

5. Modelos de simulación de destilación discontinua

Existe una gran variedad de modelos para la simulación de la destilación discontinua que tienen diferentes enfoques y grados de detalle. Un modelo muy simple con muchas restricciones es el modelo short-cut, que es esencialmente un cálculo aproximativo de la separación en una columna para un instante de tiempo. Puede ser útil para optimizaciones y se explica en el apartado 5.1.

Otra clase de modelos son los modelos MESH, que reciben su nombre del conjunto de ecuaciones principales que forman el modelo. Son los balances de Materia, de Energía, condiciones de Suma y ecuaciones de la Hidráulica. Modelos de esas características existen también como modelos rigurosos y el modelo del plato de equilibrio es un modelo de estas características (apartado 5.2). Los modelos de transferencia de materia tal como el desarrollado en el presente trabajo, son una extensión de los modelos MESH, y se denominan a veces modelos MERSHQ por añadir ecuaciones de tRansferencia (Rate equations) de materia y de calor y por las relaciones de eQuilibrio en la interfase. De hecho la "Q" debería estar también presente en la denominación de los modelos MESH también, ya que comprenden el cálculo del equilibrio.

5.1. El modelo abreviado (short cut)

El modelo abreviado, comunmente conocido por su terminología inglesa "short-cut", es un modelo de equilibrio muy simplificado y se usa generalmente para estudiar el efecto del cambio de la relación de reflujo sobre los costos de inversión y de operación. Para estos estudios es preciso simular toda la duración del lote muchas veces bajo un determinado criterio de optimización, así que hace falta un modelo lo más simple posible. El modelo short-cut es útil para tareas de diseño aproximativo o para la determinación de valores iniciales para una solución iterativa más compleja (Górak, 1994).

El método short-cut para el cálculo de la destilación discontinua es relativamente reciente y fue desarrollado por Diwekar y coautores (Diwekar, 1988). Este método se basa en la suposición, que una columna de destilación discontinua puede ser considerada como una columna continua con una alimentación cambiante en cada instante. Como la teoría del modelo short-cut para la destilación continua está muy bien desarrollada, se modificaron simplemente las ecuaciones para el cálculo del proceso continuo. Estas ecuaciones son las que desarrollaron Fenske (Fenske, 1935), Underwood (Underwood, 1948) y Gilliland (Gilliland, 1940) y son conocidas bajo la abreviación FUG.

5.1.1. Suposiciones del modelo short-cut

Las hipótesis principales del modelo short-cut son:

- Flujo molar constante en toda la columna. Esto equivale a suponer evaporación y condensación equimolar, cosa que ocurre cuando la entalpía de vaporización es la misma para todos los componentes. Se trata de una suposición que puede ser bastante correcta cuando se destilan compuestos muy parecidos, como por ejemplo isómeros.
- Volatilidad relativa constante. Esta es una de las suposiciones más restrictivas del modelo y a su vez una de las suposiciones que más agiliza el cálculo, ya que se suprime el cálculo iterativo del equilibrio vapor-líquido. La restricción del modelo se manifiesta en el hecho de hacer imposible el cálculo de la separación de cualquier mezcla líquida que no tenga un comportamiento ideal. Dicha suposición puede ser lo suficientemente buena por ejemplo para una mezcla de hidrocarburos de orden ascendente (pentano, hexano, heptano, etc.).
- Efecto de acumulación (en inglés: "Hold-up") en la columna despreciable. Esta hipótesis depende de la relación entre las principales zonas de acumulación de líquido, que son el condensador y el evaporador, y el hold-up total en la columna sea en los platos o en el relleno de la columna. Suponer que el hold-up en el cuerpo de la columna es despreciable en comparación al hold-up en el calderín

es una suposición especialmente válida para la destilación discontinua, ya que no hay alimentación y todo el líquido a procesar se encuentra en el calderín (evaporador).

Para la situación mencionada en la Figura 19, se supone que la cantidad molar de líquido evaporado en el calderín es constante durante todo el proceso. Esto es equivalente a la suposición de vaporización y condensación equimolar teniendo además un suministro de potencia constante durante todo el tiempo de procesamiento del lote. La suposición mencionada lleva al siguiente balance total de materia:

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{\dot{V}}{R+1} \quad (147)$$

El balance de materia para el componente clave k en un periodo de tiempo diferencial se puede escribir:

$$x_{D,k} \frac{\dot{V}}{R+1} = -\frac{d(x_{B,k}C)}{dt} \quad (148)$$

Sustituyendo con la ecuación (147) en la ecuación (148) resulta:

$$\frac{dx_{B,k}}{dt} = \frac{\dot{V}}{C(R+1)}(x_{B,k} - x_{D,k}), \quad x_{B0,k} = x_{F,k} \quad (149)$$

Como una de las hipótesis es que no haya hold-up en la columna, se puede aplicar la ecuación de Rayleigh, que relaciona para cada instante de procesamiento del lote la concentración en el calderín con la concentración del destilado, según:

$$\ln\left(\frac{C}{C_0}\right) = \int_{x_F}^{x_B} \frac{dx_B}{x_D - x_B} \quad (150)$$

Aplicando la ecuación de Rayleigh se llega a las ecuaciones que relacionan la variación de la concentración de componente i en una mezcla de n componentes con la variación de la concentración de componente k en el calderín:

$$\frac{dx_{B,i}}{(x_{B,i} - x_{D,i})} = \frac{dx_{B,k}}{(x_{B,k} - x_{D,k})}, \quad x_{B0,i} = x_{F,i}; \quad i = 1, 2, i \neq k, \dots, M \quad (151)$$

La aproximación de diferencias finitas a la ecuación mencionada arriba resulta en:

$$x_{B_{nuevo},j} = x_{B_{anterior},j} + \frac{\Delta x_{B,k} (x_{B,j} - x_{D,j})_{anterior}}{(x_{B,k} - x_{D,k})_{anterior}}, \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (152)$$

Con la ecuación expuesta arriba es posible calcular iterativamente para cada instante de tiempo la concentración en el calderín, conociendo las concentraciones de destilado y calderín del instante de tiempo anterior. La ecuación (152) demuestra, que lo más importante para el cálculo de concentraciones durante el procesamiento del lote, es el conocimiento de la concentración del destilado en función de la concentración en el calderín. Para establecer la relación funcional entre la concentración del destilado y la del calderín se usa el método modificado de Fenske, Underwood y Gilliland (FUG).

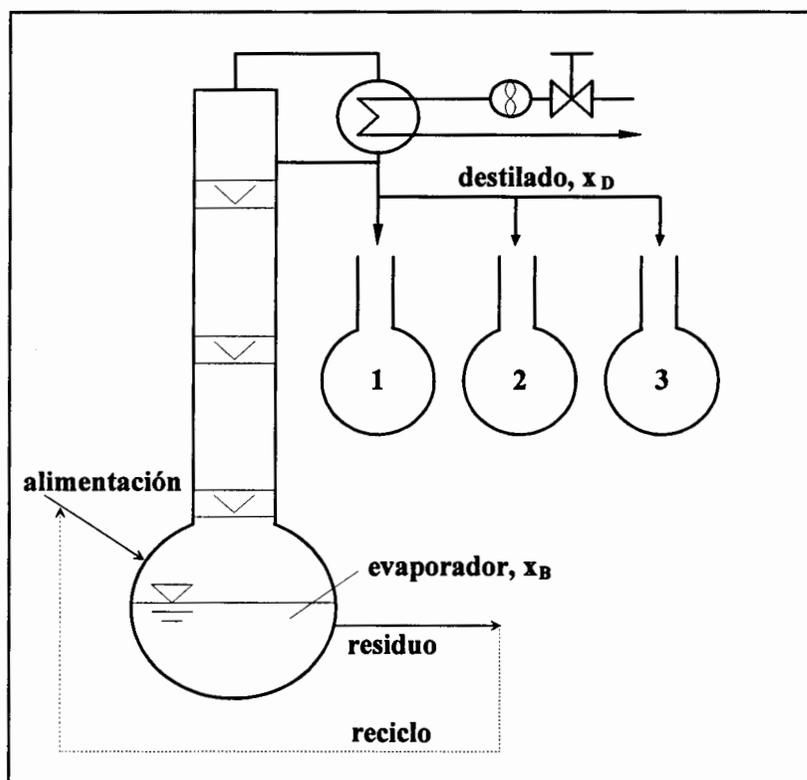


Figura 19: Operación típica de la destilación discontinua

5.1.2. Las ecuaciones FUG

En cada instante de tiempo hay un cambio en la concentración del componente clave en el calderín que cambia la concentración de todos los demás componentes en el mismo, que se puede calcular con el balance diferencial de materia dado por la ecuación (152).

Para relacionar la concentración del destilado con la nueva concentración del calderín se puede usar una forma modificada de la ecuación de Fenske (Fenske, 1932).

La ecuación desarrollada por Fenske calcula el número mínimo de platos para mezclas con volatilidad relativa α_{ij} constante en función de la concentración del producto residual y del destilado. Ecuación de Fenske:

$$n_{min} = \frac{\ln \frac{x_{D,i} x_{B,k}}{x_{D,k} x_{B,i}}}{\ln \alpha_i / \alpha_1} \quad (153)$$

Modificando la ecuación de Fenske para tener la concentración del destilado en función de la concentración del calderín, resulta una ecuación denominada ecuación de Hengstebeck-Geddes:

$$x_{D,j} = \left(\frac{\alpha_j}{\alpha_1} \right)^{n_{min}} \frac{x_{D,k}}{x_{B,k}} x_{B,j}, \quad i = 1, 2, \dots, M (i \neq k) \quad (154)$$

El número mínimo de platos n_{min} de la ecuación de Fenske está definido como el número de platos de equilibrio requeridos para una separación dada bajo la condición de reflujo total. El número mínimo de platos representa uno de los límites de las condiciones de operación siendo el otro el reflujo mínimo.

Lo expuesto arriba vale para una separación entre dos componentes, mientras que para una mezcla multicomponente la separación tiene que ser expresada en términos de una pseudo-mezcla binaria de dos componentes clave, que son el componente clave ligero LK (el componente más ligero en el calderín) y el componente clave pesado HK (el componente más pesado en el destilado). Contrariamente a la destilación continua, los componentes clave cambian durante el curso del lote. Por ejemplo el componente clave ligero es el componente que sale como el primer producto en el destilado y luego deja de serlo, siendo sustituido por el próximo componente en la jerarquía de la volatilidad relativa de los componentes.

Para calcular la relación de reflujo mínima, que es la condición del otro límite de operación, se puede usar las ecuaciones desarrolladas por Underwood (Underwood,

1948). Para alcanzar el reflujo mínimo hace falta una cantidad infinita de platos en la columna. Las dos ecuaciones desarrolladas por Underwood para la destilación continua son:

$$\sum_{i=1}^M \frac{\alpha_i x_{F,i}}{\alpha_i - \phi} = 1 - q \quad (155)$$

$$r_{min} + 1 = \sum_{i=1}^M \frac{\alpha_i x_{D,i}}{\alpha_i - \phi} \quad (156)$$

La variable q en la ecuación (155) representa el estado de la alimentación y está definido como la relación del calor necesario para vaporizar 1 mol del líquido de la alimentación a la entalpía de vaporización del mismo líquido. El parámetro ϕ es la variable que conecta las dos ecuaciones (156) y (155). Su valor siempre se encuentra entre los valores de la volatilidad relativa de los componentes LK y HK. La función del parámetro ϕ y su deducción están ampliamente explicados en la excelente publicación de Underwood (Underwood, 1948). El método short-cut asume que la destilación discontinua puede ser considerada como destilación continua con alimentación variable. En otras palabras, el producto residual de un paso de integración (mezclado con el contenido del calderín) es la alimentación para el próximo paso de integración. Esto es equivalente a tener el último plato como plato de alimentación y la alimentación al punto de ebullición, lo que significa que $q = 1$. Reemplazando entonces en la ecuación de Underwood la concentración de la alimentación con la concentración del calderín, se obtiene para la destilación discontinua:

$$\sum_{i=1}^M \frac{\alpha_i x_{B,i}}{\alpha_i - \phi} = 0 \quad (157)$$

$$r_{min} + 1 = \sum_{i=1}^M \frac{\alpha_i x_{D,i}}{\alpha_i - \phi} \quad (158)$$

Las variables de diseño de la columna como la relación de reflujo r y el número de platos N están relacionados por la correlación de Gilliland (Gilliland, 1940) con los valores r_{min} y n_{min} . Esta ecuación es una ecuación muy importante ya que permite relacionar los valores de relación de reflujo mínimo y de número de platos mínimo (que

son los valores en los dos extremos de operación de una columna de destilación, valores que nunca se alcanzan) con los valores reales de uso de la columna.

$$Y = 1 - \exp\left[\frac{(1 + 54.4X)(X - 1)}{(11 + 117.2X)\sqrt{X}}\right] \quad (159)$$

con

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1}; \quad Y = \frac{N - N_{min}}{N + 1} \quad (160)$$

Dentro de las ecuaciones del modelo short-cut expuesto arriba solo se encuentran dos ecuaciones diferenciales (ecuación (147) y (149)). El resto de las ecuaciones son ecuaciones algebraicas, lo que permite por su simplicidad usar por ejemplo el modelo para control óptimo. Se puede observar que las mismas ecuaciones - aunque en formas distintas - pueden ser usadas para simular los distintos modos de operación, que son reflujo variable, reflujo óptimo y reflujo constante, siendo éste último el modo de operación usado en los experimentos hechos para el trabajo presente. A continuación se explica cómo aplicar el modelo short-cut para este modo de operación.

En cada instante de tiempo las ecuaciones (147), (149) y (152) pueden ser usadas para calcular la concentración de todos los componentes en el calderín. Luego hay un procedimiento para calcular la concentración del destilado en estos instantes. Este procedimiento se repite para cada paso de integración hasta satisfacer un criterio de parada. Las incógnitas para el caso de la destilación con reflujo constante son el exponente en la ecuación (154), n_{min} y la concentración del destilado x_n . Con la condición de la adición a uno de todas las concentraciones molares en el calderín, se puede obtener la concentración $x_{D,k}$. La otra incógnita n_{min} se obtiene con las ecuaciones FUG.

