

## UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

## FACULTAD DE QUÍMICA

### METODOLOGÍAS PARA EL DIMENSIONAMIENTO DE COLUMNAS EMPACADAS. EJEMPLO COMPARATIVO PARA LA RECUPERACIÓN DE BIOETANOL EN UN ABSORBEDOR

#### TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE INGENIERO QUÍMICO

### PRESENTA: OSCAR BRAULIO ENRIQUEZ SÁNCHEZ

DIRECTOR DE TESIS DR. ALBERTO ROSAS ABURTO

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX., 2022





Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

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

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

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

#### JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE:Profesor: GARFIAS VÁSQUEZ FRANCISCO JAVIERVOCAL:Profesor: VIVALDO LIMA EDUARDOSECRETARIO:Profesor: ROSAS ABURTO ALBERTO1er. SUPLENTE:Profesor: CARREÓN CALDERÓN BERNARDO2° SUPLENTE:Profesor: LÓPEZ RAMÍREZ SIMÓN

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA: CIRCUITO DE LA INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA, FACULTAD DE QUÍMICA, EDIFICIO E, LABORATORIO 213, CIUDAD UNIVERSITARIA, COLONIA UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO, DELEGACIÓN COYOACÁN.

ASESOR DEL TEMA:

Dr. ALBERTO ROSAS ABURTO

SUSTENTANTE (S):

OSCAR BRAULIO ENRIQUEZ SÁNCHEZ

## AGRADECIMIENTOS INSTITUCIONALES

De igual manera quiero agradecer el apoyo de estas instituciones y programas:

- Programa de Apoyos a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de DGAPA-UNAM PAPIIT TA102120. Dr. Alberto Rosas Aburto.
- Programa de Apoyos a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de DGAPA-UNAM PAPIIT IV100119. Dr. Eduardo Vivaldo Lima.
- Programa de Apoyos a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de DGAPA-UNAM PAPIIT IG100122. Dr. Eduardo Vivaldo Lima.
- Facultad de Química-UNAM, Dr. Eduardo Vivaldo Lima PAIP 5000-9078.
- Facultad de Química-UNAM, Dr. Alberto Rosas Aburto PAIP 5000–9167.

# ÍNDICE

RESUMEN	V
INTRODUCCIÓN	VI
OBJETIVOS GENERALES	VII
OBJETIVOS PARTICULARES	VII
NOMENCLATURA	VIII
1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA DE LA COLUMNA DE ABSORCIÓN DE RECUPERACIÓN DE ETANOL	EMPACADA 1
2. MODELOS MATEMÁTICOS PARA EL PROCESO DE ABSORCIÓN	
2.1. Fracción de líquido estancado	19
2.1.1. Modelo de Shulman/Ulrich/Wells	21
2.1.2. Modelo de Billet	26
2.2. Caída de presión	34
2.2.1. Caída de presión en seco	35
2.2.2. Caída de presión total	35
2.3. Coeficiente de difusión	
2.4. Coeficiente de transferencia de masa	
2.5. Altura total de unidades de transferencia (HTU)	41
2.6. Número total de unidades de transferencia (NTU)	42
2.7. Diámetro de la columna	44
2.8. Altura de la columna de absorción	44
3. METODOLOGÍA Y RESULTADOS	45
3.1. Planteamiento general	46
3.2. Fracción de líquido estancado	46
3.2.1. Modelo de Shulman	46
3.2.2. Modelo de Reinhard Billet (si $v_G \le v_{G,C}$ )	47
3.2.3. Modelo de Reinhard Billet (si $v_G > v_{G,C}$ )	
3.2.4. Modelo de Engel	

3.3. Caí	da de presión por altura de empaque (en seco)
3.3.1.	Modelo de Reinhard Billet ( $\Delta P_0/Z$ )
3.3.2.	Modelo de Carmen/Kozeny
3.3.3.	Modelo de Burke/Plummer
3.3.4.	Modelo de Sabri Ergun50
3.3.5.	Caída de presión en seco, $\Delta P_0/Z$ [cita 1] (Chattopadhyay, 2007)51
3.3.6.	Modelo de Roman Zarcycki52
3.3.7.	Caída de presión en seco, $\Delta$ PO/Z [cita 2] (Chattopadhyay, 2007)53
3.4. Caí	da de presión por altura de empaque (total)54
3.4.1.	Modelo Reinhard Billet $\Delta P/Z$
3.4.2.	Modelo de M. Leva55
3.4.3.	Modelo de Kister and Gill56
3.4.4.	Modelo de Kister and Larson56
3.4.5.	Modelo de Roman Zarzycki58
3.5. Coe	eficiente de difusión59
3.5.1.	Modelo de Wilke and Lee59
3.5.2.	Modelo de Chapman and Enskog59
3.5.3.	Modelo de Fuller
3.5.4.	Modelo de Hayduk and Minhas61
3.5.5.	Modelo de Stokes-Einstein62
3.5.6.	Modelo de Glasstone62
3.6. Coe	eficiente de transferencia de masa63
3.6.1.	Coeficiente de transferencia de masa para la fase gas, $k_G$
3.6.2.	Coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida, $k_{L}$
3.6.3.	Coeficiente de transferencia de masa para la fase gas, $k_G$
3.6.4.	Coeficiente de transferencia de masa para la fase gas, $k_G$

3.6.5	5. Coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida, $k_L$ [cita 1] (Cussler, 2009)	
3.6.6	5. Coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida, $k_L$ [cita 2] (Cussler, 2009)	67
3.7.	Altura total de unidades de transferencia (HTU)	67
3.7.1	Altura total de unidades de transferencia, $HTU_{GT}$ (Pérez Sánchez, Pérez Sánchez, & Segura Silva, 2016)	67
3.7.2	Altura total de unidades de transferencia, $HTU_{GT}$ (Chattopadhyay, 2007)	
3.8.	Número total de unidades de transferencia (NTU)	69
3.8.1	Modelo de Kremser (si A≠1)	69
3.8.2	2. Modelo Kremser (si A=1)	69
3.8.3	8. Modelo de Chattopadhyay	69
3.8.4	Modelo de Método Gráfico	70
3.8.5	. Modelo o Método de los trapecios	73
3.9.	Diámetro de la columna	75
3.9.1	Modelo de Lobo/Eckert/Sherwood	75
3.9.2	2. Modelo de Chattopadhyay	76
3.9.3	8. Modelo de Reinhard Billet (D)	77
4. CO	OMPARACIÓN DE MODELOS	78
4.1.	Fracción de líquido estancado	79
4.2.	Caída de presión por altura de empaque (en seco)	80
4.3.	Caída de presión por altura de empaque (Total)	80
4.4.	Coeficiente de difusión	82
4.5.	Coeficiente de transferencia de masa	83
4.6.	Altura total de unidades de transferencia (HTU)	
4.7.	Número total de unidades de transferencia (NTU)	85
4.8.	Diámetro	86
4.9.	Análisis de una metodología de cálculo diferente	86
4.9.1	Diámetro de la torre	

4.9.2 Caída de presión por altura de empaque total	. 88
4.9.3 Coeficiente de difusión para la fase gas	. 89
4.9.4 Coeficiente de difusión para la fase líquida	. 89
4.9.5Coeficiente de transferencia de masa para la fase gas	. 90
4.9.6 Coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida	. 90
4.9.7 Altura total de unidades de transferencia	.91
4.9.8 Número total de unidades de transferencia	. 92
4.9.9Altura de la columna	. 92
4.9.10 Resultados	. 93
CONCLUSIONES	. 94
ANEXO I	.96
BIBLIOGRAFÍA	103

## RESUMEN

Las columnas empacadas hoy en día se utilizan para procesos de rectificación, extracción de líquidos y el más común, absorción de gases. Este tipo de columnas pueden tener un empacado regular o un empacado aleatorio.

Estas columnas presentan diferentes ventajas a comparación de las columnas de platos, como son, el trabajar con condiciones de operación más moderadas, trabajar con equipos menos especializados, grandes ahorros de energía y bajo impacto ambiental (Billet, 1995).

El proceso de absorción de gases se lleva a cabo en una torre de absorción. Las torres de absorción de lecho empaquetado son columnas verticales con empaques ya sea regular o aleatorio donde se presenta contacto continuo de las fases gas y liquido en contracorriente o corriente en paralelo. Esto es un proceso en el cual un compuesto disuelto en la fase gas es removido por un disolvente de baja volatilidad, o compuestos disueltos en la fase líquido son transferidos a la fase gas.

Para definir las características de operación en una columna empacada, es necesario realizar un desarrollo experimental específico para cada proceso, esto con el fin de poder conocer las zonas de operación de dicho proceso y sus limitantes. Sin embargo, es conveniente realizar un análisis de metodologías de cálculo que reproduzcan con un grado de certeza aceptable los datos obtenidos experimentalmente.

Hoy en día existen diversas metodologías de cálculo para el diseño hidráulico, dimensionamiento de las columnas y de transferencia de masa, aplicables para un número extenso de procesos. No obstante, muchas de estas metodologías fueron propuestas hace varias décadas, pero con ciertas limitaciones, por lo que hoy en día no pueden ser aplicables en todos los procesos.

# INTRODUCCIÓN

Este estudio aborda un análisis de distintas metodologías de cálculo para el diseño hidráulico y la transferencia de masa en un proceso de absorción de etanol en una columna empacada, con el fin de encontrar las principales diferencias entre cada una de estas y proporcionar una recomendación general para la aplicación de estas metodologías.

Este trabajo consta de cuatro capítulos. El primero de ellos es un resumen del diseño de una columna de absorción empacada con el análisis de cuatro tipos de empaques diferentes. Este extracto se obtiene del artículo "Diseño de una columna de absorción empacada considerando cuatro tipos de empaque y aplicando Matlab" publicado en la revista científica *Nexo*.

En este artículo se proporcionan las principales características de los empaques, de los compuestos involucrados en la columna, plantean diferentes ecuaciones para el dimensionamiento y diseño hidráulico de la columna y finalmente se exponen los resultados obtenidos con los diferentes tipos de empaques.

El capítulo dos plantea los diferentes modelos matemáticos reportados en la literatura, describiendo las principales características de cada modelo y definiendo las variables y constantes presentes en cada tipo de ecuación.

En el capítulo tres se describe el proceso de cálculo, paso a paso, así como los parámetros tomados en cuenta para finalmente reportar los resultados obtenidos de cada metodología de cálculo.

En el cuarto y último capítulo se comparan y evalúan las metodologías de cálculo desarrolladas anteriormente y se da una recomendación sobre el tipo de metodología a utilizar para diferentes procesos.

# **OBJETIVOS GENERALES**

Comparar las principales diferencias entre cada metodología de cálculo para algunos parámetros empleados en el dimensionamiento de columnas empacadas.

## **OBJETIVOS PARTICULARES**

- Describir las características principales de cada metodología de cálculo.
- Establecer y definir las variables y constantes relacionadas en cada modelo.
- Plantear, evaluar y elegir los mejores modelos matemáticos para el dimensionamiento de columnas empacadas.

## NOMENCLATURA

Símbolo	Descripción	Dimensiones
а	Área específica del empaque	[L] <sup>2</sup> empaque [L] <sup>3</sup> empaque
$a_h$	Área superficial efectiva de empaque	$\frac{[L]^2 empaque}{[L]^3 empaque}$
$a_l$	Área superficial de un solo elemento de empaque aleatorio	$[L]^{2}$
$A_T$	Área transversal de la columna	$[L]^{2}$
Α	Promedio del factor de absorción	[adm]
$A_{(1)}$	Factor de absorción en el fondo	[adm]
A <sub>(2)</sub>	Factor de absorción en el domo	[adm]
C,C',C''	Constantes	
$C_L$	Concentración del líquido	$\frac{[N]}{[L]^3}$
$C_h$	Factor hidráulico para $\psi_o$	[adm]
$C_L$	Factor de transferencia de masa	[adm]
$C_P$	Factor hidráulico para $a_h$	[adm]
$C_V$	Factor de transferencia de masa	[adm]
Cs <sub>in</sub>	Coeficiente a condiciones de inundación	[adm]
D	Diámetro de la columna	[L]
$D_G$	Coeficiente de difusión fase gas	$\frac{[L]^2}{[T]}$
$D_L$	Coeficiente de difusión fase líquido	$\frac{[L]^2}{[T]}$
$d_p$	Diámetro efectivo de empaque	[L]
$e_{et}/k$	e/k parámetro del etanol	[Θ]
$e_{CO2}/k$	e/k parámetro del dióxido de carbono	[Θ]
$f_{in}$	Factor de inundación	%
$F_p$	Factor de empaque	$[L]^{-1}$
$Fr_L$	Número de Froude fase líquido	[adm]
g	Aceleración de la gravedad	$\frac{[L]}{[T]^2}$
G	Flux másico del gas	$\frac{[M]}{[T][L]^2}$

Símbolo	Descripción	Dimensiones
$G_{Mx}$	Flux molar promedio del líquido	$\frac{[N]}{[T][L]^2}$
$G_{Mx(1)}$	Flux molar del líquido a la salida	$\frac{[N]}{[T][L]^2}$
$G_{Mx(2)}$	Flux molar del líquido a la entrada	$\frac{[N]}{[T][L]^2}$
$G_{My}$	Flux molar promedio del gas	$\frac{[N]}{[T][L]^2}$
$G_{My(1)}$	Flux molar del gas a la entrada	$\frac{[N]}{[T][L]^2}$
$G_{My(2)}$	Flux molar del gas a la salida	$\frac{[N]}{[T][L]^2}$
Н	Constante de Henry (Etanol-Agua @25°C)	$\frac{[M]}{[L]^2}$
H <sub>shu</sub>	Factor de corrección de la fracción del líquido estancado (Modelo de Shulman)	[adm]
$HTU_{TG}$	Altura total de la unidad de transferencia	[L]
$HTU_G$	Altura de la unidad de transferencia fase gas	[L]
$HTU_L$	Altura de la unidad de transferencia fase líquido	[L]
$h_e$	Fracción de líquido estancado estático	[L] <sup>3</sup> líquido [L] <sup>3</sup> empaque
$h_{e,w}$	Fracción de líquido estancado estático (disolvente agua)	[L] <sup>3</sup> líquido [L] <sup>3</sup> empaque
$h_L$	Fracción de líquido estancado total	[L] <sup>3</sup> líquido [L] <sup>3</sup> empaque
$h_{L,w}$	Fracción de líquido estancado total (disolvente agua)	[L] <sup>3</sup> líquido [L] <sup>3</sup> empaque
$h_{L,C}$	Fracción de líquido estancado a la carga	[L] <sup>3</sup> líquido [L] <sup>3</sup> empaque
$h_o$	Fracción de líquido estancado en operación	[L] <sup>3</sup> líquido [L] <sup>3</sup> empaque
$h_{o,w}$	Fracción de líquido estancado en operación (disolvente agua)	[L] <sup>3</sup> líquido [L] <sup>3</sup> empaque
$k_B$	Constante de Boltzmann	$\frac{[M][L]^2}{[\Theta][T]^2}$
$k_{G}$	Coeficiente convectivo de transferencia de masa fase gas	$\frac{[L]}{[T]}$

Símbolo	Descripción	Dimensiones
$k_L$	Coeficiente convectivo de transferencia de masa fase líquido	$\frac{[L]}{[T]}$
$K_T$	Coeficiente global de transferencia de masa	$\frac{[L]}{[T]}$
$K_{\nu G}$	Coeficiente de transferencia de masa fase gas	$\frac{[N]}{[T][L]^3}$
$K_{vL}$	Coeficiente de transferencia de masa fase líquido	$\frac{[N]}{[T][L]^3}$
$K_w$	Factor de pared	[adm]
L	Flux másico del líquido	$\frac{[M]}{[T][L]^2}$
m	Coeficiente de distribución	
$m_{et(abs)}$	Flujo másico de etanol absorbido	$\frac{[M]}{[T]}$
$m_{G(1)}$	Flujo másico del gas a la entrada	$\frac{[M]}{[T]}$
$m_{L(1)}$	Flujo másico del líquido a la salida (agua + etanol abs.)	$\frac{[M]}{[T]}$
$m_{L(2)}$	Flujo másico del líquido a la entrada (agua)	$\frac{[M]}{[T]}$
$M_A$	Peso molecular del líquido (agua)	$\frac{[M]}{[N]}$
$M_L$	Peso molecular de la mezcla líquida	$\frac{[M]}{[N]}$
$M_{AB}$	Peso molecular de la mezcla gas	$\frac{[M]}{[N]}$
M <sub>CO2</sub>	Peso molecular del dióxido de carbono	$\frac{[M]}{[N]}$
M <sub>et</sub>	Peso molecular del etanol	$\frac{[M]}{[N]}$
$M_{G}$	Peso molecular del gas	$\frac{[M]}{[N]}$
n	factor	[adm]
$N_{et(abs)}$	Flujo molar del etanol absorbido	$\frac{[N]}{[T]}$

Símbolo	Descripción	Dimensiones
$N_{G(1)}$	Flujo molar del gas a la entrada	$\frac{[N]}{[T]}$
$N_{G(2)}$	Flujo molar del gas a la salida	$\frac{[N]}{[T]}$
$N_{GS(1)}$	Flujo molar del gas a la entrada sin soluto	$\frac{[N]}{[T]}$
$N_{L(1)}$	Flujo molar del líquido a la salida	$\frac{[N]}{[T]}$
$N_{L(2)}$	Flujo molar del líquido a la entrada	$\frac{[N]}{[T]}$
$N_{LS(2)}$	Flujo molar del líquido a la entrada sin soluto	$\frac{[N]}{[T]}$
$NTU_{TG}$	Número total de unidades de transferencia	[adm]
Р	Presión	$\frac{[M]}{[L]^2}$
$Q_{G(1)}$	Flujo volumétrico del gas	$\frac{[L]^3}{[T]}$
$Q_{L(1)}$	Flujo volumétrico del líquido a la salida	$\frac{[L]^3}{[T]}$
$\Delta P_o/Z$	Caída de presión en seco por metro de altura de empaque	$\frac{[M]}{[L]^3}$
$\Delta P/Z$	Caída de presión total por metro de altura de empaque	$\frac{[M]}{[L]^2[L]}$
$\Delta P_{limit}/Z$	Máxima caída de presión permitida por metro de altura de empaque	$\frac{[M]}{[L]^2[L]}$
r <sub>et</sub>	Radio de etanol	[ <i>L</i> ]
R	Constante ideal de los gases	$\frac{[M]}{[L]^2}[L]^3$ [N][ $\Theta$ ]
R%	Porcentaje de etanol removido	۲۹ <u>۱</u> (۵) %
$Re_L$	Número de Reynolds fase gas	[adm]
$Re_L$	Número de Reynolds fase líquido	[adm]
$Sc_G$	Número de Schmidt para fase gas	[adm]
Т	Temperatura	$[\Theta]$
$T^*$	Factor de temperatura	[Θ]
$v_{G}$	Velocidad del gas	$\frac{[L]}{[T]}$

Símbolo	Descripción	Dimensiones
$v_{G,C}$	Velocidad del gas a la carga	$\frac{[L]}{[T]}$
$v_{G,e}$	Velocidad efectiva del gas	$\frac{[L]}{[T]}$
$v_{G,in}$	Velocidad del gas en condiciones de inundación	$\frac{[L]}{[T]}$
$v_L$	Velocidad del líquido	$\frac{[L]}{[T]}$
$v_{L,e}$	Velocidad efectiva del líquido	$\frac{[L]}{[T]}$
V <sub>et</sub>	Volumen molar del etanol	$\frac{[L]^3}{[N]}$
V <sub>CO2</sub>	Volumen molar del dióxido de carbono	$\frac{[L]^3}{[N]}$
x	Fracción mol en fase líquido	
X	Parámetro de flujo	
$x_{et(1)}$	Fracción mol de etanol a la salida fase líquido	
$x_{et(2)}$	Fracción mol de etanol a la entrada fase líquido	
$y_{et(1)}$	Fracción mol de etanol a la entrada fase gas	
$y_{et(2)}$	Fracción mol de etanol a la salida fase gas	
$y_{CO(1)}$	Fracción mol del dióxido de carbono a la entrada	
$y^*$	Fracción mol en fase gas al equilibrio	
Y <sub>in</sub>	Parámetro de caída de presión en condiciones de inundación	[adm]
Ζ	Altura de empaque	[L]

### Símbolos

$\psi_o$	Coeficiente de resistencia del empaque seco	[adm]
ε	Porosidad del empaque	[adm]
W	Correlación caída de presión	[adm]
$ ho_L$	Densidad del líquido	$\frac{[M]}{[L]^3}$
$ ho_G$	Densidad del gas	$\frac{[M]}{[L]^3}$
$\mu_{CO2}$	Viscosidad del dióxido de carbono	$\frac{[M]}{[L][T]}$

Símbolos		
$\mu_{et}$	Viscosidad del etanol	$\frac{[M]}{[L][T]}$
$\mu_L$	Viscosidad del líquido	$\frac{[M]}{[L][T]}$
$\mu_G$	Viscosidad del gas	$\frac{[M]}{[L][T]}$
f'	Factor de fricción	[adm]
α,β	Constantes	
$\sigma_L$	Tensión superficial del líquido	$\frac{[M][L]}{[T]^2[L]}$
π	Número PI	
θ	Correlación de temperatura	
$\upsilon_L$	Viscosidad cinemática del liquido	$\frac{[L]^2}{[T]}$
$\upsilon_G$	Viscosidad cinemática del gas	$\frac{[L]^2}{[T]}$
$\sigma_{\!AB}$	Diámetro de colisión promedio	[L] Ángstrom
$\sigma_{et}$	Diámetro de colisión del etanol	[L] Ángstrom
$\sigma_{CO2}$	Diámetro de colisión del dióxido de carbono	[L] Ángstrom
$arOmega_D$	Integral de colisión de difusión	[adm]

### DIMENSIONES BÁSICAS UTILIZADAS EN EL SISTEMA INTERNACIONAL DE UNIDADES

Magnitud básica	Símbolo de la dimensión
Longitud	L
Masa	Μ
Tiempo	Т
Intensidad de corriente eléctrica	Ι
Temperatura termodinámica	Θ
Cantidad de sustancia	Ν
Intensidad luminosa	J

# 1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA DE LA COLUMNA DE ABSORCIÓN EMPACADA DE RECUPERACIÓN DE ETANOL<sup>1</sup>

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Reproducido con permiso de Pérez Sánchez, A., Pérez Sánchez, E. J., & Segura Silva, R. (2016), "DISEÑO DE UNA COLUMNA DE ABSORCIÓN EMPACADA CONSIDERANDO CUATRO TIPOS DE EMPAQUE Y APLICANDO MATLAB", *Nexo Revista Científica*, *29*(2), 83-104. https://doi.org/10.5377/nexo.v29i2.4577.

El proceso de absorción tuvo una gran relevancia a partir de los años 70's ya que se observó que la absorción de componentes orgánicos volátiles a base de partículas de carbón activado era muy efectiva, lo cual provocó que fuera la tecnología más utilizada en esa década para problemas de contaminación. Sin embargo, era un sistema que necesitaba mejoras de diseño para hacerlo económicamente más atractivo y operacionalmente más práctico. (McCabe, Smith, & Harriott, 1993) (Wankat, 2012) (Roman & Andrzej, 1993)

A partir de los años 80's se da a conocer el proceso de absorción con aire, una tecnología a base de estudios experimentales, pruebas piloto y a escala industrial que demostraba que era una tecnología más eficiente y económica para la remoción de compuestos orgánicos volátiles en el agua que la absorción a base de carbón activado. Más adelante, en los 90's, entra a la competencia el proceso de absorción con vapor (McCabe, Smith, & Harriott, 1993) (Wankat, 2012) (Roman & Andrzej , 1993).



