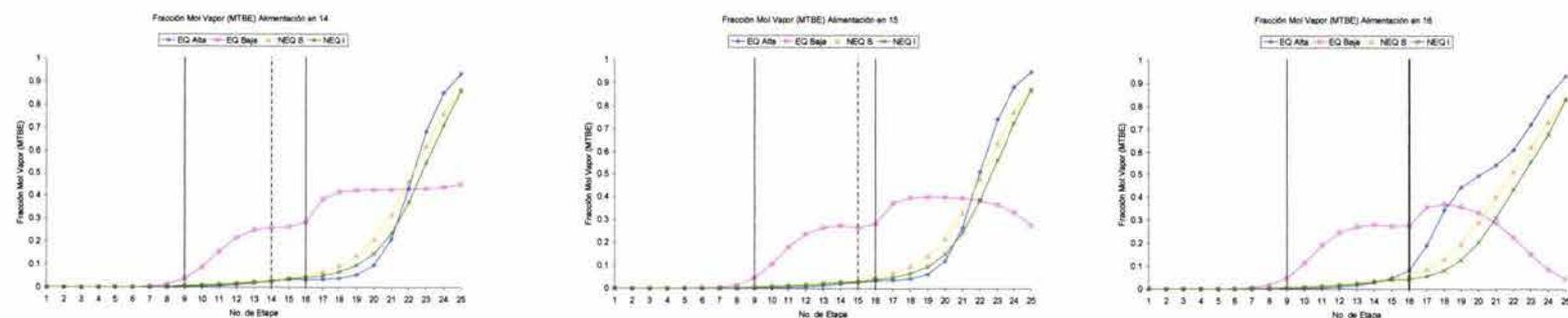


Figura 5.72 Comparación para la Fracción Mol Vapor del MTBE para los 2 modelos. N=25

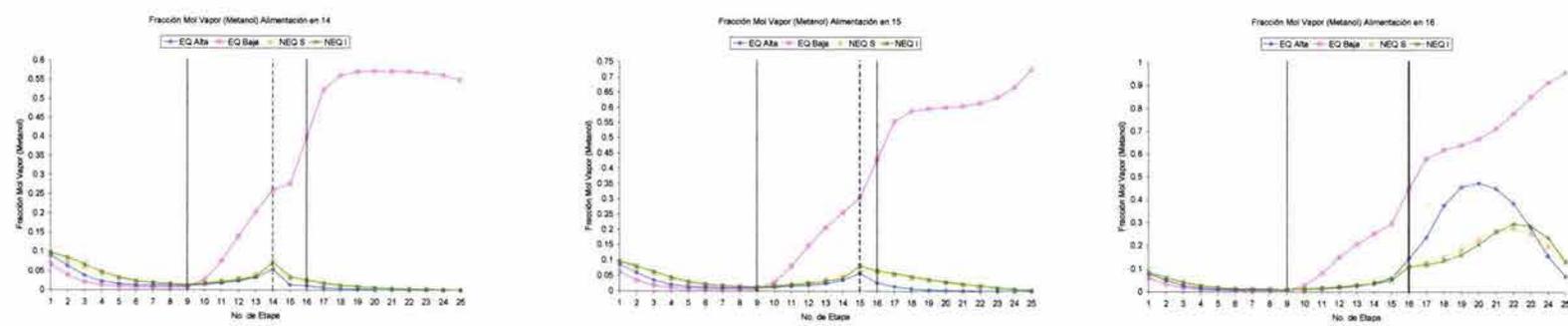


Figura 5.73 Comparación para la Fracción Mol Vapor del Metanol para los 2 modelos. N=25

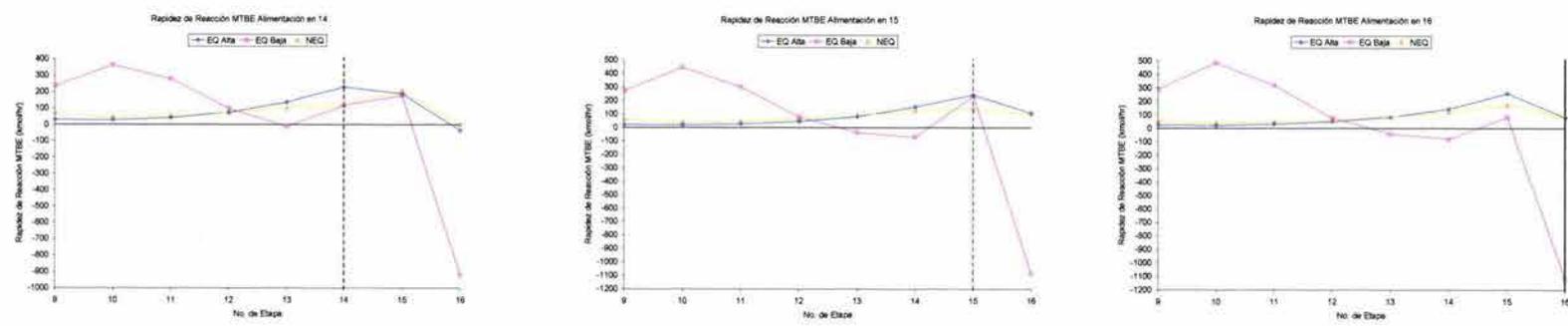


Figura 5.74 Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=25

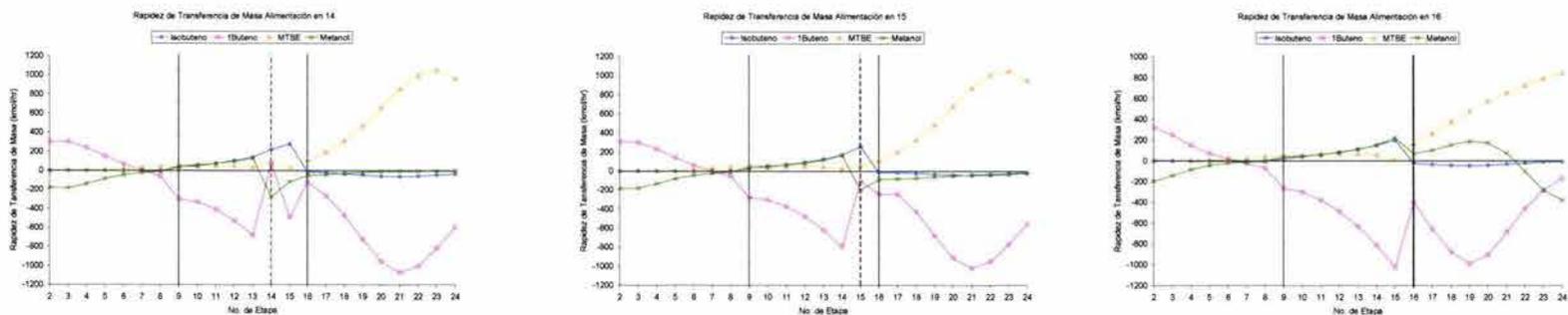


Figura 5.75 Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=25

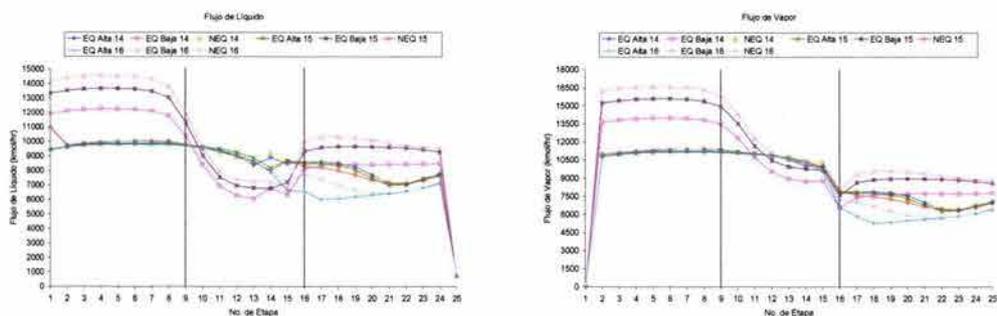


Figura 5.76 Comparación para los Flujos de Líquido y Vapor para los 2 modelos. N=25

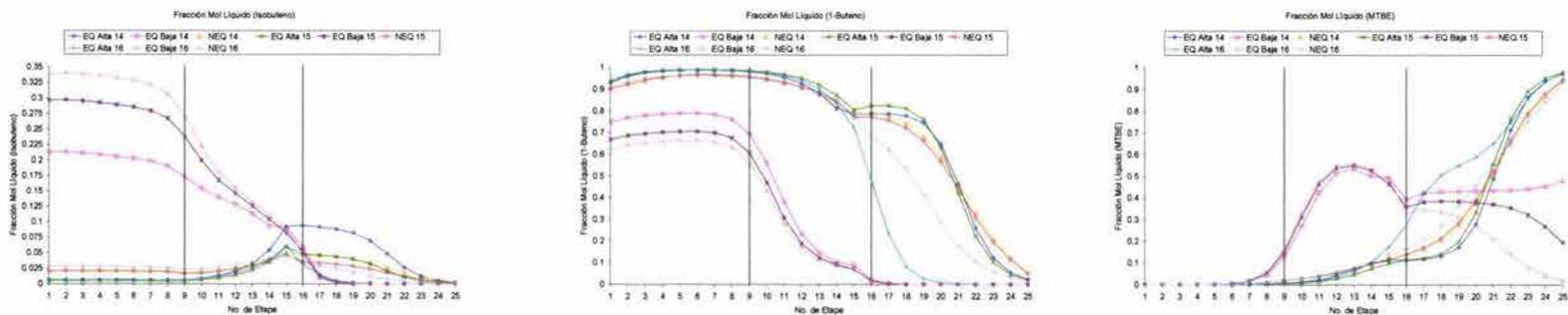


Figura 5.77 Comparación para la Fracción Mol Líquido para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=25

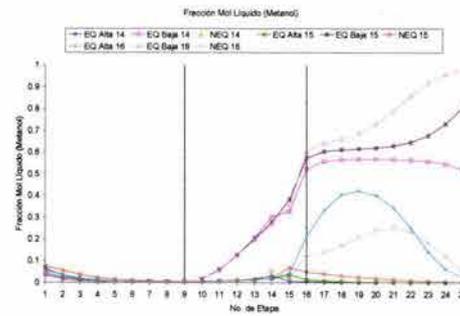


Figura 5.77 (Cont.) Comparación para la Fracción Mol Líquido para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=25

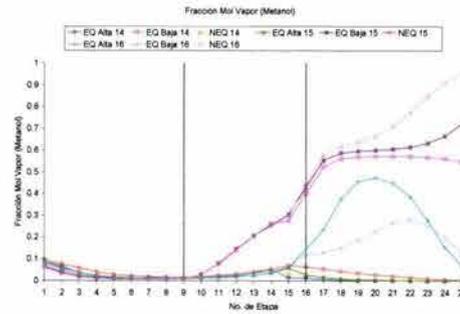
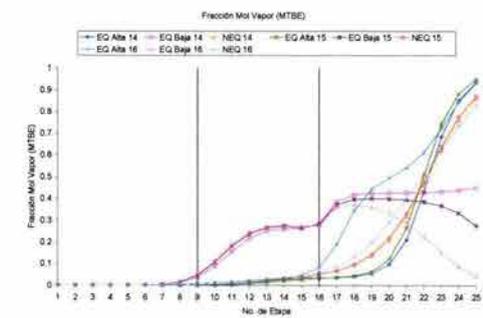
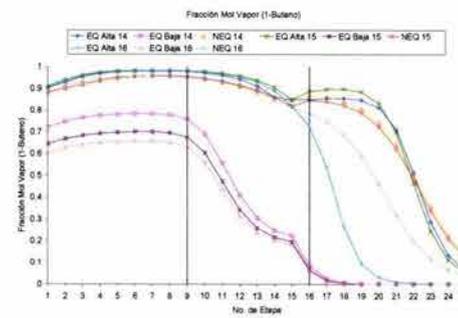
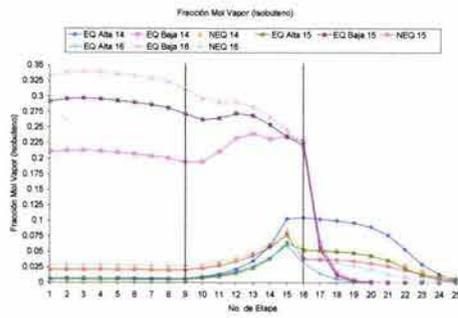


Figura 5.78 Comparación para la Fracción Mol Vapor para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=25

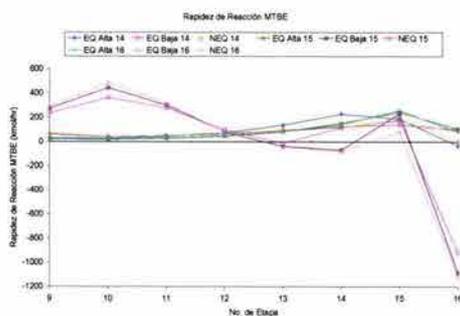


Figura 5.79 Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=25

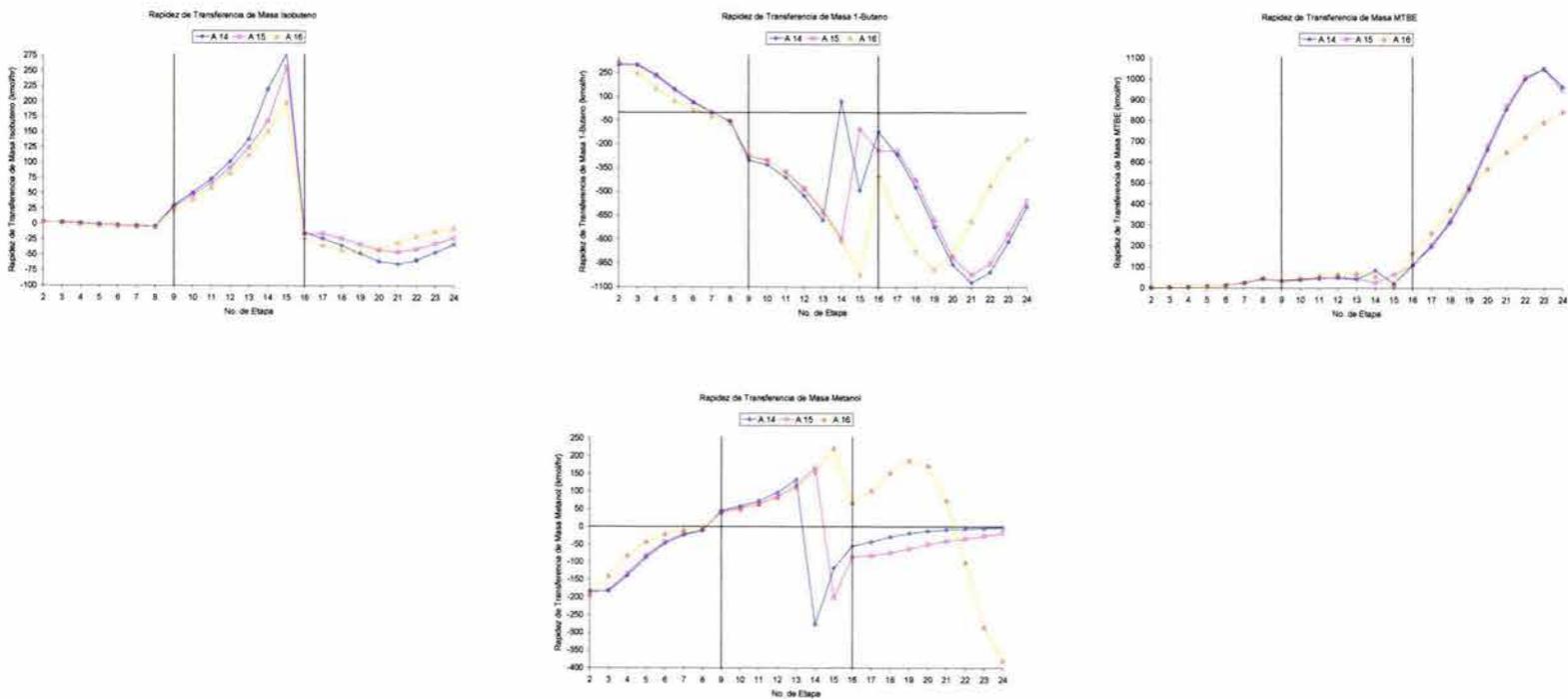


Figura 5.80 Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=25

Para el caso en donde las dos alimentaciones entran en la etapa 16, las composiciones del líquido y del vapor del metanol se ven afectadas, y además este efecto es distinto para los dos modelos. Para la rama de alta conversión y el modelo de no equilibrio después de la zona de reacción las composiciones empiezan a aumentar, hasta que llegan a un valor límite para disminuir hasta que la composición es de casi cero. Este efecto también se puede ver en la rapidez de transferencia de masa, después de la zona de reacción la transferencia es del vapor al líquido, llega a un valor límite y empieza a cambiar, hasta que la transferencia se da del líquido al vapor. En cambio para la rama de baja conversión, después de la zona de reacción las composiciones también aumentan, pero no llegan a un valor límite para empezar a disminuir sino que, la composición continúa aumentando, esto se debe a que la rapidez de reacción es mínima, lo que ocasiona que para que se cumpla el balance de materia, el metanol tiene que salir por la corriente de fondos junto con la pequeña cantidad de MTBE que se forma en la reacción.

En los siguientes resultados el número de etapas se aumentó a 30.

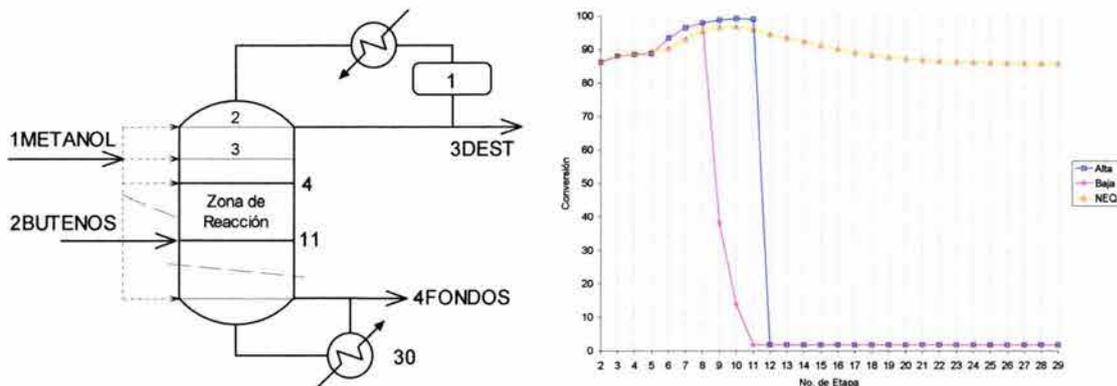


Figura 5.81 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 4 a 11. N=30

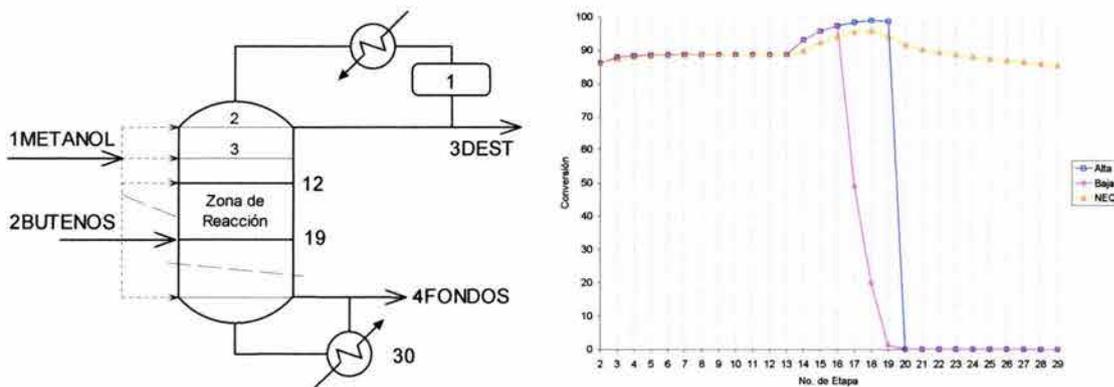


Figura 5.82 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 12 a 19. N=30

En las figuras se puede ver que hay una zona en donde la conversión del isobuteno es la misma usando cualquiera de los 2 modelos, pero cuando la alimentación de la corriente 1METANOL entra a la zona de reacción los resultados empiezan a ser diferentes. Mientras más se avanza en la zona de reacción la diferencia se hace mayor, hasta que llega un momento en el que se presentan los MEE en el modelo de equilibrio.

Para ver las diferencias entre los dos modelos y entre los MEE se hizo la simulación de aquellas etapas en donde hay presencia de MEE, para el caso donde la reacción es de 12 a 19.

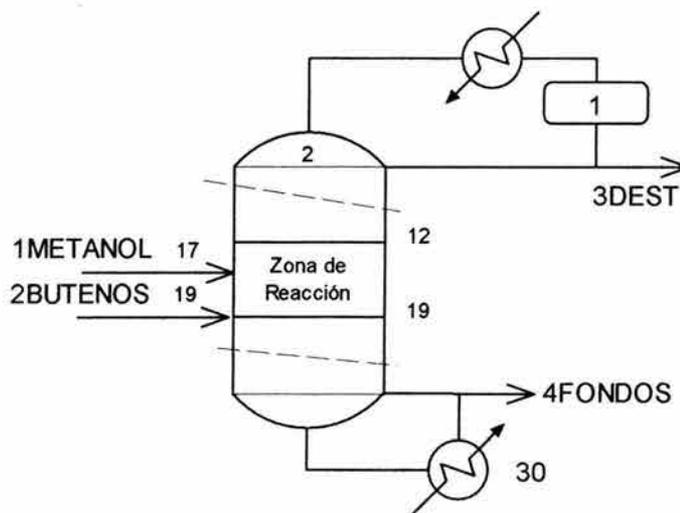


Figura 5.83 Configuración de la columna. Reacción de 12 a 19. Alimentaciones en 17 y 19. N=30

Alimentación en 17	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	150.7
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	9.942	1.597
1-Buteno	0	1274.4	1257.259	17.141
MTBE	0	0	0	690.46
Metanol	775.8	0	85.338	0.001
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.007	0.002
1-Buteno	0	0.645	0.93	0.024
MTBE	0	0	2.1E-08	0.974
Metanol	1	0	0.063	0.000002

Tabla 5.34 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=30

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio

Alimentación en 17	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.1	133
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	357.531	0
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0.001	344.469
Metanol	775.8	0	66.599	364.731
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.21	6E-09
1-Buteno	0	0.645	0.75	3E-09
MTBE	0	0	4.24E-07	0.486
Metanol	1	0	0.039	0.514

Tabla 5.35 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=30

Alimentación en 17	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	73.8	147.4
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	30.012	1.758
1-Buteno	0	1274.4	1237.199	37.201
MTBE	0	0	0.023	670.207
Metanol	775.8	0	105.536	0.034
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.022	0.002
1-Buteno	0	0.645	0.901	0.052
MTBE	0	0	0.000017	0.945
Metanol	1	0	0.077	0.000048

Tabla 5.36 Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=30

Alimentación en 17	Error	Error	Error	Error
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.27	2.24	0.41	9.77
Flujos Molares				
Isobuteno	66.87	9.16	>100	100.00
1-Buteno	1.62	53.92	3.01	100.00
MTBE	100.00	3.02	95.65	48.60
Metanol	19.14	97.06	36.89	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	68.18	0.00	>100	100.00
1-Buteno	3.22	53.85	16.76	100.00
MTBE	99.88	3.07	97.51	48.57
Metanol	18.18	95.83	49.35	>100

Tabla 5.37 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=30

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 95.4%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.3% y 49.0%. Los errores al comparar el modelo de no equilibrio con la rama de baja conversión son altos porque los números que se están comparado son pequeños.