5.1.3. Método short-cut para la destilación discontinua

Para el caso de reflujo constante el siguiente procedimiento explica cómo resolver un paso de integración. Hay que notar que la elección del componente clave ligero es crucial para el éxito del método. Dada la concentración del calderín es posible calcular

la concentración del destilado con ecuación (154). No obstante hay dos incógnitas en la ecuación que son n_{min} y $x_{D,k}$. Para resolver el problema se pueden seguir los siguientes pasos:

1. Estimar un valor inicial de n_{min} .
2. La ecuación Hengstebeck-Geddes (ecuación (154)) y el hecho de que la suma de todas las concentraciones en el destilado debe ser uno, lleva a:

$$\sum_{i=1}^M \left(\frac{\alpha_i}{\alpha_k} \right)^{n_{min}} \frac{x_{D,k}}{x_{B,k}} x_{B,i} = 1 \quad (161)$$

Así la concentración del destilado se puede obtener por:

$$x_{D,k} = \frac{1}{\sum_{i=1}^M \left(\frac{\alpha_i}{\alpha_k} \right)^{n_{min}} \frac{x_{B,i}}{x_{B,k}}} \quad (162)$$

3. Sustituyendo esta concentración del componente clave k en ecuación (154), calcular los $x_{D,i}$, $i = 1, 2, \dots, M$.
4. Resolver las ecuaciones de Underwood (ecuaciones (155) y (156)) sustituyendo las concentraciones de calderín y de destilado para calcular r_{min} . Este valor se denomina $r_{min,U}$ para futuras referencias.
5. Para el caso del reflujo constante son ahora variables conocidas la relación de reflujo misma y el número de platos teóricos para la especificación de la columna. Con estos valores se puede calcular la relación de reflujo mínima con la correlación de Gilliland. Para futura referencia se denomina este valor $r_{min,G}$.
6. En el caso de haber estimado en el paso 1 el valor correcto para n_{min} , los dos valores $r_{min,U}$ y $r_{min,G}$ deberían ser iguales o bien el valor δ en la siguiente ecuación debe tender a cero cuando n_{min} ha convergido.

$$\delta = \frac{r_{min,U}}{r} - \frac{r_{min,G}}{r} \quad (163)$$

7. Calcular δ y averiguar si se encuentra dentro de una determinada tolerancia. Cuando δ se aumenta dentro de la tolerancia especificada, la solución ha convergido para este paso de integración; de lo contrario, calcular un nuevo valor para n_{min} y repetir todos los pasos desde 2.

5.2. El modelo del plato de equilibrio

El modelo del plato de equilibrio o plato teórico es el modelo típicamente usado para el diseño de columnas de destilación y tiene una difusión muy amplia. Todos los paquetes comerciales de simulación de procesos (Aspen Plus de AspenTech, ProVision de Simulation Science y Hysys de Hyprotech) usan este modelo o como mínimo lo tienen como opción. Aunque se trata de un modelo bastante reducido, en la literatura se lo considera como "riguroso". Sus ventajas son la posibilidad de predicción para mezclas de cualquier tipo (también mezclas con azeótropo) y la estabilidad en el cálculo.

5.2.1. Suposiciones del modelo del plato de equilibrio

El modelo del plato de equilibrio representa un modelo simplificado y se distingue por las siguientes suposiciones:

- En el contacto líquido-vapor se alcanza el equilibrio vapor líquido. Se trata de la principal suposición del modelo y de aquí viene el nombre del modelo.
- El líquido en el plato está completamente mezclado y no es compresible, así que no existen gradientes de concentración radiales en la columna. Esta suposición solamente se cumple a perfección en columnas muy pequeñas, porque según

Stichlmaier ya se pueden notar gradientes de concentración en columnas de más de 50mm de diámetro (Stichlmaier, 1995).

- El vapor no arrastra líquido hacia al plato superior. De hecho, esta es una suposición que se debe cumplir siempre y cuando la columna trabaja en el margen de operación satisfactoria sin tener un arrastre excesivo.

El vapor tiene una concentración uniforme al entrar líquido del plato superior, o sea no hay gradientes de concentración radiales en el vapor. Además se considera el vapor como incompresible.

- Todas las fases se encuentran en equilibrio mecánico; no hay diferencias radiales de presión en un plato.

Para el cálculo de una columna de destilación mediante el modelo del plato teórico solo se necesitan balances de materia y el cálculo del equilibrio. Las ecuaciones necesarias para el cálculo están mencionadas en apartado 5.2.2.

El enriquecimiento del vapor en un plato real siempre es menor que el mismo en un plato teórico, ya que se necesitaría una superficie de intercambio infinita o bien un tiempo de contacto entre vapor y líquido infinito para llegar al equilibrio vapor líquido. El cociente entre el enriquecimiento real logrado y el enriquecimiento ideal se llama eficiencia o rendimiento de plato. Hay múltiples definiciones para la eficiencia de plato de la cual la de Murphee es la más usada. Eficiencia de plato según Murphee (Murphee, 1925):

$$\eta_i = \frac{y_{i,m} - y_{i,m+1}}{y_{i,m}^e - y_{i,m+1}} = \frac{y_i^{OUT} - y_i^{IN}}{y_{i,m}^* - y_i^{IN}} \quad (164)$$

La eficiencia del plato depende entre otros factores de las viscosidades de vapor y líquido, de las propiedades de difusión de los componentes y de la carga de vapor y líquido de la columna, ya que estas influyen en la hidrodinámica de la separación. A parte de esto hay fenómenos especiales en la interfase (efectos Marangoni), que pueden influir notablemente sobre la separación. Entre otros son:

- Turbulencia en la interfase por zonas inestables en forma de células giratorias o en forma de interferencias en la superficie de partículas fluidas.
- Cambio de la estabilidad de láminas de líquido por el cambio del espesor de capas de líquido de poco espesor.

Por razón de las influencias mencionadas, que no son predecibles por su carácter estocástico, se usan factores de seguridad en el diseño de columnas cuando se hace servir el modelo del plato teórico.

En cuanto a la aptitud del modelo para la destilación multicomponente, se ha demostrado que las ecuaciones derivadas para mezclas binarias también valen para mezclas multicomponentes. En lugar de la línea de equilibrio de un par binario aparecen ahora las líneas de destilación en una red de coordenadas triangular. También en este diagrama se puede determinar la cantidad exacta de platos teóricos para un determinado problema de separación.

El gran problema del modelo del plato teórico está en el uso de la eficiencia de plato, que pretende hacer del plato teórico un plato real. Solo dentro del rango que cubren los experimentos hechos es posible usar correlaciones o diagramas para este factor y establecer dichas relaciones. Se han llevado a cabo numerosos estudios para la determinación de las eficiencias de plato, pero todos se restringen a un par binario y no tienen en cuenta efectos de cruce con los demás componentes. Con la eficiencia de Murphee no es posible dar una respuesta apropiada al comportamiento diferente de las diferentes sustancias en una mezcla multicomponente; generalmente se usa una sola eficiencia de plato para calcular el enriquecimiento en un plato para todos los componentes.

Como tanto el modelo del plato de equilibrio como el modelo short-cut solo sirven de referencia en este trabajo, no se pretende detallar con mayor profundidad el cálculo de la

eficiencia de plato, lo que puede consultarse por ejemplo en el libro de Treybal (Treybal, 1988).

5.2.2. Ecuaciones de modelización para el modelo del plato de equilibrio

Las ecuaciones básicas de modelización son las denominadas ecuaciones MESH, que comprenden:

- balance de **M**ateria
- relaciones de **E**quilibrio
- ecuaciones de **S**uma
- balance de energía (en inglés: **H**eat)

Adicionalmente se necesitan ecuaciones para el cálculo de la entalpía del vapor y del líquido, para el cálculo de las constantes de equilibrio y de la pérdida de presión. En la Figura 20 están apuntadas todas las variables de un plato teórico. Como se supone que existe equilibrio entre vapor y líquido, la temperatura de vapor y de líquido es la misma y la presión es también la misma.

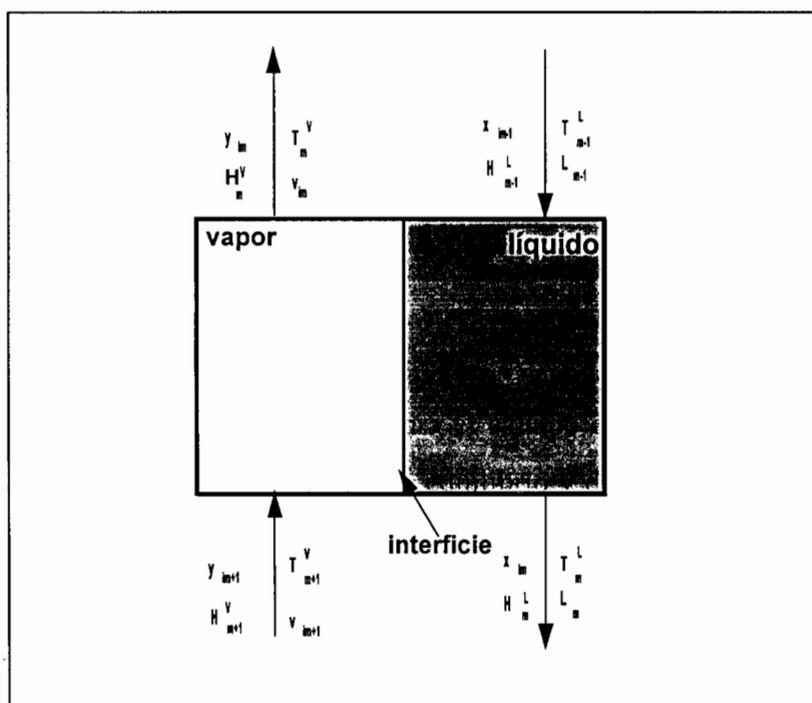


Figura 20: Variables en un plato para el modelo del plato teórico

Los $4M+5$ ecuaciones para el plato número m son:

- Balance total de materia del plato (1 ecuación):

$$\dot{V}_{m+1} + \dot{L}_{m-1} - \dot{V}_m - \dot{L}_m = \frac{d}{dt} \dot{N}_{H,m} \quad (165)$$

- Balance de cantidad de componente (M-1 ecuaciones):

$$y_{i,m+1} \dot{V}_{m+1} + x_{i,m-1} \dot{L}_{m-1} - y_{i,m} \dot{V}_m - x_{i,m} \dot{L}_m = \frac{d}{dt} (N_{H,m} \cdot x_{i,m}) \quad (166)$$

- Balance de energía (1 ecuación):

$$\dot{V}_{m+1} h^v_{m+1} + \dot{L}_{m-1} h^l_{m-1} - \dot{V}_m h^v_m - \dot{L}_m h^l_m = \frac{d}{dt} (N_{H,m} \cdot h_m) \quad (167)$$

- Equilibrio de fase (M ecuaciones):

$$y_{i,m} = K_{i,m} x_{i,m} \quad (168)$$

- Cálculo de la concentración de vapor de salida (M ecuaciones)

$$y_{i,m} = \eta_{i,m} y_{i,m}^e + (1 - \eta_{i,m}) y_{i,m+1} \quad (169)$$

- Cálculo de los constantes de equilibrio (M ecuaciones):

$$K_{i,m} = \gamma_{i,m} \frac{1}{\phi_{i,m}} \frac{P_{i,m}^0}{P_m} \quad (170)$$

- Condición de suma de concentración de vapor (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^n y_{i,m} = 1 \quad (171)$$

- Condición de suma de concentración de líquido (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^n x_{i,m} = 1 \quad (172)$$

- Entalpía de vapor y líquido en función de la concentración, temperatura y presión (2 ecuaciones de la biblioteca de propiedades):

$$\begin{aligned} h_m^V &= f^V(x_m, T_m, p_m) \\ h_m^L &= f^L(x_m, T_m, p_m) \end{aligned} \quad (173)$$

variable	cantidad
\dot{V}_m	1
\dot{L}_m	1
$y_{i,m}$	M
$y_{i,m}^e$	M
$x_{i,m}$	M
h_m^V	1
h_m^L	1
K	M
T_m	1
$S = 4M+5$	

Figura 21: Variables y su número en el modelo del plato teórico.

La cantidad de las variables indicada se multiplica con el número de platos. Los platos se consideran numerados de arriba hacia abajo, así que el líquido que entra al plato número m lleva el índice $m-1$, porque llega del plato de arriba con el número $m-1$, y el vapor que entra al plato lleva el índice $m+1$, ya que sube del plato de abajo con el número $m+1$.

5.2.3. Cálculo de la eficiencia de plato con correlaciones

El uso de eficiencias de plato en la simulación de la destilación tiene muchas desventajas. Las mayores desventajas son la carencia de un razonamiento físico y los problemas de aplicación en la separación multicomponente. A pesar de estas desventajas, se ha optado por trabajar con eficiencias de plato, calculadas con correlaciones de amplia difusión, ya que servirá como modelo de referencia.

El método más simple y utilizado para estimar el comportamiento real de la separación en un plato es el del uso de eficiencias de plato calculadas a base de correlaciones. Estas correlaciones se utilizan generalmente en columnas de separación de hidrocarburos. Una correlación conocida es la de Drickamer y Bradford, que relaciona la eficiencia con la viscosidad promedio del líquido de la alimentación (Drickamer, 1943) según:

$$\eta_{total} = 0.17 - 0.616 \log_{10} \sum_{i=1}^n [x_{i,f} (\mu_{i,L} / \mu_w)] \quad (174)$$

con las variables:

- $x_{i,f}$ fracción molar de componente i en la alimentación
- μ_L viscosidad dinámica de los componentes a temperatura promedio de la torre
- μ_w viscosidad dinámica de agua a 293 K

La correlación mencionada solamente contempla el estado del líquido en su punto de entrada en la columna y es muy aproximada. Correlaciones más exactas existen en términos de unidades de transferencia. De estas correlaciones, las más conocidas son las que se llevaron a cabo en un proyecto del AIChE y que están publicadas en el manual del diseño de platos perforados ("Bubble Tray Design Manual"; van Antwerpen, 1958).

Las así llamadas unidades de transferencia se calculan para ambos lados de la interfase con dos distintas correlaciones clave. El valor de la unidad de transferencia de gas N_G se calcula en función de la altura del rebosadero h_w , del flujo de gas expresado por el la variable F , del flujo de líquido \dot{L} y del número Schmidt de la fase vapor. La unidad de transferencia de líquido N_L se calcula con el factor F , el tiempo de contacto t_L y el coeficiente de difusión del líquido D_L .

$$N_G = (0.776 + 0.0046h_w - 0.24 F + 105 \dot{L}) \sqrt{Sc} \quad (175)$$

$$N_L = \sqrt{4.13 \times 10^8 D_L} (0.21 F + 0.15) t_L \quad (176)$$

Donde el tiempo de contacto t_L en segundos se calcula aquí según:

$$t_L = \frac{h_{zB} Z_L}{L} \quad (177)$$

siendo la altura de la zona bifásica h_{zB} calculada según la ecuación (250), que se verá más adelante

El número total de unidades de transferencia N_O se calcula según:

$$N_{o,j} = \frac{1}{N_{Gj}} + \frac{m_i \dot{G}}{\dot{L}} \frac{1}{N_{Lj}} \quad (178)$$

siendo $m = dy/dx$ la pendiente de la línea de equilibrio.