Figura 1. Diseño típico de una columna de absorción empacada (Pérez Sánchez, Pérez Sánchez, & Segura Silva, 2016) Reproducido bajo permiso de Nexo revista científica

Hoy en día se utiliza el proceso de absorción para remover compuestos disueltos en la fase gas o fase líquida con otro (disolvente) en el cual el compuesto a remover sea miscible.

Como se mencionó anteriormente, Pérez-Sánchez et al. (2016) realizaron un estudio muy completo de este proceso. En ese artículo siguen una metodología completa y referenciada. Sin embargo, las ecuaciones planteadas en el artículo son algunas de las muchas existentes, y entre estas múltiples ecuaciones se encuentran variaciones para distintos parámetros.

Por tal motivo la creación de este documento, con el objetivo de revisar y comparar similitudes y diferencias entre los distintos modelos utilizados para el diseño de una columna de absorción.

A continuación, se presenta un resumen del artículo Pérez-Sánchez et al. (2016).

### "Diseño de una columna de absorción empacada considerando cuatro tipos de empaque y aplicando Matlab"<sup>2</sup>

En este trabajo se diseña una columna de absorción empacada para la recuperación de etanol contenido en una corriente gaseosa. Se consideran 4 tipos de empaques (anillos *Hiflow*® metálicos de 50 mm, anillos *Pall*® cerámicos de 50 mm, anillos *Top Pak*® metálicos de 50 mm y anillos *VSP*® metálicos de 25 mm) con el fin de encontrar el más apropiado para las dimensiones de la columna, caída de presión y transferencia de masa. Para este propósito se determinaron varios parámetros de diseño, tales como: diámetro de la columna, altura de empaque, coeficiente global de transferencia de masa, caída de presión en seco, altura total de unidades de transferencia en fase gas y el área superficial efectiva del empaque.

#### Descripción del problema

Una mezcla gaseosa contiene  $CO_2$  y etanol, con una composición molar de 92%  $CO_2$  y 8% Etanol, proveniente de un proceso de fermentación. El etanol debe recuperarse por medio de un proceso de absorción a contracorriente usando agua como disolvente. La mezcla de gas entrará a la torre a un flujo volumétrico de 4000 m<sup>3</sup>/h, a 25°C y 1.1 atm, mientras que el disolvente será

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Reproducido con permiso de Pérez Sánchez, A., Pérez Sánchez, E. J., & Segura Silva, R. (2016), "DISEÑO DE UNA COLUMNA DE ABSORCIÓN EMPACADA CONSIDERANDO CUATRO TIPOS DE EMPAQUE Y APLICANDO MATLAB", Nexo Revista Científica, 29(2), 83-104. https://doi.org/10.5377/nexo.v29i2.4577.

suministrado con un flujo másico de 6500 kg/h a la misma temperatura. La recuperación requerida del etanol es del 97%, mientras que la máxima caída de presión permitida para la corriente de gas no debe exceder los 250 Pa/m de altura de empaque. Se diseñará la cama empacada al 70% de inundación, trabajando bajo condiciones isotérmicas y sin haber reacción entre el etanol y el agua.



Figura 2. Esquema de columna de absorción en condiciones de operación

Tipo de empaque		Para	Parámetros de transferencia de masa				
	a [m <sup>-1</sup> ]	ε [adm]	$C_h[adm]$	C <sub>p</sub> [adm]	$F_p[m^{-1}]$	$C_L[adm]$	C <sub>V</sub> [adm]
50-mm anillo <i>Hiflow®</i> metálico	92	0.977	0.876	0.421	52	1.168	0.408
50-mm anillo <i>Pall®</i> cerámico	121	0.783	1.335	0.662	142	1.227	0.415
52-mm anillo <i>Top</i> <i>Pak®</i> metálico	75	0.980	0.881	0.604	46	1.326	0.389
25-mm anillo VSP®	205	0.970	1.369	0.782	105	1.376	0.405

Tabla 1. Características de empaques

Tabla 2. Datos de entrada del proceso de absorción

Parámetro	Valor	Unidades					
Flujo volumétrico $\left( Q_{G(1)}  ight)$ , Mezcla de gas	4000	$m^3/h$					
Fracción molar de etanol $(y_{et(1)})$ , Mezcla de gas	0.08						
Flujo másico $(m_{L(2)})$ , Disolvente (agua)	6500	kg/h					
Otros datos							
Peso molecular de etanol $(M_{et})$	46.068	kg/kmol					
Peso molecular del agua $(M_A)$	18	kg/kmol					
Peso molecular del dióxido de carbono $(M_{CO2})$	44.01	kg/kmol					
Porcentaje de etanol removido (% $R$ )	97	%					
Factor de inundación $(f_{in})$	70	%					
Máxima caída de presión permitida ( $\Delta P_{limit}/Z$ )	250	Pa/m					
Densidad del disolvente líquido a 25°C ( $ ho_L$ )	997.047	kg/m <sup>3</sup>					
Viscosidad del disolvente líquido a 25°C ( $\mu_L$ )	0.0089	Pa·s					
Viscosidad de etanol vapor a 25°C ( $\mu_{et}$ )	9x10 <sup>-6</sup>	Pa·s					
Viscosidad de dióxido de carbono vapor a 25°C ( $\mu_{CO2}$ )	1.5x10⁻⁵	Pa·s					
Volumen molar de etanol ( $V_{et}$ )	58.6	cm³/mol					
Volumen molar de Dióxido de carbono ( $V_{CO2}$ )	34.0	cm³/mol					
Diámetro de colisión de etanol ( $\sigma_{et}$ )	4.530	Å					
Diámetro de colisión de Dióxido de carbono ( $\sigma_{CO2}$ )	3.941	Å					
e/k para etanol ( $e_{et}/k$ )	362.600	K					
e/k para dióxido de carbono $(e_{CO2}/k)$	195.200	K					
Constante del gas ideal (R)	0.0821	$\frac{m^3 \cdot atm}{mol \cdot K}$					
Constante de Henry para sistema etanol-agua a 25°C ( $H$ )	0.252	atm					
Coeficiente de distribución (m)	0.229						
Temperatura del sistema (T)	25.0	°C					
Presión del sistema (P)	1.1	atm					

### DIÁMETRO DE LA COLUMNA

• Peso molecular de la mezcla de gas

$$M_{G} = (y_{et(1)} * M_{et}) + (y_{CO2(1)} * M_{CO2})$$
Ec. 1  
$$y_{CO2(1)} = 1 - y_{et(1)}$$
Ec. 2

• Viscosidad de la mezcla de gas

$$\mu_{G} = \left[ \frac{M_{G}}{\left(\frac{y_{et(1)} * M_{et}}{\mu_{et}}\right) + \left(\frac{y_{CO2(1)} * M_{CO2}}{\mu_{CO2}}\right)} \right] * 0.001$$
 Ec. 3

 $\mu_{et}$  y  $\mu_{CO2}$  valores en cP

• Cantidad de etanol absorbido

$$m_{et(abs)} = \left(\frac{Q_{G*\rho_G}}{M_G}\right) * y_{et(1)} * \% R * M_{et}$$
 Ec. 4

• Flujo másico de corriente líquida a la salida

$$m_{L(1)} = m_{L(2)} + m_{et(abs)}$$
 Ec. 5

• Parámetro de flujo

$$X = \frac{m_{L(1)}}{Q_G * \rho_G} * \left(\frac{\rho_G}{\rho_L}\right)^{0.5}$$
 Ec. 6

• Parámetro de caída de presión en condiciones de inundación

$$lnY_{in} = -[3.5021 + 1.028 * lnX + 0.11093 * (lnX)^{2}]$$
 Ec. 7

• Coeficiente a condiciones de inundación

$$Cs_{in} = \left(\frac{Y_{in}}{Fp * \mu_L^{0.1}}\right)^{0.5}$$
 Ec. 8

• Velocidad del gas a condiciones de inundación

$$v_{Gin} = \frac{Cs_{in}}{\left(\frac{\rho_G}{\rho_L * \rho_G}\right)^{0.5}}$$
 Ec. 9

• Velocidad del gas

$$v_G = v_{Gin} + f_{in} Ec. 10$$

• Diámetro de la torre

$$D = \left[\frac{4 * \left(\frac{Q_G}{3600}\right)}{\nu_G * \pi}\right]^{0.5}$$
 Ec. 11

### CAÍDA DE PRESIÓN

• Diámetro efectivo de partícula

$$d_p = 6 * \left(\frac{1-\varepsilon}{a}\right)$$
 Ec. 12

• Factor de pared

$$K_{w} = \frac{1}{1 + \frac{2}{3} * \left(\frac{1}{1 - \varepsilon}\right) * \frac{d_{p}}{D}}$$
 Ec. 13

• Número de Reynolds

$$Re_{G} = \frac{v_{G} * d_{p} * \rho_{G} * K_{w}}{(1 - \varepsilon) * \mu_{G}}$$
 Ec. 14

• Coeficiente de resistencia del empaque seco

$$\psi_o = C_P * \left(\frac{64}{Re_G} + \frac{1.8}{Re_G^{0.08}}\right)$$
 Ec. 15

• Flux másico del líquido

$$L = \frac{4 * \left(\frac{m_{L(1)}}{3600}\right)}{\pi * D^2}$$
 Ec. 16

• Velocidad de líquido

$$v_L = \frac{L}{\rho_L}$$
 Ec. 17

• Número de Reynolds fase líquida

$$Re_L = \frac{v_L * \rho_L}{a * \mu_L}$$
 Ec. 18

• Número de Froude fase líquida

$$Fr_L = \frac{v_L^2 * a}{g}$$
 Ec. 19

• Superficie específica efectiva del empaque

$$\frac{a_h}{a} = C_h * Re_L^{0.5} * Fr_L^{0.1} para Re_L < 5$$
  
$$\frac{a_h}{a} = 0.85 * C_h * Re_L^{0.25} * Fr_L^{0.1} para Re_L \ge 5$$
  
Ec. 20

$$a_h = \frac{a_h}{a} * a$$
 Ec. 21

• Líquido estancado

$$h_L = \left(12 * \frac{Fr_L}{Re_L}\right)^{1/3} \left(\frac{a_h}{a}\right)^{2/3}$$
 Ec. 22

• Caída de presión en seco por metro de altura de empaque

$$\frac{\Delta P_o}{Z} = \psi_o * \frac{a}{\varepsilon^3} * \frac{\rho_G * v_G^2}{2} * \frac{1}{K_w}$$
 Ec. 23

• Caída de presión total por metro de altura de empaque

$$\frac{\Delta P}{Z} = \frac{\Delta P_o}{Z} \left[ \left( \frac{\varepsilon}{\varepsilon - h_L} \right)^{1.5} exp\left( \frac{Re_L}{200} \right) \right]$$
 Ec. 24

### **COEFICIENTE DE DISTRIBUCIÓN**

• Coeficiente de difusión fase gas

$$D_{G} = \frac{\left[3.03 - \left(\frac{0.98}{M_{AB}^{1/2}}\right)\right] * (10^{-3}) * T^{3/2}}{P * M_{AB}^{1/2} * \sigma_{AB}^{2} * \Omega_{D}} * 0.0001$$
 Ec. 25

• Peso molecular de la mezcla gas

$$M_{AB} = 2 * \left(\frac{1}{M_{et}} + \frac{1}{M_{CO2}}\right)^{-1}$$
 Ec. 26

• Diámetro de colisión promedio

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_{et} + \sigma_{CO2}}{2}$$
 Ec. 27

• Integral de colisión de difusión

$$\Omega_D = \frac{1.06036}{T^{*0.15610}} + \frac{0.19300}{\exp(0.47635 * T^*)} + \frac{1.03587}{\exp(1.52996 * T^*)} + \frac{1.76474}{\exp(3.89411 * T^*)}$$
Ec. 28

• Factor de temperatura

$$T^* = \frac{T}{\sqrt{\frac{e_{et}}{k} * \frac{e_{CO2}}{k}}}$$
 Ec. 29

• Coeficiente de difusión fase líquido

$$D_{L} = \frac{1.25 \times 10^{-8} (V_{et}^{-0.19} - 0.292) * T^{1.52} * \mu_{L}^{n}}{10000}$$
Ec. 30  

$$V_{et} = Volumen \ molar \ del \ etanol \left[\frac{cm^{3}}{mol}\right]; \qquad \mu_{L} = Viscosidad \ del \ agua \ a \ temp. \ T \ [cP]$$

$$n = \frac{9.58}{V_{et}} - 1.12$$
Ec. 31

#### **COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA**

• Coeficiente convectivo de transferencia de masa fase gas

$$k_{G} = 0.1304 * C_{v} * \left(\frac{D_{G} * P}{R * T}\right) \left(\frac{a}{[\varepsilon(\varepsilon - h_{L})]^{0.5}}\right) \left(\frac{Re_{G}}{K_{w}}\right)^{3/4} * Sc_{G}^{2/3}$$
Ec. 32  
R: Constante del gas ideal = 0.0821 
$$\left[\frac{m^{3} \cdot atm}{kmol \cdot K}\right]$$

• Número de Schmidit

$$Sc_G = \frac{\mu_G}{\rho_G * D_G}$$
 Ec. 33

• Coeficiente convectivo de transferencia de masa fase líquido

$$k_L = 0.757 * C_L * \left(\frac{D_L * a * v_L}{\varepsilon * h_L}\right)^{0.5}$$
Ec. 34

#### **ALTURA DE EMPAQUE**

• Altura de empaque

$$Z = HTU_G * NTU_G$$
 Ec. 35

• Flux molar del gas a la entrada

$$G_{My(1)} = \frac{4 * N_{G(1)}}{3600 * \pi * D^2}$$
 Ec. 36

• Flux molar del gas a la salida

$$G_{My(2)} = \frac{4 * (N_{G(1)} - N_{et(abs)})}{3600 * \pi * D^2}$$
 Ec. 37  

$$N_{et(abs)}: flujo \ molar \ de \ etanol \ absorbido = \left(\frac{Q_G \cdot \rho_G}{M_G}\right)$$

• Promedio del flux molar del gas

$$G_{My} = \frac{G_{My(1)} + G_{My(2)}}{2}$$
 Ec. 38

• Flux molar del líquido a la entrada

$$G_{Mx(2)} = \frac{4 * N_{L(2)}}{3600 * \pi * D^2}$$
 Ec. 39  

$$N_{L(2)}: Flujo \ molar \ interno \ del \ líquido \ \left[\frac{kmol}{h}\right] = \left(\frac{m_{L(2)}}{M_A}\right)$$

• Flux molar del líquido a la salida

$$G_{Mx(1)} = \frac{4 * (N_{L(2)} + N_{et(abs)})}{3600 * \pi * D^2}$$
 Ec. 40

• Factor de absorción en el fondo

$$A_{(1)} = \frac{G_{M\chi(1)}}{G_{M\chi(1)} * m}$$
 Ec. 41

• Factor de absorción en el domo

$$A_{(2)} = \frac{G_{Mx(2)}}{G_{My(2)} * m}$$
 Ec. 42

• Promedio geométrico del factor de absorción

$$A = \frac{A_{(1)} + A_{(2)}}{2}$$
 Ec. 43

• Composición molar de etanol en el gas a la salida

$$y_{et(2)} = (100 - \% R) * y_{et(1)}$$
 Ec. 44

• Coeficiente de transferencia de masa en fase gas

$$K_{\nu G} = k_G * a_h$$
 Ec. 45

• Coeficiente de transferencia de masa en fase líquido

$$K_{\nu L} = k_L * a_h * C_L$$
 Ec. 46  
$$C_L = \frac{\rho_L}{M_L}$$

• Coeficiente global de transferencia de masa

$$K_T = \frac{1}{\frac{1}{K_{\nu G}} + \frac{m}{K_{\nu L}}}$$
 Ec. 47

• Altura total de unidad de transferencia fase gas

$$HTU_{TG} = \frac{G_{My}}{k_T}$$
 Ec. 48

• Número total de unidades de transferencia fase gas

$$NTU_{TG} = \frac{ln\left[\left(\frac{y_{et(1)} - (m * x_{et(2)})}{y_{et(2)} - (m * x_{et(2)})} * \left(1 - \frac{1}{A}\right)\right) + \frac{1}{A}\right]}{1 - \frac{1}{A}}$$
Ec. 49

### **OPERACIÓN Y LÍNEA DE EQUILIBRIO**

- Fracción mol de etanol de la mezcla gas de entrada  $(y_{et(1)}) = 0.08$
- Fracción mol de etanol de la mezcla gas de salida  $(y_{et(2)}) = 0.0024$
- Fracción mol de etanol del líquido de entrada  $(x_{et(2)}) = 0$
- Fracción mol de etanol del líquido de salida

$$x_{et(1)} = \frac{N_{et(abs)}}{N_{L(1)}} = \frac{N_{et(abs)}}{N_{L(2)} + N_{et(abs)}} = 0.038$$
$$y^* = m * x$$
Ec. 50

Parámetro	Unidades	Ecuación No.	Valor
Peso molecular de la mezcla gas $(M_G)$	kg/kmol	Ec. 1	44.17
Densidad de la mezcla gas ( $ ho_G$ )	$kg/m^3$		2.01
Viscosidad de la mezcla gas $(\mu_G)$	$Pa \cdot s$	Ec. 3	1.42x10 <sup>-5</sup>

#### Tabla 3. Resultados de parámetros físicos

Tabla 4. Resultados de caída de presión y diámetro de la columna para cada empaque

Parámetro	Unidades	Ec. No.	Hiflow®	Pall®	Top Pak®	<b>VSP®</b>
$m_{et(abs)}$	kg/h	Ec. 4	649.35	649.35	649.35	649.35
$m_{L(1)}$	kg/h	Ec. 5	7149.35	7149.35	7149.35	7149.35
X	adm	Ec. 6	0.040	0.040	0.040	0.040
Y <sub>in</sub>	adm	Ec. 7	0.261	0.261	0.261	0.261
Cs <sub>in</sub>	adm	Ec. 8	0.101	0.061	0.107	0.071
$v_{Gin}$	m/s	Ec. 9	2.24	1.36	2.39	1.58
$v_G$	m/s	Ec. 10	1.57	0.95	1.67	1.11
D	m	Ec. 11	0.949	1.221	0.921	1.132
$d_p$	m	Ec. 12	0.0015	0.0108	0.0016	0.0006
K <sub>w</sub>	adm	Ec. 13	0.956	0.974	0.945	0.983
Re <sub>G</sub>	adm	Ec. 14	13822.8	6475.8	17821.2	4466.6
Ψο	adm	Ec. 15	0.355	0.597	0.499	0.730
L	$kg/(s \cdot m^2)$	Ec. 16	2.806	1.698	2.984	1.975
$v_L$	m/s	Ec. 17	0.0028	0.0017	0.0030	0.0020
Re <sub>L</sub>	adm	Ec. 18	34.27	15.77	44.70	10.83
<i>Fr<sub>L</sub></i>	adm	Ec. 19	7.4x10 <sup>-5</sup>	3.6x10⁻⁵	6.8x10 <sup>-5</sup>	8.2x10 <sup>-5</sup>
a <sub>h</sub> /a	adm	Ec. 20	0.696	0.812	0.742	0.824
$a_h$	$m^{-1}$	Ec. 21	64.05	98.29	55.66	169.57
$h_L$	adm	Ec. 22	0.0233	0.0262	0.0216	0.0396
$\Delta P_0/Z$	Pa/m	Ec. 23	91	140	118	199
$\Delta P/Z$	Pa/m	Ec. 24	112	159	152	223

Parámetro	Unidades	Ec. No.	Hiflow®	Pall®	Top Pak®	<b>VSP</b> ®
M <sub>AB</sub>	kg/kmol	Ec. 25	45.02	45.02	45.02	45.02
$\sigma_{AB}$	Å	Ec. 26	4.236	4.236	4.236	4.236
$\Omega_D$	adm	Ec. 27	1.364	1.364	1.364	1.364
$T^*$	adm	Ec. 28	1.120	1.120	1.120	1.120
$D_G$	cm <sup>2</sup> /s	Ec. 29	0.0821	0.0821	0.0821	0.0821
$D_L$	cm <sup>2</sup> /s	Ec. 30	1.36x10⁻⁵	1.36x10 <sup>-5</sup>	1.36x10 <sup>-5</sup>	1.36x10 <sup>-5</sup>
k <sub>G</sub>	$kmol/(s \cdot m^2)$	Ec. 32	0.0022	0.0021	0.0021	0.0021
Sc <sub>G</sub>	adm	Ec. 33	0.862	0.862	0.862	0.862
k <sub>L</sub>	m/s	Ec. 34	1.1x10 <sup>-4</sup>	1.1x10 <sup>-4</sup>	1.2x10 <sup>-4</sup>	1.3x10 <sup>-4</sup>
$G_{My(1)}$	$kmol/(s \cdot m^2)$	Ec. 36	0.071	0.043	0.076	0.050
$G_{My(2)}$	$kmol/(s \cdot m^2)$	Ec. 37	0.066	0.040	0.070	0.046
G <sub>My</sub>	$kmol/(s \cdot m^2)$	Ec. 38	0.069	0.041	0.073	0.048
$G_{MX(2)}$	$kmol/(s \cdot m^2)$	Ec. 39	0.142	0.086	0.151	0.100
$G_{MX(1)}$	$kmol/(s \cdot m^2)$	Ec. 40	0.147	0.089	0.157	0.104
A <sub>(1)</sub>	adm	Ec. 41	9.017	9.017	9.017	9.017
A <sub>(2)</sub>	adm	Ec. 42	9.408	9.408	9.408	9.408
Α	adm	Ec. 43	9.212	9.212	9.212	9.212
$y_{et(1)}$	adm	Ec. 44	0.0024	0.0024	0.0024	0.0024
$K_{\nu G}$	$kmol/(s \cdot m^3)$	Ec. 45	0.142	0.203	0.116	0.349
$K_{\nu L}$	$kmol/(s \cdot m^3)$	Ec. 46	0.391	0.592	0.372	1.172
K <sub>T</sub>	$kmol/(s \cdot m^3)$	Ec. 47	0.131	0.188	0.109	0.326
HTU <sub>G</sub>	m	Ec. 48	0.524	0.221	0.671	0.148
NTU <sub>G</sub>	adm	Ec. 49	3.81	3.81	3.81	3.81
Ζ	m	Ec. 35	2.0	0.8	2.6	0.6

Tabla 5. Resultados de coeficiente de difusión y de transferencia de masa para cada empaque

#### CONCLUSIONES

Analizando las variables se encuentra que; un incremento del flujo de alimentación de la mezcla de gas  $(Q_{G(1)})$ , manteniendo el flujo del disolvente constante  $(m_L)$ , incrementa los valores del diámetro de la columna (D), la caída de presión por altura de empaque  $(\Delta P/Z)$ , y altura de la columna (Z), mientras que, el coeficiente global de transferencia de masa  $(K_T)$ , disminuye; esto pasa con los cuatro tipos de empaque.

Por otra parte, un incremento en el flujo del disolvente  $(m_L)$ , manteniendo la alimentación de la mezcla de gas  $(Q_{G(1)})$  constante, provoca el incremento del diámetro de la columna (D) y el coeficiente global de transferencia de masa  $(K_T)$ , mientras que, la caída de presión por altura de empaque  $(\Delta P/Z)$  y la altura de la columna (Z) disminuyen, esto para los cuatro tipos de empaque.

Para este estudio se obtuvo que el tipo de empaque *VSP*® metálicos de 25 mm es el mejor para este proceso, ya que, mejora las condiciones de transferencia de masa con las menores dimensiones de la columna.