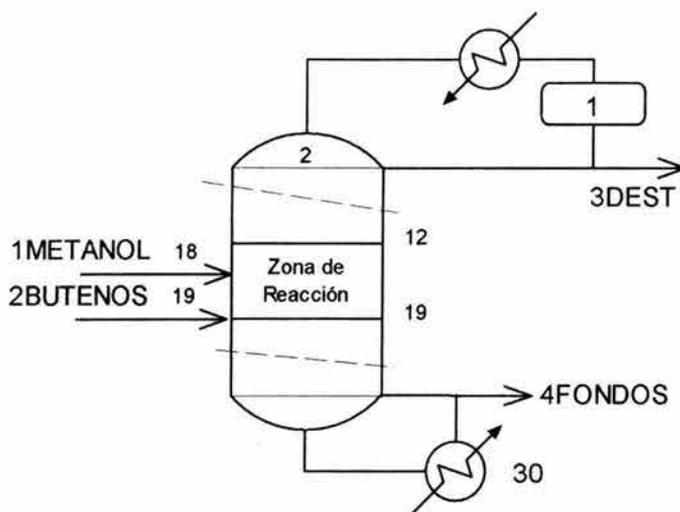


Figura 5.84 Configuración de la columna. Reacción de 12 a 19. Alimentaciones en 18 y 19. N=30

Alimentación en 18	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	151.3
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	6.988	0.626
1-Buteno	0	1274.4	1260.215	14.185
MTBE	0	0	0	694.385
Metanol	775.8	0	81.412	0.003
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.005	0.000883
1-Buteno	0	0.645	0.934	0.02
MTBE	0	0	1.5E-08	0.979
Metanol	1	0	0.06	0.000004

Tabla 5.38 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=30

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio

Alimentación en 18	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.2	134.4
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	562.238	0
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0.001	139.761
Metanol	775.8	0	66.599	569.439
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.295	0
1-Buteno	0	0.645	0.67	0
MTBE	0	0	5.17E-07	0.197
Metanol	1	0	0.035	0.803

Tabla 5.39 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=30

Alimentación en 18	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	73.9	147.7
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	28.138	1.276
1-Buteno	0	1274.4	1239.28	35.12
MTBE	0	0	0.022	672.564
Metanol	775.8	0	102.975	0.24
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.021	0.002
1-Buteno	0	0.645	0.904	0.05
MTBE	0	0	0.000016	0.948
Metanol	1	0	0.075	0.000338

Tabla 5.40 Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=30

Alimentación en 18	Error	Error	Error	Error
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.14	2.44	0.41	9.00
Flujos Molares				
Isobuteno	75.17	50.94	>100	100.00
1-Buteno	1.69	59.61	2.83	100.00
MTBE	100.00	3.24	95.45	79.22
Metanol	20.94	98.75	35.33	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	76.19	55.85	>100	100.00
1-Buteno	3.32	60.00	25.88	100.00
MTBE	99.91	3.27	96.77	79.22
Metanol	20.00	98.82	53.33	>100

Tabla 5.41 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=30

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio

Alimentación en 19	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.2	140.3
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	693.612	0
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0.001	8.387
Metanol	775.8	0	66.599	700.813
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.341	0
1-Buteno	0	0.645	0.626	0
MTBE	0	0	5.54E-07	0.012
Metanol	1	0	0.033	0.988

Tabla 5.43 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=30

Alimentación en 19	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.1	145.4
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	40.716	0.156
1-Buteno	0	1274.4	1270.29	4.11
MTBE	0	0	0.025	661.103
Metanol	775.8	0	70.84	43.831
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.029	0.000219
1-Buteno	0	0.645	0.919	0.006
MTBE	0	0	0.000018	0.932
Metanol	1	0	0.051	0.062

Tabla 5.44 Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=30

Alimentación en 19	Error	Error	Error	Error
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.13	3.30	0.13	3.51
Flujos Molares				
Isobuteno	76.02	100.00	>100	100.00
1-Buteno	0.32	99.88	0.32	100.00
MTBE	100.00	4.71	96.00	98.73
Metanol	5.98	61.31	5.99	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	75.86	99.84	>100	100.00
1-Buteno	2.61	99.88	31.88	100.00
MTBE	99.89	4.72	96.92	98.71
Metanol	3.92	61.29	35.29	>100

Tabla 5.45 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=30

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 94.1%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.6% y 1.19%.

	EQ Alta	EQ Alta	EQ Alta	EQ Alta
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Comparación	17-18	17-18	17-19	17-19
Temperatura	0.00	0.40	0.27	0.33
Flujos Molares				
Isobuteno	29.71	60.80	1.78	100.00
1-Buteno	0.24	17.25	1.36	99.97
MTBE	0	0.57	0	0.26
Metanol	4.60	>100	21.95	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	28.57	55.85	0.00	99.98
1-Buteno	0.43	16.67	1.40	99.97
MTBE	28.57	0.51	4.76	0.21
Metanol	4.76	100.00	22.22	>100

Tabla 5.46 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 17, 18 y 19 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=30

	EQ Baja	EQ Baja	EQ Baja	EQ Baja
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Comparación	17-18	17-18	17-19	17-19
Temperatura	0.13	1.05	0.13	5.49
Flujos Molares				
Isobuteno	57.26	0	94.00	0
1-Buteno	0.00	0	0.00	0
MTBE	0.00	59.43	0.00	97.57
Metanol	0.00	56.13	0.00	92.15
Fracciones Mol				
Isobuteno	40.48	100.00	62.38	100.00
1-Buteno	10.67	100.00	16.53	100.00
MTBE	21.93	59.47	30.66	97.53
Metanol	10.26	56.23	15.38	92.22

Tabla 5.47 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 17, 18 y 19 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=30

	NEQ	NEQ	NEQ	NEQ
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Comparación	17-18	17-18	17-19	17-19
Temperatura	0.14	0.20	0.41	1.36
Flujos Molares				
Isobuteno	6.24	27.42	35.67	91.13
1-Buteno	0.17	5.59	2.67	88.95
MTBE	4.35	0.35	8.70	1.36
Metanol	2.43	>100	32.88	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	4.55	0.00	31.82	89.05
1-Buteno	0.33	3.85	2.00	88.46
MTBE	5.88	0.32	5.88	1.38
Metanol	2.60	>100	33.77	>100

Tabla 5.48 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 17, 18 y 19 para el Modelo de No Equilibrio. N=30

Para el modelo de no equilibrio el error es mínimo al comparar las etapas 17 con la 18, y cuando se compara la etapa 17 con la 19 el error también es pequeño en comparación con el de los otros modelos. Los errores que son muy grandes se deben a que se están comparando número muy pequeños.

Con estos resultados se puede ver que el modelo que tiene las menores variaciones respecto a la etapa en la cual se va a alimentar es el de no equilibrio.

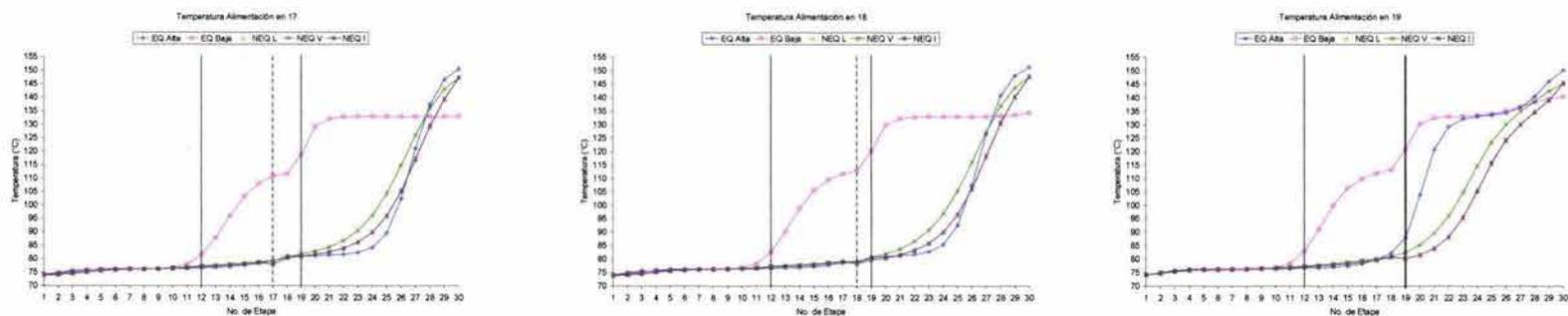


Figura 5.86 Comparación para las Temperaturas para los 2 modelos. N=30

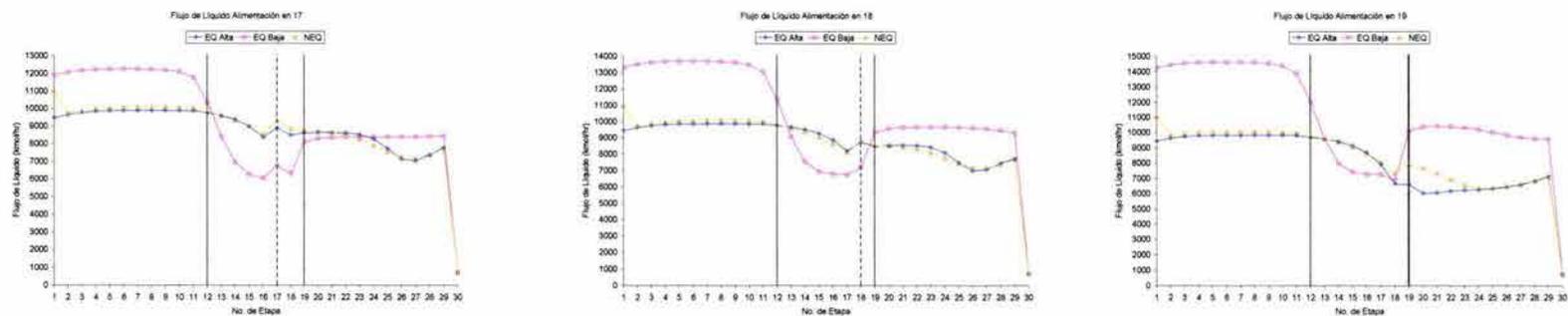


Figura 5.87 Comparación para los Flujos de Líquido para los 2 modelos. N=30

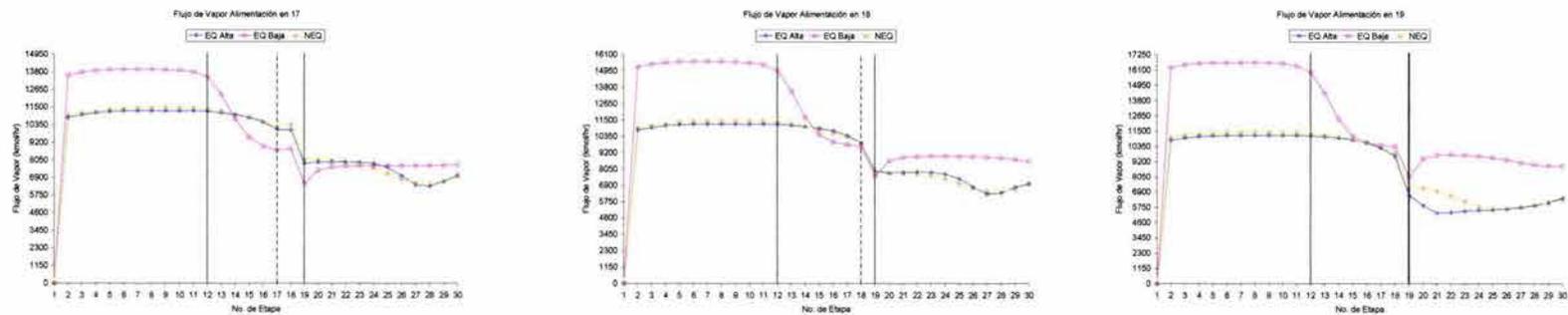


Figura 5.88 Comparación para los Flujos de Vapor para los 2 modelos. N=30

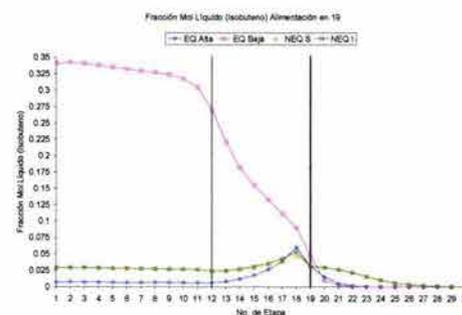
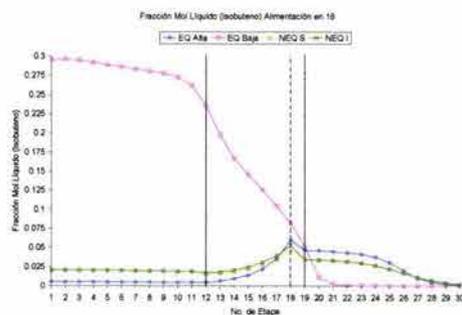
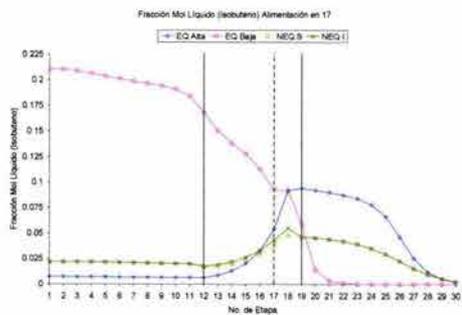


Figura 5.89 Comparación para la Fracción Mol Líquido del Isobuteno para los 2 modelos. N=30

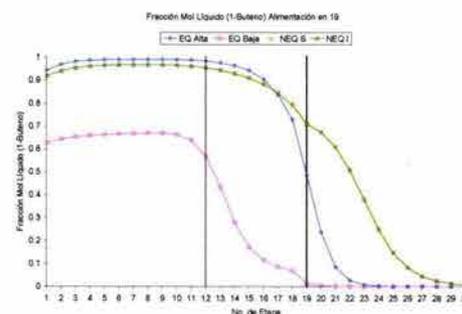
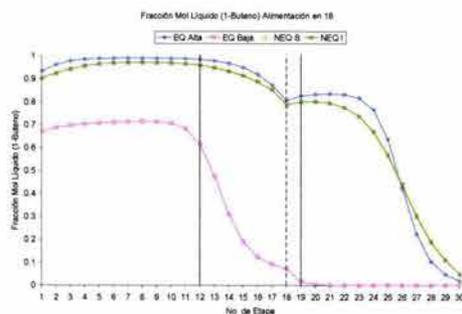
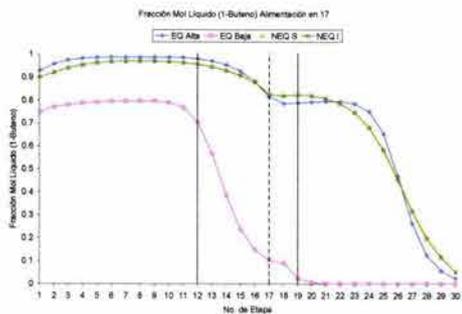


Figura 5.90 Comparación para la Fracción Mol Líquido del 1-Buteno para los 2 modelos. N=30

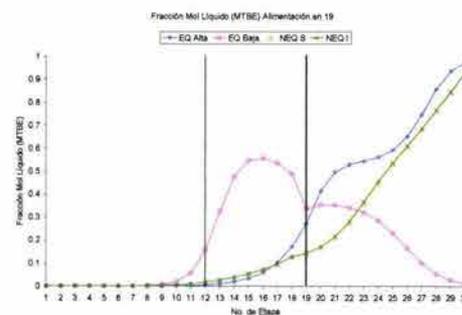
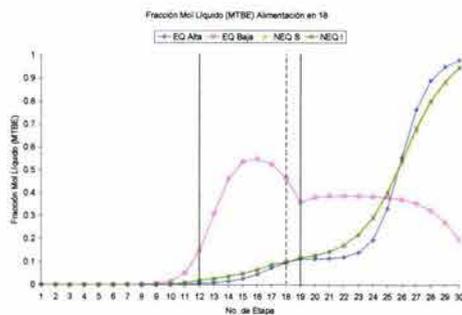
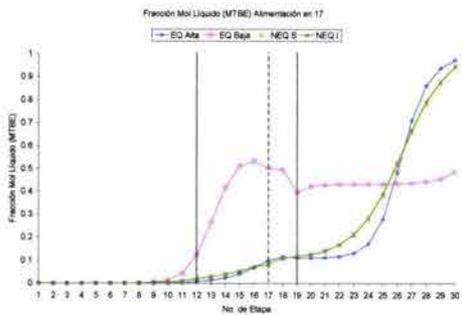


Figura 5.91 Comparación para la Fracción Mol Líquido del MTBE para los 2 modelos. N=30

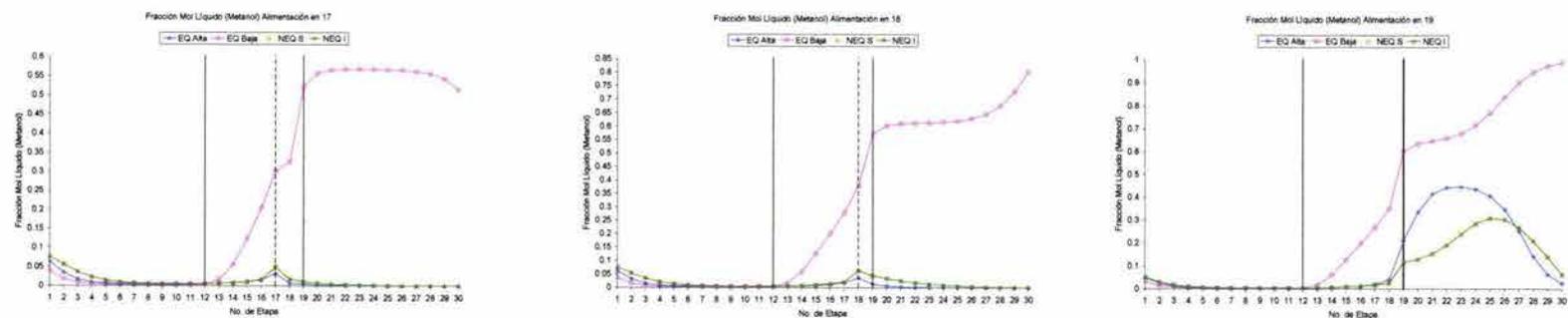


Figura 5.92 Comparación para la Fracción Mol Líquido del Metanol para los 2 modelos. N=30

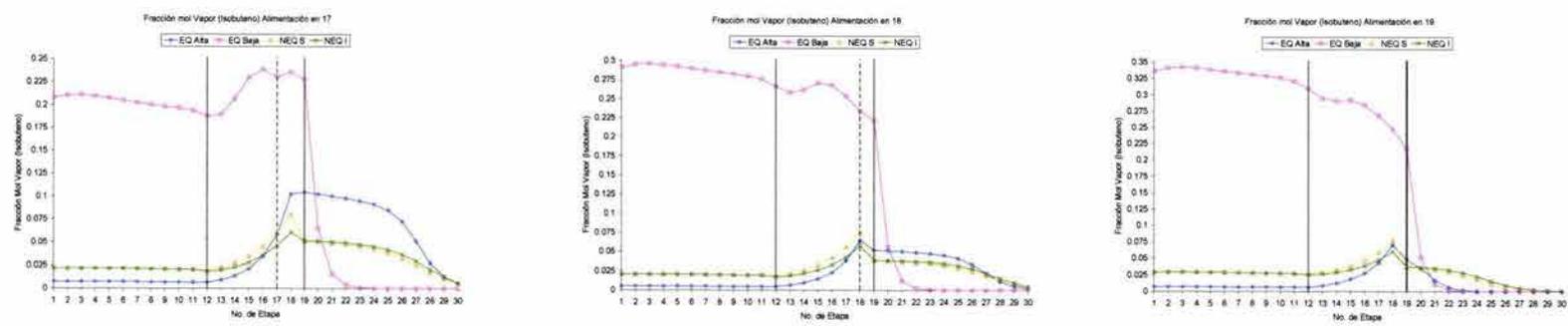


Figura 5.93 Comparación para la Fracción Mol Vapor del Isobuteno para los 2 modelos. N=30

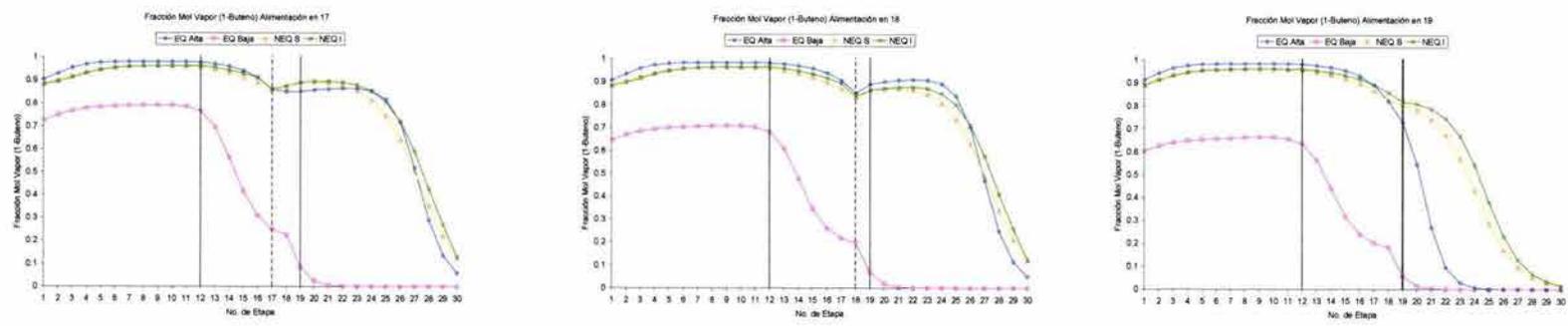


Figura 5.94 Comparación para la Fracción Mol Vapor del 1-Buteno para los 2 modelos. N=30

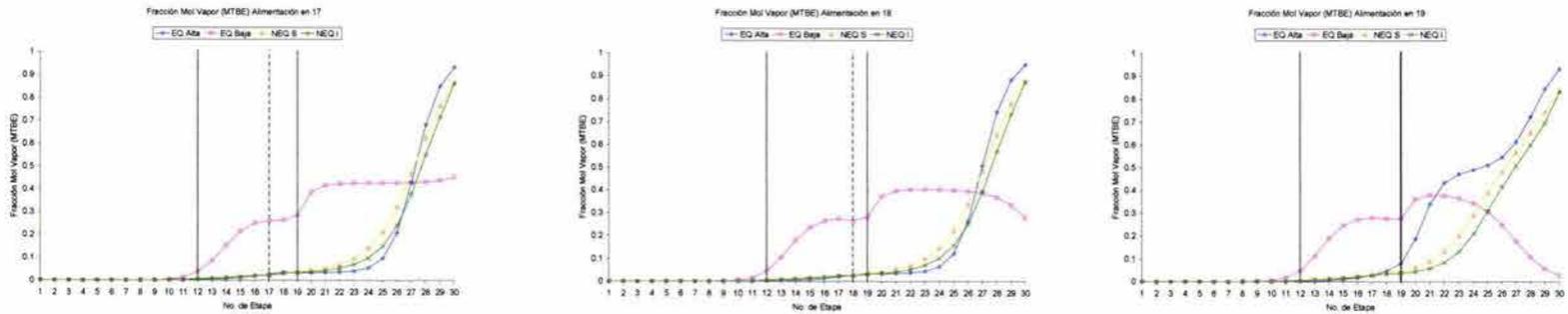


Figura 5.95 Comparación para la Fracción Mol Vapor del MTBE para los 2 modelos. N=30

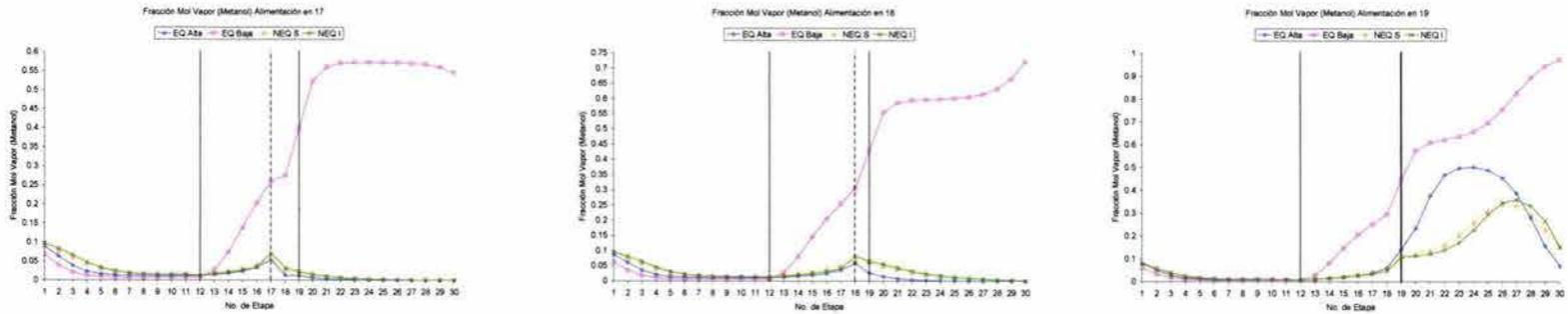


Figura 5.96 Comparación para la Fracción Mol Vapor del Metanol para los 2 modelos. N=30