De las correlaciones dadas por las ecuaciones (175) y (176) se calcula el número de unidades de transferencia para una mezcla binaria pero no están pensadas para la destilación multicomponente. De hecho se trata de las correlaciones más utilizadas, ya que fueron obtenidas en un estudio riguroso llevado a cabo por la prestigiosa AIChE. La razón de usar dichas correlaciones en este trabajo es la de presentar la mejor referencia posible en materias de cálculo de eficiencias de plato.

Según se ha indicado, tales correlaciones no pueden utilizarse para una mezcla multicomponente, ya que el coeficiente de difusión en ecuación (176) (D_L) y el coeficiente de difusión en gases, que se encuentra en el cálculo del número Schmidt en ecuación (175), son coeficientes de interacción binaria para un par binario de sustancias. Para el caso multicomponente se utilizó una transformación a una pseudo-mezcla binaria, calculando así tres diferentes valores *Schmidt* (resultando en tres diferentes unidades de transferencia de gas) y tres diferentes coeficientes binarios de difusión en líquido (resultando así tres diferentes unidades de transferencia de líquido).

Los tres diferentes valores *Schmidt* se han calculando para cada componente suponiendo el promedio aritmético de una mezcla del componente con los demás componentes según:

$$\begin{aligned}
 Sc_1 &= \frac{\mu^y}{\rho^y} \left(\frac{y_2}{y_1 + y_2} D_{12} + \frac{y_3}{y_1 + y_3} D_{13} \right) \\
 Sc_2 &= \frac{\mu^y}{\rho^y} \left(\frac{y_1}{y_2 + y_1} D_{21} + \frac{y_3}{y_2 + y_3} D_{23} \right) \\
 Sc_3 &= \frac{\mu^y}{\rho^y} \left(\frac{y_1}{y_1 + y_3} D_{31} + \frac{y_2}{y_2 + y_3} D_{32} \right)
 \end{aligned} \tag{179}$$

Para el cálculo de N_L se procedió de manera parecida calculando los coeficientes de difusión y los pendientes de la línea de equilibrio m_i según:

$$\begin{aligned}
 D_{L,1} &= D_{L,12} \frac{x_2}{x_1 + x_2} + D_{L,13} \frac{x_3}{x_1 + x_3} & m_1 &= \frac{y_1^e - K_1(x_1 + \Delta x)}{\Delta x} \\
 D_{L,2} &= D_{L,21} \frac{x_1}{x_1 + x_2} + D_{L,23} \frac{x_3}{x_2 + x_3} & m_2 &= \frac{y_2^e - K_2(x_2 + \Delta x)}{\Delta x} \\
 D_{L,3} &= D_{L,31} \frac{x_1}{x_1 + x_3} + D_{L,32} \frac{x_2}{x_2 + x_3} & m_3 &= \frac{y_3^e - K_3(x_3 + \Delta x)}{\Delta x}
 \end{aligned} \tag{180}$$

Conociendo los números totales de unidades de transferencia $N_{O,i}$, se pueden calcular las eficiencias globales para cada componente i mediante:

$$\eta_{total,i} = 1 - e^{(-N_{O,i})} \tag{181}$$

5.3. El modelo de transferencia de materia

El modelo de transferencia de materia se basa en el trabajo de Krishnamurthy y Taylor en el cual se propone el modelo del plato de desequilibrio para el cálculo de la destilación multicomponente (Krishnamurthy, 1985). Este modelo, que se basa en cambios discretos de las variables de estado en una columna, es el más apto para la simulación de una columna con platos, ya que en estas circunstancias aparecen cambios discretos de un plato al otro.

El modelo parte de los balances de materia y de energía en un plato real. Las ecuaciones de transferencia de materia y de calor forman un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales. La solución de este sistema de ecuaciones es la base de la simulación del proceso. El modelo permite la descripción de los fenómenos característicos de la transferencia de materia mediante la definición de coeficientes de transferencia de materia individuales para todos los componentes de la mezcla destilada. Según las suposiciones realizadas para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales, resultan diferentes modelos de transporte (véase capítulo 4).

La alta complejidad del modelo de transferencia de materia y la gran cantidad de parámetros que incluye necesita de un tiempo de cálculo elevado y además puede provocar problemas de convergencia. Adicionalmente hay que determinar otras propiedades para todas las fases a parte de las ya conocidas para el modelo del plato teórico (densidad, entalpía, etc.), que son:

- coeficientes de difusión
- conductividades de calor
- viscosidades

Este aspecto desfavorable aumenta con cada componente adicional, ya que el cálculo se ralentiza considerablemente por el aumento de variables. Las propiedades mencionadas se tienen que calcular generalmente con correlaciones, porque para la mayoría de las mezclas no existen datos de mediciones tabuladas. La fiabilidad de propiedades físicas calculadas es a veces cuestionable, sobre todo cuando su origen no está completamente claro. Por eso para el cálculo de todas las propiedades, que no estaban plenamente documentadas en el entorno de programación usado (Speedup), se ha usado el método publicado más fiable, para no tener que recurrir a las rutinas incorporadas en el entorno de programación.

La posibilidad de la incorporación de reacciones químicas y de fenómenos especiales de circulación en la interfase son las mayores ventajas del modelo de transferencia de materia frente al modelo del plato de equilibrio. Además, el cálculo explícito de la

transferencia entre vapor y líquido es mucho más contundente que el simple uso de un factor de rendimiento como la eficiencia de Murphee. El modelo de transferencia de materia y su explicación son una parte importante del trabajo presente, ya que el modelo de simulación desarrollado se basa principalmente en él.

5.3.1. Suposiciones del modelo de transferencia de materia

Las suposiciones para el modelo de transferencia de materia son básicamente las mismas presentadas para el modelo del plato de equilibrio, que son:

- El líquido en el plato está completamente mezclado y no compresible, no hay gradientes de concentración radiales en la columna.
- El vapor no arrastra líquido hacia al plato de arriba, suposición que se cumple en el margen de operación satisfactoria.
- El vapor tiene una concentración uniforme al entrar al líquido del plato siguiente, no hay gradientes de concentración radiales en el vapor.
- La interfase es uniforme y solo hay un determinado contacto líquido-vapor.
- No hay una acumulación de material en la interfase.
- La cantidad de moles en la fase de vapor (hold-up) es despreciable en comparación a la cantidad de moles en el líquido.
- Todas las fases se encuentran en equilibrio mecánico; no hay diferencias radiales de presión en un plato.

Las suposiciones mencionadas son las típicas para el modelo. Para cada aplicación individual se pueden tomar otras adicionales cuando la aplicación lo permita; así por

ejemplo, para la destilación muchas veces se supone que toda la resistencia del transporte de materia está en la fase de vapor (Taylor, 1993).

5.3.2. Ecuaciones de modelización para el modelo de transferencia de materia

El modelo de transferencia de materia supone el contrario que el modelo del plato teórico, que los caudales que salen de un plato no están en equilibrio. El intercambio de materia y de calor surge por diferencias de temperatura y de concentración en ambas fases. Todos los balances se elaboran para líquido y vapor por separado, interconectando ambas fases con los caudales de materia y de energía transferidos por la interfase. Por eso es necesario formular también las ecuaciones para estos caudales. A partir de las ecuaciones generalizadas de Maxwell-Stefan para sistemas multicomponentes, se obtiene ecuaciones para el intercambio de materia para la fase del gas y del líquido bajo la condición de equilibrio termodinámico en la interfase. Así también se derivan las ecuaciones para la transferencia de calor usando la analogía de Chilton-Colburn.

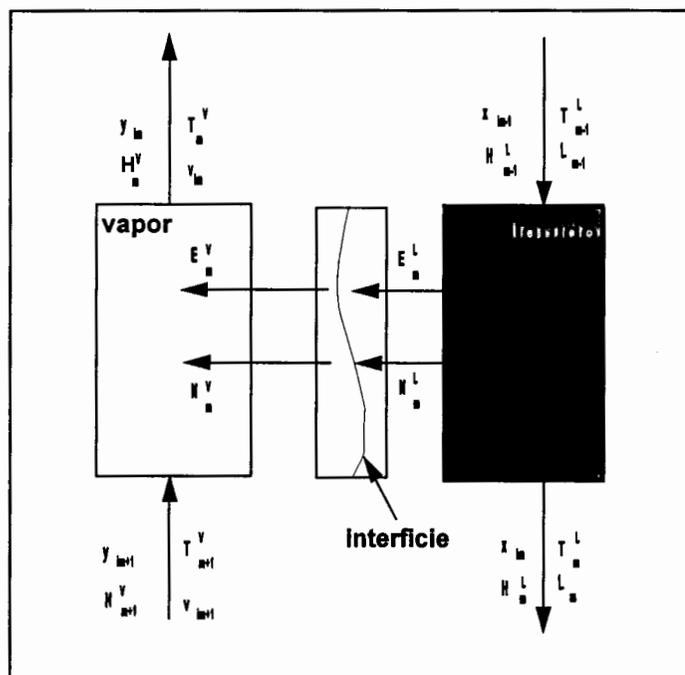


Figura 22: Variables en un plato para el modelo de la transferencia de materia

En la Figura 22 aparecen todas las variables de estado en un plato modelizado con el modelo de la transferencia de materia. La siguiente tabla (Tabla 7) informa acerca del número de estas variables:

variable	número	variable	número
\dot{V}_m	1	T_m^V	1
\dot{L}_m	1	T_m^L	1
$y_{i,m}$	M	T_m^I	1
$y_{i,m}^I$	M	\dot{E}_m^V	1
$x_{i,m}$	M	\dot{E}_m^L	1
$x_{i,m}^I$	M	$\dot{N}_{i,m}^V$	M
h_m^V	1	$\dot{N}_{i,m}^L$	M
h_m^L	1	K_i	M
$\Sigma = 7M+9$			

Tabla 7: Variables y su número en el modelo de la transferencia de materia.

Las ecuaciones para el modelo están agrupadas por separado según el bloque (líquido, vapor o interfase) al cual pertenecen.

Líquido:

- Balance total de materia para el líquido (1 ecuación):

$$\dot{L}_{m-1} - \dot{L}_m - \dot{N}_{i,m}^L = \frac{d}{dt} N_{H,m} \quad (182)$$

- Balance de cantidad de componente para el líquido (M-1 ecuaciones):

$$x_{i,m-1} \dot{L}_{m-1} - x_{i,m} \dot{L}_m - \dot{N}_{i,m}^L = \frac{d}{dt} (N_{H,m} \cdot x_{i,m}) \quad (183)$$

- Balance de energía para el líquido (1 ecuación):

$$\dot{L}_{m-1} h_{m-1}^L - \dot{L}_m h_m^L - \dot{E}_m^L = \frac{d}{dt} (N_{H,m} h_m^L) \quad (184)$$

- Cálculo de los caudales de materia del líquido a la interfase (M-1 ecuaciones):

$$(\dot{N}_m^L) = c_i^L [\beta^L] [k_L^*] (x_m^I - x_m) \quad (185)$$

- Cálculo de la suma de los caudales de vapor a la interfase para determinar el caudal del último componente (1 ecuación):

$$\dot{N}_{i,m}^L = \frac{\dot{q}_m^L - \dot{q}_m^V}{\lambda_y} - \frac{\sum_{k=1}^{M-1} (\lambda_k - \lambda_n) \dot{J}_{k,m}^L}{\lambda_y} \quad (186)$$

- Condición de suma de concentración de líquido (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^n x_{i,m} = 1 \quad (187)$$

- Condición de suma de concentración de líquido en la interfase (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^n x_{i,m}^I = 1 \quad (188)$$

- Equilibrio de fase (n ecuaciones):

$$y_{i,m}^I = K_{i,m}^I x_{i,m}^I \quad (189)$$

- Cálculo de los constantes de equilibrio (M ecuaciones):

$$K_{i,m} = \gamma_{i,m} \frac{1}{\varphi_{i,m}} \frac{P_{i,m}^0}{P_m} \quad (190)$$

- Entalpía del líquido en función de concentración, temperatura y presión (1 ecuación de la biblioteca de propiedades):

$$h_m^L = f^L(x_m, T_m^L, p_m) \quad (191)$$

Vapor:

- Balance total de materia para el vapor (1 ecuación):

$$\dot{V}_{m+1} - \dot{V}_m - \dot{N}_{i,m}^V = 0 \quad (192)$$

- Balance de cantidad de componente para el vapor (M-1 ecuaciones):

$$y_{i,m+1} \dot{V}_{m+1} - y_{i,m} \dot{V}_m - \dot{N}_{i,m}^V = 0 \quad (193)$$

- Balance de energía para el vapor (1 ecuación):

$$\dot{V}_{m+1} h_{m+1}^V - \dot{V}_m h_m^V + \dot{E}_m^V = 0 \quad (194)$$

- Cálculo de los caudales de materia del vapor a la interfase (M-1 ecuaciones):

$$(\dot{N}_m^V) = c_i^V [\beta^V] [k_v^*] (y_m - y_m^I) \quad (195)$$

- Cálculo de la suma de los caudales del vapor a la interfase para determinar el caudal del último componente (1 ecuación):

$$\dot{N}_{i,m}^V = \frac{\dot{q}_m^L - \dot{q}_m^V}{\bar{\lambda}_y} - \frac{\sum_{k=1}^{M-1} (\lambda_k - \lambda_n) \dot{J}_{k,m}^V}{\bar{\lambda}_y} \quad (196)$$

- Condición de suma de concentración de vapor (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^n y_{i,m} = 1 \quad (197)$$

- Condición de suma de concentración de vapor en la interfase (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^n y_{i,m}^I = 1 \quad (198)$$

- Entalpía de vapor en función de concentración, temperatura y presión (1 ecuación de la biblioteca de propiedades):

$$h_m^V = f^V(y_m, T_m^V, P_m) \quad (199)$$

Interfase:

- Continuidad del caudal de materia en la interfase (M ecuaciones):

$$\dot{N}_{i,m}^L = \dot{N}_{i,m}^V \quad (200)$$

- Continuidad del transporte de energía en la interfase (1 ecuación):

$$\dot{E}_m^L = \dot{E}_m^V \quad (201)$$

Así resulta un sistema de $(7M+9)$ ecuaciones, que coincide con las $(7M+9)$ variables desconocidas, que aparecen en la Tabla 7. Una de las suposiciones frecuentemente utilizada consiste en despreciar la resistencia de transporte en el lado el líquido ($x_{i,m} = x_{i,m}^L$). Con dicha suposición el sistema de ecuaciones se reduce en n variables, quedando un sistema de $(6M+9)$ variables. Si adicionalmente se supone que ambas fases se encuentran en equilibrio térmico ($T_m^L = T_m^V = T_m^I$) el sistema se reduce en otras dos variables. Esta suposición es factible, cuando el flujo térmico difusivo es muy pequeño en comparación al flujo convectivo (Górak, 1990).