# 2. MODELOS MATEMÁTICOS PARA EL PROCESO DE ABSORCIÓN

El propósito principal del diseño de columnas empacadas para el proceso de absorción es, determinar los valores de variables y parámetros para el dimensionamiento de la columna, tales como diámetro y altura de la columna, así como una predicción del comportamiento de la transferencia de masa dentro de la columna.

El diseño de la columna requiere un conjunto de parámetros, los cuales dependen uno del resultado del otro, por lo que se debe seguir un algoritmo de cálculo para obtener los resultados finales. El algoritmo de cálculo para el diseño de una columna empacada es el siguiente:

- Fracción de líquido estancado
- Caída de presión
- Coeficiente de difusión
- Coeficiente de transferencia de masa
- Altura total de unidades de transferencia (HTU)
- Número total de unidades de transferencia (NTU)
- Diámetro de la columna
- Altura de la columna

A continuación, se describirá cada punto de este algoritmo y se establecerán las principales ecuaciones con las cuales se calcula ese parámetro, resaltando las constantes y variables involucradas en cada ecuación. Para ver las ecuaciones completas, consultar el Capítulo 3. METODOLOGÍA Y RESULTADOS.

#### 2.1. Fracción de líquido estancado

La fracción de líquido estancado es la porción del flujo de líquido que se encuentra bordeando los empaques dentro de la cama empacada. En esta porción de fluido es donde se realiza la transferencia de masa, ya que se encuentra en contacto directo con la otra fase fluida.

El líquido estancado no es en sí una fracción de líquido que se encuentra estática bordeando los empaques, ya que se encuentra en constante movimiento y es remplazada continuamente por una nueva fase líquida. (Billet, 1995), (Dutta, 2009), (Chattopadhyay, 2007), (Kolev, 2006), (Mackowiak, 2010).


Figura 3. Representación esquemática del líquido estancado en un empaque

Típicamente se manejan dos definiciones para este parámetro:

- Fracción de líquido estancado estático

Este factor es el volumen del líquido por unidad de volumen de empaque que permanece en la cama empacada cuando se ha drenado la columna posterior a que ha sido inundada; su efecto en la columna es insignificante.

- Fracción de líquido estancado bajo operación

Como lo dice su nombre, es el volumen del líquido por unidad de volumen de empaque que permanece en la cama empacada cuando hay flujo de líquido en operación.

Existen estas dos definiciones para el líquido estancado ya que la parte estática se utiliza cuando el suministro de disolvente (fase líquida) en la columna es discontinuo, con lo cual considerarse que, es un valor fijo y mínimo para el parámetro de líquido estancado.

Cabe mencionar que la suma de estos dos parámetros da como resultado la fracción de líquido estancado total.

Un estancamiento de líquido razonable facilita la transferencia de masa, pero un estancamiento excesivo aumenta la caída de presión; por tal motivo es un parámetro que debe definirse previo al cálculo de la caída de presión.

Autor / Referencia	Ecuación básica	Ec. No.
Shulman/Ulrich/Wells (Shulman, Ullrich, & Wells, 1955), (Shulman, Ullrich , Wells, & Proulx, 1955), (Kolev, 2006) (Chattopadhyay, 2007)	$\begin{aligned} h_L &= h_e + h_o \\ h_{L,w} &= h_{e,w} + h_{o,w} \end{aligned}$	Ec. 51 Ec. 52
Billet ( Billet, 1995)	$h_{L(v_{G} \leq v_{G,C})} = \left(12\frac{Fr_{L}}{Re_{L}}\right)^{1/3} \left(\frac{a_{h}}{a}\right)^{2/3}$	Ec. 53
Billet ( Billet, 1995)	$h_{L(v_G > v_{G,C})} = h_e \left[ 1 + 1.2 \left( \frac{v_G}{v_{G,I}} \right)^{13} \right]$	Ec. 54
Engel (Chattopadhyay, 2007)	$h_L = 0.93 (Fr_L)^{1/6} \left(\frac{\mu_L^2 * a^3}{\rho_L * g}\right)^{1/10} \left(\frac{\sigma_L * a^2}{\rho_L * g}\right)^{1/8}$	Ec. 55
Kushalkar/Pangerkar	Anillo Raschig 25 mm cerámico. $h_L = 0.1024 \; (v_L)^{0.527}$	Ec. 56
(Kolev, 2006)	Anillo Pall 25 mm metálico. $h_L = 0.1088 \; (v_L)^{0.4887}$	Ec. 57

## 2.1.1. Modelo de Shulman/Ulrich/Wells

Shulman et al. redactaron una serie de nueve artículos en el AIChe Journal entre 1955 y 1971, en los cuales describieron diferentes modelos para explicar los fenómenos que se presentan en columnas empacadas y con ello estimar variables requeridas para el diseño (primeros ocho artículos) y simulación (noveno artículo) de una columna. Todos estos trabajos fueron publicados bajo el título de "Performance of Packed Columns" con la siguiente secuencia:

- I. Total, Static, and Operating Holdups.
  - o (Shulman, Ullrich, & Wells, 1955).
- II. Wetted and Effective-interfacial Areas, Gas and Liquid-phase Mass Transfer Rates.
  - o (Shulman, Ullrich, Proulx, & Zimmerman, 1955)
- III. Holdup for Aqueous and Nonaqueous Sytems.
  - (Shulman, Ullrich , Wells, & Proulx, Perfomance of Packed Columns. III.
     Holdup for Aqueous and Nonaqueous Systems, 1955)
- IV. Effect of Gas Properties, Temperature, and Pressure on Gas Phase Mass Transfer Coefficients.

- (Shulman & Margolis, 1957)
- V. Effect of Solute Concentration on Gas-Phase Mass Transfer Rates.
  - (Shulman & Delaney, 1959)
- VI. Mass Transfer Rates for Dehumidification at High Solute Concentrations}.
   (Shulman & Robinson, 1960)
- VII. The Effect of Holdup on Gas-Phase Mass Transfer Rates.
  - o (Shulman, Savini, & Edwin, 1963)
- VIII. liquid Flow Patterns and Velocities in Packed Beds.
  - o (Shulman & Mellish, 1967)
- IX. Simulation of a Packed Column.
  - o (Shulman, Mellish, & Lyman, 1971)

Estos autores recopilaron información de autores previos y centraron su estudio en columnas empacadas empleando empaques aleatorios tipo Raschig cerámicos (unglazed white porcelain Raschig rings, U. S. Stoneware Co.), de carbono (carbon Raschig rings, National Carbon Co.) y empaques de sillas de montar tipo Berl cerámicas (unglazed white porcelain Berl saddles, Maurice A. Knight Co.). Estos trabajos han sido citados en muchos libros y referencias aún hasta nuestros días (Billet, 1995), (Kolev, 2006), (Chattopadhyay, 2007), (Dutta, 2009):

$$h_L = h_o + h_e Ec. 51$$

$$h_{L,w} = h_{e,w} + h_{o,w}$$
 Ec. 52

Donde:

 $h_L$  es la fracción total del líquido.

 $h_e$  es la fracción de líquido estancado.

 $h_o$  es la fracción de líquido estancado bajo operación.

Las variables  $h_{L,w}$ ,  $h_{o,w}$ ,  $h_{e,w}$ , tienen la misma definición que sus análogas, con la diferencia que estas expresiones consideran agua o una solución acuosa diluida como corriente líquida.

Para el cálculo de cada una de estas fracciones de líquido  $h_L$  y  $h_e$ , los autores emplearon correlaciones semi-empíricas descritas en la Tabla 7 y que fueron obtenidas a partir de la experimentación con los tres tipos de empaques ya descritos. En este caso se tienen dos conjuntos de ecuaciones para cada fracción del líquido.

Un conjunto de ecuaciones describe columnas que empleen agua como líquido, para los empaques sobre los que realizaron su experimentación. El otro juego describe un caso más general para cualquier disolvente, donde los exponentes y coeficientes dependerán del tipo de empaque y líquido a emplear. Desafortunadamente, hasta donde nuestra búsqueda se desarrolló, no se encontraron datos de los coeficientes ni exponentes fuera de los empaques empleados por estos autores, los de tipo Raschig y tipo Berl.

A pesar de ello, los trabajos del grupo de Shulman generados a lo largo de 16 años sentaron las bases para el entendimiento de las variables y fenómenos que suceden dentro de las columnas empacadas y que posteriormente otros autores con enfoques distintos retomaron y citaron (Billet, 1995), (Kolev, 2006), (Chattopadhyay, 2007), (Benitez, 2009), (Dutta, 2009).

#### Tabla 7. Relaciones para el cálculo de la fracción de líquido estancado empleando el modelo de Shulman/Ulrich/Wells (Shulman, Ullrich, & Wells, 1955), (Shulman, Ullrich , Wells, & Proulx, 1955), (Kolev, 2006), (Chattopadhyay, 2007)

Variable	Referencia	Ecuación	Ecuación No.
Fracción del líquido estancado	(Kolev, 2006), (Chattopadhyay, 2007)	$h_e = \frac{b_{shu}}{d_p^{p_{shu}}} \frac{\mu_L^{m_{shu}} \sigma^{n_{shu}}}{\rho_L^{0.37}}$	Ec. 58
estático para empaques tipo Raschig y Berl considerando cualquier líquido.	(Shulman, Ullrich , Wells, & Proulx, 1955)	$h_e = b_{shu} \frac{\mu_L^{m_{shu}} \sigma^{n_{shu}}}{\rho_L^{0.37}}$	Ec. 59
Diámetro	(Kolev, 2006)	$d_p = \sqrt{rac{a_l}{\pi}}$	Ec. 60
efectivo de empaque.	(Chattopadhyay, 2007)	$d_p = \frac{6(1-\epsilon)}{a}$	Ec. 12
Fracción del líquido estancado estático considerando agua o solución acuosa.	(Chattopadhyay, 2007)	$h_{e,w} = \frac{b_{shu,w}}{d_p^{p_{shu}}}$	Ec. 61
Fracción del líquido que fluve	(Shulman, Ullrich , Wells, & Proulx, 1955)	$h_o = b_{shu,o} L^{0.57} \frac{\mu_L^{m_{shu,o}}}{\rho_L^{0.84}} \left(\frac{\sigma}{73}\right)^{(n_{shu,o} - 0.262 \log L)}$	Ec. 62
en operación para empaques tipo Raschig y Berl.	(Chattopadhyay, 2007)	$h_o = h_{o,w} H_{shu}$	Ec. 63
	(Chattopadhyay, 2007)	$h_{L,w} = \frac{b_{shu,Lw}}{d_p^2} (737.5 L)^{1.508 d_p^{0.376}}$	Ec. 64
Factor de corrección de la fracción del líquido estancado.	(Chattopadhyay, 2007)	$H_{shu} = \frac{b_{shu,H} L^{0.57} \mu_L^{m_{shu,H}}}{\rho_L^{0.84} (w_{shu,H} L^{f_{shu,H}} - 1)} \left(\frac{\sigma}{0.073}\right)^{(n_{shu,H} - 0.262 \log L)}$	Ec. 65

Tabla 8. Recopilación de valores de las constantes asociadas y unidades empleadas por diferentes autores, para el cálculo de la fracción del líquido estancado empleando el modelo de Shulman/Ulrich/Wells

	Valores de las constantes para las ecuaciones de Shulman, reportados por distintos autores														
Empaque	Referencia	<b>b</b> <sub>shu</sub>	<b>p</b> <sub>shu</sub>	m <sub>shu</sub>	n <sub>shu</sub>	b <sub>shu,w</sub>	b <sub>shu,o</sub>	m <sub>shu,o</sub>	n <sub>shu,o</sub>	b <sub>shu,Lw</sub>	b <sub>shu,H</sub>	$m_{shu,H}$	W <sub>shu,H</sub>	f <sub>shu,H</sub>	n <sub>shu,H</sub>
	(Shulman, Ullrich, & Wells, 1955)	0.0002	1.21	0.02	0.99	1.04x10 <sup>-3</sup>	$\mu < 12 cP$ 3.9x10 <sup>-4</sup> $\mu > 12 cP$ 2.5x10 <sup>-4</sup>	$\mu < 12 cP$ 0.13 $\mu > 12 cP$ 0.31	0.925	-	-	-	-	-	-
Anillo Raschig	(Kolev, 2006)	0.0046	1.21	0.02	0.99	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Cerámico	(Chattopadhyay, 2007)	0.0486	1.21	0.02	0.99	2.47x10 <sup>-4</sup>	_	-	-	2.09x10 <sup>-6</sup>	$\mu < 0.012 \frac{Kg}{m s}$ 975.7 $\mu > 0.012 \frac{Kg}{m s}$ 2168	$\mu < 0.012 \frac{Kg}{m s}$ $0.13$ $\mu > 0.012 \frac{Kg}{m s}$ $0.31$	2.024	0.43	0.1737
	(Shulman, Ullrich, & Wells, 1955)	0.0185	1.21	0.02	0.23	2.50x10 <sup>-3</sup>	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Anillo Raschig Carbón	(Kolev, 2006)	0.0113	1.21	0.02	0.28	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	(Chattopadhyay, 2007)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	(Shulman, Ullrich, & Wells, 1955)	0.0012	1.56	0.04	0.55	3.20x10 <sup>-4</sup>	$\mu < 20 \ cP$ 4.3x10 <sup>-4</sup> $\mu > 20 \ cP$ 2.5x10 <sup>-4</sup>	$\mu < 20 cP$ 0.13 $\mu < 20 cP$ 0.31	1.033	2.32x10 <sup>-6</sup>	-	-	-	-	-
Silla de Montar	(Kolev, 2006)	0.0008	1.56	0.04	0.55	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Beri Cerámico	(Chattopadhyay, 2007)	0.0042	1.56	0.04	0.55	5.014x10 <sup>-</sup> 5	-	-	-	-	$\mu < 0.012 \frac{Kg}{m s}$ $1404$ $\mu > 0.012 \frac{Kg}{m s}$ $2830$	$\mu < 0.012 \frac{Kg}{m s}$ $0.13$ $\mu > 0.012 \frac{Kg}{m s}$ $0.31$	3.24	0.413	0.2817
(Shulman, Ullrich, & Wells, 1955) $d_p = [ft], \mu_L = \left[\frac{lb}{hr} f_t\right], L = \left[\frac{lb}{ft^2}\right], \rho = \left[\frac{lb}{ft^3}\right], \sigma = \left[\frac{dyn}{cm}\right]$															
(Кс	blev, 2006)	$d_p = [r$	$n], \mu_L =$	= [mPa	s], L =	$\left[\frac{Kg}{m^2s}\right]$	, $\rho = \left[\frac{Kg}{m^2}\right]$	$\sigma = [mN/\gamma]$	<i>n</i> ]						
(Chattopadhyay, 2007) $d_p = [m], \mu_L = [Pa \ s], L = {Kg / m^2 s}, \rho = {Kg / m^3}, \sigma = {N/m}$															

Kolev (Kolev, 2006) y Shulman et al. (Shulman, Ullrich , Wells, & Proulx, 1955) establecen el cálculo de la fracción del líquido estancado  $h_L$  de forma directa, calculando  $h_e$  con la ecuación Ec. 58 o Ec. 59, respectivamente, d<sub>p</sub> con la Ec. 60 y  $h_o$  Ec. 61 la Ec. 62, para después sumar ambas fracciones y calcular  $h_L$  con la Ec. 51.

Chattopadhyay (Chattopadhyay, 2007) por su parte en un cálculo de la fracción del líquido estancado para una columna de absorción de benceno empleando hidrocarburos como agentes de separación líquido, dentro de una columna empacada con sillas de montar tipo Berl, empleó otro algoritmo de cálculo, que a continuación se muestra:

- 1. Calcula el flux másico en las unidades pertinentes  $[kg/(s \cdot m^2)]$ .
- 2. Con el diámetro equivalente  $d_p$  (que se da como dato en el problema), se estima la fracción del líquido estancado estático considerando agua o solución acuosa  $h_{e,w}$ , empleando la Ec. 61.
- 3. Con el diámetro equivalente  $d_p$ , el flux másico y las respectivas constantes de la Tabla 8 se calcula la fracción del líquido estancado total  $h_{L,w}$  para empaques tipo Raschig y Berl considerando agua y empleando la Ec. 64.
- 4. Con los valores de  $h_{e,w}$  y  $h_{L,w}$  se despeja de la Ec. 52 y se calcula la fracción del líquido estancado en operación considerando agua,  $h_{o,w}$ .
- 5. Con las propiedades pertinentes, la Ec. 65 y  $h_{o,w}$  se calcula  $H_{shu}$ .
- 6. Con la Ec. 58 y las propiedades correspondientes se calcula  $h_e$ .
- 7. Con la Ec. 63 se calcula  $h_o$ .
- 8. Con  $h_o$  y  $h_e$  se calcula  $h_L$  empleando la Ec. 51.

## 2.1.2. Modelo de Billet

Para comprender el modelo de Billet se debe de realizar el análisis de la sección de una columna empacada, donde se considera de esta un elemento diferencial de altura  $d_z$  con su respectivo radio de la columna  $r_c$ . En el interior de este elemento diferencial se tiene la presencia de pequeños elementos de empaque aleatorios distribuidos de forma igual al resto de la columna.

A esta sección entra un flujo de gas con el soluto a remover y de líquido empleado en la remoción. De igual forma salen corrientes de estas fases desde esta sección alimentando etapas anteriores y subsecuentes. Estas corrientes de gas y líquido generan patrones de flujo dentro del elemento diferencial entre las piezas de empaque. Entre los elementos del empaque tanto el líquido como el gas pueden o no entrar en contacto entre sí.

Se considera que el líquido escurre por la pared del empaque formando una película de espesor determinado. Aunque hay un flujo continuo del líquido este se "adhiere" a las paredes del empaque. A este líquido se le conoce como "líquido estancado"; el gas ocupa el espacio libre dentro del segmento diferencial de la columna mientras fluye.

Consideremos qué elementos ocupan el volumen dentro del segmento diferencial de la columna empacada:

- El volumen de este elemento diferencial es:  $V_C = \pi r_C^2 d_Z$
- Si se pudiera compactar el material del empaque ocuparía un cierto volumen dentro de nuestro elemento diferencial (V<sub>P</sub>).
- El líquido ocupa también un cierto volumen (V<sub>L</sub>).
- El volumen restante es disponible y se considera que el gas se expande hasta ocuparlo por completo  $(V_V)$ .
- Por ende, tenemos que:  $V_C = V_P + V_L + V_V$

Si dividimos toda la expresión entre  $V_c$  obtenemos una expresión adimensional en términos de fracciones de volumen:

$$1 = \frac{V_P}{V_C} + \frac{V_L}{V_C} + \frac{V_V}{V_C}$$

Donde:

- Fracción de volumen vacío dejado por el empaque:  $\varepsilon = \frac{V_C V_P}{V_C} = \frac{[L_{libre\,seco}^3]}{[L_{V_C}^3]}$
- Fracción de volumen ocupada por el empaque:
- $1 \varepsilon = \frac{V_P}{V_C} = \frac{\left[L_{empaque}^3\right]}{\left[L_{V_C}^3\right]}$  $h_L = \frac{V_L}{V_C} = \frac{\left[L_{l(quido)}^3\right]}{\left[L_{V_C}^3\right]}$

 $\frac{V_V}{V_C} = (\varepsilon - h_L) \frac{\left[L_{gas}^3\right]}{\left[L_{Wa}^3\right]}$ 

- Fracción del líquido estancado:
- Fracción de volumen ocupada por el gas:

Posterior a este análisis se tiene la premisa del modelo de Billet:

- Si aislamos una pieza de empaque dentro de una columna empacada en un segmento de la columna con altura diferencial  $d_z$ , se observaría que el líquido fluye cubriendo la pieza y siempre hay una fracción de líquido estancado que la rodea  $(h_L)$ .
- Se considera constante el espesor de esta capa de líquido alrededor del empaque y se denota como  $(S_0)$ .
- El líquido desciende debido a la fuerza de gravedad (g).
- Este flujo de líquido genera un perfil de esfuerzos (cortante) desde la pared del empaque, hasta la interfase con el gas ( $\tau_L$ ).
- El líquido descendente y el gas ascendente, generan fricción en la interfase, la cual se denota como arrastre  $(F_D)$ .
- Ambas fases se mueven a velocidades diferentes  $v_L$  y  $v_G$ , además de que presentan valores de densidad  $\rho_L$  y  $\rho_G$  y viscosidad  $\mu_L$  y  $\mu_G$ , propias de cada fase. Se denota como  $\varepsilon$  a la fracción de volumen vacío descontando el empaque.
- Se lleva a cabo un balance de fuerzas en un diferencial de distancia " $d_s$ " dentro de la película de líquido descendente alrededor del empaque

Si existen condiciones de estado estacionario, se desprecian las fuerzas inerciales y se considera que no hay cambio significativo en la presión. Se puede suponer que la fuerza de gravedad está en equilibrio con las fuerzas de corte en cualquier punto dado en una capa coaxial de espesor y en dirección *S* dentro de la película líquida y que la fuerza de fricción ejercida por el vapor de densidad  $\rho_G$  actúa en la superficie de la película. Por lo tanto, el balance de fuerzas se deduce del balance de momentum en cualquier capa en la posición *S* dentro de la película de espesor  $S_0$ . Billet plantea la ecuación de cantidad de movimiento en base a suposiciones anteriores. Después de algunas simplificaciones obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{d\left(\mu_L \frac{dv_{L,e,S}}{d_S}\right)}{d_S} = -\rho_L g \qquad \qquad 0 \le S \le S_0$$

Se sabe que la velocidad del flujo descendente de líquido se expresa como función de la densidad, la viscosidad del líquido y la posición *S* con dependencia cuadrática:

$$v_{L,e,S} = KS - \frac{\rho_L g}{2\mu_L} S^2$$

Donde *K* es una constante, *S* representa la posición a lo largo de la película del líquido, *g* es la magnitud de la fuerza de gravedad,  $\mu_L$  es la viscosidad del líquido y  $\rho_L$  es la densidad del líquido.

Sustituyendo la expresión de velocidad en la derivada resultante del balance de momentum:

$$\frac{d(v_{L,e,S}=)}{d_S} = K - 2\frac{\rho_L g}{2\mu_L}S$$

Considerando a  $S = S_0$  y multiplicando por la viscosidad, obtenemos el esfuerzo cortante del lado del líquido, quedando así nuestra expresión como sigue:

$$\mu_L \frac{d(v_{L,e,S}=)}{d_S} = \mu_L K - \rho_L g S_0$$

En estado estacionario el esfuerzo cortante del lado del líquido está en equilibrio con la fuerza de arrastre del lado del gas que fricciona al líquido en la interfase.



Figura 4. Representación esquemática del modelo de transferencia de masa de Billet (Apuntes de la clase de procesos de separación, Facultad de Química 2022) Para llegar a la ecuación del esfuerzo cortante del lado del líquido, Billet toma la solución derivada del modelo de Stokes, donde Bird toma el problema de Stokes y lo resuelve para el flujo alrededor de una esfera, mismo problema que se encuentra desarrollado en su libro (Bird et al., 2015).