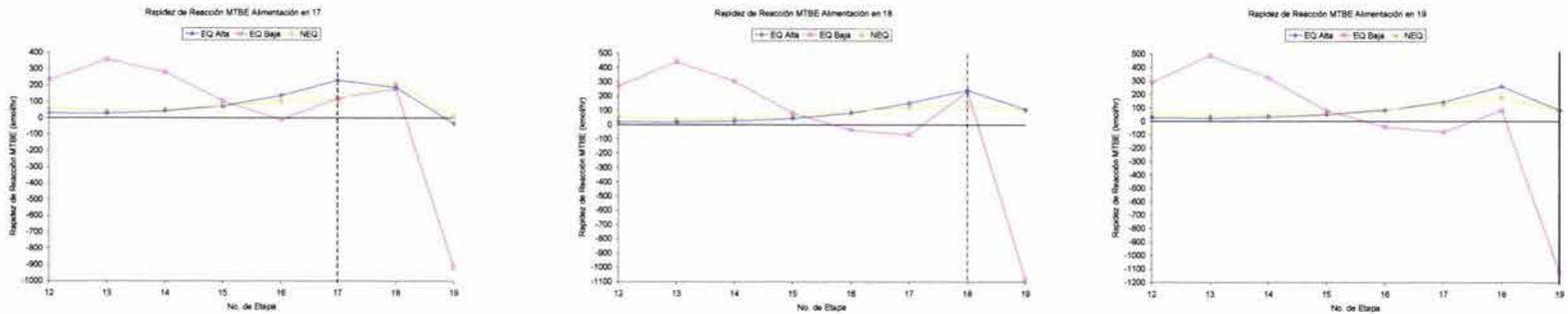


Figura 5.97 Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=30

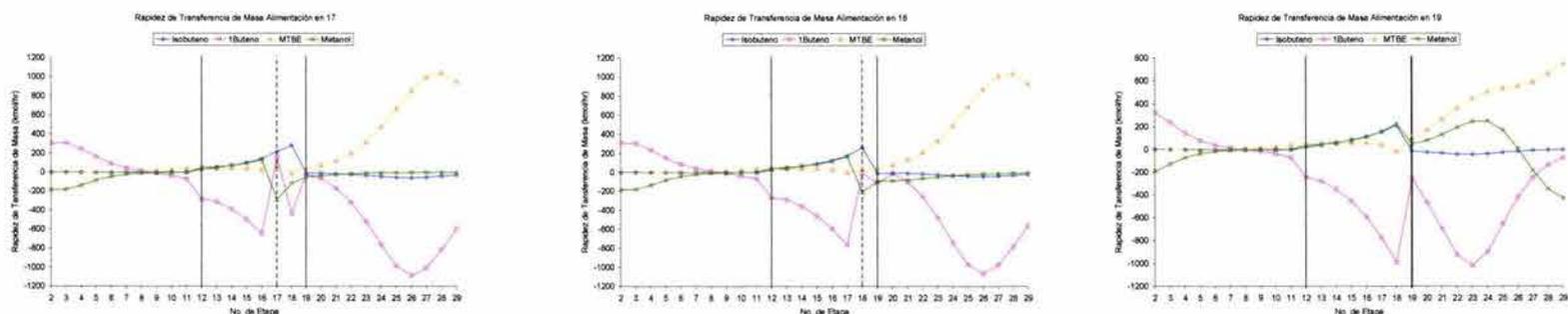


Figura 5.98 Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=30

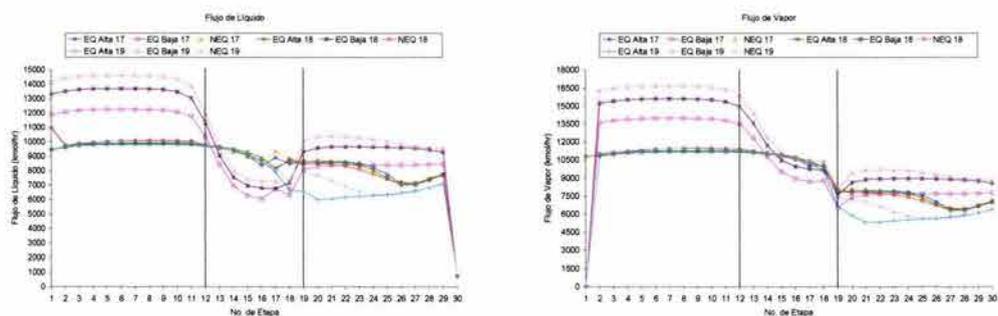


Figura 5.99 Comparación para los Flujos de Líquido y Vapor para los 2 modelos. N=30

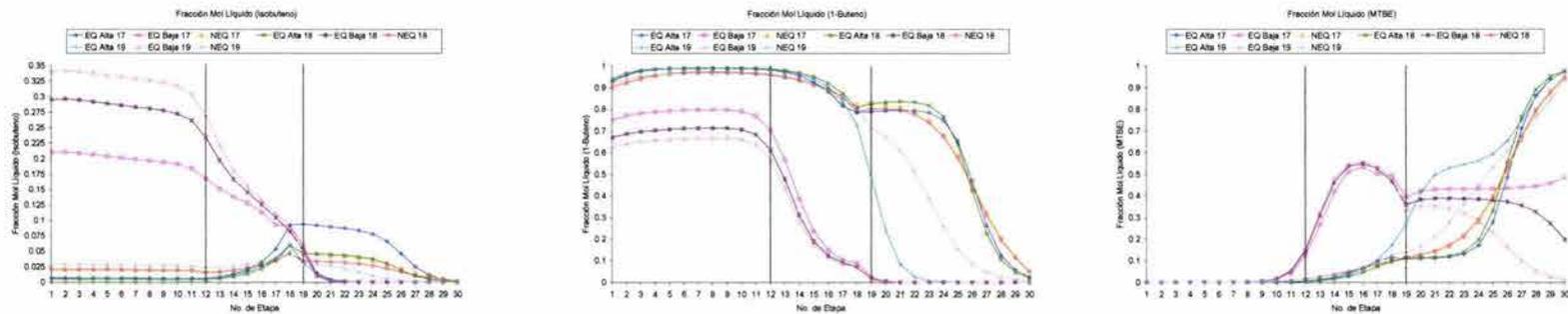


Figura 5.100 Comparación para la Fracción Mol Líquido para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=30

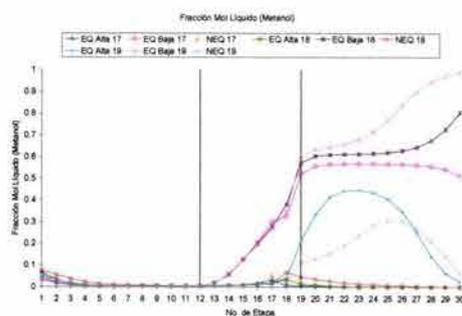


Figura 5.100 (Cont.) Comparación para la Fracción Mol Líquido para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=30

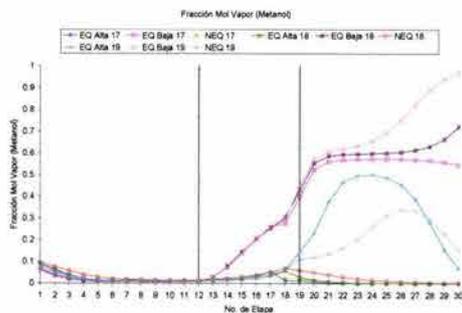
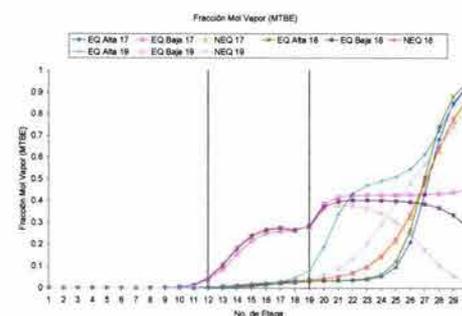
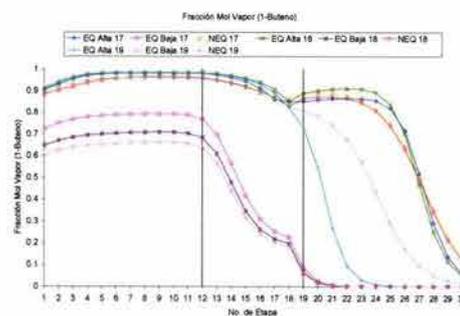
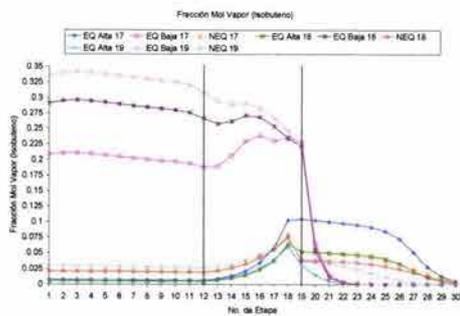


Figura 5.101 Comparación para la Fracción Mol Vapor para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=30

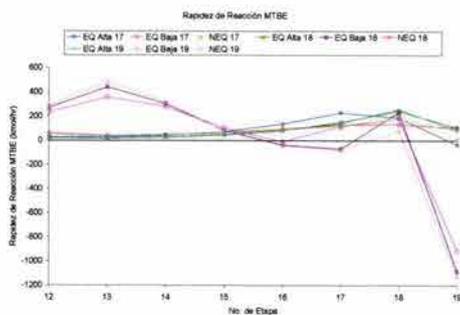


Figura 5.102 Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=30

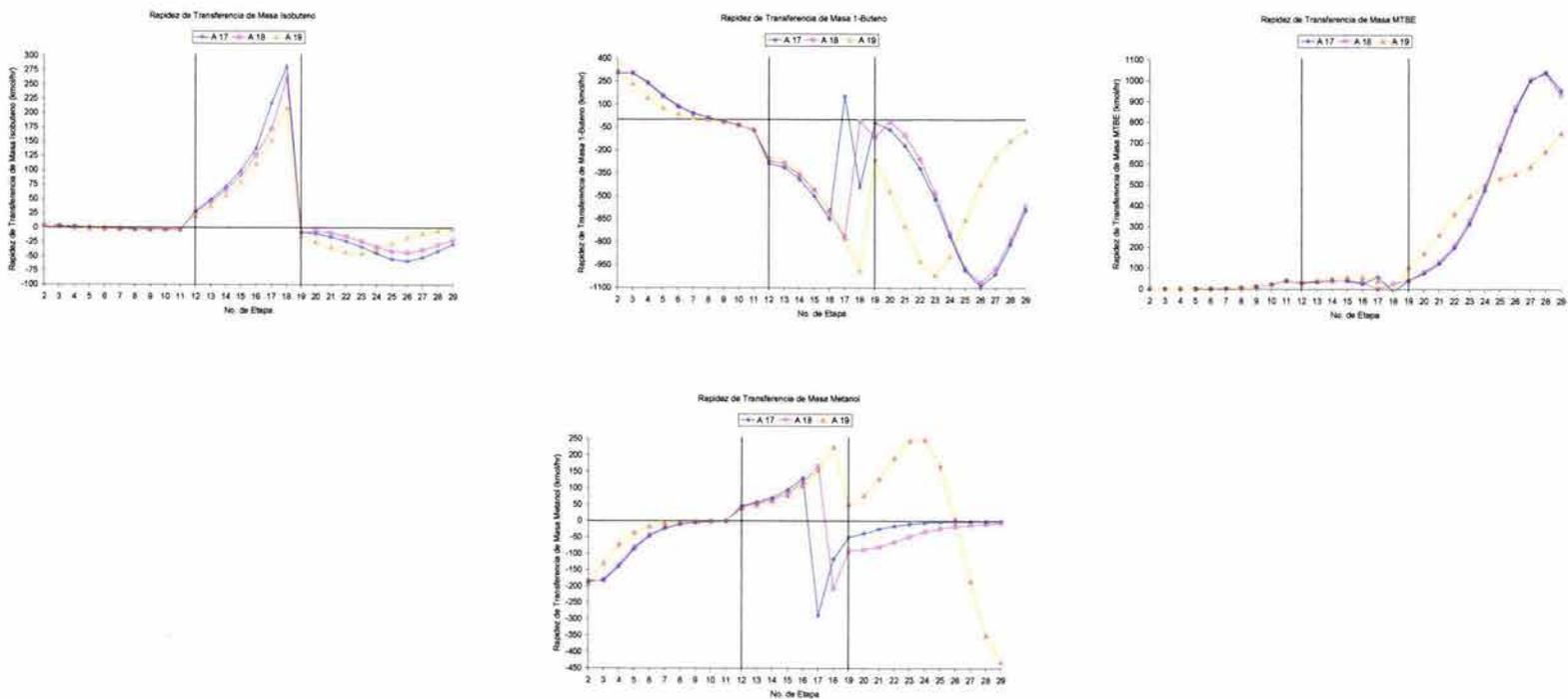


Figura 5.103 Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa para cada uno de los componentes. N=30

En las gráficas se puede ver que cuando las dos alimentaciones entran en la etapa 19, se presenta un comportamiento distinto en las temperaturas, en las composiciones y en la rapidez de transferencia de masa, para la rama de alta conversión y para el modelo de no equilibrio. Para las temperaturas después de la zona de reacción la temperatura aumenta bruscamente, hasta que llega al valor de la rama de baja conversión. Para las composiciones se puede ver que después de la zona de reacción la composición aumenta, llega a un valor límite y empieza a descender para el MTBE y para el Metanol, para el 1-Buteno la composición disminuye más rápido que en los otros casos, además el mismo comportamiento se puede observar para la fracción mol del vapor. Los comportamientos anteriores se deben a que cuando las dos corrientes se alimentan en la misma etapa, la cantidad de los componentes presentes en la parte inferior de la columna es mayor, por esa razón la transferencia de masa para el Isobuteno, 1-Buteno y Metanol se da del líquido al vapor, para que los componentes salgan por la corriente de destilado y lleguen a la zona de reacción.

En los siguientes resultados el número de etapas se aumentó a 35.

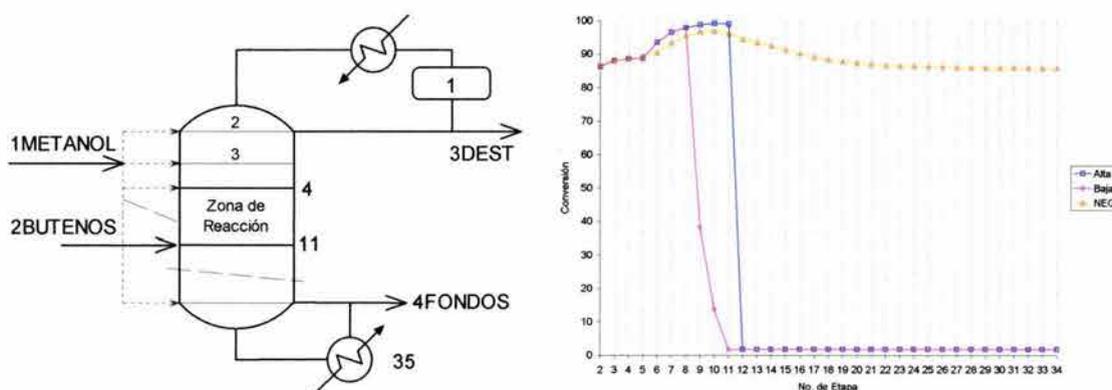


Figura 5.104 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 4 a 11. N=35

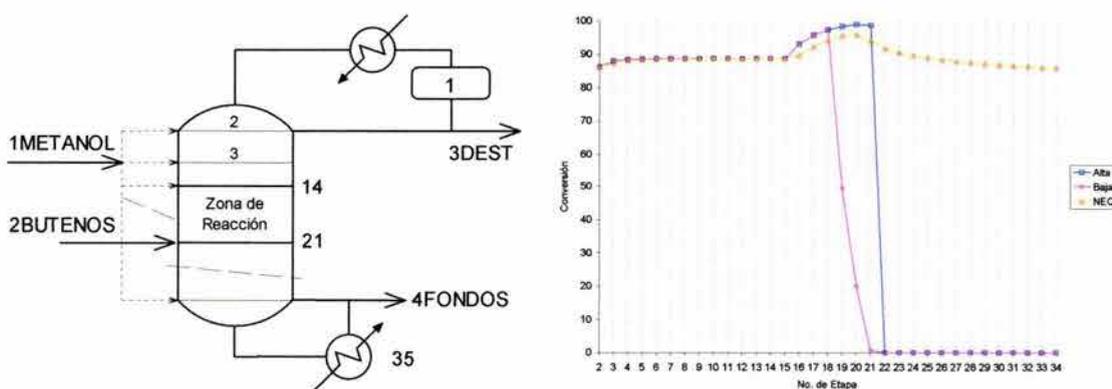


Figura 5.105 Resultados variando la etapa de alimentación de 1METANOL con la reacción de 14 a 21. N=35

Mientras la columna tiene más etapas hay más zonas en donde se puede ubicar la zona de reacción, lo que hace que exista un mayor número de zonas en donde hay MEE. Cuando la alimentación del 1METANOL está ubicada en la parte superior de la columna, la conversión de los modelos es muy parecida, pero en esos puntos no es conveniente alimentar porque la conversión es de aproximadamente 85%, a menos que se esté buscando una conversión cercana a ese valor.

Para ver las diferencias entre los dos modelos y entre los MEE se hizo la simulación de aquellas etapas en donde hay presencia de MEE, para el caso donde la reacción es de 14 a 21.

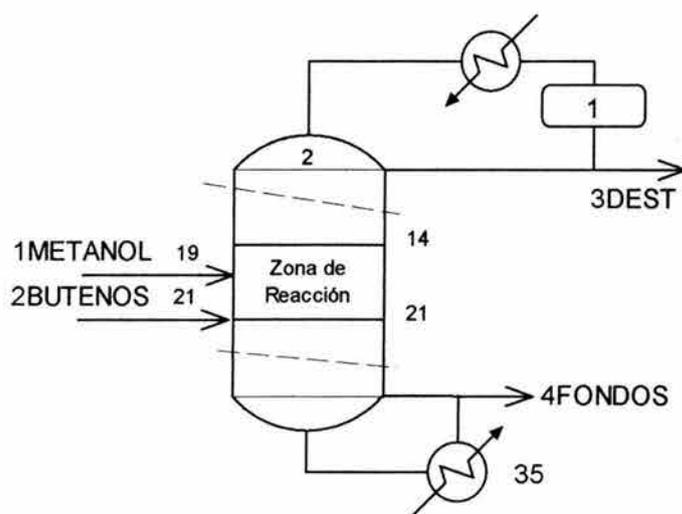


Figura 5.106 Configuración de la columna. Reacción de 14 a 21. Alimentaciones en 19 y 21. N=35

Alimentación en 19	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	150.7
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	10.062	1.479
1-Buteno	0	1274.4	1257.138	17.262
MTBE	0	0	0	690.459
Metanol	775.8	0	85.34	0
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.007	0.002
1-Buteno	0	0.645	0.929	0.024
MTBE	0	0	0.000000002	0.974
Metanol	1	0	0.063	0.000000189

Tabla 5.49 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=35

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio

Alimentación en 19	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.1	133
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	355.294	0
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0	346.706
Metanol	775.8	0	66.6	362.494
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.209	0
1-Buteno	0	0.645	0.751	0
MTBE	0	0	0.000000044	0.489
Metanol	1	0	0.039	0.511

Tabla 5.50 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=35

Alimentación en 19	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	73.8	147.5
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	29.57	1.582
1-Buteno	0	1274.4	1237.629	36.771
MTBE	0	0	0.007	670.841
Metanol	775.8	0	104.946	0.006
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.022	0.002
1-Buteno	0	0.645	0.902	0.052
MTBE	0	0	0.000005	0.946
Metanol	1	0	0.076	0.000009

Tabla 5.51 Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=35

Alimentación en 19	Error	Error	Error	Error
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.27	2.17	0.41	9.83
Flujos Molares				
Isobuteno	65.97	6.51	>100	100.00
1-Buteno	1.58	53.06	2.97	100.00
MTBE	100.00	2.92	100.00	48.32
Metanol	18.68	100.00	36.54	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	68.18	0.00	>100	100.00
1-Buteno	2.99	53.85	16.74	100.00
MTBE	99.96	2.96	99.12	48.31
Metanol	17.11	97.90	48.68	>100

Tabla 5.52 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=35

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 95.5%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.3% y 49.3%.

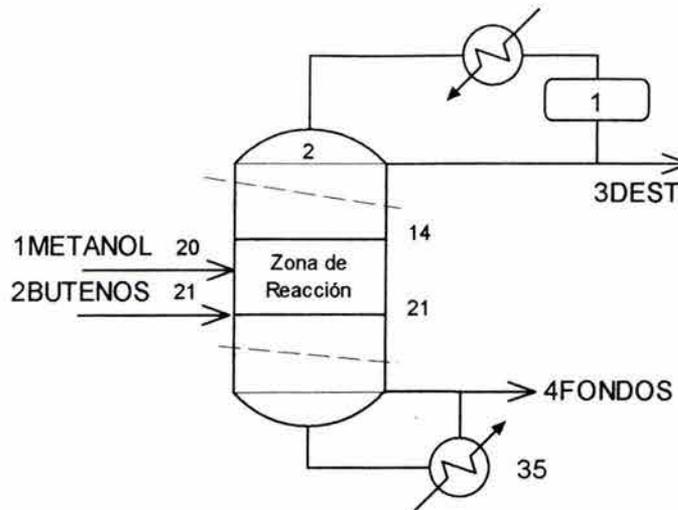


Figura 5.107 Configuración de la columna. Reacción de 14 a 21. Alimentaciones en 20 y 21. N=35

Alimentación en 20	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74	151.3
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	7.067	0.576
1-Buteno	0	1274.4	1260.134	14.266
MTBE	0	0	0	694.357
Metanol	775.8	0	81.442	0
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.005	0.000812
1-Buteno	0	0.645	0.934	0.02
MTBE	0	0	0.000000002	0.979
Metanol	1	0	0.06	0.00000048

Tabla 5.53 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=35

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio

Alimentación en 20	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.2	134.4
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	561.223	0
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0	140.777
Metanol	775.8	0	66.6	568.423
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.295	0
1-Buteno	0	0.645	0.67	0
MTBE	0	0	0.000000054	0.199
Metanol	1	0	0.035	0.801

Tabla 5.54 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=35

Alimentación en 20	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	73.9	147.8
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	27.842	1.188
1-Buteno	0	1274.4	1239.4	35
MTBE	0	0	0.006	672.963
Metanol	775.8	0	102.782	0.049
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.02	0.002
1-Buteno	0	0.645	0.905	0.049
MTBE	0	0	0.000005	0.949
Metanol	1	0	0.075	0.000069

Tabla 5.55 Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=35

Alimentación en 20	Error	Error	Error	Error
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.14	2.37	0.41	9.07
Flujos Molares				
Isobuteno	74.62	51.52	>100	100.00
1-Buteno	1.67	59.24	2.82	100.00
MTBE	100.00	3.18	100.00	79.08
Metanol	20.76	100.00	35.20	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	75.00	59.40	>100	100.00
1-Buteno	3.20	59.18	25.97	100.00
MTBE	99.96	3.16	98.92	79.03
Metanol	20.00	99.30	53.33	>100

Tabla 5.56 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=30

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 95.8%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.9% y 20.0%. En este caso la conversión de la rama de alta conversión y del modelo de no equilibrio aumentan, mientras que la conversión de la rama de baja conversión disminuye, en comparación cuando se alimenta en la etapa 20.