En las ecuaciones principales del modelo de transferencia de materia (ecuaciones (182) hasta (201)) aparecen algunas variables que precisan una explicación adicional. Son variables que no se han incorporado en el conjunto de ecuaciones por razones de claridad. Estas variables son:

- Cálculo de la transferencia de calor por convección de líquido a la interfase según la teoría laminar (1 ecuación):

$$\dot{Q}_m^L = \alpha^L A^I (T_m^L - T_m^I) \quad (202)$$

- Cálculo de los caudales difusivos del líquido a la interfase (M-1 ecuaciones):

$$(j_m^L) = c_i^L [k_L^*] (x_m - x_m^I) \quad (203)$$

- Cálculo de la transferencia de calor por convección de vapor a la interfase según la teoría laminar (1 ecuación):

$$\dot{Q}_m^V = \alpha^V A^I (T_m^V - T_m^I) \quad (204)$$

- Cálculo de los caudales difusivos del vapor a la interfase (M-1 ecuaciones):

$$(j_m^V) = c_i^V [k_v^*] (y_m^I - y_m) \quad (205)$$

El cálculo de los coeficientes de transferencia de materia según el modelo general de transferencia de materia se explica en el apartado 5.5.

5.4. Modelos mixtos

Para mejorar las desventajas del modelo de desequilibrio se han desarrollado, diferentes modelos con determinadas mejoras. Estos modelos tienen diferentes objetivos y añaden bloques de ecuaciones para poder adaptar el modelo a los efectos reales observados en plantas de destilación. Así por ejemplo, Taylor contempla en un trabajo un modelo que usa la misma formulación para la descripción de la interfase que el modelo de Krishnamurthy (Krishnamurthy, 1985), pero con la ampliación de varios hold-up's adicionales, que representan el líquido en el rebosadero o el líquido disperso en la fase de gas (Taylor, 1994).

5.4.1. El modelo de dos clases de vapor

Un desarrollo interesante es el realizado por Voigtländer, que tiene como objetivo la simulación del comportamiento real de un plato perforado en una columna de destilación, representando la interfase vapor-líquido por dos clases de vapor (Voigtländer, 1995). La mayor ventaja del modelo es la posibilidad del cálculo de la transferencia de materia sin necesidad de correlaciones para la determinación del coeficiente de transferencia de materia, el cual se deduce analíticamente. Esto es posible porque se supone que la única geometría de intercambio es la burbuja.

5.4.2. Suposiciones del modelo de dos clases de vapor

Para el modelo del plato teórico, o sea para un plato de equilibrio con una eficiencia de Murphee de 1.0, se suponía que todo el vapor que entra al plato tenía la concentración correspondiente al equilibrio termodinámico. En cambio, en caso de uso del modelo de transferencia de materia el vapor no ha llegado todavía al equilibrio, así que el proceso está determinado por la cinética del intercambio de calor y de materia.

El caudal de vapor que entra a un plato real se separa en muchos caudales parciales, que tienen flujos volumétricos y superficies diferentes. Todas las construcciones de columnas con platos poseen dispositivos que dividen el vapor entrante, para obtener una interfase vapor - líquido grande, tales como válvulas, campanas o perforaciones. En estos puntos de separación aparecen burbujas de diferentes tamaños, que pasan con diferentes velocidades por la zona bifásica encima del plato. Cuanto más pequeño es el diámetro de la burbuja que se forma, más baja es su velocidad de ascensión. Las burbujas pequeñas con una velocidad ascendente baja, que se traduce en un tiempo de contacto elevado, también poseen una relación superficie / volumen mayor que el de las burbujas grandes. Así que para un determinado tamaño de burbujas pequeñas, esas llegan al equilibrio vapor - líquido y la separación quedaría determinada solamente por la cinética de transferencia en las burbujas grandes.

Esta separación en caudales de vapor con propiedades distintas también se presenta en una columna de relleno, ya que dentro del relleno se forman canales con diferentes diámetros en los cuales sube el vapor con velocidades distintas por una fricción distinta en diferentes superficies. Así en los canales estrechos el tiempo de contacto es mayor y además la relación entre superficie del canal y su volumen es mayor que la de los canales grandes. Como consecuencia, también en una columna de relleno se encuentran caudales de vapor con la concentración del equilibrio y otros con un tiempo de contacto tan corto que no llegan al equilibrio.

Para los dos ejemplos dados, una superficie grande y un tiempo de contacto largo actúan simultáneamente, así que se podría pensar que el intercambio que se efectúa dentro de las burbujas o canales grandes es tan pequeño, que no contribuye substancialmente al intercambio total. De hecho algo similar pudo ser demostrado por Schlünder en una investigación sobre el proceso de secado de ladrillos (Schlünder, 1976). Secando ladrillos de arcilla con diferentes tamaños de poro se mostraba, que existe un tamaño de poro límite, por debajo del cual el aire que sale del secador está completamente saturado, y por encima del cual el aire está casi seco. Para describir los fenómenos de transporte de este proceso es suficiente conocer la porción de los poros que superan el tamaño del poro límite, ya que el aire en estos poros no participa en el proceso de secado, mientras que el aire en los poros pequeños alcanza la saturación y origina el secado. Un proceso de estas características se denomina “proceso determinado por la hidráulica”, porque este proceso solo depende de la distribución de los poros, no teniendo la cinética del intercambio influencia ninguna.

Las burbujas de distintos tamaños en el proceso de la destilación pueden ser entendidas como los poros en un ladrillo. Si la destilación fuera un proceso solamente controlado por la hidráulica, la eficiencia de plato tendría que ser la misma para todos los componentes, porque el comportamiento hidráulico es equivalente para todos los componentes. En realidad las eficiencias en la destilación multicomponente son bien distintas como se conoce de muchos trabajos de investigación y como se revelará también en este trabajo (Taylor 1994, 1993; Mehlhorn, 1996). Experimentos en un solo plato perforado mostraron que el intercambio no solo depende de la hidráulica, sino que también hace falta considerar la cinética del intercambio en las burbujas y los canales grandes (Kaltenbacher, 1982).

El mecanismo de intercambio en el plato depende entonces de la hidráulica y de la cinética del intercambio de calor y de materia. Este hecho es la razón de la ampliación del modelo general de transferencia de materia (apartado 5.3), ya que no se pueden representar diferentes procesos de intercambio de calor y de materia para los distintos caudales de vapor. El gradiente de temperatura y de concentración es el mismo para

todos los caudales parciales en el modelo general de transferencia de materia, aunque en realidad resultan temperaturas y concentraciones diferentes en cada caudal parcial.

Para poder distinguir entre dos diferentes caudales de vapor se ha desarrollado el modelo de dos clases de vapor, que supone un caudal de vapor que llega al equilibrio termodinámico (representado por burbujas pequeñas) y otro para el cuál se calcula la transferencia por la interfase. La separación en dos caudales de vapor se determina con las condiciones hidrodinámicas mediante correlaciones de distintos autores, que han observado una distribución en dos diferentes tamaños de burbujas (Kaltenbacher, 1982; Prado, 1990; Stichmaier, 1995). Para el líquido se sigue suponiendo una mezcla completa en el plato. Las suposiciones y bases del modelo de dos clases de vapor están resumidas a continuación:

- El líquido en el plato está completamente mezclado y no es compresible.
- El vapor no arrastra líquido hacia el plato de arriba.
- El vapor tiene una concentración uniforme al entrar al líquido del plato siguiente, el vapor de salida del plato se representa por la mezcla ideal de los dos vapores de salida (el de equilibrio y el de desequilibrio), no existen gradientes de concentración radiales en el vapor.
- La interfase no es uniforme, hay dos diferentes formas de contacto líquido-vapor
- No hay ninguna acumulación de material en la interfase.
- La cantidad de moles en el vapor de ambas clases de vapor (hold-up) es despreciable en comparación a la cantidad de moles en el líquido.
- Todas las fases se encuentran en equilibrio mecánico; no hay diferencias de presión en un plato.

Los distintos volúmenes de balance se encuentran ilustrados en la Figura 23. Se puede observar que el modelo de dos clases de vapor representa una mezcla del modelo del plato de equilibrio y del modelo de transferencia de materia, ya que la parte del vapor de equilibrio se incorpora junto con el líquido en el balance de materia como si de un modelo de plato de equilibrio se tratase. El tratamiento de la otra parte de vapor es equivalente al mismo del modelo de transferencia de materia.

En la Figura 23 aparecen todas las variables de estado en un plato modelizado con el modelo de dos clases de vapor. No aparece por separado una temperatura del vapor de equilibrio, ya que en equilibrio termodinámico las temperaturas de vapor y líquido son iguales. La siguiente tabla (Tabla 8) informa acerca de estas variables y de su cantidad:

Tabla 8: Variables y su número en el modelo de dos clases de vapor

variable	número	variable	número
\dot{V}_m	1	$h_m^{V, sb}$	1
$\dot{V}_{m, OUT}^{sb}$	1	$h_m^{V, bb}$	1
$\dot{V}_{m, OUT}^{bb}$	1	K_i^I	M
\dot{L}_m	1	K_i	M
$y_{i, m}$	M	T_m^V	1
$y_{i, m}^I$	M	T_m^L	1
$y_{i, m}^{sb}$	M	T_m^I	1
$y_{i, m}^{bb}$	M	$T_m^{V, bb}$	1
$x_{i, m}$	M	\dot{E}_m^V	1
$x_{i, m}^I$	M	\dot{E}_m^L	1
h_m^V	1	$\dot{N}_{i, m}^V$	M
h_m^L	1	$\dot{N}_{i, m}^L$	M
$\Sigma = 10n+14$			

5.4.3. Ecuaciones de modelización para el modelo de dos clases de vapor

Las ecuaciones necesarias para la simulación del modelo de dos clases de vapor son básicamente las mismas que las usadas para el modelo general de transferencia de materia con la diferencia de incorporar un balance adicional de materia y de energía para el punto de mezcla de las dos clases de vapor. El balance de materia y de energía para el líquido es parecido al balance usado en el caso del modelo del plato de equilibrio, incorporando la clase del vapor de equilibrio (burbujas pequeñas).

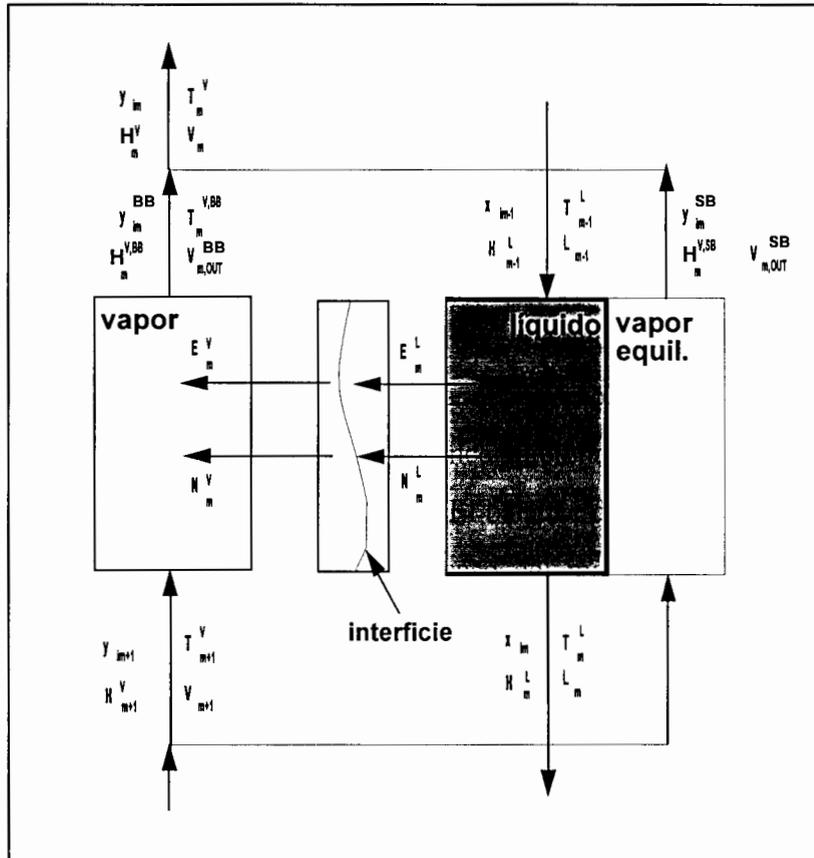


Figura 23: Esquema del modelo de dos clases de vapor

Las ecuaciones expuestas a continuación se agrupan por separado según su pertenencia a líquido, vapor o interfase.