Del desarrollo del problema de Stokes se obtienen las siguientes ecuaciones:

- Fuerza de arrastre - Coeficiente de arrastre o de resistencia  $F^{(d)} = \frac{\psi_o}{2} \rho_G v^2 A_f$   $\psi_o = C_P \left(\frac{1}{Re_c}\right)^2 + \left(\frac{1}{Re_c}\right)$ 

Retomando las ecuaciones del modelo de transferencia de masa de Billet, sabemos que el esfuerzo cortante del lado del líquido es igual a:

$$\mu_L \frac{d(v_{L,e,S}=)}{d_S} = \mu_L K - \rho_L g S_0$$

Resulta ser que en operaciones a régimen permanente este esfuerzo está en equilibrio con el esfuerzo relacionado con la fuerza de arrastre:

Esfuerzo cortante del  $\mu_L \frac{d(v_{L,e,S})}{d_S} = \frac{F^{(d)}}{A_f}$  Esfuerzo cortante de la fuerza de arrastre del gas

Sustituyendo ambas expresiones obtenemos la siguiente ecuación

$$\mu_L K - \rho_L g S_0 = -\frac{\psi_o}{2} \rho_G v^2$$

Donde  $v = \overline{v_G}$  es la velocidad del gas. De esta forma podemos obtener la expresión para la constante K, considerando que estas ecuaciones modelan un fluido descendente en flujo laminar y un gas ascendente en flujo laminar también:

$$K = \frac{\rho_L g S_0}{\mu_L} - \frac{\psi_o}{2\mu_L} \rho_G v_{G,e}^2$$

La velocidad teórica promedio del líquido dentro de la película de fluido alrededor del empaque de espesor  $S_0$  se define como:

$$v_{L,e} = \frac{1}{S_0} \int_0^{S_0} v_{L,e,S} \, ds$$

Las velocidades promedio locales del líquido y del gas o también conocidas como velocidades efectivas, se asocian con la velocidad promedio del fluido en la columna mediante las siguientes expresiones:

$$v_{L,e} = \frac{v_L}{aS_0} = \frac{v_L}{h_L} \qquad \qquad v_{G,e} = \frac{v_G}{\varepsilon - h_L} = \frac{v_G}{\varepsilon - aS_0}$$

Las velocidades promedio de los fluidos en la columna ( $v_L$ ,  $v_G$ ) se obtienen a partir de las dimensiones de la columna, en específico el radio de la columna ( $r_c$ ), las densidades de los fluidos ( $\rho_L$ ,  $\rho_G$ ), el peso molecular de los fluidos ( $M_L$ ,  $M_G$ ) y los flujos molares ( $N_L$ ,  $N_G$ ):

$$v_x = \frac{N_x}{\pi r_c^2} \frac{M_x}{\rho_x}$$

De esta forma queda implícito que las velocidades promedio locales (alrededor del empaque) del líquido y del gas son diferentes a las velocidades promedio de la comuna y se relacionan con los flujos molares del líquido y del gas, con el área transversal de la columna, pero también con el espesor de película del líquido que se forma alrededor del empaque y de la relación área volumen del mismo empaque.

$$v_{L,e} = \frac{M_L N_L}{aS_0 \rho_L \pi r_c^2} = \frac{M_L N_L}{h_L \rho_L \pi r_c^2} \qquad \qquad v_{G,e} = \frac{N_G}{\pi r_c^2} \frac{M_G}{\rho_G} \frac{1}{\varepsilon - h_L} = \frac{N_G}{\pi r_c^2} \frac{M_G}{\rho_G} \frac{1}{\varepsilon - aS_0}$$

Retomando la ecuación siguiente para la velocidad:

$$v_{L,e} = \frac{S_0}{\mu_L} \left( \frac{1}{3} \rho_L g S_0 - \frac{\psi_o}{4} \rho_G v_{G,e}^2 \right)$$

Al sustituir los valores de velocidad efectiva para el gas y el líquido y el espesor de película  $S_0$  en la ecuación anterior, mediante algunos arreglos nos queda lo siguiente:

$$v_L \mu_L a^2 = (h_L)^3 \left\{ \frac{\rho_L g}{3} - \frac{\psi_o}{4} \left[ \frac{a}{h_L (\varepsilon - h_L)^2} \right] \rho_G (v_G)^2 \right\}$$

Si el exponente de la fracción del líquido estancado lo sustituimos por una variable 1/n. Donde n = 1/3 para columnas con flujo laminar en canales verticales. Al dejar el exponente como 1/n es posible ajustar el parámetro "n" en función del régimen de flujo y otros efectos no considerados hasta el momento.

$$v_L \mu_L a^2 = (h_L)^{1/n} \left\{ \frac{\rho_L g}{3} - \frac{\psi_0}{4} \left[ \frac{a}{h_L (\varepsilon - h_L)^2} \right] \rho_G (v_G)^2 \right\}$$

Esta ecuación representa la dinámica de fluidos y describe el flujo en términos de la carga de la columna, las propiedades físicas de las corrientes del gas y del líquido, y las características del empaque.

R. Billet retoma y modifica la ecuación anterior, obteniendo la siguiente ecuación para la fracción de líquido estancado, en la cual el exponente n depende del tipo de empaque.

$$h_L = \left[\frac{a^2 \mu_L v_L}{\frac{\rho_L g}{3} - \frac{\psi_o}{4} \left(\frac{a}{h_L (\varepsilon - h_L)^2}\right) \rho_G(v_G)^2}\right]^n$$

A partir de la ecuación anterior él trabaja con números adimensionales y demás variables y obtiene la Ec. 53 y Ec. 54 representadas en la Tabla 6.

En las secciones 2.1.1 y 2.1.2 se proporcionan los antecedentes para el cálculo de estas propiedades y la obtención de las ecuaciones para la fracción de líquido estancado, combinando las dos principales escuelas de las diversas existentes. No es relevante para este escrito el introducirnos a la explicación de los demás modelos, ya que, son variantes de los anteriormente explicados.

#### 2.2. Caída de presión

La caída de presión dentro de la columna es un indicador de la dificultad que tiene el fluido (mezcla gaseosa) para atravesar la columna. A grandes valores de caída de presión menor transferencia de masa y mayores dimensiones para la columna.

Este parámetro se ve afectado principalmente por la velocidad del fluido, su densidad y su viscosidad. También se ve afectada, aunque en menor medida por las características del empaque, tales como, porosidad del empaque, factor de pared, factor hidráulico, factor de transferencia de masa, diámetro de partícula, área superficial de transferencia de masa y fracción de líquido estancado.

La caída de presión es un parámetro muy importante en el diseño de columnas empacadas, ya que estas columnas son comúnmente diseñadas usando dos criterios principales: una aproximación de la velocidad del gas de inundación o una caída de presión máxima permitida. Las columnas empacadas que fungen como absorbedores usualmente son diseñadas para caídas de presión entre 200 a 400 Pa/m. (Benitez, 2009)

Por tal motivo, es importante definir esta variable antes de continuar el proceso de cálculo para el diseño de la columna, ya que, si no se opera dentro del rango de caída de presión recomendado, sería necesario redefinir los puntos que afectan el cálculo.

## 2.2.1. Caída de presión en seco

La caída de presión en seco es un parámetro medido en la columna en ausencia de flujo de líquido, el cual es siempre menor que la caída de presión bajo inundación o total.

Autor / Referencia	Ecuación básica	Constante	Ec. No.
( Billet, 1995)	$\Delta P_0/Z = C(v_G^2 * \rho_G)$	$C = \psi_o * \frac{a}{2 * \varepsilon^3 * K_w}$	Ec. 66
Carmen/Kozeny (Chattopadhyay, 2007)	$\Delta P_0/Z = C(v_G * \mu_G)$	$C = \frac{C'}{\varepsilon^3} \left(\frac{1-\varepsilon}{d_p}\right)^2$	Ec. 67
Burke/Plummer (Chattopadhyay, 2007)	$\Delta P_0/Z = C(v_G^2 * \rho_G)$	$C = \frac{C^{\prime\prime}}{d_p} \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right)$	Ec. 68
Sabri Ergun (Sabri, 1952)	$\Delta P_0 / Z = C_1 (v_G * \mu_G) + C_2 (v_G^2 * \rho_G)$	$C_1 = \frac{C'}{\varepsilon^3} \left(\frac{1-\varepsilon}{d_p}\right)^2$ $C_2 = \frac{C''}{d_p} \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3}\right)$	Ec. 69
(Chattopadhyay, 2007)	$\Delta P_0/Z = C(v_G^2 * \rho_G)$	C = C	Ec. 70
R. Zarzycki (Roman & Andrzej , 1993)	$\Delta P_0/Z = C(v_G^2 * \rho_G)$	$C = \frac{f'}{2 * d_p * \varepsilon^2}$	Ec. 71
(Chattopadhyay, 2007)	$\Delta P_0/Z = C(v_G^2 * \rho_G)$	$C = \frac{f' * a}{8 * \varepsilon^{4.65}}$	Ec. 72

Tabla 9. Ecuaciones para la caída de presión en seco

## 2.2.2. Caída de presión total

La caída de presión total o bajo inundación es medida con flujo de líquido a través de la columna. Este flujo cambia la estructura del lecho empaquetado debido a la cantidad de líquido estancado.

Autor / Referencia	Ecuación básica	Constante	Ec. No.
Reinhard Billet (Billet, 1995)	$\Delta P/Z = C(v_G^2 * \rho_G)$	$C = \psi_o * W * \frac{a}{2 * \varepsilon^3 * K_w} \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon - h_L}\right)^{1.5}$	Ec. 73
M. Leva (Chattopadhyay, 2007)	$\Delta P/Z = C(v_G^2 * \rho_G)$	$\mathcal{C}=\mathcal{C}_2(10^{\mathcal{C}_3*\boldsymbol{v}_L})$	Ec. 74
Kister and Gill (Benitez, 2009) (Dutta, 2009)	$\Delta P/Z = 93.9 F_p^{0.7}$		Ec. 75
Kister and Larson (Wankat, 2012)	$\Delta P/Z = C\left(\frac{1}{\rho_G}\right)$	$C = \alpha (10^{\beta * L}) * G^2$	Ec. 76
R. Zarzycki (Roman & Andrzej , 1993)	Método gráfico		Ec. 77

Tabla 10. Ecuaciones para la caída de presión total

## 2.3. Coeficiente de difusión

Esta variable representa la facilidad con la que cierto compuesto se difunde en un disolvente determinado y se define como la relación entre el flux del componente y su gradiente de concentración.

El coeficiente de difusión es usualmente reportado en unidades de cm<sup>2</sup>/s. En unidades internacionales se representa como m<sup>2</sup>/s. El coeficiente es generalmente alto para los gases en un rango de  $(0.5 \times 10^{-5} \text{ a } 1 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s})$  para líquidos  $(10^{-10} \text{ a } 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s})$  y para solidos  $(10^{-14} \text{ a } 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s})$ , lo cual depende en gran parte de la movilidad de las moléculas. (Benitez, 2009)

Este parámetro también depende de la presión, temperatura y composición de la mezcla. La reducción de presión y aumento de temperatura en el sistema mejoran la difusividad de los gases, mientras que con un simple aumento de la temperatura se mejora la difusividad en los líquidos y sólidos.

Hoy en día puede hallarse una gran variedad de tablas con valores de difusividad para diferentes pares de compuestos, tanto para difusividad en gases, como para líquido, sin embargo, con las ecuaciones de la Tabla 11, se pueden obtener estos valores.

Autor / Referencia	Ecuación básica	Ec. No.
Wilke/Lee (Benitez, 2009)	$D_G = \frac{\left[3.03 - \left(\frac{0.98}{M_{AB}^{1/2}}\right)\right](10^{-3}) * T^{3/2}}{P * M_{AB}^{1/2} * \sigma_{AB}^2 * \Omega_D} * 0.0001$	Ec. 78
Chapman/Enskog (Dr. K., 2017)	$D_{G} = 1.858 \times 10^{-3} \frac{\sqrt{T^{3} \left(\frac{1}{M_{et}} + \frac{1}{M_{CO2}}\right)}}{P * \sigma_{AB}^{2} * \Omega_{D}}$	Ec. 79
Fuller (Dr. K., 2017)	$D_G = 10^{-3} * \frac{T^{1.75} * \sqrt{\frac{1}{M_{et}} + \frac{1}{M_{CO2}}}}{P\left[\left(\sum_I V_{i1}\right)^{1/3} + \left(\sum_I V_{i2}\right)^{1/3}\right]^2}$	Ec. 80
Mayduk/Minhas (Benitez, 2009)	$D_L = \frac{1.25 \times 10^{-8} (V_{et}^{-0.19} - 0.292) * T^{1.52} * \mu_L^n}{10000}$	Ec. 81
Stokes/Einstein (Dr. K., 2017)	$D_L = \frac{k_B * T}{6 * \pi * \mu_L * r_{et}}$	Ec. 82
Glasstone (Dr. K., 2017)	$D_L = \frac{k_B * T}{2 * \mu_L * r_{et}}$	Ec. 83

Tabla 11. Ecuaciones para los coeficientes de difusión para difusión en fase gas y en fase líquida

Existen muchas otras ecuaciones, adicionales a las de la Tabla 11. Esta variedad se da porque, algunas reportan mejores resultados con compuestos no polares, a ciertas condiciones de operación, a diferentes tamaños de partícula del soluto y lo más relevante, algunas de ellas son empíricas mientras que otras aparte de empíricas tienen una base experimental.

Para mayores detalles y modelos se pueden consultar las bases de los modelos reportados en Poling et al. (Poling, Prausnitz, & O'Connell, 2001)

En la Tabla 12 se reportan algunas ecuaciones adicionales para el coeficiente de difusión en la fase líquida.

Tabla 12. Ecuaciones extras para el coenciente de unusic	
Ecuación empírica de Scheibel	
$D_L = \frac{A * T}{\mu_L * V_1^{1/3}} \left[ 1 + \left(\frac{3V_2}{V_1}\right)^{2/3} \right]$	Ec. 84

Tabla 12 Ecuaciones extras para el coeficiente de difusión fase liquida

Ecuación empírica de Wilke and Chang		
$D_L = 4.4 x 10^{-8} \left(\frac{T}{\mu_L}\right)$	Ec. 85	
Ecuación empírica de King, Hsueh and Mas		
$D_L = \left(\frac{V_2}{V_1}\right)^{1/6} \left(\frac{\Delta H_{vap2}}{\Delta H_{vap1}}\right) $ Ec. 86		

Nota:

-Los subíndices 1 y 2 indican el soluto y el disolvente, respectivamente

-El volumen molar presentado en estas ecuaciones se refiere al volumen molar en el punto de ebullición -A= 8.2x10-8, excepto para los siguientes casos: 25.2x10-8 para agua si V<sub>1</sub> < V<sub>2</sub>; 18.9x10-8 para benceno si V<sub>1</sub> < 2V<sub>2</sub> y 17.5x10-8 para el resto si V<sub>1</sub> < 2.5V<sub>2</sub>

El coeficiente de difusión se utiliza en el cálculo del coeficiente de transferencia de masa, los cuales son directamente proporcionales.

 $\binom{Coeficiente \ de}{transferencia \ de \ masa} = \frac{Coeficiente \ de \ difusión}{Caracteristica \ de \ longitud} \binom{Factor \ de}{correlación}$ 

#### 2.4. Coeficiente de transferencia de masa

El coeficiente de transferencia de masa se define como la rapidez de transferencia de materia por unidad de volumen. Es un parámetro que describe la facilidad con la que se puede transferir materia; a mayor valor del coeficiente, más fácil será la transferencia.

La teoría de capa límite es el modelo principal que describe la transferencia de masa. La capa limite se desarrolla en la superficie de un fluido donde existe un gradiente de concentración debido a la transferencia de masa entre un fluido y otro. Esta transferencia depende del espesor de la capa limite y esta a su vez depende de las dimensiones del sistema y de las propiedades del fluido, tales como velocidad, densidad y viscosidad.

Este modelo es representado por la siguiente ecuación:

$$\left(\frac{k*L_c}{D}\right) = 0.323 \left(\frac{L_c*v^c*\rho}{\mu}\right)^{1/2} \left(\frac{\mu}{\rho*D}\right)^{1/3}$$
 Ec. 87

En términos adimensionales:

$$(Sh) = C(Re)^{1/2}(Sc)^{1/3}$$
 Ec. 88

Existen diversos modelos teóricos que describen la transferencia de masa, los cuales consideran que un soluto presente en una fase fluida migre a otra fase fluida contigua, donde una o ambas fases se encuentran en movimiento. Entre estas dos fases se encuentra una tercera, nombrada "interfase", la cual es donde se produce la migración del soluto, efecto que se llama transferencia de masa.

Estos modelos teóricos no representan de manera precisa el proceso de transferencia de masa, ya que no consideran muchos factores prácticos, tales como, tiempo de contacto diferente entre el fluido con los elementos del sistema, así como el movimiento relativo de las fases estancadas, zonas donde no hay contacto entre las fases gas y líquido. Es por ello que existen modelos empíricos o semi-empíricos que permiten obtener un mejor análisis del comportamiento de dos fluidos para su transferencia de masa, sin embargo, estos modelos siguen la misma analogía de modelo de capa límite.

Las diferentes formas de calcular el coeficiente de transferencia de masa se basan en la ecuación de capa límite, complementándola con una constante numérica y constante asociada al factor geométrico, el número de Reynolds y número de Schmidit elevados a sus respectivos exponentes, los cuales son comúnmente menores a 1; lo cual se representa en una ecuación básica (Ec. 89).

$$(Sh) = CQ(Re)^n (Sc)^m$$
 Ec. 89

C = Constante númerica

Q = Constante geometrica

En la Tabla 13, se presentan algunas de las ecuaciones con las que se puede calcular el coeficiente de transferencia de masa, tanto para la fase gas como para la fase líquida, las cuales siguen la analogía descrita anteriormente.

Autor / Referencia	Ecuación básica	Ec. No.
(Chattopadhyay, 2007)	$k_{G} = \frac{0.1D_{G}}{d_{p}} \left[ \frac{d_{p} (v_{G,e} + v_{L,e}) \rho_{G}}{\mu_{G}} \right]^{0.2405} \left( \frac{\mu_{G}}{\rho_{G} * D_{G}} \right)^{1/3}$	Ec. 90
(Chattopadhyay, 2007)	$k_{L} = \frac{0.3415D_{L}}{d_{p}} \left[ \frac{d_{p} \left( v_{G,e} + v_{L,e} \right) \rho_{L}}{\mu_{L}} \right]^{0.2337} \left( \frac{\mu_{L}}{\rho_{L} * D_{L}} \right)^{1/2}$	Ec. 91
(Cussler, 2009)	$k_G = 3.6 * Re^{0.7} * Sc^{1/3} (a * d_p)^{-2} (a * D_G)$	Ec. 92
(Cussler, 2009)	$k_G = 1.2 * (1 - \varepsilon)^{0.36} * Re^{0.64} * Sc^{1/3} \left(\frac{D_G}{d_p}\right)$	Ec. 93
(Cussler, 2009)	$k_{L} = 0.0051 * Re^{0.67} Sc^{-0.5} (a * d_{p})^{0.4} \left(\frac{1}{v_{L} * g}\right)^{-1/3}$	Ec. 94
(Cussler, 2009)	$k_L = 25 * Re^{0.45} * Sc^{0.5} \left(\frac{D_G}{d_p}\right)$	Ec. 95

Tabla 13. Ecuaciones para el coeficiente de transferencia de masa

La transferencia de masa se puede representar en diferentes unidades, tales como:

$$\left[\frac{m}{s}\right]$$

Utilizada antiguamente

$$\left[\frac{mol}{m^2 \cdot s \cdot Pa}\right]$$
 Utilizada comúnmente en procesos de absorción

$$\left[\frac{mol}{m^2 \cdot s}\right]$$

Utilizada especialmente en gases y para cálculos prácticos

$$\left[\frac{mol}{m^3 \cdot s}\right]$$

Utilizadas para nuestro proceso de calculo

Para la practicidad de los siguientes cálculos se tomarán las unidades de  $(mol/(s \cdot m^3))$ , lo cual implica que se tienen que ajustar las ecuaciones de la Tabla 13, ya que estas están dadas en (m/s); para convertir de unas unidades a otras, se emplearan las ecuaciones de la Tabla 14.

Tabla 14. Ecuaciones para la conversión de unidades el coeficiente de transferencia de masa

$$K_{\nu L} = k_L * C_L * a_h$$
 Ec. 96  
$$K_{\nu G} = k_G * \frac{P}{RT} * a_h$$
 Ec. 97

Tabla 15. Ecuación para el coeficiente global de transferencia de masa

$$K_T = \frac{1}{\frac{1}{k_{\nu G}} + \frac{m}{k_{\nu L}}}$$
 Ec. 98

La transferencia de masa sirve para conocer qué tan fácil será nuestro proceso de absorción y es necesaria para poder calcular la altura de la cama empacada. Es importante mencionar que al tener una buena transferencia de masa no es necesario tener alturas elevadas para la cama empacada.

## 2.5. Altura total de unidades de transferencia (HTU)

La altura total de unidades de transferencia representa la altura necesaria para poder lograr la transferencia de masa requerida dentro de la columna de absorción. Este parámetro está representado en unidades de longitud y significa la altura de la cama empacada.

HTU da una idea de la eficiencia del equipo de separación. Un HTU chico es señal de una buena torre y representa una gran área interfacial por unidad de volumen, o una transferencia de masa más rápida.

Como se puede observar en la Ec. 99, HTU es inversamente proporcional al coeficiente de transferencia de masa, lo cual indica que una buena transferencia de masa entre los fluidos que interactúan dentro de la columna representaría una altura menor de la cama empacada.

Los flujos del gas y del líquido aumentan cuando hay una buena transferencia de masa. Un aumento en el flujo del líquido (disolvente) mejora la transferencia de masa y como se puede observar directamente en la Ec. 100, este parámetro es inversamente proporcional al HTU del líquido, por lo que en conclusión un aumento en el flujo del líquido disminuiría el HTU total.

Es importante determinar el valor de HTU para poder calcular la altura total de la columna. El valor de HTU suele estar en un rango de 0.3 a 1 metro, (Cussler, 2009).

Ecuación básica	Ec. No.
$HTU_{GT} = \frac{G_{My}}{k_T}$	Ec. 99
$HTU_{GT} = HTU_G + \frac{m * G_{My}}{G_{Mx}} * HTU_L$	Ec. 100

Tabla 16. Ecuaciones para la altura total de unidades de transferencia

Se debe aclarar que los términos  $HTU_{GT}$  y  $NTU_{GT}$  están definidos para la fase gas, ya que, es la fase que representa mayor resistencia a la transferencia de masa. En otras palabras, es la fase que está transfiriendo el soluto al disolvente.

## 2.6. Número total de unidades de transferencia (NTU)

Es un parámetro adimensional que representa el número de unidades o número de etapas teóricas que se necesitan para llevar a cabo cierto cambio. En nuestro caso es la transferencia de masa requerida.

NTU es afectado principalmente por las fuerzas motrices, es decir, la diferencia de concentración de soluto en el seno de la fase gaseosa a la interfase, y de la interfase al seno de la fase líquida. Lo anterior se describe en la teoría de doble capa, como se observa en la Figura 5.



Figura 5. Teoría de doble capa

En algunas referencias de literatura como por ejemplo (Cussler, 2009) se describe a NTU como una medida de dificultad de separación. Si NTU es grande, la separación es difícil. Se necesitan tanto HTU como NTU para poder calcular la altura total de la columna.