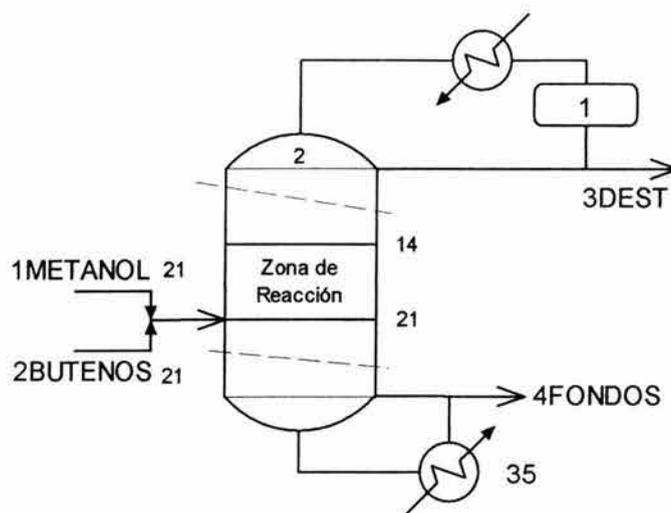


Figura 5.108 Configuración de la columna. Reacción de 14 a 21. Alimentaciones en 21 y 21. N=35

Alimentación en 21	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.2	150.2
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	9.861	0
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0	692.139
Metanol	775.8	0	66.6	17.061
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.007	0.000000008
1-Buteno	0	0.645	0.943	0.000000162
MTBE	0	0	0.000000002	0.976
Metanol	1	0	0.049	0.024

Tabla 5.57 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=35

5 Comparación entre los Modelos de Equilibrio y de No Equilibrio

Alimentación en 21	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.2	140.6
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	697.142	0
1-Buteno	0	1274.4	1274.4	0
MTBE	0	0	0	4.858
Metanol	775.8	0	66.6	704.342
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.342	0
1-Buteno	0	0.645	0.625	0
MTBE	0	0	0.000000058	0.007
Metanol	1	0	0.033	0.993

Tabla 5.58 Resultados usando el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=35

Alimentación en 21	1METANOL	2BUTENOS	3DEST	4FONDOS
Temperatura (°C)	46.8	76.8	74.2	145.5
Presión (bar)	11.146	11.146	11.146	11.146
Flujos Molares (kmol/hr)				
Isobuteno	0	702	41.364	0.022
1-Buteno	0	1274.4	1273.775	0.625
MTBE	0	0	0.007	660.606
Metanol	775.8	0	67.24	47.946
Fracciones Mol				
Isobuteno	0	0.355	0.03	0.000031
1-Buteno	0	0.645	0.921	0.000882
MTBE	0	0	0.000005	0.931
Metanol	1	0	0.049	0.068

Tabla 5.59 Resultados usando el Modelo de No Equilibrio. N=35

Alimentación en 21	Error	Error	Error	Error
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
	Alta Conv.	Alta Conv.	Baja Conv.	Baja Conv.
Temperatura	0.00	3.23	0.00	3.37
Flujos Molares				
Isobuteno	76.16	100.00	>100	100.00
1-Buteno	0.05	100.00	0.05	100.00
MTBE	100.00	4.77	100.00	99.26
Metanol	0.95	64.42	0.95	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	76.67	99.97	>100	100.00
1-Buteno	2.39	99.98	32.14	100.00
MTBE	99.96	4.83	98.84	99.25
Metanol	0.00	64.71	32.65	>100

Tabla 5.60 Error entre el Modelo de No Equilibrio y de Equilibrio. N=35

Cuando se usa el modelo de etapa en no equilibrio la conversión es de 94.1%, con el modelo de etapa en equilibrio son de 98.5% y 0.69%.

	EQ Alta	EQ Alta	EQ Alta	EQ Alta
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Comparación	19-20	19-20	19-21	19-21
Temperatura	0.00	0.40	0.27	0.33
Flujos Molares				
Isobuteno	29.77	61.05	2.00	100.00
1-Buteno	0.24	17.36	1.37	100.00
MTBE	0	0.56	0	0.24
Metanol	4.57	0	21.96	0
Fracciones Mol				
Isobuteno	28.57	59.40	0.00	100.00
1-Buteno	0.54	16.67	1.51	100.00
MTBE	0.00	0.51	0.00	0.21
Metanol	4.76	>100	22.22	>100

Tabla 5.61 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 19, 20 y 21 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Alta Conversión. N=35

	EQ Baja	EQ Baja	EQ Baja	EQ Baja
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Comparación	19-20	19-20	19-21	19-21
Temperatura	0.13	1.05	0.13	5.71
Flujos Molares				
Isobuteno	57.96	0	96.22	0
1-Buteno	0.00	0	0.00	0
MTBE	0	59.40	0	98.60
Metanol	0.00	56.81	0.00	94.30
Fracciones Mol				
Isobuteno	41.15	0	63.64	0
1-Buteno	10.79	0	16.78	0
MTBE	22.73	59.30	31.82	98.57
Metanol	10.26	56.75	15.38	94.32

Tabla 5.62 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 19, 20 y 21 para el Modelo de Equilibrio. Rama de Baja Conversión. N=35

	NEQ	NEQ	NEQ	NEQ
	3DEST	4FONDOS	3DEST	4FONDOS
Comparación	19-20	19-20	19-21	19-21
Temperatura	0.14	0.20	0.54	1.36
Flujos Molares				
Isobuteno	5.84	24.91	39.89	98.61
1-Buteno	0.14	4.82	2.92	98.30
MTBE	14.29	0.32	0.00	1.53
Metanol	2.06	>100	35.93	>100
Fracciones Mol				
Isobuteno	9.09	0.00	36.36	98.45
1-Buteno	0.33	5.77	2.11	98.30
MTBE	0.00	0.32	0.00	1.59
Metanol	1.32	>100	35.53	>100

Tabla 5.63 Error entre los resultados de alimentar en la etapa 19, 20 y 21 para el Modelo de No Equilibrio. N=35

Al variar la etapa de alimentación el modelo de no equilibrio es el que presenta las menores diferencias. En los 3 modelos la corriente que presenta las menores diferencias es la del destilado.

La rama de baja conversión es la que presenta las mayores diferencias, esto se debe a que se comparan resultados en donde las conversiones son de 49.3%, 20.0% y 0.69%. En cambio, como la conversión de la rama de alta conversión del modelo de equilibrio, y la conversión del modelo de no equilibrio son muy parecidas, los errores son pequeños.

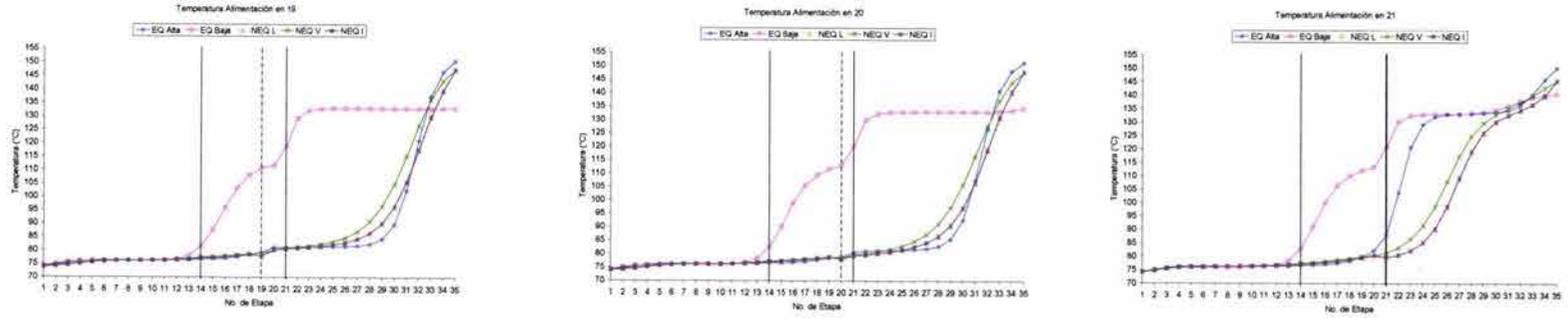


Figura 5.109 Comparación para las Temperaturas para los 2 modelos. N=35

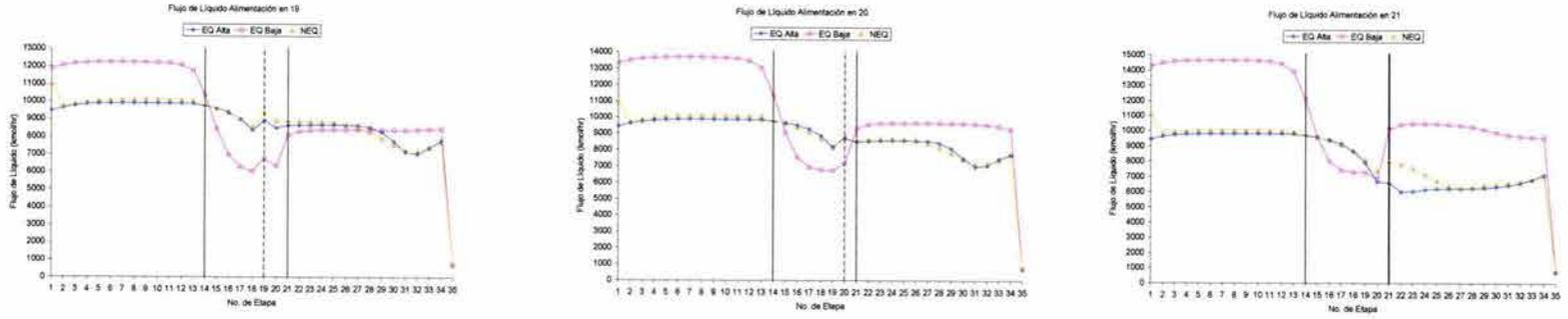


Figura 5.110 Comparación para los Flujos de Líquido para los 2 modelos. N=35

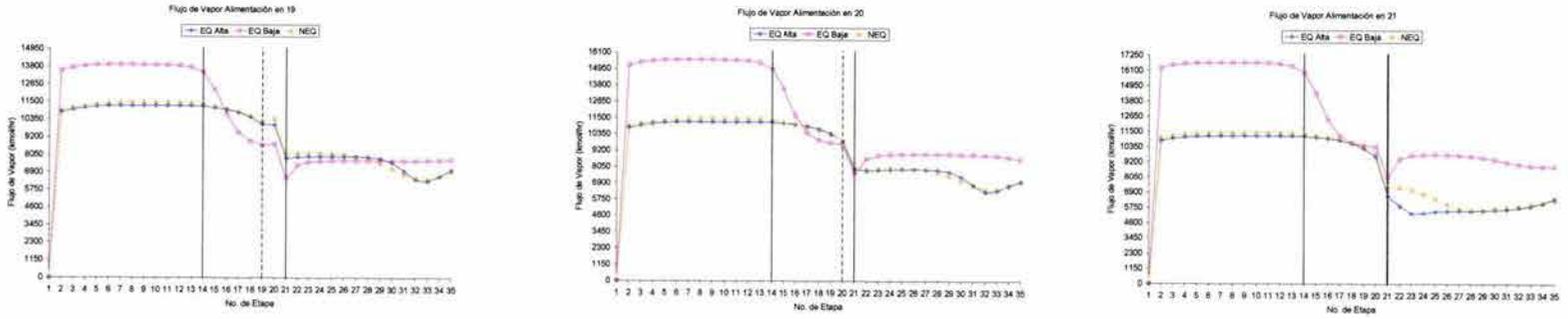


Figura 5.111 Comparación para los Flujos de Vapor para los 2 modelos. N=35

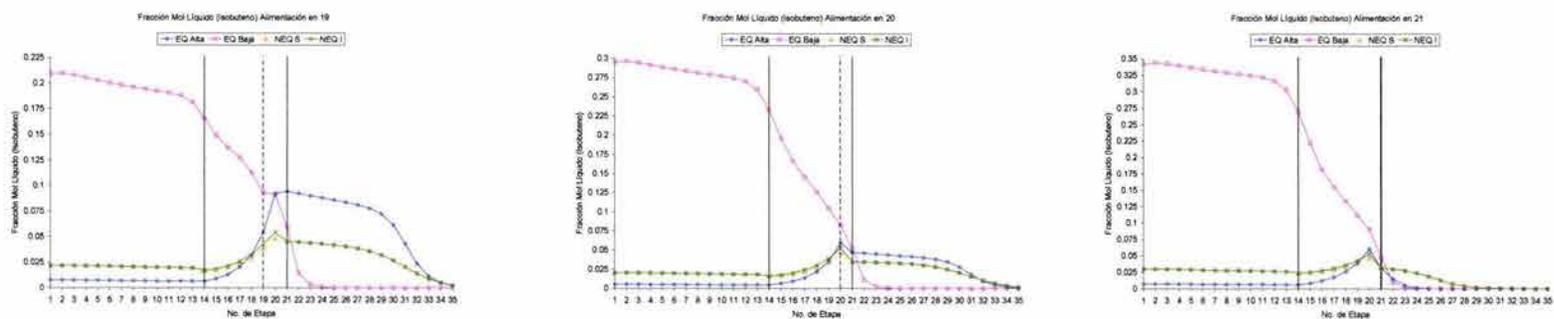


Figura 5.112 Comparación para la Fracción Mol Líquido del Isobuteno para los 2 modelos. N=35

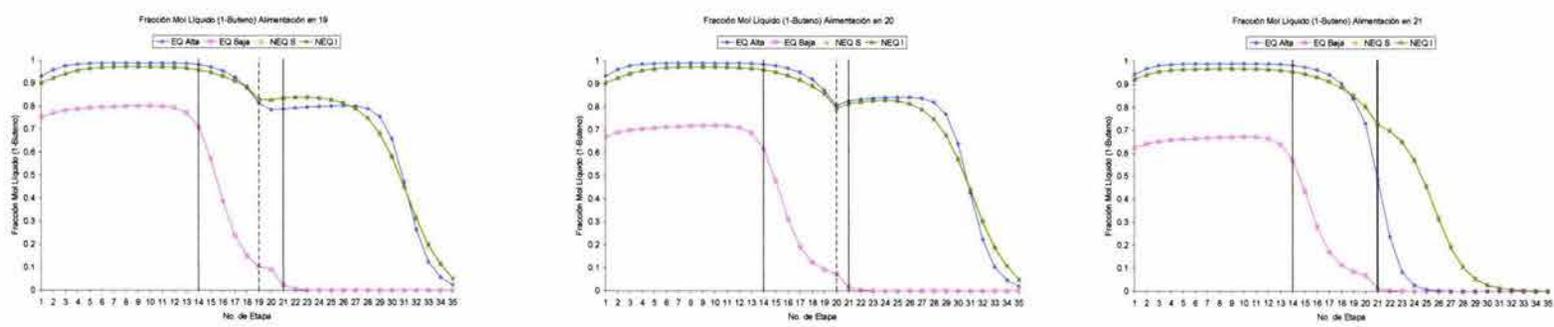


Figura 5.113 Comparación para la Fracción Mol Líquido del 1-Buteno para los 2 modelos. N=35

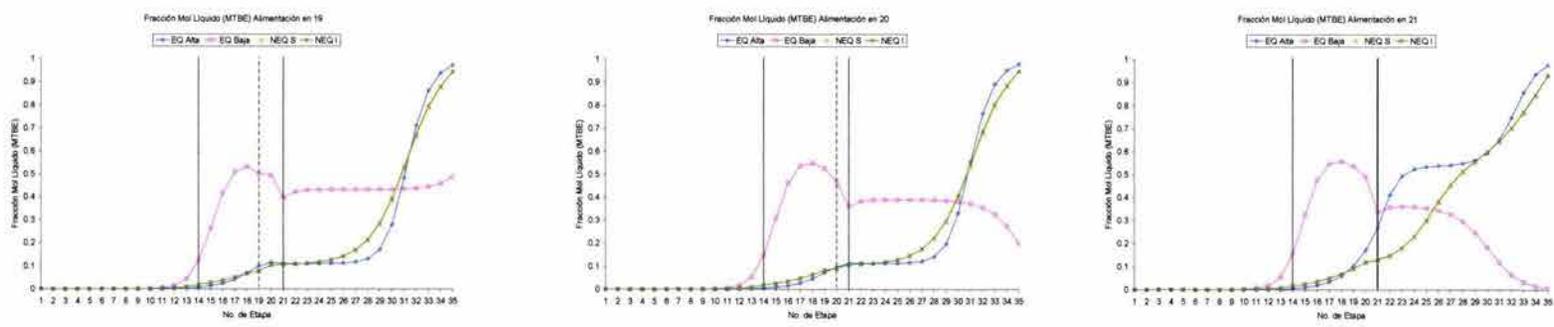


Figura 5.114 Comparación para la Fracción Mol Líquido del MTBE para los 2 modelos. N=35

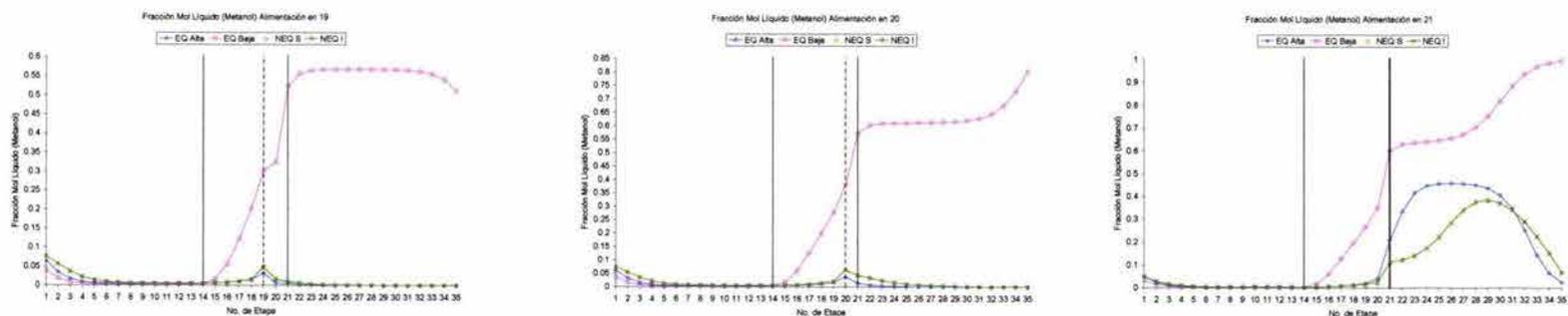


Figura 5.115 Comparación para la Fracción Mol Líquido del Metanol para los 2 modelos. N=35

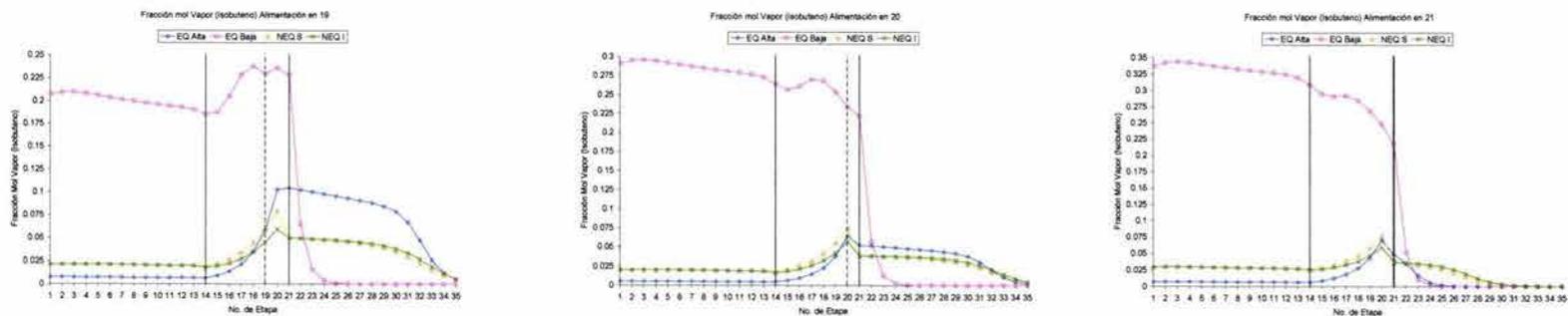


Figura 5.116 Comparación para la Fracción Mol Vapor del Isobuteno para los 2 modelos. N=35

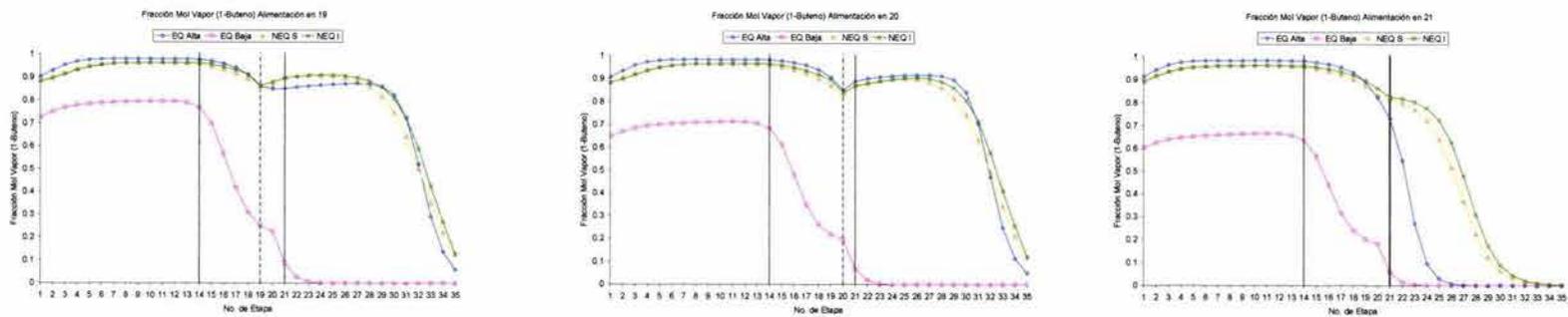


Figura 5.117 Comparación para la Fracción Mol Vapor del 1-Buteno para los 2 modelos. N=35

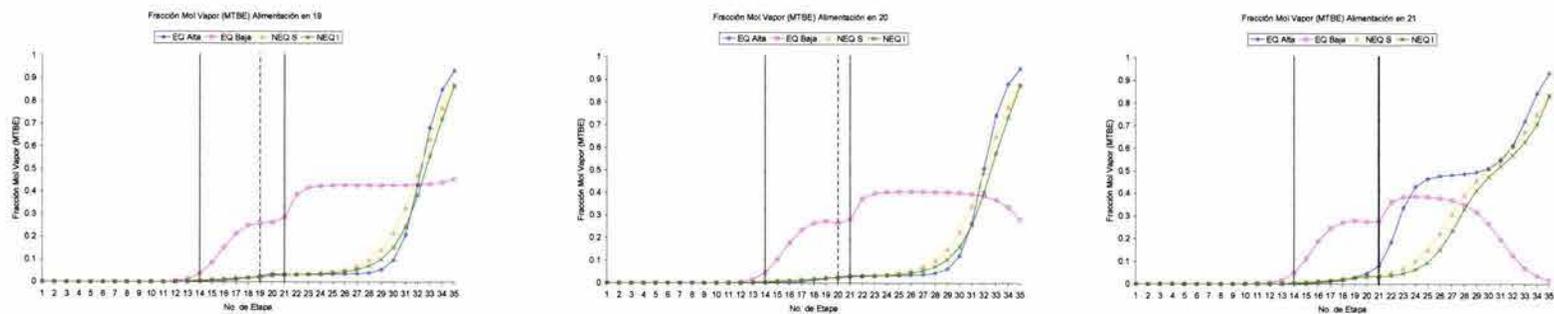


Figura 5.118 Comparación para la Fracción Mol Vapor del MTBE para los 2 modelos. N=35