Equilibrio líquido vapor:

- Balance total de materia para el líquido y el vapor en equilibrio (1 ecuación):

$$\dot{L}_{m-1} - \dot{L}_m + \dot{V}_{m,IN}^{SB} - \dot{V}_{m,OUT}^{SB} - \dot{N}_{t,m}^L = \frac{d}{dt} N_{H,m} \quad (206)$$

- Balance de cantidad de componente para el líquido y el vapor en equilibrio (M-1 ecuaciones):

$$x_{i,m-1} \dot{L}_{m-1} - x_{i,m} \dot{L}_m + y_{i,m+1} \dot{V}_{m,IN}^{SB} - y_{i,m}^{SB} \dot{V}_{m,OUT}^{SB} - \dot{N}_{i,m}^L = \frac{d}{dt} (N_{H,m} \cdot x_{i,m}) \quad (207)$$

- Balance de energía para el líquido y el vapor en equilibrio (1 ecuación):

$$\dot{L}_{m-1} h_{m-1}^L - \dot{L}_m h_m^L + \dot{V}_{m,IN}^{SB} h_{m+1}^V - \dot{V}_{m,OUT}^{SB} h_m^{V,SB} - \dot{E}_m^L = \frac{d}{dt} (N_{H,m} h_m^L) \quad (208)$$

- Cálculo de los caudales de materia del líquido a la interfase (M-1 ecuaciones):

$$(\dot{N}_m^L) = c_i^L [\beta^L] [k_L^*] (x_m^I - x_m) \quad (209)$$

- Cálculo de la suma de los caudales del vapor a la interfase para determinar el caudal del último componente (1 ecuación):

$$\dot{N}_{i,m}^L = \frac{\dot{q}_m^L - \dot{q}_m^V}{\bar{\lambda}_y} - \frac{\sum_{k=1}^{M-1} (\lambda_k - \lambda_n) J_{k,m}^L}{\bar{\lambda}_y} \quad (210)$$

- Condición de suma de concentración de líquido (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^n x_{i,m} = 1 \quad (211)$$

- Cálculo de los constantes de equilibrio (M ecuaciones):

$$K_{i,m} = \gamma_{i,m} \frac{1}{\varphi_{i,m}} \frac{P_{i,m}^0}{P_m} \quad (212)$$

- Vapor de burbujas pequeñas en equilibrio con el líquido (M ecuaciones):

$$y_{i,m}^{SB} = K_{i,m} x_{i,m} \quad (213)$$

- Condición de suma de concentración de vapor (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^M y_{i,m}^{SB} = 1 \quad (214)$$

- Entalpía del líquido en función de concentración, temperatura y presión (1 ecuación de la biblioteca de propiedades):

$$h_m^L = f^L(x_m, T_m^L, p_m) \quad (215)$$

Vapor en desequilibrio:

- Balance total de materia para el vapor de desequilibrio (1 ecuación):

$$\dot{V}_{m,IN}^{BB} - \dot{V}_{m,OUT}^{BB} - \dot{N}_{i,m}^V = 0 \quad (216)$$

- Balance de cantidad de componente para el vapor en desequilibrio (M-1 ecuaciones):

$$y_{i,m+1} \dot{V}_{m,IN}^{BB} - y_{i,m} \dot{V}_{m,OUT}^{BB} - \dot{N}_{i,m}^V = 0 \quad (217)$$

- Balance de energía para el vapor en desequilibrio (1 ecuación):

$$\dot{V}_{m,IN}^{BB} h_{m+1}^V - \dot{V}_{m,OUT}^{BB} h_m^{V,BB} + \dot{E}_m^V = 0 \quad (218)$$

- Cálculo de los caudales de materia del vapor a la interfase (M-1 ecuaciones):

$$(\dot{N}_m^V) = c_i^V [\beta^V] [k_v^*] (y_m^{BB} - y_m^I) \quad (219)$$

- Cálculo de la suma de los caudales del vapor a la interfase para determinar el caudal del último componente (1 ecuación):

$$\dot{N}_{i,m}^V = \frac{\dot{q}_m^L - \dot{q}_m^V}{\bar{\lambda}_y} - \frac{\sum_{k=1}^{M-1} (\lambda_k - \lambda_n) \dot{J}_{k,m}^V}{\bar{\lambda}_y} \quad (220)$$

- Condición de suma de concentración de vapor (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^M y_{i,m}^{BB} = 1 \quad (221)$$

- Condición de suma de concentración de vapor en la interfase (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^M y_{i,m}^I = 1 \quad (222)$$

- Entalpía del vapor en función de concentración, temperatura y presión (2 ecuaciones de la biblioteca de propiedades):

$$h_m^{V,BB} = f^V(y_m^{BB}, T_m^{V,BB}, p_m) \quad (223)$$

$$h_m^{V,SB} = f^V(y_m^{SB}, T_m^L, p_m) \quad (224)$$

Interfase:

- Continuidad del caudal de materia en la interfase (n ecuaciones):

$$\dot{N}_{i,m}^L = \dot{N}_{i,m}^V \quad (225)$$

- Continuidad del transporte de energía en la interfase (1 ecuación):

$$\dot{E}_m^L = \dot{E}_m^V \quad (226)$$

- Equilibrio de fase en la interfase (M ecuaciones):

$$y_{i,m}^I = K_{i,m}^I x_{i,m}^I \quad (227)$$

- Cálculo de las constantes de equilibrio en la interfase (M ecuaciones):

$$K_{i,m}^I = \gamma_{i,m}^I \frac{1}{\phi_{i,m}} \frac{p_{i,m}^0}{p_m} \quad (228)$$

- Condición de suma de concentración de líquido en la interfase (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^M x_{i,m}^l = 1 \quad (229)$$

Balance en el punto de mezcla de vapor:

- Balance de materia total para la mezcla (1 ecuaciones):

$$\dot{V}_m = \dot{V}_{m,OUT}^{BB} + \dot{V}_{m,OUT}^{SB} \quad (230)$$

- Balance de cantidad de componente para la mezcla (M-1 ecuación):

$$\dot{V}_m y_{i,m} = \dot{V}_{m,OUT}^{BB} y_{i,m}^{BB} + \dot{V}_{m,OUT}^{SB} y_{i,m}^{SB} \quad (231)$$

- Balance de energía para la mezcla (1 ecuación):

$$\dot{V}_m h_m^V = \dot{V}_{m,OUT}^{BB} h_m^{V, BB} + \dot{V}_{m,OUT}^{SB} h_m^{V, SB} \quad (232)$$

- Cálculo de la temperatura de salida en función de la entalpía de vapor (1 ecuación):

$$T_m^V = f(y_m, h_m^V, p_m) \quad (233)$$

- Condición de suma de concentración de vapor de salida (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^n y_{i,m} = 1 \quad (234)$$

Para evitar el cálculo explícito de la materia transferida al vapor de equilibrio se ha escogido un balance de materia, que incorpora líquido y vapor de equilibrio (ecuación (207)). Este mismo límite de balance se toma para el balance de energía evitando así el cálculo explícito de energía transferida al vapor de equilibrio.

A diferencia al modelo general de transferencia de materia (apartado 5.3), se reemplazan los balances de energía y de materia de todo el vapor por los balances correspondientes del vapor de desequilibrio. Los balances de materia y de energía de la interfase se reducen para la parte que corresponde al vapor de desequilibrio; a su vez los flujos de transferencia de materia solo se determinan para este caudal de vapor parcial. Los balances de materia y de energía para el líquido se amplían por la parte de vapor en equilibrio, así que adicionalmente al modelo general de transferencia de materia, existen n ecuaciones adicionales más para el equilibrio de fase del vapor en equilibrio, ya que se encuentra en equilibrio con el líquido en el plato.

Como variables desconocidas adicionales aparecen los caudales de salida de ambas partes de vapor $\dot{V}_{m,OUT}^{SB}$ y $\dot{V}_{m,OUT}^{BB}$ y sus respectivas concentraciones, temperaturas y entalpías. La temperatura del vapor en equilibrio no figura entre las variables desconocidas, ya que por la condición de equilibrio termodinámico es igual a la temperatura del líquido. En lugar de determinar directamente la concentración del vapor, se determina la de la parte de desequilibrio, calculando la del vapor que sale del plato con un balance de materia de la mezcla de ambos caudales de vapor. Las variables desconocidas determinantes del líquido que sale del plato permanecen sin cambio. De esta manera resultan las $(10M + 14)$ variables anotadas en la Tabla 8.

5.4.4. Distribución entre las dos clases de vapor

La apariencia del modelo de dos clases de vapor se debe principalmente a la observación de las dos distintas clases de burbujas en un plato perforado, que componen las dos clases de vapor del modelo expuesto arriba. Para conocer la distribución en vapor de equilibrio y de desequilibrio es necesario conocer la distribución en burbujas grandes y pequeñas.

La sorprendente distribución en solo dos clases de burbujas se debe al hecho de que la burbuja se genera en la superficie del plato, partiendo de una situación de equilibrio entre tensión superficial del líquido y presión del vapor, que sale del conducto de vapor.

En esta situación y por la condición de equilibrio solo debería aparecer una sola clase de burbuja de gran tamaño. No obstante hay también burbujas grandes, que nacen en el orificio por el impulso de las burbujas grandes, cuando estas despegan de la superficie: las burbujas grandes "tiran" pequeñas tras sí. A partir de los conceptos establecidos por Stichmaier (Stichmaier, 1978) se ha desarrollado la formulación del modelo que aparece a continuación.

Para llevar a cabo el cálculo de la distribución de las dos clases de vapor, es necesario calcular previamente algunos valores que dependen de la hidrodinámica del proceso de separación, como los diámetros de burbuja pequeña (d_{SB}) y de burbuja grande (d_{BB}). El diámetro de las burbujas pequeñas no tiene importancia para el cálculo de la transferencia, pero es necesario para calcular el caudal de vapor en burbujas pequeñas. Las burbujas pequeñas con su diámetro reducido se mantienen muy estables por la tensión superficial, así que se puede suponer que se comportan como partículas sólidas. Su diámetro resulta entonces de un equilibrio de fuerzas entre las fuerzas de empuje, gravedad y superficie a:

$$d_{SB} = \sqrt{\frac{6\sigma}{g(\rho^L - \rho^V)}} \quad (235)$$

En el caso de las burbujas grandes resultan diferentes diámetros (d_{BB1}) y (d_{BB2}) en la zona de formación (1) y en la zona bifásica (2).

$$d_{BB,1} = \left\{ \frac{3\sigma d_h}{\rho^L g} + \left[\left(\frac{3\sigma d_h}{\rho^L g} \right)^2 + \frac{13.9 \dot{V}_h^2 d_h}{g} \right]^{1/2} \right\}^{1/3} \quad (236)$$

Las burbujas se separan durante la subida, así que tienen un diámetro inferior en la zona bifásica. Este diámetro inferior se calcula con la simple relación:

$$d_{BB} = d_{BB,2} = 0.4 d_{BB,1} \quad (237)$$

Los otros valores que hay que conocer son las velocidades de las burbujas pequeñas (w_{SB}) y grandes (w_{BB}). Las burbujas pequeñas son muy estables por la fuerza de superficie, así que se puede usar la relación para partículas estables:

$$w_{SB} = 1.55 \left(\frac{\sigma(\rho^L - \rho^V)g}{\rho^{L2}} \right)^{1/4} \left(\frac{\rho^V}{\rho^L} \right)^{1/24} \quad (238)$$

Las burbujas pequeñas no representan partículas sólidas, por su velocidad alta y por las bajas fuerzas de superficie. En efecto poseen una interfase móvil, que disminuye la resistencia y aumenta con ello la velocidad. La velocidad de ascenso para las burbujas grandes (w_{BB}) con interfase móvil resulta de:

$$w'_{BB} = 0.714 \sqrt{g d_{BB,2}} \quad (239)$$

También se considera que las burbujas grandes reciben un impulso adicional por la gran velocidad del vapor que pasa por el plato; esto resulta en una velocidad de ascenso más elevada. Esta velocidad resulta ser igual a la velocidad promedio de las burbujas en la zona bifásica, obteniéndose la siguiente ecuación como velocidad de las burbujas grandes:

$$w_{BB} = \frac{w_{TV}}{\varepsilon_{TOT}} + 0.714 \sqrt{g d_{BB,2}} \quad (240)$$

En esta ecuación (w_{TV}) es la velocidad de vapor en la sección transversal del plato (esencialmente la superficie de la torre menos la superficie ocupada por el rebosadero) y (ε_{TOT}) es la parte total de volumen de vapor en relación al volumen total de la zona bifásica, la cual se calcula según:

$$\varepsilon_{TOT} = \left(\frac{F}{F_{max}} \right)^{0.28} \quad (241)$$

El factor F es el factor que se usa generalmente para determinar la carga de vapor, definido por:

$$F = w_{TV} \sqrt{\rho^V} \quad (242)$$

La carga máxima de vapor para un plato perforado aparece cuando el vapor empieza a arrastrar líquido hacia el plato siguiente. Se puede calcular esta carga por:

$$F_{max} = 2.5 \left[\phi^2 \sigma g (\rho^L - \rho^V) \right] \quad (243)$$

donde ϕ es la relación de superficie libre del plato y σ la tensión superficial del líquido.

Las relaciones de vapor de equilibrio y de desequilibrio se pueden calcular bajo dos suposiciones. La primera es que solo hay vapor en dos clases distintas de burbujas, así que la relación total de vapor en la zona bifásica es la suma de las dos relaciones individuales de vapor:

$$\varepsilon_{TOT} = \varepsilon_{SB} + \varepsilon_{BB} \quad (244)$$

La segunda suposición es que todo el vapor se transporta por la zona bifásica. Con esta suposición se puede hacer el siguiente balance de materia, que relaciona las distintas velocidades entre ellas:

$$w_{TV} = \varepsilon_{BB} w_{BB} + \varepsilon_{SB} w_{SB} \quad (245)$$

Usando la combinación de ambas ecuaciones resulta la relación de vapor de las burbujas grandes:

$$\varepsilon_{BB} = \frac{w_{TV} - \varepsilon_{TOT} w_{SB}}{w_{BB} - w_{SB}} \quad (246)$$

y con la condición de suma de las relaciones de vapor resulta la relación de vapor de burbujas pequeñas:

$$\varepsilon_{SB} = \varepsilon_{TOT} - \varepsilon_{BB} \quad (247)$$

Finalmente se pueden calcular las cantidades de vapor de equilibrio y de desequilibrio en relación a la cantidad total de vapor:

$$\frac{\dot{V}_{m,IN}^{SB}}{\dot{V}_{m+1}} = \frac{\varepsilon_{SB} w_{SB}}{w_{TV}} \Rightarrow \dot{V}_{m,IN}^{SB} = \dot{V}_{m+1} \frac{\varepsilon_{SB} w_{SB}}{w_{TV}} \quad (248)$$

El caudal de vapor de desequilibrio (burbujas grandes) resulta de:

$$\frac{\dot{V}_{m,IN}^{BB}}{\dot{V}_{m+1}} = \frac{\varepsilon_{BB} w_{BB}}{w_{TV}} \Rightarrow \dot{V}_{m,IN}^{BB} = \dot{V}_{m+1} \frac{\varepsilon_{BB} w_{BB}}{w_{TV}} \quad (249)$$

Así queda determinada la relación de entrada de vapor de equilibrio y de desequilibrio según el modelo de dos clases de vapor. El cálculo de los coeficientes de transferencia de materia según el modelo de dos clases de vapor se explica en el apartado 5.5.

Con las variables usadas en el capítulo anterior se puede calcular también la altura de la zona bifásica h_{ZB} con una correlación dada por Stichlmaier (Stichlmaier, 1995), según:

$$h_{ZB} = h_w + 1.45 \frac{1}{g^{1/3}} \left(\frac{\dot{L}}{b(1 - \varepsilon_{TOT})c_{TOT}} \right)^{2/3} + 125 \frac{\rho^v (w_{TV} / \varepsilon_{TOT} - w_{BP})^2}{g(\rho^L - \rho^v)} \quad (250)$$

5.4.5. El modelo de tres clases de vapor

La suposición principal que motiva el uso de dos diferentes clases de vapor es la observación de dos distintas clases de burbujas en un determinado rango de trabajo de un plato perforado. Este rango de trabajo, para el cuál distintos autores reclaman la existencia de las dos clases de burbujas, está situado entre el 10 y el 60 % de la carga máxima del plato (Kaltenbacher, 1982; Voigtländer, 1995). Se llama rango o régimen de burbujeo. Otros autores hacen constar, que el régimen de burbujeo no es nada más que una simplificación, que no tiene en cuenta el hecho de que aparezca otro fenómeno de contacto líquido vapor que es el de soplado o de canales de vapor, denominado "jetting" en inglés (Prado, 1990; Stichlmaier, 1995; Wesselingh, 1995).