Ecuación básica	Ec. No.
$NTU_{GT \ A \neq 1} = \frac{ln \left[ \frac{y_{et(1)} - m * x_{et(2)}}{y_{et(2)} - m * x_{et(2)}} \left( 1 - \frac{1}{A} \right) + \frac{1}{A} \right]}{lnA}$	Ec. 101
$NTU_{GT A=1} = \frac{y_{et(1)} - y_{et(2)}}{y_{et(2)} - m * x_{et(2)}}$	Ec. 102
$NTU_{GT} = \frac{\frac{y_{et(1)} - y_{et(2)}}{\Delta y_{et(1)} - \Delta y_{et(2)}}}{\frac{\Delta y_{et(1)} - \Delta y_{et(2)}}{\ln\left(\frac{\Delta y_{et(1)}}{\Delta y_{et(2)}}\right)}}$	Ec. 103
Método gráfico	Ec. 104
Método de los trapecios	Ec. 105

Tabla 17. Ecuaciones para el número total de unidades de transferencia

## 2.7. Diámetro de la columna

La capacidad de una torre empacada está determinada por el área de sección transversal. El diámetro mínimo permitido para una torre está delimitado por los flujos de líquido y gas, así como la caída de presión.

Como se puede observar en las ecuaciones de la Tabla 18, el diámetro no es un parámetro que necesite de los valores obtenidos en los puntos anteriores y, al contrario, hay algunos de ellos que necesitan del diámetro para ser determinados. Sin embargo, tanto el diámetro como la altura de la torre son requeridos desde el inicio para el diseño de la columna.

Ecuación básica	Ec. No.
Factor de capacidad vs parámetro de flujo a distintas caídas de presión	Ec. 106
$D = \left(\frac{4A_T}{\pi}\right)^{1/2}$	Ec. 107
$D = 5.4x10^{-3} \sqrt{G * \frac{T}{P} * \frac{1}{v_G}}$	Ec. 108

#### Tabla 18. Ecuaciones para el diámetro de la columna

## 2.8. Altura de la columna de absorción

La altura de una columna depende directamente de los valores de HTU y NTU, pero en términos generales una columna siempre será más alta si lo flujos en su interior son altos. De igual manera, será de mayores dimensiones si la cantidad que se necesita absorber es mayor.

Siempre se busca que una columna sea de dimensiones no tan grandes para que esto no represente un gran costo de inversión. Sin embargo, si ya se han seleccionado el mejor disolvente, el tipo de empaque ideal y las mejores condiciones de operación, la columna cumple con lo requerido y aun así las dimensiones son grandes, eso no significa que el diseño de esta columna este mal, las dimensiones de esa columna serán las ideales para su operación.

Tabla 19. Ecuación para la a	altura de la columna
------------------------------	----------------------

Ecuación básica	Ec. No.
$Z = HTU_{TG} * NTU_{TG}$	Ec. 109

## 3. METODOLOGÍA Y RESULTADOS

## 3.1. Planteamiento general

A continuación, vamos a enumerar las consideraciones generales para el cálculo de algunos de los parámetros hidrodinámicos y de transporte de masa a partir de distintos modelos. De esta forma podremos comparar entre sí los distintos resultados para cada parámetro hidrodinámico o de transporte de masa.

- 1) En esta sección se muestran las diferentes ecuaciones planteadas para el cálculo de parámetros descritos en el capítulo anterior.
- 2) Los datos requeridos que se emplean en cada modelo para cada parámetro seleccionado, son los reportados en Pérez-Sánchez et al. (Pérez Sánchez, Pérez Sánchez, & Segura Silva, 2016). Con ello se pretende comparar solo los modelos planteados con los mismos datos de entrada, hasta donde sea posible.
- 3) Se emplearán los datos del empaque 50-mm Ceramic Pall® rings, Tabla 1, a menos que se especifique lo contrario, ya que es un empaque de uso común en ejemplos de diseño y académicos. Además, es más frecuente encontrar información complementaria sobre este empaque, lo cual será útil para el caso de estudio.
- Se obtiene ecuaciones complementarias principalmente de las referencias ya citadas (Pérez Sánchez, Pérez Sánchez, & Segura Silva, 2016), (Billet, 1995), (Kolev, 2006).

## 3.2. Fracción de líquido estancado

#### 3.2.1. Modelo de Shulman

Se usa este modelo para procesos donde el disolvente es agua o una solución acuosa. Las ecuaciones usadas se resumen en la Tabla 7, y los parámetros requeridos para empaques tipo Raschig Ring cerámico de 50 mm se reportan en la Tabla 8. Dichos parámetros corresponden a un sistema aire/agua.

Se usan datos para este tipo de empaque ya que en la literatura se reportan datos únicamente para empaques Raschig Ring cerámico y Berl saddles cerámico. Se seleccionaron los datos correspondientes del Raschig Ring cerámico por la similitud que tienen con el Ceramic Pall ring.

$$x_{et(1)} = 0.038 \ [adm]$$
 Ec. 52- a

$$M_{et} = 46.07 [kg/kmol]$$
 Ec. 52- b

$$M_A = 18.00 \ [kg/kmol]$$
 Ec. 52- c

$$M_{L(1)} = x_{et(1)} * M_{et} + (1 - x_{et(1)})M_A = 19.054 [kg/kmol]$$
 Ec. 52-d

$$G_{Mx(1)} = 0.089 \left[\frac{kmol}{s \cdot m^2}\right]$$
 Ec. 52- e

$$L = G_{Mx(1)} * M_{L(1)} = 1.698 \left[\frac{kg}{s \cdot m^2}\right]$$
 Ec. 52- f

$$\beta = 1.508 \, d_s^{0.376} = 0.562 \, [adm]$$
 Ec. 52- g

$$h_{o,w} = \frac{2.09 \times 10^{-6} * (737.5 * L)^{\beta}}{d_s^2} = 0.022 \ [adm]$$
 Ec. 52- h

$$h_{e,w} = \frac{2.47 \times 10^{-4}}{d_s^{1.21}} = 0.006 \ [adm]$$
 Ec. 52- i

$$h_{L,w} = h_{e,w} + h_{o,w} = 0.028 \ [adm]$$
 Ec. 52

## 3.2.2. Modelo de Reinhard Billet (si $v_G \le v_{G,C}$ )

Se utiliza esta ecuación cuando la velocidad del flujo del gas dentro de la columna es menor o igual a la velocidad del flujo de gas a la carga de la columna.

$$\frac{a_h}{a} para Re_L \ge 5 = 0.812 \ [adm]$$
 Ec. 53- a

$$Fr_L = 3.58 \times 10^{-5} \ [adm]$$
 Ec. 53- b

$$Re_L = 15.77 \ [adm]$$
 Ec. 53- c

$$h_{L(v_{G} \le v_{G,C})} = \left(12\frac{Fr_{L}}{Re_{L}}\right)^{1/3} \left(\frac{a_{h}}{a}\right)^{2/3} = 0.026 \ [adm]$$
Ec. 53

#### 3.2.3. Modelo de Reinhard Billet (si $v_G > v_{G,C}$ )

Se utiliza esta ecuación cuando la velocidad del flujo del gas dentro de la columna es mayor a la velocidad del flujo de gas a la carga de la columna.

$$h_L = \left(12\frac{Fr_L}{Re_L}\right)^{1/3} = 0.0301 \,[adm]$$
 Ec. 54- a

$$h_{L(v_G > v_{G,C})} = h_L \left[ 1 + 1.2 \left( \frac{v_G}{v_{G,in}} \right)^{13} \right] = 0.030 \ [adm]$$
 Ec. 54

#### 3.2.4. Modelo de Engel

La tensión superficial del agua a 25°C Ec. 55- a 
$$\sigma_L = 0.072 [N/m]$$

$$Fr_L = 3.58 \times 10^{-5} \ [adm]$$
 Ec. 55- b

$$h_L = 0.93 (Fr_L)^{1/6} \left(\frac{\mu_L^2 * a^3}{\rho_L * g}\right)^{1/10} \left(\frac{\sigma_L * a^2}{\rho_L * g}\right)^{1/8} = 0.042 \ [adm]$$
Ec. 55

#### 3.3. Caída de presión por altura de empaque (en seco)

Todas las ecuaciones de caída de presión por altura de empaque tienen un factor en común, el cual es la velocidad del gas dentro de la columna. En la mayoría de las ocasiones este término se eleva al cuadrado y se multiplica por la densidad del gas. Este factor se encuentra en cada una de las ecuaciones citadas a continuación.

La única variante es la contante por la cual es multiplicada; esta constante varía dependiendo del autor de cada ecuación, pero principalmente depende de la geometría del empaque.

#### 3.3.1. Modelo de Reinhard Billet ( $\Delta P_0/Z$ )

$$K_w = 0.974 \, [adm]$$
 Ec. 66- a

$$d_p = 0.011 \ [m]$$
 Ec. 66- b

$$Re_G = 5621.85 \ [adm]$$
 Ec. 66- c

$$\psi_o = C_p \left( \frac{64}{Re_G} + \frac{1.8}{Re_G^{0.08}} \right) = 0.605 \ [adm]$$
 Ec. 66- d

$$C = \psi_o * \frac{a}{2 * \varepsilon^3 * K_w} = 78.28 \ [m^1]$$
 Ec. 66- e

$$(v_G^2 * \rho_G) = 1.81 [Pa]$$
 Ec. 66- f

$$\Delta P_0 / Z = C(v_G^2 * \rho_G) = 141.76 [Pa/m]$$
 Ec. 66

#### 3.3.2. Modelo de Carmen/Kozeny

Esta ecuación se ocupa para flujos laminares. En ella la caída de presión del gas se debe principalmente a la pérdida por arrastre, debido a la resistencia de la cama empacada.

Las constante C' y C" utilizadas en las ecuaciones Ec. 67, Ec. 68 y Ec. 69 se obtienen de Sabri Ergun (Sabri, 1952), las cuales se determinaron a partir de 640 experimentos, abarcando para su estudio diferentes tipos de materiales de empaque y gases como  $CO_2$ ,  $N_2$ ,  $CH_4$  e  $H_2$ .

Estas constantes se representan en la ecuación junto a los demás parámetros, usando unidades inglesas. Por tal motivo se utilizan estas unidades en el cálculo, representando el resultado final en unidades inglesas y en el sistema internacional.

$$C' = 150 \ [adm]$$
 Ec. 67- a

$$d_p = 0.035 \ [ft]$$
 Ec. 67- b

$$C = \frac{C'}{\varepsilon^3} \left( \frac{1 - \varepsilon}{d_p} \right)^2 = 11812.08 \, [ft^{-2}]$$
 Ec. 67- c

$$(v_G * \mu_G) = 3.4x 10^{-5} [lb/s^2]$$
 Ec. 67- d

$$\Delta P_0 / Z = C(v_G * \mu_G) = 0.405 \left[ \frac{lb}{ft \cdot s^2} \right]$$
 Ec. 67- e

$$\Delta P_0/Z = C(v_G * \mu_G) = 1.976 [Pa/m]$$
 Ec. 67

#### 3.3.3. Modelo de Burke/Plummer

Esta ecuación se ocupa para flujos turbulentos y describe que la caída de presión del gas se debe principalmente a la pérdida de energía cinética.

$$C' = 1.75 \ [adm]$$
 Ec. 68- a

$$d_p = 0.035 \, [ft]$$
 Ec. 68- b

$$C = \frac{C''}{d_p} \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3}\right) = 22.41 \ [ft^{-1}]$$
 Ec. 68- c

$$(v_G^2 * \rho_G) = 1.207 [lb/(ft \cdot s^2)]$$
 Ec. 68- d

$$\Delta P_0 / Z = C(v_G^2 * \rho_G) = 27.05 \left[ \frac{lb}{ft \cdot s^2} \right]$$
 Ec. 68- e

$$\Delta P_0/Z = C(v_G^2 * \rho_G) = 132.09 [Pa/m]$$
 Ec. 68

#### 3.3.4. Modelo de Sabri Ergun

Esta ecuación se ocupa para flujos tanto turbulentos como laminares y describe que la caída de presión del gas se debe en conjunto a la pérdida de energía cinética y a la pérdida por arrastre, debido a la resistencia de la cama empacada.

$$C'' = 1.75 \ [adm]$$
 Ec. 69- a

$$C' = 150 \ [adm]$$
 Ec. 69- b

$$d_p = 0.035 \, [ft]$$
 Ec. 69- c

$$C = \frac{C''}{d_p} \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3}\right) = 22.41 \, [ft^{-1}]$$
 Ec. 69- d

$$(v_G^2 * \rho_G) = 1.207 \left[ \frac{lb}{ft \cdot s^2} \right]$$
 Ec. 69- e

$$C = \frac{C'}{\varepsilon^3} \left(\frac{1-\varepsilon}{d_p}\right)^2 = 11812.08 \ [ft^{-2}]$$
 Ec. 69- f

$$(v_G * \mu_G) = 3.4x 10^{-5} [lb/s^2]$$
 Ec. 69- g

$$\Delta P_0 / Z = C_1 (v_G * \mu_G) + C_2 (v_G^2 * \rho_G) = 27.46 \left[ \frac{lb}{ft \cdot s^2} \right]$$
 Ec. 69- h

$$\Delta P_0/Z = C_1(v_G * \mu_G) + C_2(v_G^2 * \rho_G) = 134.07 \ [Pa/m]$$
 Ec. 69

## 3.3.5. Caída de presión en seco, $\Delta P_0/Z$ [cita 1] (Chattopadhyay, 2007)

La ecuación es utilizada para flujos turbulentos.

Se ocupa para el cálculo la constante del empaque Raschig Ring cerámico 50 mm por la similitud con el Pall ring cerámico 50 mm, ya que en la literatura se reportan únicamente datos para los empaques mostrados en la Tabla 20. Los datos de las constantes se basan en un sistema aire/agua.

Tabla 20. Coeficiente de caída de presión en seco (Chattopadhyay, 2007)

Tipo de empaque	Material	Tamaño [ <i>mm</i> ]	Espesor de Pared [mm]	<i>C</i> <sub>1</sub>
	cerámico	25	3.175	290.675
Raschig ring	cerámico	38	4.76	175.556
	cerámico	50	6.35	137.153
Raschig ring	metal	25	1.58	296.251
	metal	38	1.58	175.556
	metal	50	1.58	137.153
Intalox saddle	cerámico	25		235.904
	cerámico	38		98.750
	cerámico	50		76.806
	cerámico	75		40.058
Pall Ring	metal	25	1.58	98.750
	metal	38	1.58	60.347

$$C = 137.15 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 70- a

$$(v_G^2 * \rho_G) = 1.811 [Pa]$$
 Ec. 70- b

$$\Delta P_0/Z = C(v_G^2 * \rho_G) = 248.36 [Pa/m]$$
 Ec. 70

## 3.3.6. Modelo de Roman Zarcycki

Esta ecuación es utilizada para flujos turbulentos

$$d_p = 0.011 \ [m]$$
 Ec. 71- a

$$f' = 456 * Re_G^{-0.742}(para Re_G < 200) [adm]$$
 Ec. 71- b

$$f' = 27.4 * Re_G^{-0.216}(para Re_G \ge 200) = 4.244 [adm]$$
 Ec. 71- c

$$C = \frac{f'}{2 * d_p * \varepsilon^2} = 321.66 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 71- d

$$(v_G^2 * \rho_G) = 1.811 [Pa]$$
 Ec. 71- e

# 3.3.7.Caída de presión en seco, ΔP0/Z [cita 2]<br/>(Chattopadhyay, 2007)

Tabla 21. Datos para caída de presión en seco de diferentes tipos de empaques (Stichlmair, Bravo, & Fair, 1988) Reproducido bajo permiso de ELSEVIER

Ec. 71

Empaque	Tamaño	a $[m^2\cdot m^{-3}]$	3	<i>C</i> <sub>1</sub>	<i>C</i> <sub>2</sub>	<i>C</i> 3	Referencia
Structured	B1 300	300	0.97	2	3	0.9	18
packings:	B1 200	200	0.98	2	4	1.0	18
Montz	B1 100	100	0.99	3	7	1.0	18
Compack	2A	394	0.92	3	2.4	0.31	19
бетраск	ЗA	262	0.93	3	2.3	0.28	19
Sulzer	Mellapak 250Y (plástico)	250	0.85	1	1	0.32	21
	Mellapak 250Y (metal)	250	0.96	5	3	0.45	20
	BX-packing	450	0.86	15	2	0.35	20
	10	472	0.655	48	8	2.0	29
Dumped	10	327	0.657	10	8	1.8	28
ceramic	15	314	0.676	48	10	2.3	23
packings:	15	264	0.698	48	8	2.0	29
Raschig Rings	30	137	0.775	48	8	2.0	24
	35	126	0.773	48	8	2.15	24
	25	192	0.742	10	3	1.2	24
Poll Pings	25	219	0.74	1	4	1.0	26
r all Milgs	35	139	0.773	33	7	1.4	24
	35	165	0.76	1	6	1.1	26
Reflux Rings	50	120	0.78	75	15	1.6	25
Hiflow Rings	20	291	0.75	10	5	1.1	27
Porl Saddlas	15	300	0.561	32	6	0.9	23
Berr Saudies	35	133	0.75	33	14	1.0	24
Intolox	20	300	0.672	30	6	1.4	23
Saddlos	25	183	0.732	32	7	1.0	24
Saudies	35	135	0.76	30	6	1.2	24
	25	255	0.73	19	1	0.85	26
Torus Saddles	50	120	0.75	10	8	0.75	26

Se ocupan las constantes del empaque *Pall Ring cerámico 35 mm* por la similitud con el de *50 mm*; los datos de las constantes se basan en un sistema vapor/solución acuosa.

$$C_1 = 33$$
  $C_2 = 7$   $C_3 = 1.4$  Ec. 72- a

$$f' = \frac{C_1}{Re_G} + \frac{C_2}{Re_G^{1/2}} + C_3$$
 Ec. 72- b

$$C = \frac{f' * a}{8 * \varepsilon^{4.65}} = 70.72 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 72- c

$$\Delta P_0 / Z = C(v_G^2 * \rho_G) = 128.07 [Pa/m]$$
 Ec. 72

#### 3.4. Caída de presión por altura de empaque (total)

#### 3.4.1. Modelo Reinhard Billet $\Delta P/Z$

La Ec. 53 para el líquido estancado  $(h_L)$  es la misma que la presentada en el artículo (Pérez Sánchez, Pérez Sánchez, & Segura Silva, 2016). Se usa cuando la velocidad del flujo del gas dentro de la columna es menor o igual a la velocidad del flujo de gas a la carga de la columna, por lo que el término  $(h_{L,C})$  es igual al término  $(h_L)$ .

$$Re_L = 15.77 \ [adm]$$
 Ec. 73- a

$$h_L = h_{L,C} = 0.026 \ [adm]$$
 Ec. 73- b

$$W = \left[exp\left(\frac{Re_L}{200}\right)\right] \left(\frac{h_L}{h_{L,C}}\right)^{0.3} = 1.082 \ [adm]$$
 Ec. 73- c

$$C_p = 0.662 \ [adm]$$
 Ec. 73- d

$$Re_G = 5621.85 \ [adm]$$
 Ec. 73- e

$$\psi_o = C_p \left( \frac{64}{Re_G} + \frac{1.8}{Re_G^{0.08}} \right) = 0.605 \ [adm]$$
 Ec. 73- f

$$a = 121 [m^{-1}]$$
 Ec. 73- g

$$K_w = 0.974 \,[adm]$$
 Ec. 73- h

$$C = \psi_o * W * \frac{a}{2 * \varepsilon^3 * K_w} \left[\frac{\varepsilon}{\varepsilon - h_L}\right]^{1.5} = 89.140 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 73- i

$$(v_G^2 * \rho_G) = 1.811 [Pa]$$
 Ec. 73- j

$$\Delta P/Z = C(v_G^2 * \rho_G) = 161.42 \ [Pa/m]$$
 Ec. 73

#### 3.4.2. Modelo de M. Leva

Se ocupa la constante del empaque Raschig Ring 50 mm para el cálculo debido a la similitud con el Pall ring cerámico 50 mm, ya que en la literatura se reportan únicamente datos para los empaques mostrados en la Tabla 22, los cuales están basados en un sistema vapor/solución acuosa.

Tabla 22. Coeficientes para caída de presión, Correlación de Leiva (Chattopadhyay, 2007)	

Tipo de empaque	Tamaño nominal [ <i>mm</i> ]	Espesor de Pared [ <i>mm</i> ]	<i>C</i> <sub>2</sub>	<i>C</i> 3	Rango de $L\left[\frac{kg}{h\cdot m^2}\right]$
Raschig ring	13	2.4	1920	0.1893	1460-4200
	19	2.4	450	0.1184	8790-52750
	25	3.0	439	0.1141	1750-131800
	38	6.0	165	0.1049	3500-87900
	50	6.0	154	0.0774	3500-105450
Berl saddles	13		823	0.0892	1460-68840
	19		329	0.0774	1750-70300
	25		219	0.0774	3500-140600
	38		110	0.0594	3500-105450
Intalox saddles	25		170	0.0728	12300-70300
	38		77	0.0594	12300-70300

$$C_2 = 154$$

Ec. 74- a
$$C_3 = 0774$$
 Ec. 74- b

$$v_L = 1.7 x 10^{-3} [m/s]$$
 Ec. 74- c

$$C = C_2(10^{C_3 * v_L}) = 154.05 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 74- d

$$(v_G^2 * \rho_G) = 1.811 [Pa]$$
 Ec. 74- e

$$\Delta P/Z = C(v_G^2 * \rho_G) = 278.96 \ [Pa/m]$$
 Ec. 74

#### 3.4.3. Modelo de Kister and Gill

$$F_P = 43.29 \, [ft^{-1}]$$
 Ec. 75- a

$$\Delta P/Z = 93.9F_P^{0.7} = 1312.67 \ [Pa/m]$$
 Ec. 75

#### 3.4.4. Modelo de Kister and Larson

Esta ecuación se presenta en unidades inglesas, por lo que se resolverá respetando estas unidades y se convertirá a unidades internacionales al final.

Nuevamente se ocupan las constantes del empaque *Pall Ring plástico de 50 mm* por la similitud con el *Pall ring cerámico 50 mm,* como se aprecia en la Tabla 23. Los datos de las constantes se basan en un sistema vapor/solución acuosa.

Tipo de		Tamaño de empaque nominal [ <i>in</i> ]									
empaque		1/4	3/8	1/2	5/8	3/4	1	1 1/4	1 1/2	2	3
Raschig ring	F	700	390	300	170	155	115				
(metal, 1/32 in,	α				1.20						
pared)	β				0.28						
Raschig ring	F			410	290	220	137	110	83	57	32
(metal, 1/16 in,	α					0.80	0.42		0.29	0.23	
pared)	β					0.30	0.21		0.20	0.14	

Tabla 23. Parámetros para la caída de presión (Wankat, 2012) Reproducido bajo permiso de Pearson

Tipo de	Tamaño de empaque nominal [ <i>in</i> ]										
empaque		1/4	3/8	1/2	5/8	3/4	1	1 1/4	1 1/2	2	3
<b>_</b>	F	1600	1000	580	380	255	155	125	95	65	37
Raschig ring	α		4.70	3.10	2.35	1.34	0.97	0.57	0.39	0.24	0.18
(ceramico)	β		0.41	0.41	0.26	0.26	0.25	0.23	0.23	0.17	0.15
Dell via se	F				97		52		32	25	
Pall rings	α						0.22			0.10	
(plastico)	β						0.14			0.12	
Dollrings	F				70		48		28	20	
Pail rings (motal)	α				0.43		0.15		0.08	0.06	
(metal)	β				0.17		0.16		0.15	0.12	
Dorl coddloc	F	900		240		170	110		65	45	
len saudies	α			1.2		0.62	0.39		0.21	0.16	
(ceramico)	β			0.21		0.17	0.17		0.13	0.12	
Intalox caddles	F	725	330	200		145	98		52	40	22
	α			1.04		0.52	0.52		0.13	0.14	
(ceranneo)	β			0.37		0.25	0.16		0.15	0.10	
Intalox saddles (plástico)	F						33			21	16
Intalox saddles (metal)	F						41			18	
Flexirings (plástico)	F				78		45		28	22	
Bellast ring (plástico)	F					97		52	32	25	
Cascade miniring (plástico)	F					30	25	18		15	
Hy-Pak (plástico)	F						25			12	

 $\alpha = 0.10$ 

Ec. 76- a

 $\beta = 0.12$  Ec. 76- b

$$L = \frac{4 * (m_{L(2)} + m_{et(abs)})}{\pi * D^2} = 0.348 \left[\frac{lb}{s \cdot ft^2}\right]$$
 Ec. 76- c

$$G = \frac{4 * (m_{G(1)} - m_{et(abs)})}{\pi * D^2} = 0.359 \left[\frac{lb}{s \cdot ft^2}\right]$$
 Ec. 76- d

$$C = \alpha (10^{\beta * L}) * G^2 = 0.014 \left[ \frac{in H_2 O \cdot ft^2}{lb} \right]$$
 Ec. 76- e

$$\Delta P/Z = C\left(\frac{1}{\rho_G}\right) = 0.113 \ [in H_2 O/ft]$$
 Ec. 76- f

$$\Delta P/Z = C\left(\frac{1}{\rho_G}\right) = 92.46 \left[Pa/m\right]$$
 Ec. 76

#### 3.4.5. Modelo de Roman Zarzycki

Existen diversas gráficas obtenidas experimentalmente para diferentes tipos de empaques, en las que se correlaciona el valor de caída de presión con la velocidad del gas dentro de la columna.