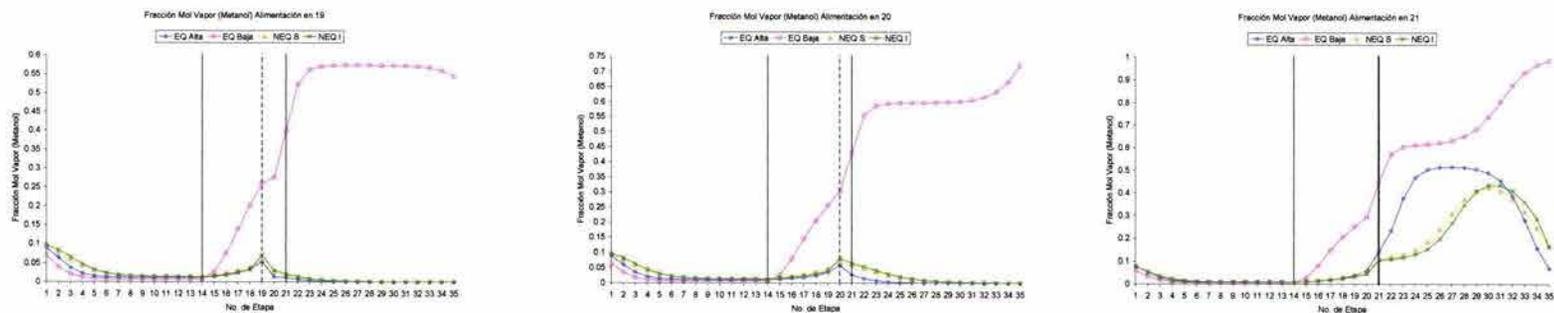


Figura 5.119 Comparación para la Fracción Mol Vapor del Metanol para los 2 modelos. N=35

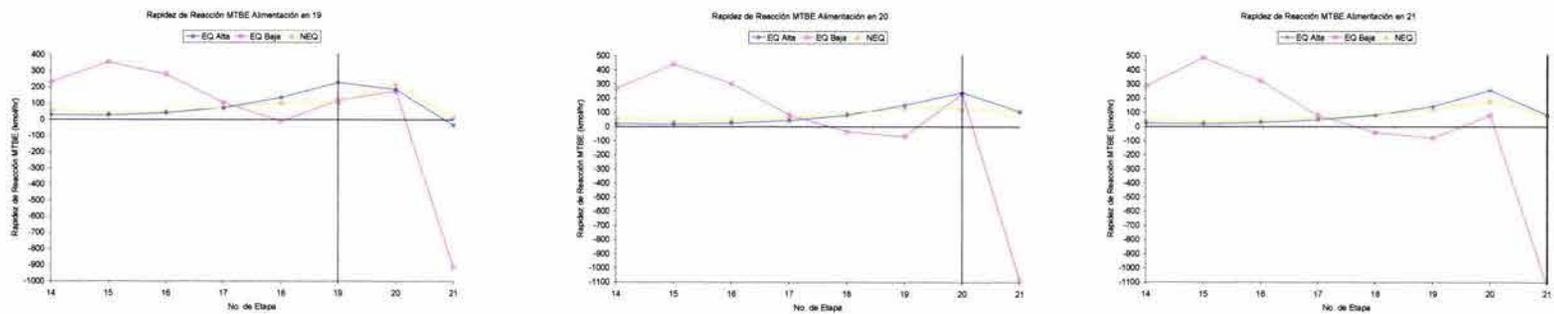


Figura 5.120 Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para los 2 modelos. N=35

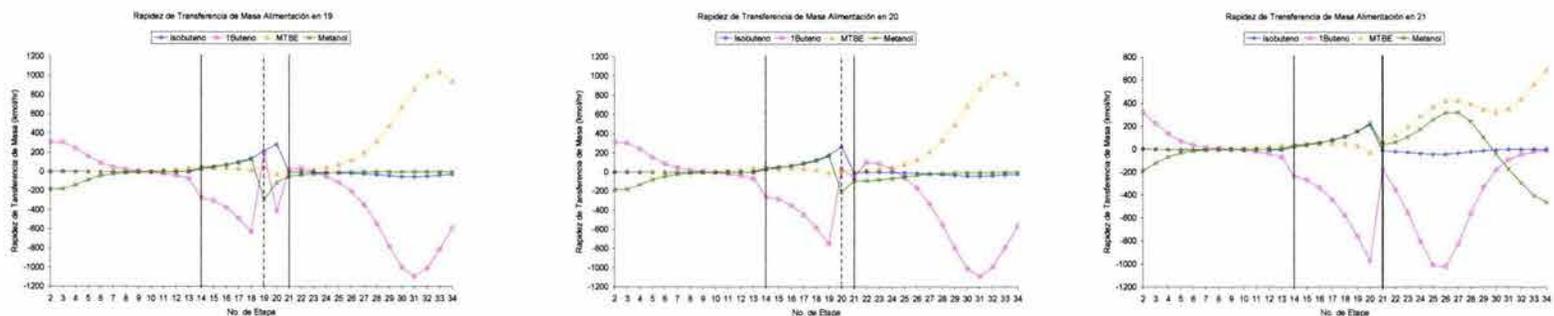


Figura 5.121 Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa. N=35

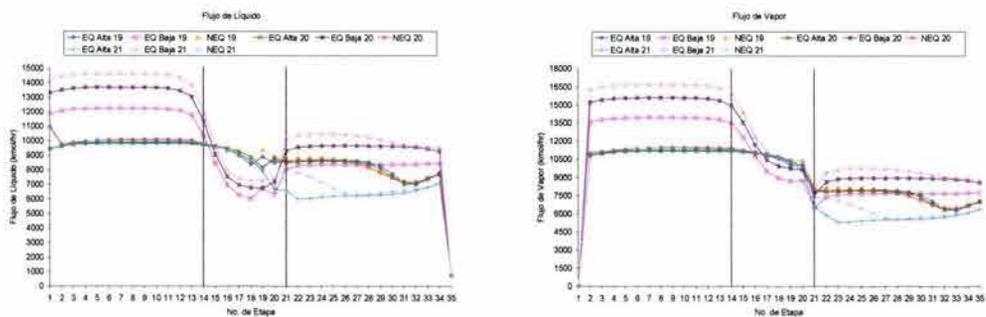


Figura 5.122 Comparación para los Flujos de Líquido y Vapor para los 2 modelos. N=35

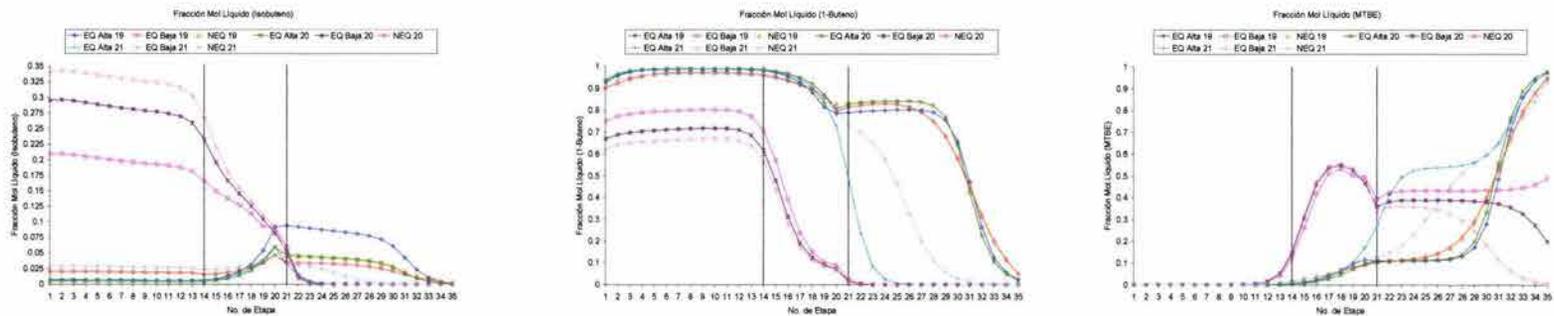


Figura 5.123 Comparación para la Fracción Mol Líquido para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=35

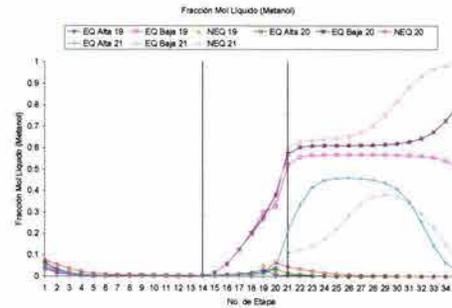


Figura 5.123 (Cont.) Comparación para la Fracción Mol Líquido para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=35

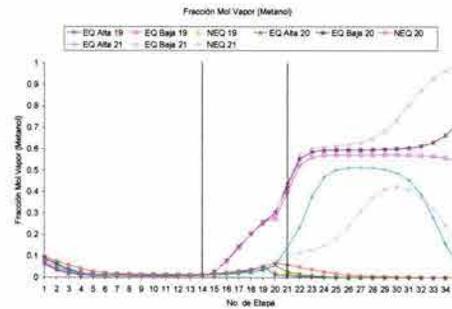
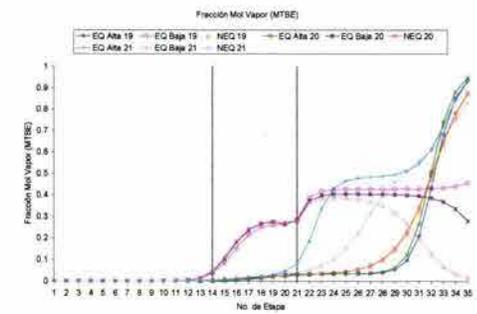
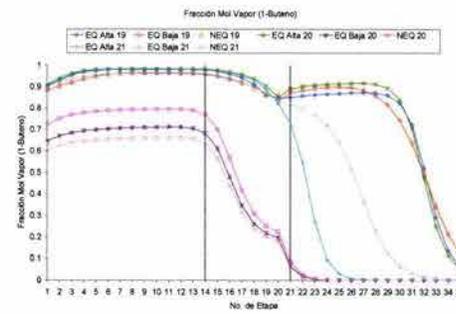
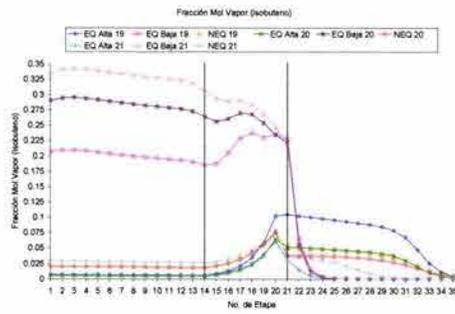


Figura 5.124 Comparación para la Fracción Mol Vapor para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=35

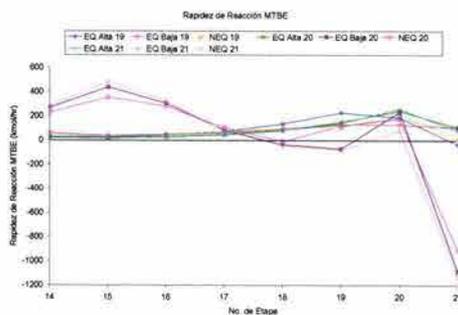


Figura 5.125 Comparación para la Rapidez de Reacción del MTBE para cada uno de los componentes para los 2 modelos. N=35

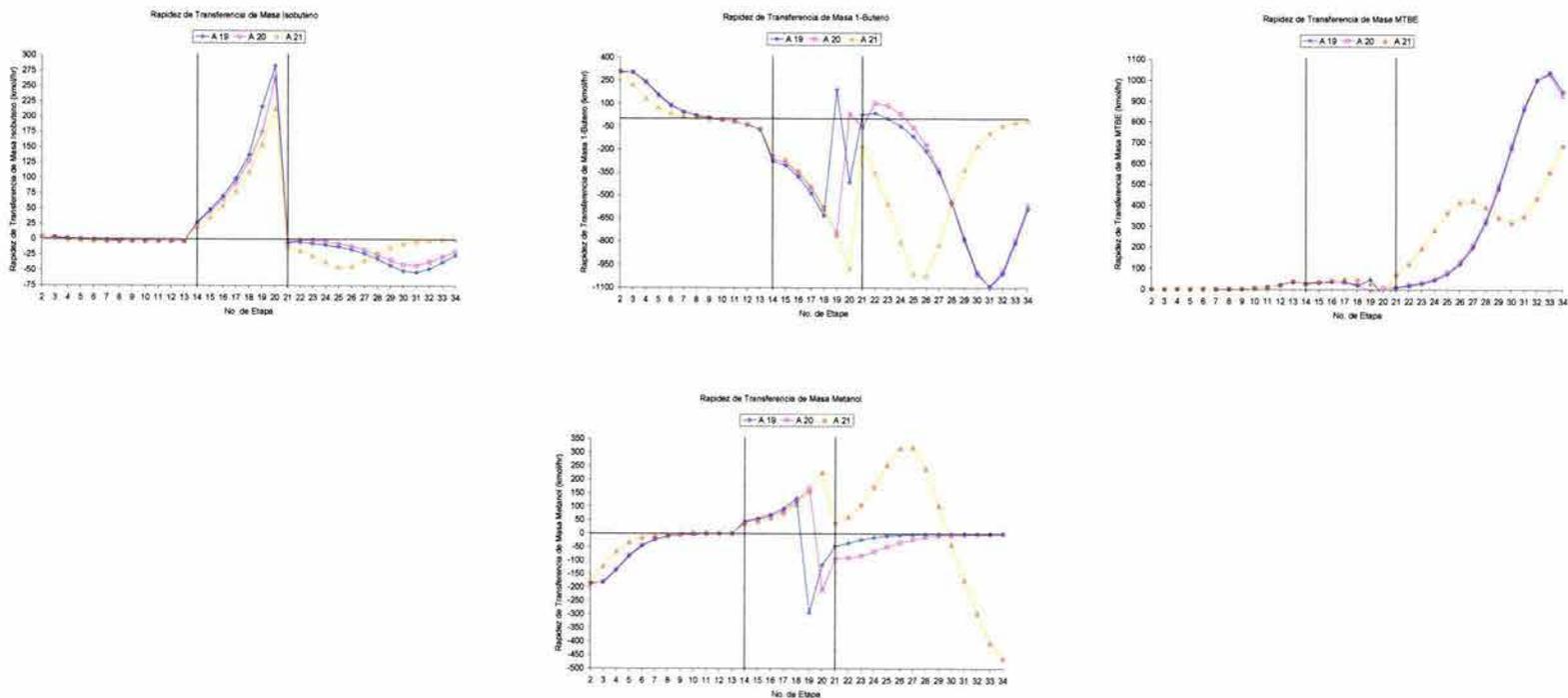


Figura 5.126 Comparación para la Rapidez de Transferencia de Masa para cada uno de los componentes. N=35

El efecto que causa el hecho de que las 2 alimentaciones entren en la misma etapa se observa en las temperaturas, las composiciones y en la rapidez de transferencia de masa. Para las temperaturas, después de la zona de reacción la temperatura de la rama de alta conversión y del modelo de no equilibrio aumenta bruscamente, pero como este cambio es en las etapas inferiores no interfiere con la reacción. El cambio continúa hasta que el valor final es el mismo que el obtenido cuando se alimentó la corriente de 1METANOL en las etapas superiores.

En la composición del Metanol se ve un aumento muy brusco después de la zona de reacción, el efecto de las alimentaciones en este caso es aumentar la cantidad de este componente en la parte inferior de la columna, pero como el metanol sale en la corriente de destilado su transferencia de masa en las etapas inferiores se da del líquido al vapor. Para el MTBE se puede ver el mismo efecto, pero como sale en la corriente de fondos su transferencia de masa en este caso es del vapor al líquido.

En todos los casos anteriores se puede ver que la rapidez de reacción de la rama de baja conversión es muy alta en las primeras etapas, incluso más alta que la de la rama de alta conversión y la del modelo de no equilibrio. Sin embargo en las etapas inferiores de la zona de reacción el MTBE no se sigue formando, sino que se lleva a cabo la reacción inversa para producir a partir de MTBE isobuteno y metanol. Este efecto es causado por la gran cantidad de MTBE que se encuentra presente en este caso en la zona de reacción.

Cuando la corriente de 1METANOL se alimenta arriba de la zona de reacción la conversión es muy parecida usando cualquiera de los 2 modelos, pero si se alimenta en la zona de reacción la conversión de modelo de no equilibrio siempre es menor. El efecto más importante es que si se alimenta después de la zona de reacción la conversión en el modelo de equilibrio disminuye a valores de cero, en el modelo de no equilibrio también se ve una disminución de la conversión pero no hasta cero.

Los resultados más importantes son los siguientes:

1. Si se utiliza el modelo de equilibrio hay presencia de MEE.
2. Cuando se usa el modelo de no equilibrio no hay MEE.
3. La etapa de alimentación de la corriente 1METANOL, determina si hay o no MEE.
4. La temperatura y la composición del líquido en la zona de reacción, son muy diferentes en los casos en que hay MEE.
5. Cuando aumenta la temperatura y la composición del MTBE en la zona de reacción, se favorece la reacción de descomposición del MTBE que fue formado previamente en las etapas superiores, obteniéndose una corriente de fondos que no es rica en MTBE. Este caso se llamó rama de baja conversión.
6. Por el contrario, si la temperatura y la composición del MTBE en la zona de reacción eran bajas, la reacción que era favorecida era la de formación del MTBE, obteniéndose en la corriente de fondos una corriente rica en MTBE. Este caso se denominó rama de alta conversión.

7. Al aumentar el número de etapas también aumentó el número de MEE.
8. Si la zona de reacción es cambiada, la etapa de alimentación de la corriente de 1METANOL en donde se presentan MEE también cambia.
9. Los resultados del modelo de no equilibrio son muy parecidos a los resultados de la rama de alta conversión del modelo de equilibrio. Pero si se alimentan las dos corrientes en la misma etapa la diferencia entre los resultados aumenta.
10. Las diferencias de composición en cada uno de los platos, provoca que, los resultados de la composición de las corrientes de destilado y de fondos sea distinta para cada uno de los modelos.

La transferencia de masa es un factor importante que hay que considerar para saber como influye en el proceso. Para analizar el efecto de la transferencia de masa, se llevo a cabo una serie de simulaciones, en donde se varió el valor de los coeficientes de transferencia de masa. Con esa información se puede analizar qué pasa en el proceso cuándo los coeficientes valen 60%, 70%, 80%, 90%, 110%, 120%, 130% y 140% de su valor original.

La columna que se simuló fue la de la figura 5.8, en el apéndice F se encuentra el código fuente de la subrutina en lenguaje Fortran, utilizada para variar el valor de los coeficientes.

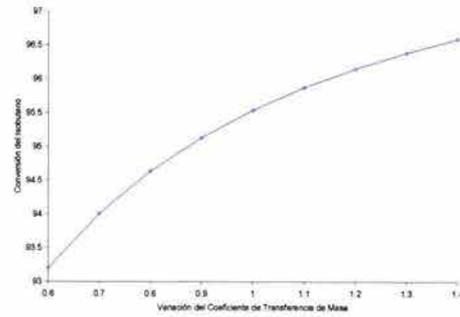


Figura 5.127 Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en la Conversión. N=17

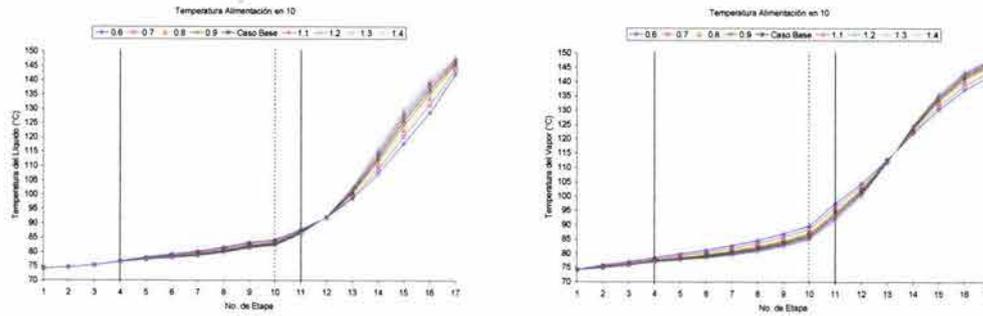


Figura 5.128 Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en las Temperaturas del Líquido y del Vapor. N=17

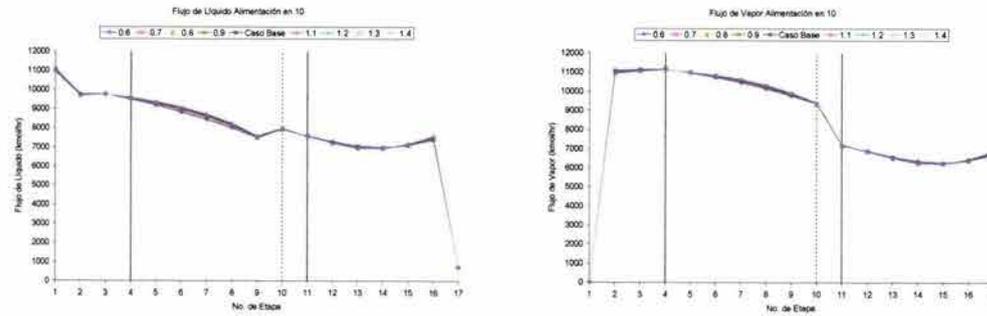


Figura 5.129 Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en los Flujos del Líquido y del Vapor. N=17

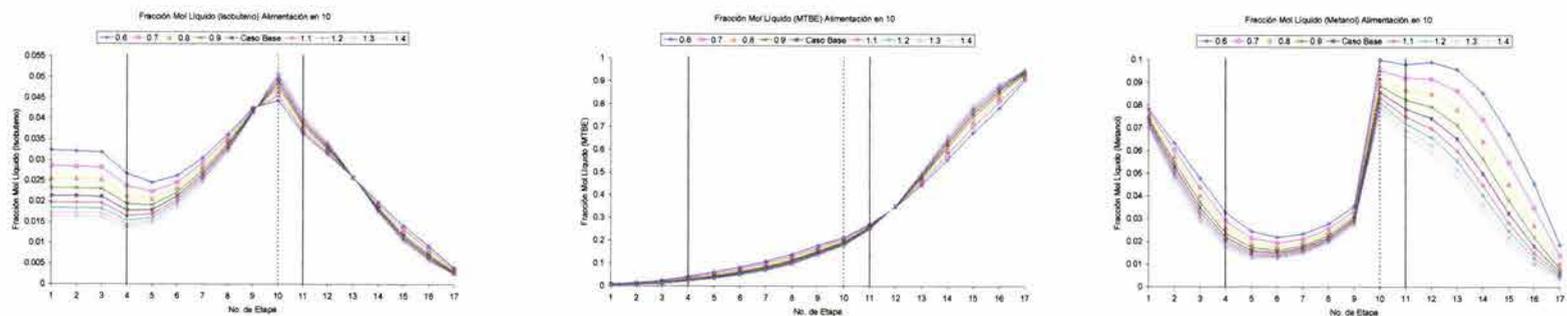


Figura 5.130 Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en las Composiciones del Líquido. N=17

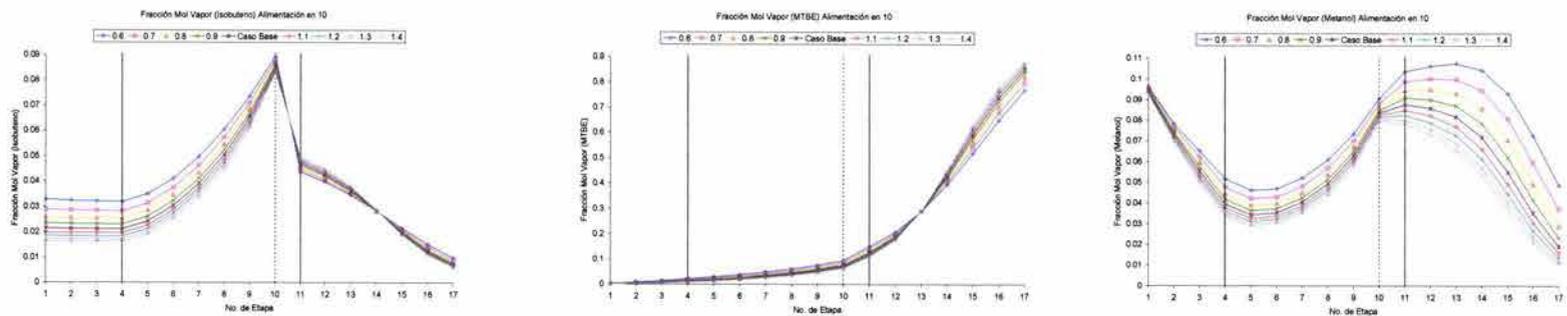


Figura 5.131 Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en las Composiciones del Vapor. N=17

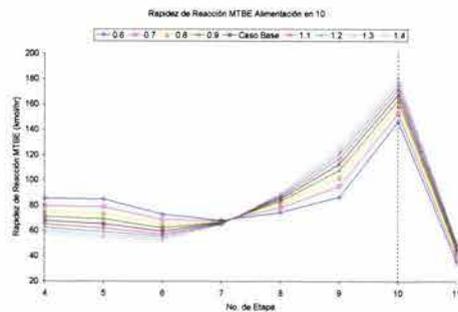


Figura 5.132 Efecto de la variación del Coeficiente de Transferencia de Masa en la Rapidez de Reacción del MTBE. N=17

Al analizar las gráficas se puede ver que, el efecto de variar los coeficientes de transferencia de masa en la conversión es mínimo. Cuando los coeficientes de transferencia de masa valen el 60% de su valor original la conversión es de 93.19%. Pero si los coeficientes valen 140%, la conversión es del 96.58%. Una diferencia de solo 0.03%.