Canales de vapor aparecen, cuando el vapor empuja tan fuerte, que la presión estática del líquido deja de ser suficiente para mantener el orificio del plato cerrado, dejando pasar el vapor por un tubo con la superficie del líquido como pared limitante. Dichos autores constatan, que este fenómeno ya ocurre en algunos orificios a una carga baja de vapor (alrededor del 20 % de la máxima) y sigue aumentando gradualmente con la carga de vapor. Por consiguiente, la suposición de un contacto solamente en forma de burbujas es una mera aproximación, que deja de ser válida por completo por encima de una carga equivalente al 60 % de la carga máxima. Los autores que han observado, que existen orificios en el régimen de contacto de canales de vapor, proponen una dependencia funcional de la cantidad de orificios en el régimen de burbujeo y de canales en función del factor de carga de vapor F .

En realidad, las columnas operan generalmente con una carga de vapor lo más alta posible, para poder permitir una producción máxima. Según las propiedades del líquido

usado se suele operar con un margen de seguridad del 15 al 20 % permitiendo así la operación del 80 hasta el 85 % de la carga máxima. Esta zona de operación está bastante alejada de la zona que puede considerarse en régimen de burbujeo. Por esta razón se hace necesaria la incorporación de otro régimen de contacto (y con ello otra clase de vapor) en el modelo de dos clases de vapor. Por otra parte, la incorporación de esta tercera clase de vapor se hace más patente al validar los datos experimentales de este trabajo, ya que fueron obtenidos en una columna de escala de laboratorio con orificios pequeños, para los cuales la diferenciación entre burbujas grandes y pequeñas no es tan grande como en columnas de escala industrial.

5.4.6. Suposiciones del modelo de tres clases de vapor

El esquema de la Figura 24 representa la integración de tres distintas clases de vapor en un modelo, que se ha denominado en este trabajo como modelo de tres clases de vapor. Tres de los cuatro triángulos dibujados representan una clase de vapor. Para las dos clases de vapor, que representan las burbujas grandes y los canales de vapor, se cuenta con la existencia de una interfase explícita con sus respectivas variables. La tercera clase de vapor, que representa las burbujas pequeñas, se incorpora en el balance de materia del líquido, así que no se calculan explícitamente los caudales de transferencia de materia ni temperatura ni concentración en esta interfase. El cuarto triángulo representa en este caso el material del plato y una sección de la columna en sí, hacia la cual solo se transporta energía durante la fase de calentamiento de la columna. Durante el tiempo de operación de la columna se supone que este material siempre tiene la misma temperatura que el líquido, lo que resulta en un aumento de masa total en el balance no estacionario de energía. Si se pretende usar el modelo para la simulación de la destilación reactiva, esta fase sólida representa el catalizador y se calcula la transferencia de materia del catalizador hacia al líquido y al revés.

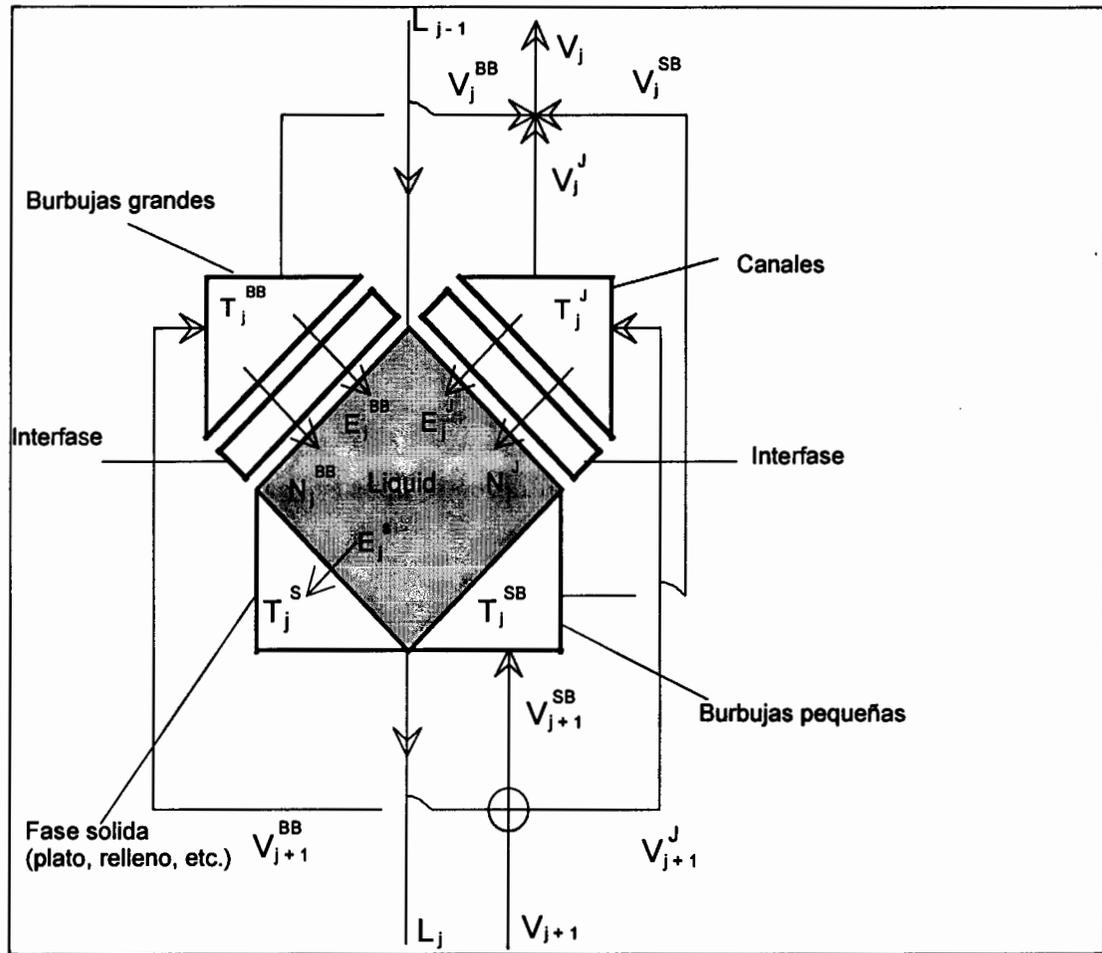


Figura 24: Distribución de fases y variables usando tres clases de vapor

Las suposiciones e ideas del modelo de tres clases de vapor se resumen a continuación:

- El líquido en el plato está completamente mezclado y no es compresible.
- El vapor no arrastra líquido hacia al plato de arriba.
- El vapor tiene una concentración uniforme al entrar al líquido del plato siguiente, el vapor de salida del plato se representa como la mezcla ideal de los tres vapores de salida (el de equilibrio y los dos de desequilibrio), no existen gradientes de concentración radiales en el vapor.
- La interfase no es uniforme, hay tres diferentes formas de contacto líquido-vapor

- No hay ninguna acumulación de material en las interfases.
- La cantidad de moles en ambas clases de vapor (hold-up) es despreciable en comparación a la cantidad de moles en el líquido.
- Todas las fases se encuentran en equilibrio mecánico; no hay diferencias de presión en un plato.
- La distribución de vapor en sus tres diferentes tipos es una función de la carga de vapor representado por el factor F .

Para el modelo de tres clases de vapor hay que añadir un juego adicional de variables que describan la transferencia a la segunda interfase. Por eso la cantidad de variables propias del modelo de transferencia de materia se multiplican por dos; estas son las variables de la interfase, temperatura (1), concentración de vapor (M) y de líquido (M), los caudales de transferencia de materia (2M) y de energía (2), las constantes de equilibrio (M), las variables de la nueva clase de vapor, entalpía (1), temperatura (1) y concentración (M). Adicionalmente aparece en la Tabla 9 el caudal de vapor de entrada de la nueva clase de vapor.

Tabla 9: Variables y su número en el modelo de tres clases de vapor

Variable	número	variable	número
\dot{V}_m	1	$h_m^{V, sb}$	1
$\dot{V}_{m, OUT}^{sb}$	1	$K_i^{L, bb}$	M
$\dot{V}_{m, OUT}^{bb}$	1	$K_i^{L, jet}$	M
$\dot{V}_{m, OUT}^{jet}$	1	K_i	M
\dot{L}_m	1	T_m^V	1
$y_{i, m}$	M	T_m^L	1
$y_{i, m}^{L, bb}$	M	$T_m^{L, bb}$	1
$y_{i, m}^{L, jet}$	M	$T_m^{L, jet}$	1
$y_{i, m}^{sb}$	M	$T_m^{V, bb}$	1
$y_{i, m}^{bb}$	M	$T_m^{V, jet}$	1
$y_{i, m}^{jet}$	M	$\dot{E}_m^{V, bb}$	1
$x_{i, m}$	M	$\dot{E}_m^{L, bb}$	1
$x_{i, m}^{L, bb}$	M	$\dot{E}_m^{V, jet}$	1
$x_{i, m}^{L, jet}$	M	$\dot{E}_m^{L, jet}$	1
h_m^V	1	$\dot{N}_{i, m}^{V, bb}$	M
h_m^L	1	$\dot{N}_{i, m}^{L, bb}$	M
$h_m^{V, bb}$	1	$\dot{N}_{i, m}^{V, jet}$	M
$h_m^{V, jet}$	1	$\dot{N}_{i, m}^{L, jet}$	M
$\Sigma = 16M + 20$			

5.4.7. Formulación de las ecuaciones del modelo de tres clases de vapor

Las ecuaciones necesarias para la simulación del modelo de tres clases de vapor son básicamente las mismas que las usadas para el modelo de dos clases de vapor pero incorporan un balance adicional de materia y de energía para la tercera clase de vapor, que representa los canales de vapor. El balance de materia y de energía para el líquido es parecido al balance usado en el caso del modelo del plato de equilibrio, incorporando la clase del vapor de equilibrio (burbujas pequeñas).

Equilibrio líquido - vapor:

- Balance total de materia para el líquido y el vapor en equilibrio (1 ecuación):

$$\dot{L}_{m-1} - \dot{L}_m + \dot{V}_{m,IN}^{SB} - \dot{V}_{m,OUT}^{SB} - \dot{N}_{i,m}^{L,BB} - \dot{N}_{i,m}^{L,JET} = \frac{d}{dt} N_{H,m} \quad (251)$$

- Balance de cantidad de componente para el líquido y el vapor en equilibrio (M-1 ecuaciones):

$$x_{i,m-1} \dot{L}_{m-1} - x_{i,m} \dot{L}_m + y_{i,m+1} \dot{V}_{m,IN}^{SB} - y_{i,m} \dot{V}_{m,OUT}^{SB} - \dot{N}_{i,m}^{L,BB} - \dot{N}_{i,m}^{L,JET} = \frac{d}{dt} (N_{H,m} \cdot x_{i,m}) \quad (252)$$

- Balance de energía para el líquido y el vapor en equilibrio (1 ecuación):

$$\dot{L}_{m-1} h_{m-1}^L - \dot{L}_m h_m^L + \dot{V}_{m,IN}^{SB} h_{m+1}^V - \dot{V}_{m,OUT}^{SB} h_m^{V,SB} - \dot{E}_m^{L,BB} - \dot{E}_m^{L,JET} = \frac{d}{dt} (N_{H,m} h_m^L + m_{plato} c_{p,plato} T^L) \quad (253)$$

- Cálculo de los caudales de materia del líquido a las dos interfaces distintas [2*(M-1) ecuaciones]:

$$\begin{aligned} (\dot{N}_m^{L,BB}) &= c_i^L [\beta^L] [k_L^{*,BB}] (x_m^{I,BB} - x_m) \\ (\dot{N}_m^{L,JET}) &= c_i^L [\beta^L] [k_L^{*,JET}] (x_m^{I,JET} - x_m) \end{aligned} \quad (254)$$

- Cálculo de la suma de los caudales del vapor a la interfase para determinar el caudal del último componente (2 ecuaciones):

$$\begin{aligned} \dot{N}_{i,m}^{L,BB} &= \frac{\dot{q}_m^{L,BB} - \dot{q}_m^{V,BB}}{\bar{\lambda}_y} - \frac{\sum_{k=1}^{M-1} (\lambda_k - \lambda_n) \dot{J}_{k,m}^{L,BB}}{\bar{\lambda}_y} \\ \dot{N}_{i,m}^{L,JET} &= \frac{\dot{q}_m^{L,JET} - \dot{q}_m^{V,JET}}{\bar{\lambda}_y} - \frac{\sum_{k=1}^{M-1} (\lambda_k - \lambda_n) \dot{J}_{k,m}^{L,JET}}{\bar{\lambda}_y} \end{aligned} \quad (255)$$

- Condición de suma de concentración de líquido (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^n x_{i,m} = 1 \quad (256)$$

- Cálculo de las constantes de equilibrio (M ecuaciones):

$$K_{i,m} = \gamma_{i,m} \frac{1}{\varphi_{i,m}} \frac{P_{i,m}^0}{P_m} \quad (257)$$

- Composición del vapor de burbujas pequeñas en equilibrio al líquido (M ecuaciones):

$$y_{i,m}^{SB} = K_{i,m} x_{i,m} \quad (258)$$

- Condición de suma de concentración de vapor (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^n y_{i,m}^{SB} = 1 \quad (259)$$

- Entalpía del líquido en función de concentración, temperatura y presión (1 ecuación de la biblioteca de propiedades):

$$h_m^L = f^L(x_m, T_m^L, p_m) \quad (260)$$

Vapor de burbujas grandes en desequilibrio:

- Balance total de materia para el vapor de las burbujas grandes (1 ecuación):

$$\dot{V}_{m,IN}^{BB} - \dot{V}_{m,OUT}^{BB} - \dot{N}_{i,m}^{V,BB} = 0 \quad (261)$$

- Balance de cantidad de componente para el vapor de las burbujas grandes (M-1 ecuaciones):

$$y_{i,m+1} \dot{V}_{m,IN}^{BB} - y_{i,m} \dot{V}_{m,OUT}^{BB} - \dot{N}_{i,m}^{V,BB} = 0 \quad (262)$$

- Balance de energía para el vapor de las burbujas grandes (1 ecuación):

$$\dot{V}_{m,IN}^{BB} h_{m+1}^V - \dot{V}_{m,OUT}^{BB} h_m^V + \dot{E}_m^{V,BB} = 0 \quad (263)$$