Un ejemplo de esto es la Gráfica 1. Esta gráfica solamente contiene valores para tres tipos de empaques (*K Ring, Pall Ring y Raschig Ring*) y únicamente para una medida (*25 mm*). En nuestro caso de estudio utilizaremos la información para el *Pall Ring 25 mm*.





$$v_G = 0.950 \ [m/s]$$
 Ec. 77- a

$$\Delta P/Z = 180.00 \ [Pa/m]$$
 Ec. 77

## 3.5. Coeficiente de difusión

#### 3.5.1. Modelo de Wilke and Lee

$$T = 298.15 [K]$$
 Ec. 78- a

$$T^* = \frac{T}{\sqrt{\frac{e_{et}}{k} * \frac{e_{CO2}}{k}}} = 1.121 \ [adm]$$
 Ec. 78- b

$$\Omega_D = \frac{1.06036}{T^{*0.15610}} + \frac{0.19300}{\exp(0.47635 * T^*)} + \frac{1.03587}{\exp(1.52996 * T^*)} + \frac{1.76474}{\exp(3.89411 * T^*)} = 1.364 \ [adm] \qquad \text{Ec. 78-c}$$

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_{et} + \sigma_{CO2}}{2} = 4.236 \,[\text{\AA}]$$
 Ec. 78- d

$$M_{AB} = 2\left(\frac{1}{M_{et}} + \frac{1}{M_{CO2}}\right)^{-1} = 45.02 \ [kg/kmol]$$
 Ec. 78- e

$$D_G = \frac{\left[3.03 - \left(\frac{0.98}{M_{AB}^{1/2}}\right)\right](10^{-3}) * T^{3/2}}{P * M_{AB}^{1/2} * \sigma_{AB}^2 * \Omega_D} = 0.082 \ [cm^2/s]$$
 Ec. 78

## 3.5.2. Modelo de Chapman and Enskog

$$P = 1.1 \ [atm]$$
 Ec. 79- a

$$T = 298.15 [K]$$
 Ec. 79- b

$$\sigma_{AB} = 4.236 \, [\text{\AA}]$$
 Ec. 79- c

$$\Omega_D = 1.364 \,[adm] \qquad \qquad \text{Ec. 79-d}$$

$$M_{CO2} = 44.010 [g/mol]$$
 Ec. 79- e

$$M_{et} = 46.068 [g/mol]$$
 Ec. 79- f

$$D_G = 1.858 x 10^{-3} \frac{\sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_{et}} + \frac{1}{M_{CO2}}\right)}}{P * \sigma_{AB}^2 * \Omega_D} = 0.075 \ [cm^2/s]$$
Ec. 79

#### 3.5.3. Modelo de Fuller

Para el siguiente parámetro se realiza la suma de los volúmenes de difusión atómica  $(\sum_i Vi1)$  de los elementos presentes en la molécula de etanol (CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-OH) y para la molécula de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) se elige el volumen de difusión atómica  $(\sum_i Vi2)$  adecuado.

Incrementos de volume	en de difusión atómica y	Volúmenes de difusión para moléculas simples			
estruct	urar v <sub>ij</sub>	L ∠ V ij			
С	16.5	H <sub>2</sub>	7.07		
Н	1.98	Не	2.88		
0	5.48	N <sub>2</sub>	17.9		
(N)	5.69	O <sub>2</sub>	16.6		
(CI)	19.5	Aire	20.1		
(S)	17.0	Ar	16.1		
Anillo aromático	-20.2	Kr	22.8		
Anillo heterocíclico	-20.2	СО	18.9		
		CO <sub>2</sub>	26.9		
		N <sub>2</sub> O	35.9		
		NH <sub>3</sub>	14.9		
		H <sub>2</sub> O	12.7		
		(Cl <sub>2</sub> )	37.7		
		(SO <sub>2</sub> )	41.1		

Tabla 24. Volúmenes de difusión atómica (Dr. K., 2017) Reproducido bajo permiso de American Chemical Society

$$\sum_{i} Vi1 = 50.36 \left[ cm^3 / mol \right]$$

$$\sum_{i} Vi2 = 26.90 \ [cm^3/mol]$$
 Ec. 80- b

$$P = 1.10 \ [atm]$$
 Ec. 80- c

$$T = 298.15 [K]$$
 Ec. 80- d

$$M_{CO2} = 44.01 \, [g/mol]$$
 Ec. 80- e

$$M_{et} = 46.07 \ [g/mol]$$
 Ec. 80- f

$$D_{G} = 10^{-3} * \frac{T^{1.75} * \sqrt{\frac{1}{M_{et}} + \frac{1}{M_{CO2}}}}{P\left[ (\sum_{I} V_{i1})^{\frac{1}{3}} + (\sum_{I} V_{i2})^{\frac{1}{3}} \right]^{2}} = 0.006 \ [cm^{2}/s]$$
Ec. 80

## 3.5.4. Modelo de Hayduk and Minhas

$$n = \frac{9.58}{V_{et}} - 1.12 = -9.57 \times 10^{-1} \ [adm]$$
 Ec. 81- a

$$T = 298.15 [K]$$
 Ec. 81- b

$$\mu_L = 0.890 \ [cP]$$
 Ec. 81- c

$$V_{et} = 58.60 \ [cm^3/mol]$$
 Ec. 81- d

$$D_L = 1.25 x 10^{-8} (V_{et}^{-0.19} - 0.292) * T^{1.52} * \mu_L^n = 1.37 x 10^{-5} [cm^2/s]$$
 Ec. 81

#### 3.5.5. Modelo de Stokes-Einstein

$$T = 298.15 [K]$$
 Ec. 82- a

$$r_{et} = 1X10^{-10} \left(\frac{\sigma_{et}}{2}\right) = 2.26x10^{-10} [m]$$
 Ec. 82- b

$$\mu_L = 8.90 x 10^{-4} [Pa \cdot s]$$
 Ec. 82- c

$$k_B = 1.38 x 10^{-23} [J/K]$$
 Ec. 82- d

$$D_L = \frac{k_B * T}{6 * \pi * \mu_L * r_{et}} * 1x10^4 = 1.08x10^{-5} [cm^2/s]$$
 Ec. 82

#### 3.5.6. Modelo de Glasstone

$$T = 298.15 [K]$$
 Ec. 83- a

$$r_{et} = 1X10^{-10} \left(\frac{\sigma_{et}}{2}\right) = 2.26x10^{-10} [m]$$
 Ec. 83- b

$$\mu_L = 8.90 x 10^{-4} \left[ Pa \cdot s \right]$$
 Ec. 83- c

$$k_B = 1.38 x 10^{-23} [J/K]$$
 Ec. 83- d

$$D_L = \frac{k_B * T}{2 * \mu_L * r_{et}} * 1x10^4 = 1.02x10^{-4} [cm^2/s]$$
 Ec. 83

Las ecuaciones anteriores para el cálculo del coeficiente de difusión sirven para un cálculo directo de los valores. Sin embargo, también existen muchas tablas con valores experimentales para diferentes tipos de compuestos a diferentes condiciones de proceso. Estas tablas pueden ser útiles si no se cuenta con toda la información necesaria para el desarrollo de las ecuaciones.

#### 3.6. Coeficiente de transferencia de masa

## 3.6.1. Coeficiente de transferencia de masa para la fase gas, $k_G$ (Chattopadhyay, 2007)

En el cálculo de la velocidad efectiva del líquido y del gas usando la Ec. 90 y Ec. 91 se usa la fracción de líquido estancado en operación. Sin embargo, como se puede ver en la Ec. 52 la fracción de líquido estancado estática representa un valor muy pequeño, por lo que se utilizará la fracción del líquido estancado total, reportado en los resultados del artículo (Pérez Sánchez, Pérez Sánchez, & Segura Silva, 2016).

$$a_h = 98.29 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 90- a

$$R = 0.080 \left[ \frac{atm \cdot m^{-3}}{kmol \cdot K} \right]$$
 Ec. 90- b

$$T = 298.15 [K]$$
 Ec. 90- c

$$P = 1.1 \ [atm]$$
 Ec. 90- d

$$D_L = 1.37 x 10^{-9} \ [m^2/s]$$
 Ec. 90- e

$$D_G = 8.22 \times 10^{-6} \ [m^2/s]$$
 Ec. 90- f

$$v_{L,e} = \frac{v_L}{\varepsilon * h_L} = 0.083 \ [m/s]$$
 Ec. 90- g

$$v_{G,e} = \frac{v_G}{\varepsilon(1 - h_L)} = 1.246 \, [m/s]$$
 Ec. 90- h

$$k_{\nu G} = k_G * \frac{P}{R * T} * a_h = 0.002 \left[\frac{kmol}{m^3 \cdot s}\right]$$
 Ec. 90- i

$$k_{G} = \frac{0.1D_{G}}{d_{p}} \left(\frac{d_{p}(v_{G,e} + v_{L,e})\rho_{G}}{\mu_{G}}\right)^{0.2405} \left(\frac{\mu_{G}}{\rho_{G} * D_{G}}\right)^{1/3} = 4.59x10^{-4} [m/s]$$
 Ec. 90

## 3.6.2. Coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida, $k_L$ (Chattopadhyay, 2007)

$$a_h = 98.29 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 91- a

$$C_L = \frac{\rho_L}{M_L} = 55.392 \ [kmol/m^3]$$
 Ec. 91- b

$$D_L = 1.37 x 10^{-9} \ [m^2/s]$$
 Ec. 91- c

$$D_G = 8.22 \times 10^{-6} \ [m^2/s]$$
 Ec. 91- d

$$v_{L,e} = \frac{v_L}{\varepsilon * h_L} = 0.083 \ [m/s]$$
 Ec. 91- e

$$v_{G,e} = \frac{v_G}{\varepsilon(1 - h_L)} = 1.246 \ [m/s]$$
 Ec. 91- f

$$k_{vL} = k_L * C_L * a_h = 0.058 \left[ \frac{kmol}{m^3 \cdot s} \right]$$
 Ec. 91- g

$$k_L = \frac{0.341D_L}{d_p} \left[ \frac{d_p (v_{G,e} + v_{L,e})\rho_L}{\mu_L} \right]^{0.2337} \left[ \frac{\mu_L}{\rho_L * D_L} \right]^{1/2} = 1.06x 10^{-5} [m/s]$$
 Ec. 91

## 3.6.3. Coeficiente de transferencia de masa para la fase gas, $k_G$ [cita 1] (Cussler, 2009)

$$a_h = 98.29 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 92- a

$$R = 0.080 \left[ \frac{atm \cdot m^{-3}}{kmol \cdot K} \right]$$
 Ec. 92- b

$$T = 298.15 [K]$$
 Ec. 92- c

$$P = 1.1 \ [atm]$$
 Ec. 92- d

$$v_G = 8.16 x 10^{-6} \ [m^2/s]$$
 Ec. 92- e

$$D_G = 8.22 \times 10^{-6} \ [m^2/s]$$
 Ec. 92- f

$$Sc_G = \frac{v_G}{D_G} = 0.993 \,[adm]$$
 Ec. 92- g

$$Re_G = \frac{v_G}{a * v_G} = 962.36 \,[adm]$$
 Ec. 92- h

$$k_{\nu G} = k_G * \frac{P}{R * T} * a_h = 1.170 \left[\frac{kmol}{m^3 \cdot s}\right]$$
 Ec. 92- i

$$k_G = 3.6 * Re^{0.7} * Sc^{\frac{1}{3}} (a * d_p)^{-2} (a * D_G) = 0.258 [m/s]$$
 Ec. 92

# 3.6.4. Coeficiente de transferencia de masa para la fase gas, $k_G$ [cita 2] (Cussler, 2009)

$$a_h = 98.29 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 93- a

$$R = 0.080 \left[ \frac{atm \cdot m^{-3}}{kmol \cdot K} \right]$$
 Ec. 93- b

$$T = 298.15 [K]$$
 Ec. 93- c

$$P = 1.1 \, [atm]$$
 Ec. 93- d

$$v_G = 8.16x10^{-6} \ [m^2/s]$$
 Ec. 93- e

$$D_G = 8.22 \times 10^{-6} \ [m^2/s]$$
 Ec. 93- f

$$Sc_G = \frac{v_G}{D_G} = 0.993 \ [adm]$$
 Ec. 93- g

$$Re_G = \frac{d_p * v_G}{v_G} = 1252.99 \ [adm]$$
 Ec. 93- h

$$k_{\nu G} = k_G * \frac{P}{R * T} * a_h = 0.230 \left[\frac{kmol}{m^3 \cdot s}\right]$$
 Ec. 93- i

$$k_G = 1.2 * (1 - \varepsilon)^{0.36} * Re^{0.64} * Sc^{\frac{1}{3}} \left(\frac{D_G}{d_p}\right) = 0.051 [m/s]$$
 Ec. 93

# **3.6.5.** Coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida, $k_L$ [cita 1] (Cussler, 2009)

$$a_h = 98.29 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 94- a

$$C_L = \frac{\rho_L}{M_L} = 55.392 \ [kmol/m^3]$$
 Ec. 94- b

$$g = 9.82 \ [m/s^2]$$
 Ec. 94- c

$$v_L = 8.93 x 10^{-7} \ [m^2/s]$$
 Ec. 94- d

$$D_L = 1.37 x 10^{-9} \ [m^2/s]$$
 Ec. 94- e

$$Sc_L = \frac{v_L}{D_L} = 653.49 \,[adm]$$
 Ec. 94- f

$$Re_L = \frac{v_L}{a * v_L} = 15.77 \ [adm]$$
 Ec. 94- g

$$k_{\nu L} = k_L * C_L * a_h = 0.158 \left[\frac{kmol}{m^3 \cdot s}\right]$$
 Ec. 94- h

$$k_L = 0.0051 * Re^{0.67} Sc^{-0.5} (a * d_p)^{0.4} \left(\frac{1}{v_L * g}\right)^{-1/3} = 2.90 x 10^{-5} [m/s]$$
 Ec. 94

## 3.6.6. Coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida, *k*<sub>L</sub> [cita 2] (Cussler, 2009)

$$a_h = 98.29 \ [m^{-1}]$$
 Ec. 95- a

$$C_L = \frac{\rho_L}{M_L} = 55.392 \ [kmol/m^3]$$
 Ec. 95- b

$$v_L = 8.93 x 10^{-7} [m^2/s]$$
 Ec. 95- c

$$D_L = 1.37 x 10^{-9} \ [m^2/s]$$
 Ec. 95- d

$$Sc_L = \frac{v_L}{D_L} = 653.49 \,[adm]$$
 Ec. 95- e

$$Re_L = \frac{d_p * v_L}{v_L} = 20.53 \ [adm]$$
 Ec. 95- f

$$k_{vL} = k_L * C_L * a_h = 1.721 \left[ \frac{kmol}{m^3 \cdot s} \right]$$
 Ec. 95- g

$$k_L = 25 * Re^{0.45} * Sc^{0.5} \left(\frac{D_L}{d_p}\right) = 3.16 x 10^{-4} [m/s]$$
 Ec. 95

#### 3.7. Altura total de unidades de transferencia (HTU)

## **3.7.1.** Altura total de unidades de transferencia, *HTU<sub>GT</sub>* (Pérez Sánchez, Pérez Sánchez, & Segura Silva, 2016)

$$m = 0.229 \ [adm]$$
 Ec. 99- a

$$k_{\nu L} = 0.593 \left[ \frac{kmol}{m^3 \cdot s} \right]$$
 Ec. 99- b

$$k_{\nu G} = 0.204 \left[ \frac{kmol}{m^3 \cdot s} \right]$$
 Ec. 99- c

$$k_T = \frac{1}{\frac{1}{k_{\nu G}} + \frac{m}{k_{\nu L}}} = 0.189 \left[\frac{kmol}{m^3 \cdot s}\right]$$
 Ec. 99- d

$$G_{My} = 0.041 \left[ \frac{kmol}{s \cdot m^2} \right]$$
 Ec. 99- e

$$HTU_{GT} = \frac{G_{My}}{k_T} = 0.220 \ [m]$$
 Ec. 99

## 3.7.2. Altura total de unidades de transferencia, $HTU_{GT}$ (Chattopadhyay, 2007)

$$m = 0.229 \ [adm]$$
 Ec. 100- a

$$G_{Mx} = \frac{G_{Mx(1)} + G_{Mx(2)}}{2} = 0.087 \left[\frac{kmol}{s \cdot m^2}\right]$$
 Ec. 100- b

$$k_{\nu L} = 0.593 \left[ \frac{kmol}{s \cdot m^3} \right]$$
 Ec. 100- c

$$HTU_L = \frac{G_{Mx}}{k_{\nu L}} = 0.148 \ [m]$$
 Ec. 100- d

$$G_{My} = 0.041 \left[ \frac{kmol}{s \cdot m^2} \right]$$
 Ec. 100- e

$$k_{vG} = 0.204 \left[ \frac{kmol}{s \cdot m^3} \right]$$
 Ec. 100- f

$$HTU_G = \frac{G_{My}}{k_{vG}} = 0.204 \ [m]$$
 Ec. 100- g

$$HTU_{GT} = HTU_G + \frac{m * G_{My}}{G_{Mx}} * HTU_L = 0.220 \ [m]$$
 Ec. 100

#### 3.8. Número total de unidades de transferencia (NTU)

#### **3.8.1.** Modelo de Kremser (si A≠1)

La siguiente ecuación se utiliza cuando el factor de absorción promedio es diferente de uno.

$$A = 9.093 \ [adm]$$
 Ec. 101- a

$$x_{et(2)} = 0.000 \ [adm.]$$
 Ec. 101- b

$$y_{et(2)} = 0.002 \ [adm]$$
 Ec. 101- c

$$y_{et(1)} = 0.080 \ [adm]$$
 Ec. 101- d

$$NTU_{GT A \neq 1} = \frac{ln \left[ \frac{y_{et(1)} - m * x_{et(2)}}{y_{et(2)} - m * x_{et(2)}} \left( 1 - \frac{1}{A} \right) + \frac{1}{A} \right]}{lnA} = 1.537 \rightarrow 2 \ [adm]$$
Ec. 101

#### 3.8.2. Modelo Kremser (si A=1)

La siguiente ecuación solo se dejará como indicativa, ya que, para nuestro caso el factor de absorción promedio es diferente a uno.

$$NTU_{GT A=1} = \frac{y_{et(1)} - y_{et(2)}}{y_{et(2)} - m * x_{et(2)}}$$
 Ec. 102

#### **3.8.3.** Modelo de Chattopadhyay

$$y_{et(2)}^* = x_{et(2)} * m = 0.000 \ [adm]$$
 Ec. 103- a

$$\Delta y_{et(2)} = y_{et(2)} - y_{et(2)}^* = 0.002 \ [adm]$$
 Ec. 103- b

$$y_{et(1)}^* = x_{et(1)} * m = 0.009 [adm]$$
 Ec. 103- c

$$\Delta y_{et(1)} = y_{et(1)} - y_{et(1)}^* = 0.071 \,[adm]$$
 Ec. 103- d

$$y_{et(2)} = 0.002 \ [adm]$$
 Ec. 103- e

$$y_{et(1)} = 0.080 \ [adm]$$
 Ec. 103- f

$$NTU_{GT} = \frac{\frac{y_{et(1)} - y_{et(2)}}{\Delta y_{et(1)} - \Delta y_{et(2)}}}{\ln\left(\frac{\Delta y_{et(1)}}{\Delta y_{et(2)}}\right)} = 3.816 \rightarrow 4 \ [adm]$$
Ec. 103

#### 3.8.4. Modelo de Método Gráfico

X	$x = \frac{X}{1+X}$	Y	$y^* = m * x$	$Y^* = \frac{y^*}{1-y^*}$
$X_{et(2)} = 0.000$	0.000	$Y_{et(2)} = 0.003$	0.000	0.000
0.005	0.005	0.013	0.001	0.001
0.010	0.010	0.024	0.002	0.002
0.015	0.014	0.034	0.003	0.003
0.020	0.019	0.045	0.004	0.004
0.024	0.024	0.055	0.005	0.005
0.029	0.028	0.066	0.007	0.007
0.034	0.033	0.077	0.008	0.008
$X_{et(1)} = 0.039$	0.038	$Y_{et(1)} = 0.087$	0.009	0.009

Tabla 25. Método gráfico

Como primer paso de este método, se buscará el valor de la relación mol en el líquido  $(X_{et(2)}, X_{et(1)})$ , por lo que se seguirá el siguiente procedimiento para el cálculo.

$$X_{et(2)} = \frac{x_{et(2)}}{1 - x_{et(2)}} = 0.000$$
 Ec. 104- a

$$X_{et(1)} = \frac{N_{GS(1)}}{N_{LS(2)}} (Y_{et(1)} - Y_{et(2)}) + X_{et(2)} = 0.039$$
 Ec. 104- b

$$N_{GS(1)} = N_{G(1)} (1 - y_{et(1)}) = 167.04 [kmol/h]$$
 Ec. 104- c

$$N_{LS(2)} = N_{L(2)} = 361.11 \ [kmol/h]$$
 Ec. 104- d

Una vez encontradas  $X_{et(2)}$  y  $X_{et(1)}$  se determinan intervalos entre estos valores para obtener una cantidad significativa de puntos para poder graficar, los intervalos se eligen de manera arbitraria.

Como siguiente paso se calcula el valor de la relación mol del etanol en el gas seco  $(Y_{et(2)}, Y_{et(1)})$  con la siguiente ecuación.

$$N_{G(1)}(Y_{et(1)} - Y) = N_{L(2)}(X_{et(1)} - X)$$
 Ec. 104- e

Despejando y sustituyendo valores

$$Y = 2.7x10^{-3} + 2.1618X$$
 Ec. 104- f

Posterior a esto, se calcula la línea de equilibrio como se muestra en las últimas columnas de la Tabla 25. Para poder realizar la gráfica.