La variación de los coeficientes, tiene también un efecto casi nulo, en las temperaturas y en los flujos de líquido y de vapor.

Sin embargo, al analizar la rapidez de reacción, se puede ver que cuando disminuye el coeficiente de transferencia de masa, en las etapas superiores aumenta la rapidez de reacción, pero en las etapas inferiores la rapidez de reacción disminuye. Por el contrario, si el coeficiente de transferencia de masa aumenta, la rapidez de reacción en las etapas superiores es pequeña, pero en las etapas inferiores la rapidez de reacción aumenta. En la figura 5.132 se puede ver que en las etapas 9, 10 y 11, la rapidez de reacción para todos los casos estudiados es mucho mayor que en las etapas 4 a 8.

Si aumenta la transferencia de masa, la conversión aumenta, porque la rapidez de reacción en las etapas inferiores es mucho mayor que en las etapas superiores.

Con estas simulaciones, se puede ver que los coeficientes de transferencia de masa influyen en el proceso. De manera que, al aumentar la transferencia de masa, los resultados obtenidos serán más parecidos a los del modelo de equilibrio.

El efecto que tiene la transferencia de masa en el proceso, se puede ver en la siguiente figura.

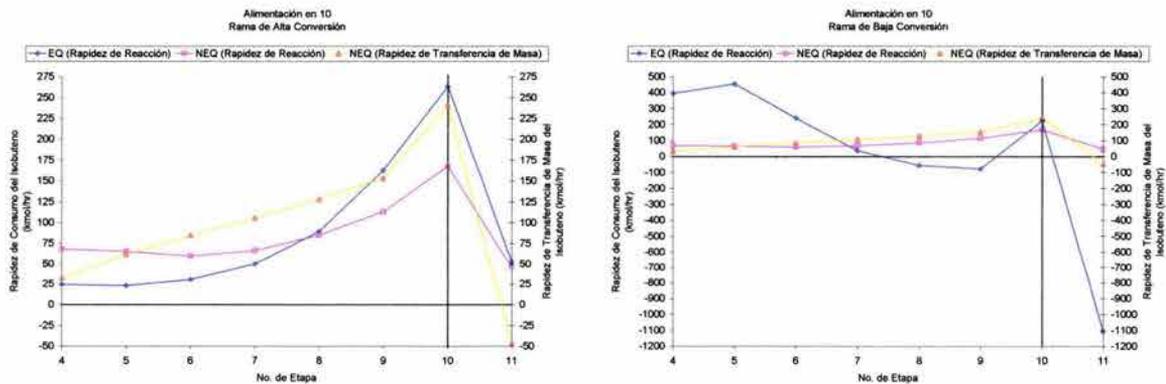


Figura 5.133 Comparación entre la Rapidez de Consumo del Isobuteno y la Rapidez de Transferencia de Masa del Isobuteno para el Modelo de Equilibrio (Rama de Alta y Baja Conversión) y para el Modelo de No Equilibrio

En la figura 5.133 que corresponde a la rama de alta conversión, se puede ver que, la rapidez de transferencia de masa del isobutano es mayor que la rapidez

con la que se consume el isobutano. De manera que para este caso, la transferencia de masa no es un factor limitante.

Por el contrario, en la figura que corresponde a la rama de baja conversión, la rapidez con la que se consume el isobutano es parecida a la transferencia de masa para el modelo de no equilibrio. Pero para el modelo de equilibrio, la rapidez de consumo es mucho mayor que la rapidez de transferencia de masa. Es en este caso donde la transferencia de masa se convierte en el factor limitante del proceso.

Nomenclatura

A	etapa de alimentación
Alta	resultados del modelo de equilibrio rama de alta conversión
Baja	resultados del modelo de equilibrio rama de baja conversión
$C_{p_{mexcla}}$	calor específico [J / kmol K]
EQ Alta	resultados del modelo de equilibrio rama de alta conversión
EQ Baja	resultados del modelo de equilibrio rama de baja conversión
h	coeficiente de transferencia de calor [W / K]
\bar{k}	coeficiente de transferencia de masa binario promedio [kmol / s]
NEQ	resultados del modelo de no equilibrio
NEQ I	resultados del modelo de no equilibrio para la interfase
NEQ L	resultados del modelo de no equilibrio para la fase líquido
NEQ S	resultados del modelo de no equilibrio para el seno del fluido
NEQ V	resultados del modelo de no equilibrio para la fase vapor
Sc	número de Schmidt

6 Conclusiones

La destilación reactiva es una opción que permite llevar a cabo una reacción y una separación al mismo tiempo, lo que provoca que se necesite menos equipo, se aprovechen los reactivos y los servicios suministrados al sistema.

Para modelar la separación se pueden usar 2 modelos, el modelo de etapa en equilibrio y el de etapa en no equilibrio. El modelo de etapa en no equilibrio se basa en los fenómenos fundamentales, por lo que es más riguroso, pero sus desventajas podrían radicar en el número de ecuaciones que se necesitan resolver y en que se necesita la configuración previa de la columna. En cambio el modelo de etapa en equilibrio es un modelo más sencillo, ya que simplifica los fenómenos fundamentales, al considerar que existe un equilibrio termodinámico en cada etapa.

El modelo de equilibrio es más fácil de resolver, pero sus resultados no están apegados a la realidad. Sin embargo, el modelo se puede mejorar usando el concepto de las eficiencias, pero no hay una eficiencia que considere que se está llevando a cabo una reacción química. Por lo que a pesar las desventajas que presenta el modelo de no equilibrio, vale la pena utilizarlo porque se obtienen resultados reales.

En caso de que se tenga una reacción heterogénea, también se debe contar con un modelo que describa adecuadamente la adsorción de los reactivos en el catalizador, su transporte hacia el sitio activo, la rapidez de reacción y el proceso de salida de los productos del catalizador,

En algunos casos, como resultado de la combinación de la reacción química y de la separación, pueden existir MEE. Los MEE tienen implicaciones muy fuertes en la operación y en el control de la columna, ya que una perturbación puede ocasionar que el sistema cambie de una solución a otra.

Para la columna estudiada se observa que únicamente hay MEE cuando las simulaciones se realizan con el modelo de equilibrio. Se obtuvieron 2 soluciones, una que corresponde a una alta conversión del isobuteno (>98%) y otra que corresponde a una baja conversión del isobuteno (<50%).

En la rama de baja conversión, la temperatura y la composición en el líquido del MTBE son mayores que en el caso de la rama de alta conversión.

Para la rama baja conversión, en las etapas superiores de la zona de reacción se forma mucho MTBE, pero en las etapas inferiores debido a la gran cantidad de MTBE que se formó previamente y a las altas temperaturas, la reacción que se lleva a cabo es la de descomposición del MTBE.

En cambio, para la rama de alta conversión y para el modelo de no equilibrio, en las etapas superiores de la zona de reacción se forma muy poco MTBE, de manera que al llegar a las etapas inferiores de la zona de reacción, la cantidad de MTBE presente y las temperaturas, no provocan que la reacción sea de descomposición, como en el caso de la rama de baja conversión, sino que se sigue llevando a cabo la reacción de formación del MTBE.

Si la zona de reacción se mueve a lo largo de la columna, los MEE también cambian. Y si el número de etapas aumenta, el número de MEE también aumenta. Al aumentar el número de etapas, y dejando el reflujo y el flujo de fondos sin cambio, la conversión aumenta.

Una de las opciones para evitar que la columna opere en una zona en donde existan MEE, consiste en alimentar la corriente de 1METANOL antes de la zona de reacción, pero la conversión que se alcanza es de aproximadamente 85%. En cambio si la corriente de 1METANOL se alimenta en la zona de reacción la conversión es de aproximadamente 95%.

Cuando las 2 alimentaciones entran en la misma etapa la conversión disminuye, en comparación con la conversión que se obtiene si las corrientes se alimentan en etapas separadas. Además se observa que después de la zona de reacción aumenta la temperatura, la composición del metanol y la del MTBE para la rama de alta conversión y el modelo de no equilibrio. Este comportamiento que es distinto al observado al alimentar en etapas superiores, es ocasionado por alimentar 2 corrientes en la misma etapa. La manera en la que responde el sistema es aumentando la transferencia de masa del metanol para que pase del líquido al vapor, y de esa manera salga por la corriente del destilado. Con base en lo anterior no es recomendable alimentar las 2 corrientes en la misma etapa.

La rama de baja conversión siempre provocó un aumento en los flujos de líquido y de vapor, para una columna que se vaya a construir o que esté operando, estos datos son importantes pues se tiene que considerar que pasaría en caso de una perturbación, ya que la columna podría estar diseñada para flujos menores (rama de alta conversión) y se podría inundar.

Con el modelo de no equilibrio, se puede estudiar el efecto de la transferencia de masa. Al aumentar la transferencia de masa la conversión aumenta, si la transferencia de masa continua aumentando entonces el modelo de no equilibrio tiende a ser igual al modelo de equilibrio. Si la transferencia de masa disminuye, entonces la conversión también disminuye, esto se debe a que la cantidad de isobuteno y de metanol que pueden reaccionar para formar MTBE es menor.

La transferencia de masa puede ser un factor limitante en la operación de la columna. Cuando se analiza la rama de alta conversión y los resultados del modelo de equilibrio, se observa que la rapidez de consumo del isobuteno es menor que la rapidez de transferencia de masa, en este caso la transferencia de masa no es un factor limitante. Por el contrario, al analizar la rama de baja

conversión, se ve que la rapidez de consumo del isobuteno, es mucho mayor que la rapidez de transferencia de masa del isobuteno, en este caso la transferencia de masa es un factor limitante, porque no se cuenta con la cantidad necesaria de isobuteno para que reaccione y forme MTBE.

El mejor sistema, considerando como el mejor a aquel que tiene una alta conversión y no presenta o tiene un mínimo de MEE, es el de 17 etapas. En los demás sistemas la conversión es alta, pero el número de MEE aumenta.

Los dos modelos pueden ser mejorados si se cuenta con información experimental, ya que los parámetros que utilizan los modelos serían específicos para el sistema de estudio. Para mejorar el modelo de equilibrio, se pueden usar las eficiencias excepto en la zona de reacción. Para el modelo de no equilibrio, se pueden obtener mejores correlaciones que permitan calcular la transferencia de masa, la cual es una parte muy importante del modelo. El problema es que esos parámetros solo pueden ser utilizados en sistemas iguales o muy parecidos, y en caso de realizar un cambio en el sistema, los parámetros se tienen que volver a ajustar que continúen dando información más confiable.

7 Bibliografía

1. AIChE, (1958), "Bubble Tray Design Manual: Prediction of Fractionation Efficiency", AIChE, Estados Unidos.
2. Bao, J., Gao, B., Wu, X., Yoshimoto, M., Nakao, K., (2002), "Simulation of Industrial Catalytic-Distillation Process for Production of Methyl *Tert*-Butyl Ether by Developing User's Model on Aspen Plus Platform", Chem, Eng. J., **90**, 253-266.
3. Baur, R., (2000), "Modeling Reactive Distillation Dynamics", PhD Dissertation, Clarkson University.
4. Baur, R., Higler, A. P., Taylor, R., Krishna, R., (2000), "Comparison of Equilibrium and Nonequilibrium Stage Models for Reactive Distillation", Chem. Eng. J., **76**, 33-47.
5. Baur, R., Taylor, R., Krishna, R., (2000), "Development of a Dynamic Nonequilibrium Cell Model for Reactive Distillation Tray Columns", Chem. Eng. Sci., **55**, 6139-6154.
6. Baur, R., Taylor, R., Krishna, R., (2001), "Dynamic Behaviour of Reactive Distillation Columns Described by a Nonequilibrium Stage Model", Chem. Eng. Sci., **56**, 2085-2102.
7. Baur, R., Taylor, R., Krishna, R., (2001), "Dynamic Behaviour of Reactive Distillation Tray Columns Described with a Nonequilibrium Cell Model", Chem. Eng. Sci., **56**, 1721-1729.
8. Baur, R., Taylor, R., Krishna, R., (2001), "Influence of Column Hardware on the Performance of Reactive Distillation Columns", Catalysis Today, **66**, 225-232.
9. Bennett, D. L., Agrawal, R., Cook, P. J., (1983), "New Pressure Drop Correlation for Sieve Tray Distillation Columns", AIChE J., **29**, 434-442.
10. Bisowarno, B. H., Tian, Y., Tadé, M. O., (2002), "Effects of Separation Stages on ETBE Reactive Distillation Performance", Proceedings of the 9th APCCHE Congress and CHEMECA, Christchurch, Nueva Zelanda.
11. Bravo, J. L., Fair, J. R., (1982), "Generalized Correlation for Mass Transfer in Packed Distillation Columns", Ind. Eng. Chem. Process Des. Devel., **21**, 162-170.
12. Bravo, J. L., Rocha, J. A., Fair, J. R., (1985), "Mass Transfer in Gauze Packings", Hydrocarbon Processing, **64**, (1), 56-60.

13. Chan, H., Fair, J. R., (1984), "Prediction of Point Efficiencies on Sieve Trays", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **23**, 907-913.
14. Chen, G. X., Chuang, K. T., (1993), "Prediction of Efficiencies for Sieve Trays in Distillation", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **32**, 701-708.
15. Chen, F., Huss, R. S., Doherty, M. F., Malone, M. F., (2002), "Multiple Steady States in Reactive Distillation: Kinetic Effects", *Comput. Chem. Eng.*, **26**, 81-93.
16. Chen, F., Huss, R. S., Malone, M. F., Doherty, M. F., (2000), "Simulation of Kinetic Effects in Reactive Distillation", *Comput. Chem. Eng.*, **24**, 2457-2472.
17. Ciric, A. R., Miao, P., (1994), "Steady State Multiplicities in an Ethylene Glycol Reactive Distillation Column", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **33**, 2738-2748.
18. Cussler, J. L., (1997), "Diffusion Mass Transfer in Fluid Systems", 2da. Edición, Cambridge University Press, Estados Unidos.
19. Eldarsi, H. S., Douglas, P. L., (1998), "Methyl-Tert-Butyl-Ether Catalytic Distillation Column Part I: Multiple Steady States", *Trans IChemE, parte A*, **76**, 509-516.
20. Hauan, S., Hertzberg, T., Lien, K. M., (1995), "Why Methyl *tert*-Butyl Ether Production by Reactive Distillation May Yield Multiple Solutions", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **34**, 987-991.
21. Hauan, S., Hertzberg, T., Lien, K. M., (1997), "Multiplicity in Reactive Distillation of MTBE", *Comput. Chem. Eng.*, **21**, 1117-1124.
22. Hauan, S., Schrans, M. S., Lien, M. K., (1997), "Dynamic Evidence of the Multiplicity Mechanism in Methyl *tert*-Butyl Ether Reactive Distillation", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 3995-3998.
23. Higler, A. P., Taylor, R., Krishna, R., (1999), "Nonequilibrium Modeling of Reactive Distillation: Multiple Steady States in MTBE Synthesis", *Chem. Eng. Sci.*, **54**, 1389-1395.
24. Higler, A. P., Taylor, R., Krishna, R., (1999), "The Influence of Mass Transfer and Mixing on the Performance of a Tray Column for Reactive Distillation", *Chem. Eng. Sci.*, **54**, 2873-2881.
25. Higler, A., Krishna, R., Taylor, R., (2000), "Nonequilibrium Modeling of Reactive Distillation: A Dusty Fluid Model for Heterogeneously Catalyzed Processes", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **39**, 1596-1607.

26. Higler, A., Taylor, R., Krishna, R., (1998), "Modeling of a Reactive Separation Process Using a Nonequilibrium Stage Model", *Comput. Chem. Eng.*, **22**, S111-S118.
27. Hugmark, G. A., (1971), "Methods for Vapour Phase and Liquid Phase Mass Transfer on Distillation Trays", *AIChE J.*, **17**.
28. Huss, R. S., Chen, F., Malone, M. F., Doherty, M. F., (2003), "Reactive Distillation for Methyl Acetate Production", *Comput. Chem. Eng.*, **27**, 1855-1866.
29. Ihm, S., Ahn, J., Jo, Y., (1996), "Interaction of Reaction and Mass Transfer in Ion-Exchange Resin Catalysts", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **35**, 2946-2954.
30. Isla, M. A., Irazoqui, H. A., (1996), "Modeling, Analysis and Simulation of a Methyl *tert*-Butyl Ether Reactive Distillation Column", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **35**, 2696-2708.
31. Jacobs, R., Krishna, R., (1993), "Multiple Solutions in Reactive Distillation for Methyl *tert*-Butyl Ether Synthesis", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **32**, 1706-1709.
32. Jacobsen, E. W., Skogestad, S., (1995), "Multiple Steady States and Instability in Distillation. Implications for Operation and Control", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **34**, 4395-4405.
33. Kenig, E. Y., Butzmann, F., Kucka, L., Górak, A., (2000), "Comparison of Numerical and Analytical Solutions of a Multicomponent Reaction-Mass-Transfer Problem in Terms of the Film Model", *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 1483-1496.
34. Kenig, E. Y., Wiesner, U., Górak, A., (1997), "Modeling of Reactive Absorption Using the Maxwell-Stefan Equations", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 4325-4334.
35. Krishna, R., (2002), "Reactive Separations: More Ways to Skin a Cat", *Chem. Eng. Sci.*, **57**, 1491-1504.
36. Krishna, R., Wesselingh, J. A., (1997), "The Maxwell-Stefan Approach to Mass Transfer", *Chem. Eng. Sci.*, **52**, 861-911.
37. Krishnamurty, R., Taylor, R., (1985), "A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. I: Model Design and Method of Solution", *AIChE J.*, **31**, 449-456.
38. Krishnamurty, R., Taylor, R., (1985), "A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. II: Comparison with Experiment", *AIChE J.*, **31**, 456-465.

39. Krishnamurty, R., Taylor, R., (1985), "A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. III: The Influence of Unequal Component-Efficiencies in Process Design Problems", *AIChE J.*, **31**, 1973-1985.
40. Lee, J. H., Dudukovic, M. P., (1998), "A Comparison of the Equilibrium and Nonequilibrium Models for a Multicomponent Reactive Distillation Column", *Comput. Chem. Eng.* **23**, 159-172.
41. Mohl, K. D., Kienle, A., Gilles, E. D., Rapmund, P., Sundmacher, K., Hoffmann, U., (1999), "Steady-State Multiplicities in Reactive Distillation Columns for the Production of Fuel Ethers MTBE and TAME: Theoretical Analysis and Experimental Verification", *Chem. Eng. Sci.*, **54**, 1029-1043.
42. Müller, N. P., Segura, H., (2000), "An Overall Rate-Based Stage Model for Cross Flow Distillation Columns", *Chem. Eng. Sci.*, **55**, 2515-2528.
43. Okur, H., Bayramoglu, M., (2001), "The Effect of the Liquid-Phase Activity Model on the Simulation of Ethyl Acetate Production by Reactive Distillation", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **40**, 3639-3646.
44. Onda, K., Takeuchi, H., Okumoto, Y., (1968), "Mass Transfer Coefficients Between Gas and Liquid Phases in Packed Columns", *J. Chem. Eng. Jpn.*, **1**, 56-62.
45. Peng, J., Edgar, T. F., Eldridge, R. B., (2003), "Dynamic Rate-Based and Equilibrium Models for a Packed Reactive Distillation Column", *Chem., Eng. Sci.*, **58**, 2671-2680.
46. Peng, J., Lextrait, S., Edgar, T. F., Eldridge, R. B., (2002), "A Comparison of Steady-State Equilibrium and Rate-Based Models for Packed Reactive Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **41**, 2735-2744.
47. Pilavachi, P. A., Schenk, M., Perez-Cisneros, E., Gani, R., (1997), "Modeling and Simulation of Reactive Distillation Operations", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 3188-3197.
48. Powers, M. F., Vickeryt, D. J., Arehole, A., Taylor, R., (1988), "A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. V: Computational Methods for Solving the Model Equations", *Comput. Chem. Eng.*, **12**, 1229-1241.
49. Rehfinger, A., Hoffmann, U., (1990), "Kinetics of Methyl Tertiary Butyl Ether Liquid Phase Synthesis Catalyzed by Ion Exchange Resin-I. Intrinsic Rate Expression in Liquid Phase Activities", *Chem. Eng. Sci.*, **45**, 1605-1617.

50. Rocha, J. A., Bravo, J. L., Fair, J. R., (1996), "Distillation Columns Containing Structured Packings: A Comprehensive Model for Their Performance. 2. Mass-Transfer Model", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **35**, 1660-1667.
51. Scenna, N. J., Benz, S. J., (2003), "Start-up Operation of Reactive Columns with Multiple Steady States: The Ethylene Glycol Case", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **42**, 873-882.
52. Seader, J. D., (1989), "The Rate-Based Approach for Modeling Stages Separations", *Chemical Engineering Progress*, **85**, (10), 41-49.
53. Seader, J. D., Henley, E. J., (1998), "Separation Process Principles", John Wiley & Sons, Estados Unidos.
54. Şentarli, I., Hortaçsu, A., (1987), "Solution of the Linearized Equations of Multicomponent Mass Transfer with Chemical Reaction and Convection for a Film Model", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **26**, 2409-2413.
55. Sneesby, M. G., (1998), "Simulation and Control of Reactive Distillation", PhD Thesis, Curtin University of Technology.
56. Sneesby, M. G., Tadé, M. O., Datta, R., Smith, T. N., (1997), "ETBE Synthesis via Reactive Distillation. 1. Steady-State Simulation and Design Aspects", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 1855-1869.
57. Sneesby, M. G., Tadé, M. O., Smith, T. N., (1998), "Mechanistic Interpretation of Multiplicity in Hybrid Reactive Distillation: Physically Realizable Cases", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **37**, 4424-4433.
58. Sneesby, M. G., Tadé, M. O., Smith, T. N., (1998), "Steady-State Transitions in the Reactive Distillation of MTBE", *Comput. Chem. Eng.*, **22**, 879-892.
59. Sundmacher, K., Hoffmann, U., (1996), "Development of a New Catalytic Distillation Process for Fuel Ethers via a Detailed Nonequilibrium Model", *Chem. Eng. Sci.*, **51**, 2359-2368.
60. Tanskanen, J., Pohjola, V. J., (2000), "A Robust Method for Predicting State Profiles in a Reactive Distillation", *Comput. Chem. Eng.*, **24**, 81-88.
61. Taylor, R., Kooijman, H. A., Hung, J. S., (1994), "A Second Generation Nonequilibrium Model for Computer Simulation of Multicomponent Separation Processes" *Comput. Chem. Eng.*, **18**, 205-217.
62. Taylor, R., Krishna, R., (1993), "Multicomponent Mass Transfer", John Wiley & Sons Inc., Estados Unidos.

63. Taylor, R., Krishna, R., (2000), "Modeling Reactive Distillation", Chem. Eng. Sci., **55**, 5183-5229.
64. Taylor, R., Krishna, R., Kooijman, H., (2003), "Real-World Modeling of Distillation", Chemical Engineering Progress, **99**, (07), 28-39.
65. Tuchlenski, A., Beckmann, A., Reusch, D., Düssel, R., Weidlich, U., Janowsky, R., (2001), "Reactive Distillation – Industrial Applications, Process Design & Scale-Up", Chem. Eng. Sci., **56**, 387-394.
66. Venkataraman, S., Chan, W. K., Boston, J. F., (1990), "Reactive Distillation Using Aspen Plus", Chemical Engineering Progress, **86**, (08), 45-54.
67. Wesselingh, J. A., (1997), "Non-Equilibrium Modeling of Distillation", Trans. IChemE., parte A, **75**, 529-538.
68. Wesselingh, J. A., Krishna, R., (2000), "Mass Transfer in Multicomponent Mixtures", Delft University Press, Holanda.
69. Zuidweg, F. J., (1982), "Sieve Trays – A View on the State of the Art", Chem. Eng. Sci., **37**, 1441-1461.