- Cálculo de los caudales de materia del vapor de las burbujas grandes a la interfase (M-1 ecuaciones):

$$(\dot{N}_m^{V, BB}) = c_i^{V, BB} [\beta^{V, BB}] [k_V^{*, BB}] (y_m^{BB} - y_m^{I, BB}) \quad (264)$$

- Cálculo de la suma de los caudales del vapor de las burbujas grandes a la interfase para determinar el caudal del último componente (1 ecuación):

$$\dot{N}_{i, m}^{V, BB} = \frac{\dot{q}_m^{L, BB} - \dot{q}_m^{V, BB}}{\bar{\lambda}_y} - \frac{\sum_{k=1}^{M-1} (\lambda_k - \lambda_n) j_{k, m}^{V, BB}}{\bar{\lambda}_y} \quad (265)$$

- Condición de suma de concentración de vapor de las burbujas grandes (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^M y_{i, m}^{BB} = 1 \quad (266)$$

- Condición de suma de concentración de vapor de las burbujas grandes en la interfase (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^M y_{i, m}^{I, BB} = 1 \quad (267)$$

- Entalpía del vapor en función de concentración, temperatura y presión (2 ecuaciones de la biblioteca de propiedades):

$$h_m^{V, BB} = f^V (y_m^{BB}, T_m^{V, BB}, p_m) \quad (268)$$

$$h_m^{V, SB} = f^V (y_m^{SB}, T_m^L, p_m) \quad (269)$$

Interfase entre líquido y el vapor de las burbujas grandes:

- Continuidad del caudal de materia en la interfase de las burbujas grandes (M ecuaciones):

$$\dot{N}_{i, m}^{L, BB} = \dot{N}_{i, m}^{V, BB} \quad (270)$$

- Continuidad del transporte de energía en la interfase de las burbujas grandes (1 ecuación):

$$\dot{E}_m^{L,BB} = \dot{E}_m^{V,BB} \quad (271)$$

- Equilibrio de fase en la interfase de las burbujas grandes (M ecuaciones):

$$y_{i,m}^{I,BB} = K_{i,m}^{I,BB} x_{i,m}^{I,BB} \quad (272)$$

- Cálculo de las constantes de equilibrio en la interfase de las burbujas grandes (M ecuaciones):

$$K_{i,m}^{I,BB} = \gamma_{i,m}^{I,BB} \frac{1}{\phi_{i,m}} \frac{P_{i,m}^0}{P_m} \quad (273)$$

- Condición de suma de concentración de líquido en la interfase de las burbujas grandes (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^M x_{i,m}^{I,BB} = 1 \quad (274)$$

Vapor de los canales en desequilibrio:

- Balance total de materia para el vapor de los canales (1 ecuación):

$$\dot{V}_{m,IN}^{JET} - \dot{V}_{m,OUT}^{JET} - \dot{N}_{i,m}^{V,JET} = 0 \quad (275)$$

- Balance de cantidad de componente para el vapor de los canales (M-1 ecuaciones):

$$y_{i,m+1} \dot{V}_{m,IN}^{JET} - y_{i,m}^{JET} \dot{V}_{m,OUT}^{JET} - \dot{N}_{i,m}^{V,JET} = 0 \quad (276)$$

- Balance de energía para el vapor de los canales (1 ecuación):

$$\dot{V}_{m,IN}^{JET} h_{m+1}^V - \dot{V}_{m,OUT}^{JET} h_m^{V,JET} + \dot{E}_m^{V,JET} = 0 \quad (277)$$

- Cálculo de los caudales de materia del vapor de los canales a la interfase (M-1 ecuaciones):

$$(\dot{N}_m^{V,JET}) = c_i^{V,JET} [\beta^{V,JET}] [k_v^{*,JET}] (y_m^{JET} - y_m^{I,JET}) \quad (278)$$

- Cálculo de la suma de los caudales del vapor de los canales a la interfase para determinar el caudal del último componente (1 ecuación):

$$\dot{N}_{i,m}^{V,JET} = \frac{\dot{q}_m^{L,JET} - \dot{q}_m^{V,JET}}{\bar{\lambda}_y} - \frac{\sum_{k=1}^{M-1} (\lambda_k - \lambda_n) j_{k,m}^{V,JET}}{\bar{\lambda}_y} \quad (279)$$

- Condición de suma de concentración de vapor de los canales (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^M y_{i,m}^{JET} = 1 \quad (280)$$

- Condición de suma de concentración de vapor de los canales en la interfase (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^N y_{i,m}^{I,JET} = 1 \quad (281)$$

- Entalpía del vapor en función de concentración, temperatura y presión (1 ecuación de la biblioteca de propiedades):

$$h_m^{V,JET} = f^V (y_m^{JET}, T_m^{V,JET}, p_m) \quad (282)$$

Interfase entre líquido y el vapor de los canales:

- Continuidad del caudal de materia en la interfase de los canales (M ecuaciones):

$$\dot{N}_{i,m}^{L,JET} = \dot{N}_{i,m}^{V,JET} \quad (283)$$

- Continuidad del transporte de energía en la interfase de los canales (1 ecuación):

$$\dot{E}_m^{L,JET} = \dot{E}_m^{V,JET} \quad (284)$$

- Equilibrio de fase en la interfase de los canales (M ecuaciones):

$$y_{i,m}^{I,JET} = K_{i,m}^{I,JET} x_{i,m}^{I,JET} \quad (285)$$

- Cálculo de los constantes de equilibrio en la interfase de los canales (M ecuaciones):

$$K_{i,m}^{I,JET} = \gamma_{i,m}^{I,JET} \frac{1}{\phi_{i,m}} \frac{P_{i,m}^0}{P_m} \quad (286)$$

- Condición de sumación de concentración de líquido en la interfase los canales (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^M x_{i,m}^{I,JET} = 1 \quad (287)$$

Balance en el punto de mezcla de vapor:

- Balance de materia total para la mezcla (1 ecuación):

$$\dot{V}_m = \dot{V}_{m,OUT}^{BB} + \dot{V}_{m,OUT}^{SB} + \dot{V}_{m,OUT}^{JET} \quad (288)$$

- Balance de cantidad de componente para la mezcla (M-1 ecuaciones):

$$\dot{V}_m y_{i,m} = \dot{V}_{m,OUT}^{BB} y_{i,m}^{BB} + \dot{V}_{m,OUT}^{SB} y_{i,m}^{SB} + \dot{V}_{m,OUT}^{JET} y_{i,m}^{JET} \quad (289)$$

- Balance de energía para la mezcla (1 ecuación):

$$\dot{V}_m h_m^V = \dot{V}_{m,OUT}^{BB} h_m^{V, BB} + \dot{V}_{m,OUT}^{SB} h_m^{V, SB} + \dot{V}_{m,OUT}^{JET} h_m^{V, JET} \quad (290)$$

- Cálculo de la temperatura de salida en función de la entalpía de vapor (1 ecuación):

$$T_m^V = f(y_m, h_m^V, p_m) \quad (291)$$

- Condición de suma de concentración de vapor de salida (1 ecuación):

$$\sum_{i=1}^M y_{i,m} = 1 \quad (292)$$

A parte de las entalpías de vapor y de líquido y de las constantes de equilibrio, arriba no figuran todas aquellas variables, que pueden ser calculadas mediante las variables de estado, presión, temperatura y concentración. Estas son por ejemplo la tensión superficial σ , los caudales de transferencia de calor por convección q , etc.

5.5. Cálculo de los coeficientes de transferencia de materia

Para todos los modelos, que calculan explícitamente la transferencia de materia a través de la interfase, se necesita una relación que permita calcular los coeficientes de transferencia de materia en función de las condiciones termodinámicas y hidrodinámicas del plato. En caso del modelo general de transferencia de materia se necesitan correlaciones para el producto de superficie de transferencia y del coeficiente de transferencia de materia. Estas correlaciones se obtienen con mezclas binarias en columnas de prueba. Como existe una gran variedad de compuestos, estas correlaciones para los pares binarios no están necesariamente siempre disponibles. Esta dificultad se evita en el modelo de dos clases de vapor, porque se calcula explícitamente la superficie de transferencia, reduciendo todo el intercambio de materia solo al intercambio en burbujas. Lo mismo se hace en el modelo de tres clases de vapor incorporando otra geometría de intercambio, la de los canales de vapor.

5.5.1. Coeficientes de transferencia de materia para el modelo de dos clases de vapor

La suposición principal del modelo de dos clases de vapor es la de tener una distribución de vapor en dos diferentes clases de burbujas. Para las burbujas pequeñas no hace falta calcular la transferencia de materia, ya que estos llegan a tener la concentración de equilibrio. La transferencia de materia en las burbujas grandes se puede calcular con diferentes suposiciones.

Para una burbuja estática y bajo condiciones de intercambio no estacionario, se pueden calcular los coeficientes de transferencia de materia con el modelo de Higbie. Este supone que el tiempo de contacto es muy corto y que no se considera un cambio de volumen de la burbuja. La solución de Higbie expresada en los valores adimensionales de Sherwood es la siguiente:

$$Sh_{ii}^{\hat{}} = \frac{4}{\sqrt{\pi Fo \hat{D}_{ii}^*}} \quad (293)$$

La resolución de las ecuaciones de transferencia para un volumen de burbuja constante y para cualquier tiempo de contacto se conoce como la solución de Newman:

$$Sh_{ii}^{\hat{}} = \frac{2}{3Fo\hat{D}_{ii}^*} - \frac{4}{Fo\pi^2\hat{D}_{ii}^*} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp(-n^2\pi^2 Fo\hat{D}_{ii}^*) \quad (294)$$

El desarrollo de esta solución, junto con el desarrollo de una nueva solución, está ampliamente explicado en el trabajo de Voigtländer (Voigtländer, 1995). En este trabajo, se da una nueva solución mejorada para el intercambio en burbujas teniendo en cuenta el cambio de volumen de la burbuja (por condensación) y la circulación interior que se induce en la burbuja por la fricción con el ambiente. Se trata de una ampliación de la solución encontrada por Newman. Esta solución para el uso en transferencia multicomponente es la siguiente:

$$Sh_{ii}^{\hat{}} = \frac{2}{3Fo\hat{D}_{ii}^*} - \frac{4}{Fo\pi^2\hat{D}_{ii}^*} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp(-n^2\pi^2 Fo\hat{D}_{ii}^* \hat{\Xi}_{ii}^{\rho} \kappa) \quad (295)$$

Aquí la mayor diferencia con la solución encontrada por Newman es la de la introducción de una función de corrección, que tiene en cuenta la influencia de la circulación interior en la burbuja ($\kappa = f(Re, Fo)$) y otra función de corrección, que tiene en cuenta la del cambio de volumen de la burbuja ($\varphi = f(Fo)$). Ambos detalles no se contemplan en la solución de Newman y estas funciones de corrección son el principal reto del trabajo de investigación realizado por Voigtländer. Ambas funciones de corrección se precisan a continuación:

$$\varphi = 2.0 - 1.6(Fo\hat{D}_{ii}^*)^{0.4} \hat{f}_{ii}^{-1/6} \quad \text{con} \quad \hat{f}_{ii} = \frac{\hat{\Phi}_{ii}}{\hat{\Xi}_{ii}} + 1 \quad (296)$$

$$\kappa = 1 + 0.75 \hat{f}_{ii}^{0.21} \left\{ 1 + \tanh \left[2.85 \lg \left(\frac{\text{Re } Fo}{4} \right) \right] \right\} \quad (297)$$

La conversión de los elementos diagonales de la matriz de valores Sherwood está explicada en el apartado 5.5.3.

5.5.2. Coeficientes de transferencia de materia para el modelo de tres clases de vapor

La principal suposición del modelo de tres clases de vapor es la presencia en un plato perforado de tres diferentes formas de interfase entre vapor y líquido como fue observado por distintos autores (Prado, 1990; Stichmaier, 1995; Wesselingh, 1995). La distribución de las distintas fases fue resumida por Prado en una serie de funciones lineales, que reflejan el porcentaje de orificios que se encuentran en un determinado régimen de contacto. A los tres regímenes de contacto se añade un cuarto estado que refleja el hecho de tener una parte de los orificios en situación inactiva. Los cuatro estados son los siguientes (válido para $0 < F < 2.5$):

1. Burbujeo pequeño: Se supone un valor constante del 5 %
2. Burbujeo grande: Se supone una dependencia lineal del factor F de la forma
Burbujeo grande (%) = 40.0(2.5-F)*
3. Canales de vapor: Se supone una dependencia lineal del factor F de la forma
Canales (%) = 41.0(F-0.4)*
4. Orificio inactivo: Se supone que la cantidad de orificios que están tapados por líquido y que no contribuyen en el proceso de separación, depende linealmente del factor F en la forma:
Orificios inactivos (%) = 1.0(11.4-F)*

Para el primero y cuarto caso, no hace falta calcular coeficientes de transferencia de materia, ya que en el primero, la concentración de vapor de las burbujas es la de equilibrio y en el último caso no hay ninguna separación para calcular. El segundo caso (burbujas grandes) es el del modelo de dos clases de vapor. Las burbujas grandes en el modelo de tres clases de vapor se tratan tal como se explica en el capítulo 5.5.1.

Queda el cálculo de los coeficientes de transferencia de materia para la geometría de los canales de vapor. Se puede contemplar estos canales como columnas de pared mojada. Para una columna de pared mojada se puede usar una modificación de la correlación que fue usada por Gilliland y Sherwood (Gilliland, 1935). Esta modificación tiene en cuenta la oscilación de la pared en el caso de un túnel de vapor y fue usada por Prado y Fair (Prado, 1990). En la anotación adimensional de valores Sherwood en función de Reynolds y Schmidt se obtiene:

$$Sh = 0.023 Re^{0.96} Sc^{0.44} \quad \text{con} \quad Sc = \frac{\nu}{D} \quad (298)$$

La correlación mencionada arriba se ha desarrollado para la transferencia binaria. El traspaso de esta formulación binaria a una formulación multicomponente se hace mediante la solución de Stewart y Prober (Stewart, 1964). Se trata de un método matricial desarrollado para resolver problemas de difusión multicomponente en términos de un problema de difusión binaria relacionado. Los coeficientes de difusión del problema binario se determinan por los valores propios de una matriz de difusión multicomponente; estos valores son reales y positivos. El hecho de que los valores sean siempre positivos, permite el cálculo numérico usando las correlaciones existentes, que generalmente contienen una expresión exponencial con un exponente menor a uno, lo cual no permite encontrar una solución en el dominio real. Existen soluciones de cálculo en el dominio complejo (Taylor, 1996) pero no son objeto de investigación en este trabajo.