Gráfica 2. NTU método gráfico



Como se puede observar en la Gráfica 2, el número de unidades de transferencia no es un valor único. Se podría obtener una estimación más precisa con una extensión de la gráfica, sin embargo, para términos prácticos, se puede redondear el valor a 2, ya que, el resultado es mayor a 1.5 unidades.

$$NTU_{GT} = 2$$
 Ec. 104

## 3.8.5. Modelo o Método de los trapecios

n	X	Y	<b>Y</b> *	$\frac{1}{Y-Y^*}$
0	0.000	$Y_{et(2)} = 0.003$	0.000	$I_0 = 370.370$
1	0.004	0.011	0.001	97.618
2	0.008	0.020	0.002	56.201
3	0.012	0.028	0.003	39.451
4	0.016	0.036	0.004	30.388
5	0.020	0.045	0.004	24.708
6	0.023	0.053	0.005	20.815
7	0.027	0.062	0.006	17.980
8	0.031	0.070	0.007	15.823
9	0.035	0.079	0.008	14.128
10	0.039	$Y_{et(1)} = 0.087$	0.009	$I_n = 12.759$

Tabla 26. Método de los trapecios

$$NTU_{GT} = \int_{Y_{et(2)}}^{Y_{et(1)}} \frac{dY}{Y - Y^*} + \frac{1}{2} ln \left( \frac{1 + Y_{et(2)}}{1 + Y_{et(1)}} \right)$$
 Ec. 105

El método o regla de los trapecios sirve para determinar el valor de la anterior ecuación integral, la cual queda de la siguiente manera:

$$NTU_{GT} = \int_{Y_{et(2)}}^{Y_{et(1)}} \frac{dY}{Y - Y^*} = \frac{Y_{et(1)} - Y_{et(2)}}{n} \left( \frac{I_0 + I_n}{2} + \sum_{1}^{n-1} I \right)$$
 Ec. 105- a

$$\therefore NTU_{GT} = \frac{Y_{et(1)} - Y_{et(2)}}{n} \left( \frac{I_0 + I_n}{2} + \sum_{1}^{n-1} I \right) + \frac{1}{2} ln \left( \frac{1 + Y_{et(2)}}{1 + Y_{et(1)}} \right)$$
Ec. 105- b

Como primer paso para este método, se determina el valor de la relación mol de líquido libre de soluto.

$$X_{et(2)} = \frac{x_{et(2)}}{1 - x_{et(2)}} = 0.000$$
 Ec. 105- c

$$X_{et(1)} = \frac{N_{GS(1)}}{N_{LS(2)}} (Y_{et(1)} - Y_{et(2)}) + X_{et(2)} = 0.039$$
 Ec. 105- d

Se determinan los intervalos (n) a utilizar en la ecuación, que en este caso son 10. Posterior a ello se seleccionan valores entre  $X_{et(2)}$  y  $X_{et(1)}$  preferentemente de forma escalonada.

A continuación, se determinan los valores de la fracción mol de líquido para todos los intervalos seleccionados.

$$x = \frac{X}{1+X}$$
 Ec. 105- e

Con la siguiente ecuación se determinan los valores de la relación mol de gas libre de soluto:

$$Y = 2.7x10^{-3} + 2.1618X$$
 Ec. 105- f

Ya con estos datos, como penúltimo paso se calcula la fracción mol de gas en equilibrio y la relación mol del gas libre de soluto en equilibrio.

$$y^* = m * x$$
 Ec. 105- g

$$Y^* = \frac{y^*}{1 - y^*}$$
 Ec. 105- h

Finalmente, como se muestra en la última columna de la tabla 2.23 se calculan los puntos a incluir en la suma de la integración.

$$\frac{1}{Y - Y^*}$$
 Ec. 105- i

Sustituyendo valores en el método de los trapecios obtenemos como resultado lo siguiente:

$$NTU_{GT} = 4.250 \rightarrow 4$$

#### 3.9. Diámetro de la columna

#### 3.9.1. Modelo de Lobo/Eckert/Sherwood

$$m_{L(2)} = 1.806 [kg/s]$$
 Ec. 106- a

$$m_{G(1)} = N_{G(1)} * M_G = 2.228 [kg/s]$$
 Ec. 106- b

$$\rho_G = 2.005 \, [kg/m^3]$$
 Ec. 106- c

$$\rho_L = 997.05 \, [kg/m^3]$$
 Ec. 106- d

#### Gráfica 3. Factor de flujo vs parámetro de capacidad (Ray Sinnott & Gavin Towler, 2013) Reproducido bajo permiso de Elsevier



Las curvas que cruzan la gráfica se refieren a la caída de presión dentro de la columna en unidades de  $[mm H_2O/m]$ 

$$F_{LV} = \frac{m_{L(2)}}{m_{G(1)}} \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}} = 0.036 \ [adm]$$
Ec. 106- e

$$K_4 = 0.650 \ [adm]$$
 Ec. 106- f

$$\Delta P = 16.52 \ [mm \ H_2 O/m]$$
 Ec. 106- g

Ahora con el valor estimado del parámetro de capacidad  $K_4$  se procede a calcular el flux másico del gas.

$$G = \left(\frac{K_4 * \rho_G(\rho_L - \rho_G)}{13.1 * F_p(\mu_L/\rho_L)^{0.1}}\right)^{0.5} = 0.925 \left[\frac{kg}{s \cdot m^2}\right]$$
 Ec. 106- h

$$A_T = \frac{m_{G(2)}}{G} = 2.408 \ [m^2]$$
 Ec. 106- i

$$D = \sqrt{\frac{4 * A_T}{\pi}} = 1.751 \ [m]$$
 Ec. 106

## 3.9.2. Modelo de Chattopadhyay

$$m_{G(1)} = N_{G(1)} * M_G = 2.228 [kg/s]$$
 Ec. 107- a

$$G = v_G * \rho_G = 1.906 \left[ \frac{kg}{s \cdot m^2} \right]$$
 Ec. 107- b

$$A_T = \frac{m_{G(1)}}{G} = 1.169 \ [m^2]$$
 Ec. 107- c

$$D = \sqrt{\frac{4 * A_T}{\pi}} = 1.220 \ [m]$$
 Ec. 107

## 3.9.3. Modelo de Reinhard Billet (D)

$$v_G = 0.950 \ [m/s]$$
 Ec. 108- a

$$P = 1.114 \ [bar]$$
 Ec. 108- b

$$T = 298.150 [K]$$
 Ec. 108- c

$$N_{G(1)} = 181.568 \ [kmol/h]$$
 Ec. 108- d

$$D = 5.4x10^{-3} \sqrt{\frac{N_{G(1)} * T}{P * v_G}} = 1.221 [m]$$
 Ec. 108

4. COMPARACIÓN DE MODELOS

En este capítulo se presentan de forma tabular los resultados obtenidos de los distintos modelos matemáticos obtenidos en la literatura y el análisis de resultados.

## 4.1. Fracción de líquido estancado

Modelo/Referencia	Ecuación	Resultado [ <i>adm</i> ]	Comentarios
Shulman/Ulrich/Wells	Ec. 52	0.028	Se consideró 50 mm Raschig Ring cerámico como empaque
Billet	Ec. 53	0.026	
Billet	Ec. 54	0.030	
Engel	Ec. 55	0.042	

Tabla 27. Resultados para la fracción de líquido estancado

Las principales variantes involucradas en las ecuaciones de la fracción de líquido estancado son:

- la velocidad del liquido
- las características geométricas del empaque
- la viscosidad cinemática
- la fuerza de gravedad

La velocidad y cantidad de materia del líquido son directamente proporcionales a la fracción de líquido estancado. Entre mayor sea el flujo a través de la columna, habrá siempre mayor cantidad de líquido bordeando el empaque.

De igual manera la viscosidad cinemática representa una proporcionalidad directa, ya que simplemente por definición esta viscosidad es una medida de resistencia a la afluencia del líquido bajo fuerzas gravitacionales. Por lo tanto, un fluido más viscoso representara un incremento en la fracción de líquido estancado.

Por otra parte, las características geométricas de los empaques podrían representar un incremento o disminución del valor de este parámetro, ya que los empaques con mayor área superficial de transferencia de masa muestran menos área donde el líquido puede permanecer estancado. De igual manera, los empaques con mayor diámetro muestran mayor afluencia del fluido a través de él, sin embargo, si los empaques son pequeños y con menor área superficial de transferencia de masa habrá más fracción de líquido estancado. Por último, la gravedad es el factor que siempre permanece inversamente proporcional, ya que, es la fuerza que ayuda a la atracción de las partículas de líquido hacia el fondo de la torre.

Como se puede observar en la Tabla 27, los resultados son muy cercanos entre sí, por lo que no habrá mucha diferencia entre el modelo matemático seleccionado.

## 4.2. Caída de presión por altura de empaque (en seco)

Modelo/Referencia	Ecuación	Resultado [Pa/m]	Comentarios
( Billet <i>,</i> 1995)	Ec. 66	141.76	
Carmen/Kozeny	Ec. 67	1.976	Cuidado, predice un valor mucho más bajo que el de los demás modelos
Burke/Plummer	Ec. 68	132.09	
Sabri Ergun	Ec. 69	134.07	
(Chattopadhyay, 2007)	Ec. 70	248.36	Se consideró <i>50 mm Raschig Ring cerámico</i> como empaque
R. Zarzycki	Ec. 71	582.48	
(Chattopadhyay, 2007)	Ec. 72	128.07	Se consideró <i>Pall Ring cerámico 35 mm</i> como empaque

Tabla 28. Resultados para la caída de presión en seco por altura de empaque

## 4.3. Caída de presión por altura de empaque (Total)

Modelo/Referencia	Ecuación	Resultado [Pa/m]	Comentarios
Reinhard Billet	Ec. 73	161.42	
M. Leva	Ec. 74	278.96	Se consideró <i>50 mm Raschig Ring cerámico</i> como empaque
Kister and Gill	Ec. 75	1312.67	Cuidado, predice un valor mucho más alto que el de los demás modelos
Kister and Larson	Ec. 76	92.46	Se consideró <i>Pall Ring platico 50 mm</i> como empaque
R. Zarzycki	Ec. 77	180.00	Se consideró Pall Ring 25 mm como empague

Tabla 29. Resultados para caída de presión total por altura de empaque

En el cálculo de la caída de presión tanto en seco como la total se puede observar una estructura general que representa cada ecuación, esta estructura es la siguiente:

 $\Delta P/Z = C(v_G^2 \cdot \rho_G)$ 

C = Constante geométrica

La constante geométrica depende claramente del tipo de empaque que se utilice en el estudio. Involucra parámetros como porosidad del empaque, área superficial de transferencia de masa del empaque, factor de fricción, factor de pared y diámetro efectivo de empaque, entre otros.

Es la ecuación presentada con más frecuencia en la literatura y esta descrita para la caída de presión por la pérdida de energía cinética.

También se puede hallar otro tipo de ecuación con una estructura similar a la anterior, pero con la diferencia de que ahora se considera la viscosidad del fluido en lugar de la densidad. La estructura de esta ecuación es la siguiente:

 $\Delta P/Z = C(v_G \cdot \mu_G)$ 

*C* = *Constante geométrica* 

Esta ecuación describe la caída de presión debido a la pérdida de resistencia por arrastre.

En general éstas son las principales ecuaciones que presenta la literatura. Sin embargo, hay variantes tales como, las Ec. 75 y Ec. 76 o los métodos gráficos, que a su vez se basan en la velocidad del fluido fase gas.

Ahora, realizando el análisis de resultados para las ecuaciones de caída de presión por altura de empaque (en seco) se puede observar en la Tabla 28 que todos los valores obtenidos son del mismo orden de magnitud y no tienen gran diferencia entre sí. Únicamente el valor reproducido de la Ec. 67, proporciona un resultado mucho más pequeño que los demás. La Ec. 67 describe la caída de presión debido a la pérdida de resistencia por arrastre, lo cual indica que la caída de presión dentro de la torre se da por la pérdida de energía cinética.

Como se observa en la Tabla 29 para las ecuaciones de caída de presión por altura de empaque (total), se puede observar que la mayoría de los resultados son del mismo orden de magnitud y no hay diferencia significativa entre ellos, excepto para el resultado obtenido con la Ec. 75, el cual es mucho mayor que los demás. Ello se debe a que la Ec. 75 depende principalmente del factor de empaque.

Es razonable que una ecuación con una constante y una única variable dependiente de la geometría del empaque, no pueda dar un resultado tan completo.

## 4.4. Coeficiente de difusión

Modelo/Referencia	Ecuación Resultado $[cm^2/s]$		Comentarios					
Fase gas								
Wilke/Lee	Ec. 78	0.082						
Chapman/Enskog	Ec. 79	0.075						
Fuller	Ec. 80	0.011						
	Fase líquida							
Mayduk/Minhas	Ec. 81	1.37x10 <sup>-5</sup>						
Stokes/Einstein	Ec. 82	1.08x10 <sup>-5</sup>						
Glasstone	Ec. 83	1.02x10 <sup>-4</sup>						

Tabla 30. Resultados del coeficiente de difusión

Como se menciona en el capítulo 2 el coeficiente de difusión depende principalmente de tres parámetros:

- Temperatura
- Presión
- Composición de la mezcla

Las dos primeras variables son características del sistema, las cuales pueden ser modificadas para la mejora del proceso.

La temperatura actúa de manera directamente proporcional para la difusión de los gases mientras que la presión actúa de manera contraria. En el caso de líquidos únicamente la temperatura afecta a la difusión y de igual manera, lo hace de manera directamente proporcional.

La composición de la mezcla engloba varios factores, tales como:

- Tamaño de las partículas
- Peso molecular de los compuestos
- Volúmenes atómicos
- Viscosidad del disolvente

Si las partículas son de mayor magnitud, los compuestos involucrados tienen volúmenes atómicos más grandes, y el disolvente es más viscoso, por lo que la difusión será más difícil.

Como se puede observar en la Tabla 30 los valores para el coeficiente de difusión en fase gas y en fase líquida son del orden de magnitud descrito en la literatura o muy cercano a ello, por lo que se puede concluir que cualquier ecuación reportada en el capítulo 2 para el coeficiente de difusión proporcionará un resultado factible.

#### 4.5. Coeficiente de transferencia de masa

Referencia	Ecuación	Resultado [ <i>kmol/(s · m</i> <sup>3</sup> )]	Comentarios	Fase	
(Chattonadhyay 2007)	Ec. 00	0.002	Cuidado, predice un valor más		
(Chattopauliyay, 2007)	EC. 90	0.002	bajo que el de los demás modelos	Car	
(Cussler, 2009)	Ec. 92	1.170		Gas	
(Cussler, 2009)	Ec. 93	0.230			
(Chattanadhyay 2007)	Fc 01		Cuidado, predice un valor más		
(Challopaulyay, 2007)	EC. 91	0.058	bajo que el de los demás modelos	الأمسنام	
(Cussler, 2009)	Ec. 94	0.158		iiquida	
(Cussler, 2009)	Ec. 95	1.721			

Tabla 31. Resultados del coeficiente de transferencia de masa

Como se mencionó en el capítulo 2, las diferentes formas de calcular el coeficiente de transferencia de masa se basan en la ecuación de capa límite, complementándola con una constante numérica asociada al factor geométrico, el número de Reynolds y el número Schmidit elevados a sus respectivos exponentes, los cuales son comúnmente menores a uno; obteniendo una ecuación básica como se indica a continuación.

 $(Sh) = CQ(Re)^n (Sc)^m$ 

C = Constante númerica

#### Q = Constante geométrica

El número de Sherwood (*Sh*) relaciona el coeficiente de difusión y una longitud característica, que en este caso es la del empaque, por lo que para el cálculo del coeficiente de transferencia de masa siempre está involucrado de manera

directamente proporcional el coeficiente de difusión, y de manera inversamente proporcional el diámetro efectivo del empaque.

Cabe mencionar que la ecuación para el número de Schmidit es contante en todos los cálculos, pero no es así para el número de Reynolds, ya que en la literatura se reportan diferentes tipos de ecuaciones para este número adimensional, estas variaciones son principalmente por las consideraciones del factor geométrico del empaque. Es prudente resaltar que las ecuaciones Ec. 92, Ec. 93, Ec. 94 y Ec. 95 no contemplan el factor geométrico dentro del número de Reynolds.

Se puede observar en la Tabla 31 que en general todos los resultados son menores a dos y que no hay tanta discrepancia entre una fase y otra. Sin embargo, entre ellos tienen diferencias porcentuales relevantes, lo que principalmente se puede deber a las constantes involucradas en cada ecuación, ya que éstas pueden variar en función del proceso estudiado y del tipo de empaque utilizado.

Por otra parte, las ecuaciones con los resultados más prudentes son las que toman en consideración las características del empaque para el número de Reynolds, lo que podría dar un resultado más cercano al real.

Sin embargo, aun con el análisis teórico realizado no se puede definir cuál es la mejor ecuación para el proceso sin resultados prácticos, por lo que siempre es más conveniente elegir la opción más crítica o conservadora.

## 4.6. Altura total de unidades de transferencia (HTU)

Modelo/Referencia	Ecuación	Resultado [ <i>m</i> ]	Comentarios
(Benitez, 2009)	Ec. 99	0.220	
(Chattopadhyay, 2007)	Ec. 100	0.220	

Tabla 32.Resultados para la altura total de unidades de transferencia (HTU)

Hay una sola ecuación para la altura total de unidades de transferencia, aunque se representa de diferentes maneras. Se puede obtener directamente con el coeficiente global de transferencia de masa con la Ec. 99, mientras que con la Ec. 100 se puede calcular con la altura de unidades de transferencia de cada fase.

En conclusión, se puede utilizar la ecuación que se le haga más sencilla analizar, ya que con cualquiera de las dos se obtiene el mismo resultado.

## 4.7. Número total de unidades de transferencia (NTU)

Modelo/Referencia	Ecuación	Resultado [adm]	Comentarios
Kremser	Ec. 101	1.537	
P. Chattopadhyay	Ec. 103	3.816	
Método Gráfico	Ec. 104	2.000	
Método de los trapecios	Ec. 105	4.250	

Tabla 33. Resultados para el número total de unidades de transferencia (NTU)

El método gráfico representado por la Ec. 104 es más preciso para sistemas diluidos o aquellos donde la curva de operación y la de equilibrio son casi paralelas; dado que nuestro proceso maneja un sistema diluido, el resultado obtenido se puede decir que es muy cercano al real.

Además del método gráfico existe el método de Kremser, el cual es una solución analítica del método gráfico, por lo cual de igual manera es más preciso para sistemas diluidos. Como se puede apreciar en la Tabla 33, la ecuación de Kremser (Ec. 101) y el método gráfico (Ec. 104) producen resultados muy cercanos entre sí. Se redondeo el valor de NTU con la ecuación del método gráfico, pero su valor real se encuentra entre 1.5 y 2 unidades.

Por otra parte, el método de los trapecios representado en la Ec. 105 da como resultado la aproximación de una integral definida. Los límites de integración para nuestro caso de estudio son las concentraciones de CO<sub>2</sub> absorbidas por el disolvente líquido. Es un modelo adecuado para sistemas de baja concentración y al ser la solución de un área bajo la curva, resulta ser más certero que el método gráfico o el método de Kremser.

Por último, el método correspondiente a la Ec. 103 es un modelo derivado del método de los trapecios, el cual es simplificado y con la obtención de un resultado más rápido.

Sería conveniente en este caso elegir el método con el cual se obtenga un número total de unidades de transferencia más grande para que la absorción requerida se lleve a cabo de manera completa, cuidando siempre los recursos, ya que esto implica una mayor cantidad de empaques.

#### 4.8. Diámetro

Modelo/Referencia	Ecuación	Resultado [ <i>m</i> ]	Comentarios
Lobo/Eckert/Sherwood	Ec. 106	1.751	
P. Chattopadhyay	Ec. 107	1.220	
Reinhard Billet	Ec. 108	1.221	

Tabla 34. Resultados del parámetro diámetro de la columna

El diámetro de la columna depende totalmente del área transversal la cual a su vez está determinada por el flujo y flux másico de gas.

El flux másico de gas está relacionado con la velocidad del gas, por lo que un aumento del flujo de la mezcla gas o un incremento en la velocidad de mismo gas afectarían de manera directamente proporcional al diámetro de la columna, provocando un incremento en el diámetro de la columna.

Como se puede observar en la Tabla 34, los resultados obtenidos con las diferentes ecuaciones son muy cercanos entre sí, lo cual se debe a que en cada una de ellas se involucran las mismas variables con algún parámetro extra, por lo que es posible utilizar cualquiera de esas ecuaciones dependiendo de la información que se tenga del proceso.

#### 4.9. Análisis de una metodología de cálculo diferente

Como análisis extra, en este capítulo se incluirá una metodología de cálculo similar a la presentada en el artículo de referencia, pero planteando ecuaciones distintas para los cálculos principales, tales como diámetro de columna, caída de presión, coeficiente de difusión, coeficiente de transferencia de masa, altura total de unidades de transferencia y número total de unidades de transferencia.

Se tomaron los datos base del capítulo 1 para el tipo de empaque *50-mm Ceramic Pall*® *rings* y se utilizaron las ecuaciones reportadas en el capítulo 2, pero solo aquellas que generaron los mejores resultados para cada parámetro.