Apéndice A

Archivo Input de Aspen Plus 9.3 usado para la simulación del Modelo de Etapa en Equilibrio. La columna cuenta con 17 etapas y la reacción es de la etapa 4 a la 11.

```
TITLE 'Modelo de Equilibrio 17 Etapas'

IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='MMKCAL/HR' &
      HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
      VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
      MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KCAL/MOL' &
      MASS-ENTHALP='KCAL/KG' HEAT=MMKCAL MOLE-CONC='MOL/L' &
      PDROP=BAR

DEF-STREAMS CONVEN ALL

RUN-CONTROL MAX-FORT-ERR=50

DATABANKS PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC / &
      NOASPENPCD

PROP-SOURCES PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC

COMPONENTS
      I-BUTENO C4H8-5 I-BUTENO /
      N-BUTENO C4H8-1 N-BUTENO /
      MTBE C5H12O-D2 MTBE /
      METANOL CH4O METANOL

FLOWSHEET
      BLOCK B1 IN=1METANOL 2BUTENOS OUT=3DEST 4FONDOS

PROPERTIES UNIFAC

PROP-SET PS-1 GAMMA SUBSTREAM=MIXED PHASE=L

STREAM 1METANOL
      SUBSTREAM MIXED TEMP=320 <K> PRES=11 <ATM>
      MOLE-FLOW METANOL 215.5 <MOL/SEC>

STREAM 2BUTENOS
      SUBSTREAM MIXED TEMP=350 <K> PRES=11 <ATM>
      MOLE-FLOW I-BUTENO 195 <MOL/SEC> / N-BUTENO 354 <MOL/SEC>

BLOCK B1 RADFRAC
      PARAM NSTAGE=17 ALGORITHM=NONIDEAL MAXOL=200 MAXIL=40
      FEEDS 1METANOL 10 / 2BUTENOS 11
      PRODUCTS 3DEST 1 L / 4FONDOS 17 L
      P-SPEC 1 11 <ATM>
      COL-SPECS MOLE-RDV=0 MOLE-B=197 <MOL/SEC> MOLE-RR=7
      REAC-STAGES 4 11 RSU
      HOLD-UP 4 11 MASS-LHLDLP=1000
      T-EST 2 67 / 11 77 / 16 127
```

```
X-EST 17 MTBE 0.9
Y-EST 17 MTBE 0.9
TRAY-REPORT TRAY-OPTION=ALL-TRAYS PROPERTIES=PS-1
```

SENSITIVITY S-1

```
PARAM BASE-CASE=NO
DEFINE EI MOLE-FLOW STREAM=2BUTENOS SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=I-BUTENO
DEFINE DI MOLE-FLOW STREAM=3DEST SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=I-BUTENO
DEFINE FI MOLE-FLOW STREAM=4FONDOS SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=I-BUTENO
DEFINE XMTBE MOLE-FRAC STREAM=4FONDOS SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=MTBE
DEFINE DMTBE MOLE-FLOW STREAM=3DEST SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=MTBE
DEFINE FMTBE MOLE-FLOW STREAM=4FONDOS SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=MTBE
TABULATE 1 "XMTBE" COL-LABEL="XMOL"
TABULATE 2 "(EI-DI-FI)/EI*100" COL-LABEL="CONV"
TABULATE 3 "DMTBE" COL-LABEL="DEST"
TABULATE 4 "FMTBE" COL-LABEL="FONDO"
TABULATE 5 "DMTBE+FMTBE" COL-LABEL="SUMA"
VARY BLOCK-VAR BLOCK=B1 VARIABLE=STAGE SENTENCE=FEEDS &
  ID1=1METANOL
RANGE LOWER="2" UPPER="16" INCR="1"
```

STREAM-REPOR MOLEFLOW MOLEFRAC

REACTIONS RSU REAC-DIST

```
IN-UNITS SI
PARAM SUBROUTINE=RVU3
REAC-DATA 1 KINETIC
STOIC 1 METANOL -1 / I-BUTENO -1 / MTBE 1
;
;
;
;
;
```

Apéndice B

Archivo Input de Aspen Plus 9.3 usado para la simulación del Modelo de Etapa en No Equilibrio. La columna cuenta con 17 etapas y la reacción es de la etapa 4 a la 11.

```
TITLE 'Modelo de No Equilibrio 17 Etapas'

IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='MMKCAL/HR' &
    HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
    VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
    MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KCAL/MOL' &
    MASS-ENTHALP='KCAL/KG' HEAT=MMKCAL MOLE-CONC='MOL/L' &
    PDROP=BAR

DEF-STREAMS CONVEN ALL

RUN-CONTROL MAX-FORT-ERR=50

DATABANKS PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC / &
    NOASPENPCD

PROP-SOURCES PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC

COMPONENTS
    I-BUTENO C4H8-5 I-BUTENO /
    1BUTENO C4H8-1 1BUTENO /
    MTBE C5H12O-D2 MTBE /
    METANOL CH4O METANOL

FLOWSHEET
    BLOCK B1 IN=1METANOL 2BUTENOS OUT=3DESTILA 4FONDOS

PROPERTIES UNIFAC

PROP-SET PS-1 GAMMA SUBSTREAM=MIXED PHASE=L

STREAM 1METANOL
    SUBSTREAM MIXED TEMP=320 <K> PRES=11 <ATM>
    MOLE-FLOW METANOL 215.5 <MOL/SEC>

STREAM 2BUTENOS
    SUBSTREAM MIXED TEMP=350 <K> PRES=11 <ATM>
    MOLE-FLOW I-BUTENO 195 <MOL/SEC> / 1BUTENO 354 <MOL/SEC>

BLOCK B1 RATEFRAC
    PARAM NCOL=1 INIT-MAXIT=50 INIT-OPTION=CHEMICAL &
        L-TRANS=LINEAR TOT-SEGMENT=17
    COL-CONFIG 1 17
    TRAY-SPECS 1 2 3 NTRAYS=2 TRAY-TYPE=SIEVE &
        COL-DIAM=10 <METER>
    TRAY-SPECS 1 12 16 NTRAYS=5 TRAY-TYPE=SIEVE &
        COL-DIAM=10 <METER>
```

```

PACK-SPECS 1 4 11 HTPACK=0.7 PACK-ARRANGE=RANDOM &
  PACK-TYPE=RASCHIG PACK-MAT=CERAMIC PACK-DIM="0.25-IN" &
  PACK-SIZE=6.35000E-3 SPAREA=7.119400 PACK-FACTOR=52.49280 &
  PACK-TENSION=61.00000 COL-DIAM=13.5 <METER> &
  MASS-LHLDP=1000 VOID-FRACTIO=0.62
FEEDS 1METANOL 1 1 / 2BUTENOS 1 11
PRODUCTS 3DESTILA 1 1 L / 4FONDOS 1 17 L
P-SPEC 1 1 11 <ATM>
COL-SPECS 1 MOLE-RDV=0 MOLE-RR=7 MOLE-B=197 <MOL/SEC>
TLIQ-EST 1 2 74.7 / 1 4 76.2 / 1 5 76.5 / 1 10 &
  80.1 / 1 11 83.8 / 1 16 148
MOLE-L-EST 1 2 9610 / 1 4 9685 / 1 5 9596 / 1 10 &
  8290 / 1 11 7899 / 1 16 7711
MOLE-V-EST 1 2 10784 / 1 4 11071 / 1 5 11057 / 1 &
  10 9680 / 1 11 7528 / 1 16 6737
X-EST 1 17 MTBE 0.9
Y-EST 1 17 MTBE 0.9
REPORT INT-PROFILE FLOOD-INFO MASS-RATES REAC-RATES
SEGMENT-REPO SEGMENT-OPTI=ALL-SEGMENTS PROPERTIES=PS-1
REAC-SEGMENT 1 4 11 RSUB

```

SENSITIVITY S-1

```

PARAM BASE-CASE=NO
DEFINE XMT MOLE-FRAC STREAM=4FONDOS SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=MTBE
DEFINE EI MOLE-FLOW STREAM=2BUTENOS SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=I-BUTENO
DEFINE DI MOLE-FLOW STREAM=3DESTILA SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=I-BUTENO
DEFINE FI MOLE-FLOW STREAM=4FONDOS SUBSTREAM=MIXED &
  COMPONENT=I-BUTENO
TABULATE 1 "XMT" COL-LABEL="XMOL"
TABULATE 2 "(EI-DI-FI)/EI*100" COL-LABEL="CONV"
VARY BLOCK-VAR BLOCK=B1 VARIABLE=SEGMENT SENTENCE=FEEDS &
  ID1=1METANOL
RANGE LOWER="16" UPPER="2" INCR="-1"

```

STREAM-REPOR MOLEFLOW MOLEFRAC

REACTIONS RSUB REAC-DIST

```

IN-UNITS SI
PARAM SUBROUTINE=RNE3
REAC-DATA 1 KINETIC
STOIC 1 I-BUTENO -1 / METANOL -1 / MTBE 1

```

```

;
;
;
;
;

```

Apéndice C

Subrutina en lenguaje Fortran para calcular la rapidez de reacción para el Modelo de Etapa en Equilibrio.

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
C
C calculation of MTBE synthesis reaction rate
C User Kinetics Subroutine for RADFRAC
C SUBROUTINE RVU3 (NSTAGE, NCOMP, NR, NRL, NRV,
2 T, TLIQ, TVAP, P, VF,
3 F, X, Y, IDX, NBOPST,
4 KDIAG, STOIC, IHLBAS, HLDLIQ, TIMLIQ,
5 IHVBAS, HLDVAP, TIMVAP, NINT, INT,
6 NREAL, REAL, RATES, RATEL, RATEV,
7 NINTB, INTB, NREALB, REALB, NIWORK,
8 IWORK, NWORK, WORK)
C
C VARIABLES IN ARGUMENT LIST
C
C VARIABLE I/O TYPE DIMENSION DESCRIPTION AND RANGE
C NSTAGE I I - STAGE NUMBER
C NCOMP I I - NUMBER OF COMPONENTS
C NR I I - TOTAL NUMBER OF KINETIC
C REACTIONS
C NRL I I - NUMBER OF LIQUID PHASE
C KINETIC REACTIONS
C NRV I I - NUMBER OF VAPOR PHASE
C KINETIC REACTIONS
C T I R - STAGE TEMPERATURE (K)
C TLIQ I R - LIQUID TEMPERATURE (K)
C * USED ONLY BY RATEFRAC **
C TVAP I R - VAPOR TEMPERATURE (K)
C * USED ONLY BY RATEFRAC **
C P I R - STAGE PRESSURE (N/SQ.M)
C VF I R - VAPOR FRACTION
C F I R - TOTAL FLOW ON STAGE
C (VAPOR+LIQUID) (KMOL/SEC)
C X I R NCOMP,3 LIQUID MOLE FRACTION
C Y I R NCOMP VAPOR MOLE FRACTION
C IDX I I NCOMP COMPONENT INDEX VECTOR
C NBOPST I I 6 OPTION SET BEAD POINTER
C KDIAG I I - LOCAL DIAGNOSTIC LEVEL
C STOIC I R NCOMP,NR REACTION STOICHIOMETRY
C IHLBAS I I - BASIS FOR LIQUID
C HOLDUP SPECIFICATION
C 1:VOLUME,2:MASS,3:MOLE
C HLDLIQ I R - LIQUID HOLDUP
C IHLBAS UNITS
C 1 CU.M.
C 2 KG
C 3 KMOL
C TIMLIQ I R - LIQUID RESIDENCE TIME
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

Apéndice C

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
C
C          IHVBAS      I      I      -      (SEC)
C          BASIS FOR VAPOR
C          HOLDUP SPECIFICATION
C          1:VOLUME,2:MASS,3:MOLE
C          HLDVAP      I      R      -      VAPOR HOLDUP
C          IHVBAS      UNITS
C          1          CU.M.
C          2          KG
C          3          KMOL
C          TIMVAP      I      R      -      VAPOR RESIDENCE TIME (SEC)
C          NINT        I      I      -      LENGTH OF INTEGER VECTOR
C          INT         I/O    I      NINT    INTEGER VECTOR
C          NREAL       I      I      -      LENGTH OF REAL VECTOR
C          REAL        I/O    R      NREAL   REAL VECTOR
C          RATES       O      R      NCOMP   COMPONENT REACTION RATES
C          (KMOL/SEC)
C          RATEL       O      R      NRL     INDIVIDUAL REACTION RATES
C          IN THE LIQUID PHASE
C          (KMOL/SEC)
C          * USED ONLY BY RATEFRAC **
C          RATEV       O      R      NRV     INDIVIDUAL REACTION RATES
C          IN THE VAPOR PHASE
C          (KMOL/SEC)
C          * USED ONLY BY RATEFRAC **
C          NINTB      I      I      -      LENGTH OF INTEGER VECTOR
C          (FROM UOS BLOCK)
C          INTB       I/O    I      NINTB   INTEGER VECTOR
C          (FROM UOS BLOCK)
C          NREALB     I      I      -      LENGTH OF REAL VECTOR
C          (FROM UOS BLOCK)
C          REALB      I/O    R      NREALB  REAL VECTOR
C          (FROM UOS BLOCK)
C          NIWORK     I      I      -      LENGTH OF INTEGER WORK
C          VECTOR
C          IWORK      I/O    I      NIWORK  INTEGER WORK VECTOR
C          NWORK      I      I      -      LENGTH OF REAL WORK VECTOR
C          WORK       I/O    R      NWORK   REAL WORK VECTOR
C
C*****
C          IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
C
C          EL ORDEN DEBE SER EL MISMO EN EL QUE ESTAN EN ASPEN
C
C          PARAMETER(K_IBUTILEN=1)
C          PARAMETER(K_1BUTENE=2)
C          PARAMETER(K_MTBE=3)
C          PARAMETER(K_METANOL=4)
C          PARAMETER(N_COMP=4)
C
C          DIMENSION X(NCOMP,3), Y(NCOMP), IDX(NCOMP), NBOPST(6),
2          STOIC(NCOMP,NR), INT(NINT), REAL(NREAL),
3          RATES(NCOMP), RATEL(NRL), RATEV(NRV), INTB(NINTB),
4          REALB(NREALB), IWORK(NIWORK), WORK(NWORK)
C
C Variables dentro del proceso
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
C
      DIMENSION XPHI(N_COMP),PHI(N_COMP),DPHI(N_COMP),ACTIV(N_COMP)
C*****
      COMMON /USER/ RMISS,  IMISS,  NGBAL, IPASS, IRESTR,
2          ICONVG, LMSG,  LPMSG, KFLAG, NHSTRY,
3          NRPT,  NTRMNL, ISIZE
C Conveniently stores run time control flags
C*****
C*****
      COMMON /MAXWRT/ MAXBUF
      CHARACTER*80 MAXBUF(20)
C Used to write to the Terminal File or to the Control Panel
C*****
C*****
      COMMON /PLEX/IB(1)
      DIMENSION B(1)
      EQUIVALENCE(B(1),IB(1))
C The lengthy in-core storage area for the PLEX. Consists of integer and
C real arrays equivalenced to each other. Length depends on problem
C size. The length can change (grow) during program execution.
C*****
C
      COMMON /IPOFF3/IPOFF3(1)
C
C DATA IDBG sirve para mostrar el resultado de los calculos que se
C van haciendo en la pantalla
C Si es igual a 0 no se muestran los resultados, cualquier otro
C valor muestra los resultados
C DATA IDBG/0/
C
C*****
C
C VALORES DEL ARTICULO
C KINETICS OF METHYL TERTIARY BUTYL ETHER LIQUID PHASE
C SYNTHESIS CATALYZED BI ION EXCHANGE RESIN-I. INTRINSIC RATE
C EXPRESSION IN LIQUID PHASE ACTIVITIES
C REHFINGER,A., HOFFMANN, U., CHEMICAL ENGINEERING SCIENCE
C VOL. 45, No. 6 PP. 1605-1617, 1990.
C
      TZERO = 298.15D+00
      C1 = -1.49277D+03
      C2 = -7.74002D+01
      C3 = 5.07563D-01
      C4 = -9.12739D-04
      C5 = 1.10649D-06
      C6 = -6.27996D-10
      FT = C1*((1.D+00/T) - (1.D+00/TZERO))
*      + C2*DLOG(T/TZERO)
*      + C3*(T-TZERO)
*      + C4*((T*T) - (TZERO*TZERO))
*      + C5*((T*T*T) - (TZERO*TZERO*TZERO))
*      + C6*((T*T*T*T) - (TZERO*TZERO*TZERO*TZERO))
C
C FT NO TIENE UNIDADES [-]
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
C
    DKA=2.84D+02*DEXP(FT)
C
C    DKA NO TIENE UNIDADES [-]
C
C    reaction rate constant
C    =====
C    DKR = 243.8D+00*DEXP((-9.24D+04/8.31451)*((1.D+00/T)-(1.D+00/
*      363.15D+00)))
C
C    UNIDADES DE DKR = [mmol / s eq]
C
C    IF(IDBG.GE.1) THEN
C      WRITE(MAXBUF(1),9010) FT,DKA,DKR
C      CALL WRTRM(1)
C    ENDIF
9010 FORMAT(1X,3(G13.6,1X))
C
C    CALCULO DE LOS COEFICIENTES DE FUGACIDAD PARA CALCULAR LA
C    ACTIVIDAD
C
C    DO J=1,NCOMP
C      XPHI(J)=X(J,1)
C    end do
C    KPHI=1
C
C    CALL FUGLY(T,P,XPHI,Y,NCOMP,IDX,NBOPST,KDIAG,KPHI,PHI,DPHI,KER)
C    IF(KER.NE.0) THEN
C      WRITE(MAXBUF(1),9000) T,P,KER
C      CALL WRTRM(1)
C    ENDIF
9000 FORMAT(' fugly failed at T=',G12.5,' P=',G12.5,' ker=',I4)
C
C    set offset to get activity coefficients
C
C    L_GAMMA=IPOFF3(24)
C
C    calculate activities for plex data
C    DO J=1,NCOMP
C      ACTIV(J)=DEXP(B(L_GAMMA+J))*X(J,1)
C    END DO
C    IF(IDBG.GE.1) THEN
C      DO J=1,NCOMP
C        WRITE(MAXBUF(1),9020) J,X(J,1),ACTIV(J)
C        CALL WRTRM(1)
C      END DO
C    ENDIF
9020 FORMAT(' compo ',I3,' mole-frac=',G12.5,' activity=',G12.5)
C
C    ACTIVIDAD --> FRACCION MOL POR EL COEFICIENTE DE ACTIVIDADC
C    RAPIDEZ DE REACCION
C    Q = [eq/kgcata]
C    DKR = [mmol / s eq]
C    RATE = [mmol / kgcata s]
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
C
  Q=4.9D+00
  RATE=Q*DKR*
  *      (ACTIV(K_IBUTILEN)/ACTIV(K_METANOL)
  *      -ACTIV(K_MTBE)/DKA/ACTIV(K_METANOL)**2)
C
C  LA ACUMULACION, MASS HOLDUP SE USA COMO KGCATA
C
  RATNET=RATE*HLDLIQ*1.D-06
C
  RATNET=[mmol/kgcata*s]*[kgcata]*[1mol/1000mmol]*[1kmol/1000mol]
C
  RATES(K_IBUTILEN)=-RATNET
  RATES(K_METANOL)=-RATNET
  RATES(K_MTBE)=RATNET
  RATES(K_1BUTENE)=0.D+00
C
  IF(IDBG.GE.1) THEN
    WRITE(MAXBUF(1),9030) NSTAGE,RATE,RATNET
    CALL WRTRM(1)
  ENDIF
9030 FORMAT(' stage=',I4,' spec-rate=',G12.5,' net-rate=',G12.5)
  RETURN
  END

```

Apéndice D

Subrutina en lenguaje Fortran para calcular la rapidez de reacción para el Modelo de Etapa en No Equilibrio.

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
C
C   calculation of MTBE synthesis reaction rate
C   User Kinetics Subroutine for RATEFRAC
C   SUBROUTINE RNE3   (NSTAGE, NCOMP,  NR,      NRL,      NRV,
2      T,            TLIQ,   TVAP,   P,        VF,
3      F,            X,      Y,      IDX,     NBOPST,
4      KDIAG,   STOIC,   IHLBAS, HLDLIQ, TIMLIQ,
5      IHVBAS, HLDVAP,  TIMVAP, NINT,   INT,
6      NREAL,  REAL,    RATES,  RATEL,  RATEV,
7      NINTB,  INTB,    NREALB, REALB,  NIWORK,
8      IWORK,  NWORK,  WORK)
C*****
C   IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
C
C   EL ORDEN DEBE SER EL MISMO EN EL QUE ESTAN EN ASPEN
C
C   PARAMETER(K_IBUTILEN=1)
C   PARAMETER(K_1BUTENE=2)
C   PARAMETER(K_MTBE=3)
C   PARAMETER(K_METANOL=4)
C   PARAMETER(N_COMP=4)
C
C   DIMENSION X(NCOMP,3), Y(NCOMP), IDX(NCOMP), NBOPST(6),
2      STOIC(NCOMP,NR), INT(NINT), REAL(NREAL),
3      RATES(NCOMP), RATEL(NRL), RATEV(NRV), INTB(NINTB),
4      REALB(NREALB), IWORK(NIWORK), WORK(NWORK)
C
C Variables dentro del proceso
C
C   DIMENSION XPHI(N_COMP), PHI(N_COMP), DPHI(N_COMP), ACTIV(N_COMP)
C   COMMON /USER/ RMISS,  IMISS,  NGBAL, IPASS,  IRESTR,
2      ICONVG, LMSG,    LPMSG, KFLAG, NHSTRY,
3      NRPT,   NTRMNL, ISIZE
C   COMMON /MAXWRT/ MAXBUF
C   CHARACTER*80 MAXBUF(20)
C   COMMON /PLEX/IB(1)
C   DIMENSION B(1)
C   EQUIVALENCE(B(1),IB(1))
C
C   COMMON /IPOFF3/IPOFF3(1)
C
C   DATA IDBG/0/
C
C   TZERO = 298.15D+00
C   C1 = -1.49277D+03
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
  C2 = -7.74002D+01
  C3 = 5.07563D-01
  C4 = -9.12739D-04
  C5 = 1.10649D-06
  C6 = -6.27996D-10
  FT = C1*((1.D+00/TLIQ)-(1.D+00/TZERO))
  *   + C2*DLOG(TLIQ/TZERO)
  *   + C3*(TLIQ-TZERO)
  *   + C4*((TLIQ*TLIQ)-(TZERO*TZERO))
  *   + C5*((TLIQ*TLIQ*TLIQ)-(TZERO*TZERO*TZERO))
  *   + C6*((TLIQ*TLIQ*TLIQ*TLIQ)-(TZERO*TZERO*TZERO*TZERO))

C
C   FT NO TIENE UNIDADES [-]
C
C   DKA=2.84D+02*DEXP(FT)
C
C   DKA NO TIENE UNIDADES [-]
C
C   reaction rate constant
C   =====
C   DKR = 243.8D+00*DEXP((-9.24D+04/8.31451)*((1.D+00/TLIQ)-(1.D+00/
*     363.15D+00)))
C
C   UNIDADES DE DKR = [mmol / s eq]
C
C   IF(IDBG.GE.1) THEN
C     WRITE(MAXBUF(1),9010) FT,DKA,DKR
C     CALL WRTRM(1)
C   ENDIF
9010 FORMAT(1X,3(G13.6,1X))
C
C   CALCULO DE LOS COEFICIENTES DE FUGACIDAD PARA CALCULAR LA
C   ACTIVIDAD
C
C   DO J=1,NCOMP
C     XPHI(J)=X(J,1)
C   end do
C   KPHI=1
C
C   CALL FUGLY(TLIQ,P,XPHI,Y,NCOMP,IDX,NBOPST,KDIAG,KPHI,PHI,DPHI,KER)
C   IF(KER.NE.0) THEN
C     WRITE(MAXBUF(1),9000) TLIQ,P,KER
C     CALL WRTRM(1)
C   ENDIF
9000 FORMAT(' fugly failed at T=',G12.5,' P=',G12.5,' ker=',I4)
C
C   set offset to get activity coefficients
C
C   L_GAMMA=IPOFF3(24)
C
C   calculate activities for plex data
C   DO J=1,NCOMP
C     ACTIV(J)=DEXP(B(L_GAMMA+J))*X(J,1)
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
  END DO
  IF (IDBG.GE.1) THEN
    DO J=1,NCOMP
      WRITE (MAXBUF(1),9020) J,X(J,1),ACTIV(J)
      CALL WRTRM(1)
    END DO
  ENDIF
9020 FORMAT(' compo ',I3,' mole-frac=',G12.5,' activity=',G12.5)
C
C   ACTIVIDAD --> FRACCION MOL POR EL COEFICIENTE DE ACTIVIDADC
C   RAPIDEZ DE REACCION
C   Q = [eq/kgcata]
C   DKR = [mmol / s eq]
C   RATE = [mmol / kgcata s]
C
C   Q=4.9D+00
C   RATE=Q*DKR*
C   *   (ACTIV(K_IBUTILEN)/ACTIV(K_METANOL)
C   *   -ACTIV(K_MTBE)/DKA/ACTIV(K_METANOL)**2)
C
C   LA ACUMULACION, MASS HOLDUP SE USA COMO KGCATA
C
C   RATNET=RATE*HLDLIQ*1.D-06
C
C   RATNET=[mmol/kgcata*s]*[kgcata]*[1mol/1000mmol]*[1kmol/1000mol]
C
C   RATEL(NRL)=RATNET
C
C   IF (IDBG.GE.1) THEN
C     WRITE (MAXBUF(1),9030) NSTAGE,RATE,RATNET
C     CALL WRTRM(1)
C   ENDIF
9030 FORMAT(' stage=',I4,' spec-rate=',G12.5,' net-rate=',G12.5)
  RETURN
  END

```

Apéndice E

Archivo Input de Aspen Plus 9.3 usado para la simulación del Modelo de Etapa en No Equilibrio cambiando el valor de los coeficientes de transferencia de masa. La columna cuenta con 17 etapas, la alimentación de la corriente de 1METANOL es en la etapa 10, la alimentación de la corriente de 2BUTENOS es en la etapa 11 y la reacción es de la etapa 4 a la 11.

```
TITLE 'Modelo de No Equilibrio Cambio de Coeficientes'

IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='MMKCAL/HR' &
    HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
    VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
    MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KCAL/MOL' &
    MASS-ENTHALP='KCAL/KG' HEAT=MMKCAL MOLE-CONC='MOL/L' &
    PDROP=BAR

DEF-STREAMS CONVEN ALL

RUN-CONTROL MAX-FORT-ERR=50

DATABANKS PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC / &
    NOASPENPCD

PROP-SOURCES PURECOMP / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC

COMPONENTS
    I-BUTENO C4H8-5 I-BUTENO /
    1BUTENO C4H8-1 1BUTENO /
    MTBE C5H12O-D2 MTBE /
    METANOL CH4O METANOL

FLOWSHEET
    BLOCK B1 IN=1METANOL 2BUTENOS OUT=3DESTILA 4FONDOS

PROPERTIES UNIFAC

PROP-SET PS-1 GAMMA SUBSTREAM=MIXED PHASE=L

STREAM 1METANOL
    SUBSTREAM MIXED TEMP=320 <K> PRES=11 <ATM>
    MOLE-FLOW METANOL 215.5 <MOL/SEC>

STREAM 2BUTENOS
    SUBSTREAM MIXED TEMP=350 <K> PRES=11 <ATM>
    MOLE-FLOW I-BUTENO 195 <MOL/SEC> / 1BUTENO 354 <MOL/SEC>

BLOCK B1 RATEFRAC
    PARAM NCOL=1 INIT-MAXIT=50 INIT-OPTION=CHEMICAL &
        L-TRANS=LINEAR TOT-SEGMENT=17
    COL-CONFIG 1 17
    TRAY-SPECS 1 2 3 NTRAYS=2 TRAY-TYPE=SIEVE &
        COL-DIAM=10 <METER> MASS-TRANS-R=USER
    TRAY-SPECS 1 12 16 NTRAYS=5 TRAY-TYPE=SIEVE &
```

```

COL-DIAM=10 <METER> MASS-TRANS-R=USER
PACK-SPECS 1 4 11 HTPACK=0.7 PACK-ARRANGE=RANDOM &
  PACK-TYPE=RASCHIG PACK-MAT=CERAMIC PACK-DIM="0.25-IN" &
  PACK-SIZE=6.35000E-3 SPAREA=7.119400 PACK-FACTOR=52.49280 &
  PACK-TENSION=61.00000 COL-DIAM=13.5 <METER> &
  MASS-LHLDP=1000 VOID-FRACTIO=0.62 MASS-TRANS-R=USER
FEEDS 1METANOL 1 10 / 2BUTENOS 1 11
PRODUCTS 3DESTILA 1 1 L / 4FONDOS 1 17 L
P-SPEC 1 1 11 <ATM>
COL-SPECS 1 MOLE-RDV=0 MOLE-RR=7 MOLE-B=197 <MOL/SEC>
TLIQ-EST 1 2 74.7 / 1 4 76.2 / 1 5 76.5 / 1 10 &
  80.1 / 1 11 83.8 / 1 16 148
MOLE-L-EST 1 2 9610 / 1 4 9685 / 1 5 9596 / 1 10 &
  8290 / 1 11 7899 / 1 16 7711
MOLE-V-EST 1 2 10784 / 1 4 11071 / 1 5 11057 / 1 &
  10 9680 / 1 11 7528 / 1 16 6737
X-EST 1 17 MTBE 0.9
Y-EST 1 17 MTBE 0.9
SUBROUTINE MASS-TRANS=RMATR
REPORT INT-PROFILE FLOOD-INFO MASS-RATES REAC-RATES &
  MASS-COEFF
SEGMENT-REPO SEGMENT-OPTI=ALL-SEGMENTS PROPERTIES=PS-1
REAC-SEGMENT 1 4 11 RSUB

STREAM-REPOR MOLEFLOW MOLEFRAC

REACTIONS RSUB REAC-DIST
  IN-UNITS SI
  PARAM SUBROUTINE=RNE3
  REAC-DATA 1 KINETIC
  STOIC 1 I-BUTENO -1 / METANOL -1 / MTBE 1
;
;
;
;
;
;

```

Apéndice F

Subrutina en lenguaje Fortran para variar el valor de los Coeficientes de Transferencia de Masa.

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

C

C User Mass Transfer Subroutine for RATEFRAC

```

SUBROUTINE RMATR (KSTG, NCOMPS,  IDX,  NBOPST, KPDIAG,
2      YCOMPB, YINT,  FRATEV, XCOMPB, XINT,
3      FRATEL, PRESS,  TVAP,  TLIQ,  TINT,
4      AVMWLI, AVMWVA,  DIFFP,  VISCML, DENMXL,
5      SIGMAL, VISCMV,  DENMXV, AREAIF, BINMTP,
6      COLTYP, TWRARA,  PCLDIA, HTPACK, PACSIZ,
7      SPAREA, CSIGMA,  PFACT,  IPAKAR, IPAKTP,
8      IPAKME, TCLDIA,  NTRAYS, WEIRHT, DCAREA,
9      ARAACT, FLOPTH,  NPASS,  ITRATP, ITRAME,
*      TRASPC, IPHASE,  NINTMT, INTMT,  NREALM,
1     REALMT)

```

C DESCRIPTION: TO CALCULATE THE BINARY MASS TRANSFER COEFFICIENTS
C USING USER SUPPLIED SUBROUTINE

C

C

C

VARIABLES IN ARGUMENT LIST

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

C

VARIABLE	I/O	TYPE	DIMENSION	DESCRIPTION AND RANGE
KSTG	I	INT	-	SEGMENT NUMBER
NCOMPS	I	INT	-	NUMBER OF COMPONENTS
IDX	I	INT	NCOMPS	COMPONENT INDEX VECTOR
NBOPST	I	INT	6	PHYSICAL PROPERTY OPTION SET BEAD POINTER
KPDIAG	I	INT	-	PHYSICAL PROPERTY DIAGNOSTIC CODE
YCOMPB	I	REAL	NCOMPS	BULK VAPOR MOLE FRACTION
YINT	I	REAL	NCOMPS	INTERFACE VAPOR MOLE FRACTION
FRATEV	I	REAL	-	FLOW OF VAPOR (KMOL/SEC)
XCOMPB	I	REAL	NCOMPS	BULK LIQUID MOLE FRACTION
XINT	I	REAL	NCOMPS	INTERFACE LIQUID MOLE FRACTION
FRATEL	I	REAL	-	FLOW OF LIQUID (KMOL/SEC)
PRESS	I	REAL	-	PRESSURE (N/SQ.M)
TVAP	I	REAL	-	VAPOR TEMPERATURE (K)
TLIQ	I	REAL	-	LIQUID TEMPERATURE (K)
TINT	I	REAL	-	INTERFACE TEMPERATURE (K)
AVMWLI	I	REAL	-	AVERAGE MOLECULAR WEIGHT OF LIQUID MIXTURE (KG/KMOL)
AVMWVA	I	REAL	-	AVERAGE MOLECULAR WEIGHT OF VAPOR MIXTURE (KG/KMOL)
DIFFP	I	REAL	NCOMPS, NCOMPS	BINARY DIFFUSION COEFFICIENTS (SQ.M/SEC)
VISCML	I	REAL	-	VISCOSITY OF LIQUID

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

Apéndice F

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712						
C						(N-SEC/SQ.M)
C	DENMXL	I	REAL	-		DENSITY OF LIQUID MIXTURE
C						(KMOL/CU.M)
C	SIGMAL	I	REAL	-		SURFACE TENSION OF LIQUID
C						(N/M)
C	VISCMV	I	REAL	-		VISCOSITY OF VAPOR MIXTURE
C						(N-SEC/SQ.M)
C	DENMXV	I	REAL	-		DENSITY OF VAPOR MIXTURE
C						(KMOL/CU.M)
C	AREAI	I	REAL	-		INTERFACIAL AREA
C						(SEE NOTE-1 BELOW)
C	BINMTP	O	REAL	NCOMPS,		BINARY MASS TRANSFER
C				NCOMPS		COEFFICIENTS (KMOL/SEC)
C						(SEE NOTE-2 BELOW)
C	COLTYP	I	INT	-		TYPE OF COLUMN
C						1 = PACKED
C						2 = TRAY
C	TWRARA	I	REAL	-		CROSS-SECTIONAL AREA OF
C						TOWER (SQ.M)
C	PCLDIA	I	REAL	-		PACKED COLUMN DIAMETER (M)
C	HTPACK	I	REAL	-		HEIGHT OF PACKING IN THE
C						SEGMENT (M)
C	PACSIZ	I	REAL	-		SIZE OF PACKING (M)
C	SPAREA	I	REAL	-		SPECIFIC SURFACE AREA OF
C						PACKING (SQ.M/CU.M)
C	CSIGMA	I	REAL	-		CRITICAL SURFACE TENSION
C						OF PACKING MATERIAL (N/M)
C	PFACT	I	REAL	-		PACKING FACTOR (1/M)
C	IPAKAR	I	INT	-		PACKING ARRANGEMENT
C						1 = RANDOM
C						2 = STRUCTURED
C	IPAKTP	I	INT	-		PACKING TYPE
C						1 = SADDLES
C						2 = PALL
C						3 = RASCHIG
C						4 = USER
C						5 = FLEXIPAC-1Y
C						6 = FLEXIPAC-2Y
C						7 = FLEXIPAC-3Y
C						8 = FLEXIPAC-4Y
C						9 = GEMPAK-2A
C						10 = INTALOX-2T
C						11 = MONTZ-B1-200
C						12 = MELLAPK-250Y
C						13 = SULZER-BX
C						14 = SULZER-CY
C						15 = SULZER-BX-P
C	IPAKME	I	INT	-		CALCULATION METHOD (I.E.
C						CHOICE OF CORRELATION)
C	TCLDIA	I	REAL	-		TRAY COLUMN DIAMETER (M)
C	NTRAYS	I	REAL	-		NUMBER OF TRAYS IN THE
C						SEGMENT CONSIDERED
C	WEIRHT	I	REAL	-		HEIGHT OF EXIT WEIR (M)
C	DCAREA	I	REAL	-		AREA OF DOWNCOMER (SQ.M)
C	ARAACT	I	REAL	-		ACTIVE AREA AVAILABLE ON
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712						

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
C
C          FLOPTH   I   REAL   -           TRAY (SQ.M)
C          NPASS    I   INT     -           FLOWPATH LENGTH (M)
C          ITRATP   I   INT     -           NUMBER OF TRAY PASSES
C
C          ITRAME   I   INT     -           TRAY TYPE
C
C          ITRAME   I   INT     -           1 = BUBBLE-CAP
C
C          ITRAME   I   INT     -           2 = VALVE
C
C          ITRAME   I   INT     -           3 = SIEVE
C
C          ITRAME   I   INT     -           4 = USER
C
C          ITRAME   I   INT     -           CALCULATION METHOD (I.E.
C
C          ITRAME   I   INT     -           CHOICE OF CORRELATION)
C
C          TRASPC   I   REAL   -           TRAY SPACING (M)
C          IPHASE   I   INT     -           PHASE QUALIFIER
C
C          IPHASE   I   INT     -           0 = LIQUID
C
C          IPHASE   I   INT     -           1 = VAPOR
C
C          NINTMT   I   INT     -           NUMBER OF INTEGER VALUES
C          INTMT    I   INT     NINTMT      VECTOR OF INTEGER VALUES
C          NREALM   I   INT     -           NUMBER OF REAL VALUES
C          REALMT   I   REAL   NREALM      VECTOR OF REAL VALUES
C
C          NOTE-1:
C          INTERFACIAL AREA "AREAIF" HAS THE FOLLOWING UNITS.
C          FOR PACKED COLUMNS, THE UNITS IS "SQ.M/CU.M OF PACKING"
C          FOR TRAY COLUMNS, THE UNITS IS "SQ.M/SQ.M ACTIVE
C
C          TRAY AREA"
C
C          NOTE-2:
C          BINARY MASS TRANSFER COEFFICIENTS "BINMTP" HAVE UNITS
C
C          KMOL/SEC
C          AND HAVE INTERFACIAL AREA TERM INCLUDED IN BINMTP
C
C*****
C
C          IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
C          REAL*8   NTRAYS
C          INTEGER  COLTYP,K
C
C          COMMON /USER/ RMISS,  IMISS,  NGBAL,  IPASS,  IRESTR,
2          ICONVG,  LMSG,  LPMSG,  KFLAG,  NHSTRY,
3          NRPT,  NTRMNL,  ISIZE
C
C          DIMENSION IDX(NCOMPS), NBOPST(6), YCOMPB(NCOMPS), YINT(NCOMPS),
2          XCOMPB(NCOMPS), XINT(NCOMPS), DIFFP(NCOMPS,NCOMPS),
3          BINMTP(NCOMPS,NCOMPS), INTMT(NINTMT), REALMT(NREALM)
C          DIMENSION VAL(4,4)
C          VAL es un arreglo de (NCOMPS,NCOMPS)
C
C*****
C**
C**  CALCULATION OF BINARY MASS TRANSFER COEFFICIENTS
C
C**  VAPOR PHASE COEFFICIENTS WHEN IPHASE = 1
C**  ENTER YOUR CORRELATION FOR VAPOR PHASE BINARY MASS TRANSFER
C**  COEFFICIENTS
C**
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
C
C
      FP = 0.9
C   En este caso FP = 0.9 hace la simulación considerando que los
C   coeficientes de transferencia de masa valen el 90% de su valor
C   original.
C   Para 60% FP = 0.6
C   Para 70% FP = 0.7
C   para 80% FP = 0.8
C   Para 110% FP = 1.1
C   Para 120% FP = 1.2
C   Para 130% FP = 1.3
C   Para 140% FP = 1.4
C   FP = 1.0 es el Caso Base
C
      IF (IPHASE .EQ. 1) THEN
C
      IF (KSTG .EQ. 1) THEN
      DO I=1,NCOMPS
      DO J=1,NCOMPS
      BINMTP(I,J) = 0.0
      END DO
      END DO
C
      ELSE IF (KSTG .EQ. 2) THEN
      CALL AAVAP2 (VAL)
      DO I=1,NCOMPS
      DO J=1,NCOMPS
      BINMTP(I,J) = VAL(I,J) * FP
      END DO
      END DO
C
      ELSE IF (KSTG .EQ. 3) THEN
      CALL AAVAP3 (VAL)
      DO I=1,NCOMPS
      DO J=1,NCOMPS
      BINMTP(I,J) = VAL(I,J) * FP
      END DO
      END DO
C
      ELSE IF (KSTG .EQ. 4) THEN
      CALL AAVAP4 (VAL)
      DO I=1,NCOMPS
      DO J=1,NCOMPS
      BINMTP(I,J) = VAL(I,J) * FP
      END DO
      END DO
C
      ELSE IF (KSTG .EQ. 5) THEN
      CALL AAVAP5 (VAL)
      DO I=1,NCOMPS
      DO J=1,NCOMPS
      BINMTP(I,J) = VAL(I,J) * FP
      END DO
      END DO
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 6) THEN
    CALL AAVAP6 (VAL)
    DO I=1, NCOMPS
    DO J=1, NCOMPS
    BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
    END DO
  END DO
```

```
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 7) THEN
    CALL AAVAP7 (VAL)
    DO I=1, NCOMPS
    DO J=1, NCOMPS
    BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
    END DO
  END DO
```

```
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 8) THEN
    CALL AAVAP8 (VAL)
    DO I=1, NCOMPS
    DO J=1, NCOMPS
    BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
    END DO
  END DO
```

```
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 9) THEN
    CALL AAVAP9 (VAL)
    DO I=1, NCOMPS
    DO J=1, NCOMPS
    BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
    END DO
  END DO
```

```
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 10) THEN
    CALL AAVAP10 (VAL)
    DO I=1, NCOMPS
    DO J=1, NCOMPS
    BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
    END DO
  END DO
```

```
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 11) THEN
    CALL AAVAP11 (VAL)
    DO I=1, NCOMPS
    DO J=1, NCOMPS
    BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
    END DO
  END DO
```

```
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 12) THEN
    CALL AAVAP12 (VAL)
    DO I=1, NCOMPS
    DO J=1, NCOMPS
    BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
    END DO
```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
    END DO
C
    ELSE IF (KSTG .EQ. 13) THEN
    CALL AAVAP13 (VAL)
    DO I=1,NCOMPS
    DO J=1,NCOMPS
    BINMTP(I,J) = VAL(I,J) * FP
    END DO
    END DO
C
    ELSE IF (KSTG .EQ. 14) THEN
    CALL AAVAP14 (VAL)
    DO I=1,NCOMPS
    DO J=1,NCOMPS
    BINMTP(I,J) = VAL(I,J) * FP
    END DO
    END DO
C
    ELSE IF (KSTG .EQ. 15) THEN
    CALL AAVAP15 (VAL)
    DO I=1,NCOMPS
    DO J=1,NCOMPS
    BINMTP(I,J) = VAL(I,J) * FP
    END DO
    END DO
C
    ELSE IF (KSTG .EQ. 16) THEN
    CALL AAVAP16 (VAL)
    DO I=1,NCOMPS
    DO J=1,NCOMPS
    BINMTP(I,J) = VAL(I,J) * FP
    END DO
    END DO
C
    ELSE IF (KSTG .EQ. 17) THEN
    DO I=1,NCOMPS
    DO J=1,NCOMPS
    BINMTP(I,J) = 0.0
    END DO
    END DO
    END IF
C
    ELSE IF (IPHASE .EQ. 0) THEN
    IF (KSTG .EQ. 1) THEN
    DO I=1,NCOMPS
    DO J=1,NCOMPS
    BINMTP(I,J) = 0.0
    END DO
    END DO
    ELSE IF (KSTG .EQ. 2) THEN
    CALL AALIQ2 (VAL)
    DO I=1,NCOMPS
    DO J=1,NCOMPS
    BINMTP(I,J) = VAL(I,J) * FP
    END DO
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 3) THEN
  CALL AALIQ3 (VAL)
  DO I=1, NCOMPS
  DO J=1, NCOMPS
  BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 4) THEN
  CALL AALIQ4 (VAL)
  DO I=1, NCOMPS
  DO J=1, NCOMPS
  BINMTP (I, J) = VAL (I, J)
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 5) THEN
  CALL AALIQ5 (VAL)
  DO I=1, NCOMPS
  DO J=1, NCOMPS
  BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 6) THEN
  CALL AALIQ6 (VAL)
  DO I=1, NCOMPS
  DO J=1, NCOMPS
  BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 7) THEN
  CALL AALIQ7 (VAL)
  DO I=1, NCOMPS
  DO J=1, NCOMPS
  BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 8) THEN
  CALL AALIQ8 (VAL)
  DO I=1, NCOMPS
  DO J=1, NCOMPS
  BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 9) THEN
  CALL AALIQ9 (VAL)
  DO I=1, NCOMPS
  DO J=1, NCOMPS
  BINMTP (I, J) = VAL (I, J) * FP
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

```

C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 10) THEN
  CALL AALIQ10 (VAL)
  DO I=1,NCOMPS
  DO J=1,NCOMPS
  BINMTP (I,J) = VAL (I,J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 11) THEN
  CALL AALIQ11 (VAL)
  DO I=1,NCOMPS
  DO J=1,NCOMPS
  BINMTP (I,J) = VAL (I,J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 12) THEN
  CALL AALIQ12 (VAL)
  DO I=1,NCOMPS
  DO J=1,NCOMPS
  BINMTP (I,J) = VAL (I,J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 13) THEN
  CALL AALIQ13 (VAL)
  DO I=1,NCOMPS
  DO J=1,NCOMPS
  BINMTP (I,J) = VAL (I,J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 14) THEN
  CALL AALIQ14 (VAL)
  DO I=1,NCOMPS
  DO J=1,NCOMPS
  BINMTP (I,J) = VAL (I,J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 15) THEN
  CALL AALIQ15 (VAL)
  DO I=1,NCOMPS
  DO J=1,NCOMPS
  BINMTP (I,J) = VAL (I,J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 16) THEN
  CALL AALIQ16 (VAL)
  DO I=1,NCOMPS
  DO J=1,NCOMPS
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712

```

```
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
  BINMTP(I,J) = VAL(I,J) * FP
  END DO
  END DO
C
  ELSE IF (KSTG .EQ. 17) THEN
  DO I=1,NCOMPS
  DO J=1,NCOMPS
  BINMTP(I,J) = 0.0
  END DO
  END DO
  END IF
  END IF
C
  END
```

Apéndice G

Ejemplo de la subrutina en lenguaje Fortran, que contiene los valores de los Coeficientes de Transferencia de Masa que se van a cambiar, y que necesita la subrutina del Apéndice F.

```
C2345678912345678921234567893123456789412345678951234567896123456789712
  SUBROUTINE AALIQ2(VAL)
C   En este caso la subrutina es llamada cuando se hace referencia a
C   la fase líquida y para la etapa 2.
C   En caso de que se refiera a la fase vapor, el nombre de la subru-
C   tina cambia a AAVAP2
C
  IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
C
  DIMENSION VAL(4,4)
C   VAL es un arreglo de (NCOMPS,NCOMPS)
C
  VAL(1,1) = 0.0
  VAL(1,2) = 38.5675
  VAL(1,3) = 36.6636111
  VAL(1,4) = 41.6986111
  VAL(2,1) = 38.5675
  VAL(2,2) = 0.0
  VAL(2,3) = 34.9058333
  VAL(2,4) = 47.6211111
  VAL(3,1) = 36.6636111
  VAL(3,2) = 34.9058333
  VAL(3,3) = 0.0
  VAL(3,4) = 37.2419444
  VAL(4,1) = 41.6986111
  VAL(4,2) = 47.6211111
  VAL(4,3) = 37.2419444
  VAL(4,4) = 0.0
C
C   VAL tiene la información de los coeficientes de transferencia de
C   masa, los cuales fueron obtenidos en una simulación, a la cual
C   se le pidió que reportara el valor de estos coeficientes.
C
  END
```