Parámetro	Valor	Unidades
Flujo volumétrico $\left( Q_{G(1)}  ight)$	4000	$m^3/h$
Temperatura del sistema $(T)$	25.0	°C
Presión del sistema (P)	1.1	atm
Densidad del gas ( $ ho_G$ )	2.005	$kg/m^3$
Peso molecular del gas $(M_G)$	44.17	kg/kmol
Flujo másico del líquido a la entrada $\left(m_{L(2)} ight)$	6500	kg/h
Densidad del líquido ( $ ho_L$ )	997.047	$kg/m^3$
Viscosidad del líquido ( $\mu_L$ )	8.90x10 <sup>-4</sup>	$Pa \cdot s$
Viscosidad del gas ( $\mu_G$ )	1.64x10 <sup>-5</sup>	$Pa \cdot s$
Área superficial de transferencia de masa $(a)$	121	$m^{-1}$
Porosidad del empaque ( $\varepsilon$ )	0.783	adm.
Constante de Aceleración de la Gravedad $(g)$	9.82	<i>m/s</i> <sup>2</sup>
Cantidad de etanol absorbido $\left(m_{et(abs)} ight)$	649.08	kg/h
Flujo másico del líquido a la salida $ig(m_{L(1)}ig)$	7149.08	kg/h
Fracción mol de etanol en el gas de entrada $ig(y_{et(1)}ig)$	0.08	
Fracción mol de etanol en el líquido de entrada $\left(x_{et(2)} ight)$	0.00	
Peso molecular de etanol $(M_{et})$	46.068	kg/kmol
Peso molecular del dióxido de carbono $(M_{CO2})$	44.01	kg/kmol
Diámetro de colisión de etanol ( $\sigma_{et}$ )	4.530	Å
Diámetro de colisión de Dióxido de carbono $(\sigma_{CO2})$	3.941	Å
e/k para etanol ( $e_{et}/k$ )	362.600	K
e/k para dióxido de carbono $(e_{CO2}/k)$	195.200	K
Constante de Boltzmann $(k_B)$	1.38x10 <sup>-23</sup>	J/K
Diámetro efectivo de empaque $\left( d_{p} ight)$	1.8x10 <sup>-2</sup>	m
Constante del gas ideal (R)	0.080	$\frac{m^3 \cdot atm}{mol \cdot K}$
$\int dx dx = \frac{1}{2} \int dx $	00 206	mot 1 m <sup>-1</sup>
Area superiicial electiva del empaque $(u_h)$	10	ka/kmol
Percentaio de etapol removido $(0/P)$	10	0/
Forcentaje de etallor removido ( $\%R$ )	3/	70 atm
Constante de Henry para sistema etanol-agua a 25°C (H)	0.252	um

Tabla 35. Datos de entrada del proceso, nueva metodología

#### 4.9.1 Diámetro de la torre

La ecuación para el cálculo de la velocidad del gas obtenida de (Chattopadhyay, 2007), reporta una constante *C* para empaques de tipo anillo o espiral.

$$N_{G(1)} = \frac{Q_{G(1)} * \rho_G}{M_G} = 181.568 \ [kmol/h]$$

$$m_{G(1)} = \frac{N_{G(1)} * M_G}{3600} = 2.228 \ [kg/s]$$

$$m\mu_L = 1000 * \mu_L \ [mPa \cdot s]$$

$$C = 0.220 \ [adm]$$

$$log\left(\frac{v_{Gin}}{\varepsilon^3} * \frac{a}{g} * \frac{\rho_G}{\rho_L} * m\mu_L^{0.16}\right) = C - 1.75 \left(\frac{m_{L(2)}}{m_{G(1)}}\right)^{1/4} \left(\frac{\rho_G}{\rho_L}\right)^{1/8}$$

$$\therefore v_{Gin} = 2.375 \ [m/s]$$

$$v_G = 0.75 v_{Gin} = 1.781 \ [m/s]$$

$$P = 1.114 \ [bar]$$

$$T = 298.15 \ [K]$$

$$D = 5.4x 10^{-3} \sqrt{\frac{N_{G(1)} * T}{P * v_G}} = 0.892 \ [m]$$

#### 4.9.2 Caída de presión por altura de empaque total

Para la siguiente sección se realizará el cálculo con el sistema de unidades inglés, ya que así es como la literatura lo muestra, sin embargo, se reporta el resultado en el sistema internacional de unidades.

$$L = \left(\frac{4 * m_{L(2)} + m_{et(abs)}}{3600 * \pi * D^2}\right) \left(\frac{2.205}{3.28^2}\right) = 0.652 \left[\frac{lb}{s \cdot ft^2}\right]$$
$$G = \left(\frac{4 * m_{G(1)} - m_{et(abs)}}{3600 * \pi * D^2}\right) \left(\frac{2.205}{3.28^2}\right) = 0.672 \left[\frac{lb}{s \cdot ft^2}\right]$$
$$\rho_G = 0.0624\rho_G = 0.125 \left[lb/ft^3\right]$$
$$\frac{\Delta P}{Z} = \alpha \left(10^{\beta * L}\right) \left(\frac{G^2}{\rho_G}\right) = 0.432 \left[in H20/ft\right]$$

$$\alpha = 0.10 \ [adm] \beta = 0.12 \ [adm]$$

$$\frac{\Delta P}{Z} = 816.72 \left(\frac{\Delta P}{Z}\right) = 352.795 \left[Pa/m\right]$$

## 4.9.3 Coeficiente de difusión para la fase gas

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_{et} + \sigma_{CO2}}{2} = 4.236 \, [\text{Å}]$$
$$T^* = \frac{T}{\sqrt{\frac{e_{et}}{k} * \frac{e_{CO2}}{k}}} = 1.121 \, [adm]$$

$$\begin{split} \Omega_D &= \frac{1.06036}{T^{*0.15610}} + \frac{0.19300}{\exp(0.47635*T^*)} + \frac{1.03587}{\exp(1.52996*T^*)} + \frac{1.76474}{\exp(3.89411*T^*)} = 1.364 \ [adm] \\ D_G &= 1.858 \times 10^{-3} \frac{\sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_{et}} + \frac{1}{M_{CO2}}\right)}}{P*\sigma_{AB}^2 * \Omega_D} = 0.074 \ [cm^2/s] \end{split}$$

## 4.9.4 Coeficiente de difusión para la fase líquida

$$r_{et} = 1X10^{-10} \left(\frac{\sigma_{et}}{2}\right) = 2.27 \ X10^{-10} \ [m]$$
$$D_L = \left(\frac{k_B * T}{6 * \pi * \mu_L * r_{et}}\right) * 10000 = 1.08 \ X10^{-5} \ [cm^2/s]$$

#### 4.9.5 Coeficiente de transferencia de masa para la fase gas

$$\upsilon_{G} = \frac{\mu_{G}}{\rho_{G}} = 8.16x10^{-6} [m^{2}/s]$$

$$Re_{G} = \frac{\nu_{G}}{a * \upsilon_{G}} = 1803.84 [adm]$$

$$Sc_{G} = \frac{\upsilon_{G}}{D_{G}} = 1.103 [adm]$$

$$= 3.6 * Re^{0.7} * Sc^{\frac{1}{3}} (a * d_{p})^{-2} (a * D_{G}) = 0.374 [m/s]$$

$$k_{\nu G} = k_{G} * \frac{P}{R * T} * a_{h} = 1.692 \left[\frac{kmol}{m^{3} \cdot s}\right]$$

## 4.9.6 Coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida

 $k_G$ 

$$v_{L} = \frac{\mu_{L}}{\rho_{L}} = 8.93 \times 10^{-7} [m^{2}/s]$$

$$Q_{L(1)} = \frac{m_{L(1)}}{\rho_{L} * 3600} = 0.002 [m^{3}/s]$$

$$A = \frac{\pi * D^{2}}{4} = 0.625 [m^{2}]$$

$$v_{L} = \frac{Q_{L(1)}}{A} = 0.003 [m/s]$$

$$Re_{L} = \frac{d_{p} * v_{L}}{v_{L}} = 38.438 [adm]$$

$$Sc_{L} = \frac{v_{L}}{D_{L}} = 823.77 [adm]$$

$$k_{L} = 25 * Re^{0.45} * Sc^{0.5} \left(\frac{D_{L}}{d_{p}}\right) = 3.73 \times 10^{-4} [m/s]$$

$$M_{L} = x_{et(2)} * M_{et} + (1 - x_{et(2)})M_{A} = 18.00 [kg/kmol]$$

$$C_{L} = \frac{\rho_{L}}{M_{L}} = 55.392 \ [kmol/m^{3}]$$
$$k_{\nu L} = k_{L} * C_{L} * a_{h} = 2.032 \ \left[\frac{kmol}{m^{3} \cdot s}\right]$$

## 4.9.7 Altura total de unidades de transferencia

$$\begin{split} N_{et(abs)} &= \frac{Q_{G(1)} * \rho_G}{M_G} * R\% * y_{et(1)} = 14.090 \ [kmol/h] \\ &N_{L(2)} = \frac{m_{L(2)}}{M_A} = 361.111 \ [kmol/h] \\ &G_{My(1)} = \frac{4 * N_{G(1)}}{3600 * \pi * D^2} = 0.081 \ \left[\frac{kmol}{s \cdot m^2}\right] \\ &G_{My(2)} = \frac{4 * (N_{G(1)} - N_{et(abs)})}{3600 * \pi * D^2} = 0.074 \ \left[\frac{kmol}{s \cdot m^2}\right] \\ &G_{Mx(1)} = \frac{4 * (N_{L(2)} + N_{et(abs)})}{3600 * \pi * D^2} = 0.167 \ \left[\frac{kmol}{s \cdot m^2}\right] \\ &G_{Mx(2)} = \frac{4 * N_{L(2)}}{3600 * \pi * D^2} = 0.161 \ \left[\frac{kmol}{s \cdot m^2}\right] \\ &G_{My} = \frac{G_{My(1)} + G_{My(2)}}{2} = 0.078 \ \left[\frac{kmol}{s \cdot m^2}\right] \\ &G_{Mx} = \frac{G_{Mx(1)} + G_{My(2)}}{2} = 0.164 \ \left[\frac{kmol}{s \cdot m^2}\right] \\ &HTU_G = \frac{G_{My}}{k_{vG}} = 0.046 \ [m] \\ &HTU_L = \frac{G_{Mx}}{k_{vL}} = 0.081 \ [m] \\ &m = \frac{H}{P} = 0.229 \ [adm] \\ HTU_{GT} = HTU_G + \frac{m * G_{My}}{G_{Mx}} * HTU_L = 0.055 \ [m] \end{split}$$
#### 4.9.8 Número total de unidades de transferencia

$$y_{et(2)} = (1 - \% R) * y_{et(1)} = 0.002 \ [adm]$$

 $x_{et(1)} = \frac{N_{et(abs)}}{N_{L(2)} + N_{et(abs)}} 0.038 \, [adm]$ 

$$y_{et(1)}^* = m * x_{et(1)} = 0.009 \ [adm]$$

$$y_{et(2)}^* = m * x_{et(2)} = 0.000 \ [adm]$$

$$\Delta y_{et(1)} = y_{et(1)} - y_{et(1)}^* = 0.071 \ [adm]$$

$$\Delta y_{et(2)} = y_{et(2)} - y_{et(2)}^* = 0.002 \ [adm]$$

$$NTU_{GT} = \frac{\frac{y_{et(1)} - y_{et(2)}}{\Delta y_{et(1)} - \Delta y_{et(2)}}}{\ln\left(\frac{\Delta y_{et(1)}}{\Delta y_{et(2)}}\right)} = 3.816 \ [adm]$$

#### 4.9.9 Altura de la columna

$$Z = HTU_{GT} * NTU_{GT} = 0.208 [m]$$

### 4.9.10 Resultados

Parámetro	Unidades	De artículo	De nuevo análisis
$v_{Gin}$	m/s	1.357	2.375
$v_{G}$	m/s	0.950	1.781
D	m	1.221	0.892
L	$kg/(s \cdot m^2)$	1.698	3.179
G	$kg/(s \cdot m^2)$		3.278
$\Delta P/Z$	Pa/m	159	353
$D_G$	cm <sup>2</sup> /s	0.082	0.074
r <sub>et</sub>	m		2.27x10 <sup>-10</sup>
$D_L$	cm²/s	1.36x10 <sup>-5</sup>	1.08x10 <sup>-5</sup>
Re <sub>G</sub>	adm	6475.8	1803.8
$Sc_G$	adm	0.862	1.103
k <sub>vG</sub>	$kmol/(s \cdot m^3)$	0.203	1.692
Α	$m^2$	1.169	0.625
$v_L$	m/s	0.002	0.003
Re <sub>L</sub>	adm	15.772	38.438
$Sc_L$	adm		823.77
$k_{vL}$	$kmol/(s \cdot m^3)$	0.592	2.032
$G_{My(1)}$	$kmol/(s \cdot m^2)$	0.043	0.081
$G_{My(2)}$	$kmol/(s \cdot m^2)$	0.040	0.074
$G_{Mx(1)}$	$kmol/(s \cdot m^2)$	0.089	0.167
$G_{Mx(2)}$	$kmol/(s \cdot m^2)$	0.086	0.161
$G_{My}$	$kmol/(s \cdot m^2)$	0.041	0.078
$G_{Mx}$	$kmol/(s \cdot m^2)$		0.164
$HTU_G$	m		0.046
HTUL	m		0.081
$HTU_{GT}$	m	0.221	0.055
$NTU_{GT}$	adm	3.809	3.816
Ζ	m	0.800	0.208

Tabla 36. Comparación de resultados entre ecuaciones del artículo y nueva propuesta de ecuaciones

## CONCLUSIONES

Analizando la Tabla 36 se pueden observar las diferencias puntuales en los valores obtenidos de las diversas variables calculadas. Por ejemplo, la velocidad obtenida en el capítulo 4.9.1 es casi el doble de la reportada en el artículo de referencia, lo que indica en primera instancia que se obtendrán valores más altos para la caída de presión dentro de la columna y esto provoca menor transferencia de masa.

Lo anterior indica que el valor de una sola variable puede afectar en secuencia a las demás variables calculadas y para este caso podemos observar que la velocidad del gas diverge del resultado obtenido por el artículo, ya que, la constante usada en la ecuación corresponde a un tipo de empaque distinto al de la referencia.

También se puede observar discrepancia entre los valores reportados para el cálculo de los números adimensionales. Ello se explica por el hecho de que algunos autores proponen ecuaciones que consideran características específicas del empaque utilizado, tales como el espesor de pared del empaque, factor de fricción, porosidad, etc, con el fin de obtener un número adimensional más preciso para el cálculo.

Se podrían proporcionar más ejemplos; sin embargo, con estos se puede captar la idea principal, la cual es prevenir a cualquiera persona que modele una columna empacada sobre el observar y tener precaución con las limitantes de los modelos matemáticos a utilizar para su cálculo.

En consecuencia, el presente trabajo no busca la selección del mejor modelo matemático para el dimensionamiento de una columna empacada, más bien muestra la comparación numérica de los modelos entre sí para que sirvan de criterio a alguien que los necesite.

## ANEXO I

#### Permiso de la revista científica Nexo

## Atribución 3.0 No portada (CC BY 3.0)

This is a human-readable summary of (and not a substitute for) the license. Advertencia.

#### Usted es libre de:

**Compartir** — copiar y redistribuir el material en cualquier medio o formato

**Adaptar** — remezclar, transformar y construir a partir del material para cualquier propósito, incluso comercialmente.

La licenciante no puede revocar estas libertades en tanto usted siga los términos de la licencia



## Bajo los siguientes términos:



Atribución — Usted debe dar crédito de manera adecuada, brindar un enlace a la licencia, e <u>indicar si se han realizado</u> <u>cambios</u>. Puede hacerlo en cualquier forma razonable, pero no de forma tal que sugiera que usted o su uso tienen el apoyo de la licenciante.

No hay restricciones adicionales — No puede aplicar términos legales ni medidas tecnológicas que restrinjan legalmente a otras a hacer cualquier uso permitido por la licencia.

#### **Avisos:**

No tiene que cumplir con la licencia para elementos del materiale en el dominio público o cuando su uso esté permitido por una excepción o limitación aplicable.

No se dan garantías. La licencia podría no darle todos los permisos que necesita para el uso que tenga previsto. Por ejemplo, otros derechos como <u>publicidad, privacidad, o</u> <u>derechos morales</u> pueden limitar la forma en que utilice el material.

#### Permiso de la editorial American Chemical Society

#### NEW METHOD FOR PREDICTION OF BINARY GAS-PHASE DIFFUSION COEFFICIENTS



Author: Edward N. Fuller, Paul D. Schettler, J. Calvin. Giddings Publication: Industrial & Engineering Chemistry Publisher: American Chemical Society Date: May 1, 1966

Copyright © 1966, American Chemical Society

#### PERMISSION/LICENSE IS GRANTED FOR YOUR ORDER AT NO CHARGE

This type of permission/license, instead of the standard Terms and Conditions, is sent to you because no fee is being charged for your order. Please note the following:

- Permission is granted for your request in both print and electronic formats, and translations.

- If figures and/or tables were requested, they may be adapted or used in part.

- Please print this page for your records and send a copy of it to your publisher/graduate school.

- Appropriate credit for the requested material should be given as follows: "Reprinted (adapted) with permission from {COMPLETE REFERENCE CITATION}.

Copyright {YEAR} American Chemical Society." Insert appropriate information in place of the capitalized words.

- One-time permission is granted only for the use specified in your RightsLink request. No additional uses are granted (such as derivative works or other editions). For any uses, please submit a new request.

**CLOSE WINDOW** 

If credit is given to another source for the material you requested from RightsLink, permission must be obtained from that source.

BACK

#### Permiso de la editorial ELSEVIER

ELSEVIER LICENSE TERMS AND CONDITIONS Jul 13, 2021 This Agreement between Mr. Oscar Enriquez Sánchez ("You") and Elsevier ("Elsevier") consists of your license details and the terms and conditions provided by Elsevier and Copyright Clearance Center. License Number 5107420068767 License date Jul 13, 2021 Licensed Content Elsevier Publisher Licensed Content Gas Separation & Purification Publication General model for prediction of pressure drop and capacity of Licensed Content Title countercurrent gas/liquid packed columns Licensed Content Author J. Stichlmair, J.L. Bravo, J.R. Fair Licensed Content Date Mar 1, 1989 Licensed Content Volume 3 Licensed Content Issue 1 Licensed Content Pages 10 Start Page 19 End Page 28

## Permiso de la editorial John Wiley and Sons

Jul 14, 2021						
This Agreement between Mr. Oscar Enriquez Sânchez ("You") and John Wiley and Sons ("John Wiley and Sons") consists of your license details and the terms and conditions provided by John Wiley and Sons and Copyright Clearance Center.						
License Number	5107450324502					
License date	Jul 14, 2021					
Licensed Content Publisher	John Wiley and Sons					
Licensed Content Publication	Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering					
Licensed Content Title	Absorption: Fundamentals and Applications, by R. Zarzycki and A. Chacuk, Pergamon Press, Oxford, UK (1993). 638 pages. ISBN 0-08-040263-1.					
Licensed Content Author	Martyn S. Ray					
Licensed Content Date	May 15, 2008					
Licensed Content Volume	2					
Licensed Content Issue	2-3					

#### Permiso de la editorial Elsevier

ELSEVIER LICENSE TERMS AND CONDITI	ONS				
Jul 14, 2021					
This Agreement between consists of your license d Copyright Clearance Cen	Mr. Oscar Enriquez Sánchez ("You") and Elsevier ("Elsevier") etails and the terms and conditions provided by Elsevier and ter.				
License Number	5107940290975				
License date	Jul 14, 2021				
Licensed Content Publisher	Elsevier				
Licensed Content Publication	Elsevier Books				
Licensed Content Title	Chemical Engineering Design				
Licensed Content Author	Gavin Towler, Ray Sinnott				
Licensed Content Date	Jan 1, 2013				
Licensed Content Pages	20				
Start Page	505				
End Page	524				
Type of Use	reuse in a thesis/dissertation				
Portion	figures/tables/illustrations				

#### Permiso de la editorial Pearson

Permissions gr	ANT LETTER/INVOICE		Pearson 221 River St, Hoboken, NI 07030, USA T +1 201 236 700 E info@pearson.com W pearson.com
Correspondence Date	01-Oct-2021	Pearson Reference	185707
Deal Type	Permissions Granting: Commercial		
Request date	14-Jul-2021	Requester Reference Number	
Requester Representative Name	UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO (Braulio Enriques)		
Requester Representative Address	SCIENTIFIC INVESTIGATION, FACULTY OF CHEMISTRY BUILDING E, LABORATORY 213 UNIVERSITY CITY, 04510 Mexico		
Requested Content:			
Title	Separation Process Engineering		
Author	Phillip Wankat		
ISBN	9780131382275		
Edition Number	3		
Copyright Year	2012		
Pearson Entity	Pearson Education, Inc.		
Asset Description	page 413 Table 10-3		
Requested Use	Thesis		
Pearson USA Pearson Education Inc. Fo	aderal Tax ID: 22-1603684	Company Registrat	tion No
Pearson Education Inc. P.O. Box 403339 Atlanta, GA 30384-3339		Bank of America 901 Main Street Dallas, TX 75202 ABA Routing #0260-0959-3 (wires only) ABA Routing #111-000-012 (all others) Swift Code: BOFAUS3N Account #3752182561 Account Name: Pearson Education Inc.	
Signature: Erails Erreits Erreits	(0cr.4, 2021 00:43 CDT) fq@gmail.com (0cr.4, 2021 11:15 CMT+2) (0cr.5, 2021 11:15 CMT+2) (ander@pearson.com		

# **BIBLIOGRAFÍA**

- Benitez, J. (2009). *Principles and moderns applications of mass transfer operations.* New Jersey: A JOHN WILEY & SONS, INC.,.
- Billet, R. (1995). *Packed towers in Processing and Environmental Technology.* Germany: VCH.
- Bird, R., Stewart, W., Lightfoot, E., & Klingenberg, D. (2015). *Introductory Transport Phenomena.* USA: Wiley.
- Chattopadhyay, P. (2007). *Absorption and stripping.* New Delhi: Asian books private limited.
- Cussler, E. (2009). *Diffusion mass transfer in fluid systems*. New York: CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS.
- Dr. K., W. (11 de Agosto de 2017). Mass Transfer. *Estimation of Diffusivities*. Zurich, Alemania: Eidgenossische Technische Hochschule Zurich.
- Dutta, B. (2009). *Principles of mass transfer and separation processes.* New Delhi: PHI learning private limited.
- Kolev, N. (2006). *Packed bed columns : for absorption, desorption, rectification and direct heat transfer.* Elsevier.
- Mackowiak, J. (2010). Fluid Dynamics of Packed Columns. Principles of the Fluid Dynamic Design of Columns for Gas/Liquid and Liquid/Liquid Systems. Springer.
- McCabe, W., Smith, J., & Harriott, P. (1993). *Operations of Chemical Engineering.* Singapore: McGraw-Hill.
- P. Chattopadhyay. (2007). *Absorption and stripping.* New Delhi: Asian books private limited.
- Pérez Sánchez, A., Pérez Sánchez, E., & Segura Silva, R. (2016). Diseño de una columna de absorción empacada considerando cuatro tipos de empaque y aplicando MATLAB. *Nexo revista científica*, 83-104.
- Poling, B., Prausnitz, J., & O'Connell, J. (2001). *The Properties of Gases and Liquids* (fifth ed. ed.). USA: McGraw-Hill.
- Ralph , F. S. (1987). *Packed tower design and applications.* Houston, Texas: Gulf Publishing Company.

- Ray Sinnott, & Gavin Towler. (2013). *Chemical Engineering Design.* Oxford: Elsevier.
- Roman , Z., & Andrzej , C. (1993). *Absorption Fundamentals and Applications*. Oxfordshire: Pergamon Press.
- Sabri, E. (1952). fluid flow through packed columns. En *Chemical engineering progress* (págs. 88-94). Pittsburgh, Pennsylvania: Carnegie Institute of Technology.
- Shulman , H., Savini, C., & Edwin, R. (1963). Performance of Packed Columns VII. The Effect of Holdup on Gas-Phase Mass Transfer Rates. AIChE Journal, 9(4), 479-484.
- Shulman, H., & Delaney, L. (1959). V. Effect of Solute Concentration on Gas-Phase Mass Transfer Rates. *AIChE Journal*, *5*(3), 290-294.
- Shulman, H., & Margolis, J. (1957). Performance of Packed Columns. IV. Effect of Gas Properties, Temperature, and Pressure on Gas Phase Mass Transfer Coefficients. AIChE Journal, 3(2), 157-161.
- Shulman, H., & Mellish, W. (1967). Performance of Packed Columns. Part VIII. liquid Flow Patterns and Velocities in Packed Beds. *AIChE Journal*, 13(6), 1137-1140.
- Shulman, H., & Robinson, R. (1960). Performance of Packed Columns. VI. Mass Transfer Rates for Dehumidification at High Solute Concentrations}. *AIChE Journal*, 6(3), 469-472.
- Shulman, H., Mellish, W., & Lyman, W. (1971). Performance of Packed Columns. IX. Simulation of a Packed Column. *AIChE Journal*, *17*(3), 631-640.
- Shulman, H., Ullrich , C., Wells, N., & Proulx, A. (1955). Perfomance of Packed Columns. III. Holdup for Aqueous and Nonaqueous Systems. *AICHE Journal*, 1(2), 259-264.
- Shulman, H., Ullrich, C., & Wells, N. (1955). Performance of Packed Columns. I. Total, Static, and Operating Holdups. *AICHE Journal*, 1(2), 247-253.
- Shulman, H., Ullrich, C., Proulx, A., & Zimmerman, J. (1955). Performance of Packed
  Columns II. Wetted and Effective-interfacial Areas, Gas and Liquid-phase
  Mass Transfer Rates. *AIChE Journal*, 2(1), 253-258.

- Stichlmair, J., Bravo, J., & Fair, J. (1988). General model for prediction of pressure drop and capacity of countercurrent gas/liquid packed columns. *Gas Separation & Purification, 3*(March), 19-28.
- Wankat, P. (2012). *Separation Process Engineering* (3rd ed.). Westford, Massachusetts: Prentice Hall.