Cuando se conoce la matriz de difusión, es posible calcular para el caso multicomponente, los perfiles de concentración y los flujos de transferencia de materia para sistemas de cualquier geometría, para los cuales se conocen las funciones de transferencia binarias correspondientes. El desarrollo hecho por Stewart sirve para

mezclas no ideales en flujo isotérmico laminar o turbulento con diferencias de concentración moderadas y sin reacciones químicas.

La ecuación para la transferencia de materia en columnas de pared mojada se convierte para el cálculo de transferencia multicomponente - y en anotación de valores propios - en:

$$\hat{Sh}_{ii} = 0.023 \operatorname{Re}^{0.96} \hat{Sc}_{ii}^{0.44} \quad \text{con} \quad \hat{Sc}_{ii} = \frac{\nu}{\hat{D}_{ii}} \quad (299)$$

La generalización para el caso de transferencia multicomponente implica el reemplazo del coeficiente de difusión binario D por la matriz $[D]$ de coeficientes de difusión y el de los coeficientes de difusión binarios k por la matriz $[k]$. De esta manera se obtiene la generalización de la ecuación binaria, que es - en anotación de valores adimensionales - la siguiente:

$$[Sh] = 0.023 \operatorname{Re}^{0.96} [Sc]^{0.44} \quad (300)$$

5.5.3. Cálculo de los coeficientes de transferencia de materia mediante los valores Sherwood

Las ecuaciones para el cálculo del caudal de materia que atraviesa la interfase se expresan en función del coeficiente de transferencia de materia k , lo cual se puede calcular conociendo el valor Sherwood y la difusividad D . La notación en valores adimensionales resulta más cómodo al resolver las ecuaciones y la reconversión es sencilla, mientras que el cálculo de valores Sherwood a través de los valores propios de la matriz es algo más complicado y precisa explicación.

La base de la solución de problemas de transferencia de materia se encuentra en la linealización de la ecuación de continuidad, resultado de la suposición de diferencias de concentraciones pequeñas en la capa límite. Esto último permite suponer que la matriz de coeficientes de difusión $[D]$ es constante a lo largo del camino de difusión. Esta

teoría de la linealización fue desarrollada independientemente por Toor (Toor, 1964) y por Stewart y Prober (Stewart, 1964).

La ecuación de continuidad para la difusión multicomponente en forma de una matriz de dimensión $(n-1)$ puede escribirse de la siguiente manera (comparar con la ecuación (31)):

$$\frac{\partial(c)}{\partial t} = -\nabla \cdot (N) = -\nabla \cdot (J) - \nabla \cdot (N_i(x)) \quad (301)$$

Insertando la ley de Fick en la ecuación (301) resulta:

$$\frac{\partial(c)}{\partial t} + \nabla \cdot (N_i(x)) = \nabla \cdot (c[D](\nabla x)) \quad (302)$$

La ecuación (302) representa un juego de $n-1$ ecuaciones diferenciales acopladas, que son difíciles de resolver, ya que la matriz de los coeficientes de difusión de Fick es una función de la concentración. Según la suposición hecha por Toor y Stewart, la matriz de los coeficientes de difusión puede ser aproximada como constante. Así el sistema de ecuaciones no-lineales pasa a ser un sistema lineal según:

$$c \frac{\partial(x)}{\partial t} + \nabla \cdot (N_i(x)) = c[D](\nabla^2 x) \quad (303)$$

El método general de solución que fue propuesto por Toor y Stewart explota las propiedades de la matriz modal $[P]$ cuyas columnas son los vectores propios de la matriz de coeficientes de difusión $[D]$. El producto matricial,

$$[P]^{-1}[D][P] = [\hat{D}] \quad (304)$$

es una matriz diagonal cuyas elementos son los valores propios de la matriz $[D]$. Así multiplicando la ecuación (303) por $[P]^{-1}$ y insertando la matriz de identidad $[P][P]^{-1}$ entre $[D]$ y $\nabla^2(x)$ resulta en:

$$c \frac{\partial(\hat{x})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{N}_i(\hat{x})) = c[\hat{D}](\nabla^2 \hat{x}) \quad (305)$$

donde las pseudo-composiciones \hat{x}_i se definen por:

$$(\hat{x}) = [P]^{-1}(x) \quad (306)$$

También la ley general de Fick (ecuación (37)) se puede expresar en pseudo-composiciones \hat{x}_i , multiplicando la ecuación (37) por $[P]^{-1}$, lo que resulta en:

$$(\hat{\hat{J}}) = -c[\hat{D}](\nabla\hat{x}) \quad \text{con} \quad (\hat{\hat{J}}) = [P]^{-1}(\hat{J}) \quad (307)$$

Comparando las ecuaciones (305) y (302) se ve que la transformación matemática reduce el conjunto original de $n-1$ ecuaciones diferenciales asociadas a un juego de $n-1$ ecuaciones parciales disociadas. La ecuación (305) expresada para el pseudo-componente \hat{x}_i resulta ser:

$$c \frac{\partial \hat{x}_i}{\partial t} + \nabla \cdot N_i \hat{x}_i = c \hat{D}_i \nabla^2 \hat{x}_i \quad \text{con} \quad \hat{J}_i = -c \hat{D}_i \nabla \hat{x}_i \quad (308)$$

Desde el punto de vista matemático las pseudo-fracciones molares y sus flujos molares se comportan como si fueran las variables correspondientes de una mezcla real binaria con los coeficientes de difusión \hat{D}_i , los cuales son reales y positivos. Las ecuaciones desacopladas (ecuación (308)) representan un juego de $n-1$ problemas de estilo binario. Por lo tanto, se encuentra rápidamente la solución del problema multicomponente correspondiente en función de pseudo-fracciones y de pseudo-flujos molares. Suponiendo un problema de difusión binaria, que tiene la siguiente solución:

$$\frac{(x_1 - x_{1\infty})}{(x_{10} - x_{1\infty})} = f(D_{12}, N_1) \quad (309)$$

La solución del correspondiente problema multicomponente en forma de pseudo-concentraciones es la siguiente:

$$\frac{(\hat{x}_i - \hat{x}_{i\infty})}{(\hat{x}_{i0} - \hat{x}_{i\infty})} = f(\hat{D}_i, N_i) \quad (310)$$

Los pseudo-flujos y concentraciones se pueden transformar con las siguientes identidades:

$$(x) = [P](\hat{x}); \quad [k] = [P][\hat{k}][P]^{-1}; \quad (J) = [P](\hat{J}) \quad (311)$$

De la misma forma es posible de convertir los valores propios \hat{Sh}_{ii} de la matriz de valores Sherwood en plenos valores Sherwood. De hecho el valor adimensional Sherwood puede aparecer especialmente en correlaciones empíricas por razones de facilidad de cálculo y de nomenclatura, tal como se explica en el apartado 5.5.2 (véase también ecuación (299)).

5.6. Cálculo de propiedades y de variables de estado

Algunas de las variables usadas en los distintos modelos tienen que ser determinadas con una rutina de cálculo, que permite calcular estas variables a partir de las variables de estado, temperatura, presión y concentración. Estas variables son la entalpía de vapor y líquido, la conductividad de calor de vapor y líquido, la tensión superficial del líquido, la viscosidad de vapor y líquido, la densidad de vapor y líquido y la entalpía de vaporización del líquido. Una excepción representa la presión, ya que se trata de una variable de estado, que se calcula en función de la geometría del plato.

En la mayoría de los casos se han usado las rutinas de cálculo de propiedades, que proporciona el entorno de programación en el cuál se desarrolló el programa de simulación. En caso de que este entorno no proporcionase una determinada rutina de cálculo o que esta fuera dudosa, se ha optado por de calcularlo directamente mediante una correlación propiamente programada. Estos últimos casos figuran detallados en el anexo.

5.6.1. Cálculo de la pérdida de presión

La caída de presión total para el gas Δp es la suma de las pérdidas individuales provocadas por la presencia del plato y del líquido que sostiene. La pérdida de presión en seco de un plato al otro se calcula mediante una ecuación empírica reconocida, que

está respaldada por un estudio crítico de todos los datos disponibles. El cálculo se basa en que es el resultado de una pérdida de presión a la entrada de las perforaciones, la fricción dentro del pequeño tubo que son las perforaciones, debido al espesor del plato y finalmente la pérdida a la salida (Treybal, 1988):

$$\Delta p_{\text{sec.}} = C_0 \frac{V_0^2 \rho_G}{2} \left[0,40 \left(1,25 - \frac{A_0}{A_n} \right) + \frac{4lf}{d_0} + \left(1 - \frac{A_0}{A_n} \right)^2 \right] \quad (312)$$

El factor de fricción de Fanning f se puede tomar de una tabla estándar (por ejemplo: Perry, 1995). Este factor a su vez depende del número Reynolds y del grado de rugosidad ε . Cuando el grado de rugosidad es pequeño (como aquí para el vidrio $\varepsilon = 0.00152$), se puede usar la ecuación de Prandtl para calcular f . Ecuación de Prandtl:

$$1/\sqrt{f} = -4 \log \left(\frac{1,256}{\text{Re} \sqrt{f}} \right) \quad (313)$$

C_0 es un coeficiente de orificio que depende de la relación entre espesor del plato y diámetro del orificio. Sobre el rango $l/d_0 = 0.2$ a 2.0 vale:

$$C_0 = 1,09 \left(\frac{d_0}{l} \right)^{0,25} \quad (314)$$

El segundo efecto que contribuye a la pérdida de presión es la cabeza hidráulica. En la región perforada del plato, el líquido está en forma de espuma. La profundidad equivalente de líquido claro h_L - y con ello la pérdida de presión por la cabeza hidráulica - es una estimación del valor que se obtendría si la espuma coalesciera. Este valor es generalmente menor que la altura del rebosadero de salida, y decrece al aumentar el flujo del gas. Algunos métodos de estimación de h_L utilizan un "factor de aereación" específico para describir este fenómeno. En la siguiente ecuación, el efecto de este factor se incluye como una función de las variables que modifican la ecuación:

$$\Delta p_{\text{hidr.}} = \rho^L g \left(6,1 \cdot 10^{-3} + 0,725 h_w - 0,238 V_{\text{gas}} \sqrt{\rho_{\text{gas}}} + 1,225 \frac{L_{\text{liq}}}{z} \right) \quad (315)$$

Las variables en la ecuación (315) deben ser usadas en unidades SI, z es el ancho del flujo promedio, que se puede tomar como el promedio aritmético del diámetro de la columna y de la longitud del rebosadero. Otro componente de la pérdida de presión es la caída de presión del gas residual Δp_R . Principalmente es el resultado de vencer la tensión superficial cuando el gas sale a través de una perforación:

$$\Delta p_R = \frac{6\sigma}{d_0} \quad (316)$$

La caída de presión en total es la suma de los tres efectos de pérdida de presión individuales:

$$\Delta p_m = \Delta p_{sec o, m} + \Delta p_{hidr, m} + \Delta p_{R, m} \quad (317)$$

5.6.2. Conclusiones del capítulo

En este capítulo se ha resumido todos los modelos que fueron usados en el trabajo presente y se ha explicado el cálculo de los coeficientes de transferencia de materia como fueron usados para el modelo de transferencia de materia. Todos los modelos se explican detalladamente con sus respectivas ecuaciones. Estas explicaciones sirven de base para los distintos programas de simulación que se han desarrollado, los resultados de estas simulaciones se detallan en el capítulo 6.

El modelo abreviado es uno de los modelos de referencia para compararlo con el nuevo modelo desarrollado que se detalla en los apartados 5.4.5 a 5.4.7. Como el modelo abreviado no es el más detallado actualmente existente, se lo ha comparado con otros modelos mucho más detallados, que son el modelo del plato de equilibrio (apartado 5.2) y el modelo de transferencia de materia "simple" (apartado 5.3) y el mismo con las extensiones para dos clases de vapor (apartado 5.4.1).

El resumen de todas las ecuaciones dadas para los distintos modelos permite una excelente supervisión de la naturaleza de los modelos y permite una reproducción fácil. Adicionalmente en el capítulo presente se encuentra la explicación importante de como

obtener los coeficientes de transferencia de materia a través de los valores Sherwood (apartado 5.5.3).

5.7. Símbolos

<i>Letra</i>	<i>Descripción</i>	<i>Unidad</i>
A	superficie	m^2
C	moles en calderín (bottom)	kmol
B	elementos de la matriz invertida de coeficientes de difusión	s/m^2
c_p	calor específico	$kJ/kmol\ K$
c	concentración molar	$kmol/m^3$
g	aceleración gravitatoria	m/s^2
J	caudal difusivo por superficie	$kmol/s\ m^2$
k	coeficiente de difusión	m/s
K	coeficiente de equilibrio	-
N	número de unidades de transferencia	-
\bar{N}	flujo molar promedio por superficie	$kmol/s\ m^2$
\dot{N}	flujo molar por superficie	$kmol/s\ m^2$
N_H	Hold-up encima del plato	mol
p	presión	Pa
q	residual en la ecuación de Underwood	-
Q	energía, calor	kJ
R	relación de reflujo	-
T	temperatura	K
\dot{V}	caudal de vapor	m^3/s
Z_L	longitud del trayecto de líquido en el plato	m

Símbolos griegos

<i>Letra</i>	<i>Descripción</i>	<i>Unidad</i>
α	volatilidad relativa	-
β	coeficientes de matriz "bootstrap"	-
γ	coeficiente de actividad de líquido	-
δ	parámetro de convergencia	-
ε	relación de vapor en zona bifásica	-
λ	calor de evaporación	kJ/kmol
Λ	calor de evaporación relativo	-
η	eficiencia de plato de Murphee	-
ν	coeficiente de indicación de tipo de transferencia	-
φ	fugacidad	-
ϕ	parámetro de enlace (ecuaciones Underwood)	-
σ	tensión superficial	N/m

Subíndices

B	"bottom", fondo
D	destilado
i	número de componente (de 1 hasta M)
j	número de plato (de 1 hasta N+1 [calderín])
o	"overall"
TV	tubo vacío
ZB	zona bifásica
BB	"big bubbles", burbujas grandes
SB	"small bubbles", burbujas pequeñas

Superíndices

V	vapor
L	líquido

E	equilibrio (se refiere a la parte de vapor en equilibrio)
D	desequilibrio (se refiere a la parte de vapor que no está en equilibrio)
.	indicación para un valor por unidad de tiempo, e.g. un caudal (1/sec)
I	interfase
*	condición de operación de flujo elevado
e	equilibrio
-	promedio

Números adimensionales

$$Nu \quad \text{Nusselt:} \quad Nu = \frac{2 \alpha R_0}{\lambda}$$

$$Pr \quad \text{Prandtl:} \quad Pr = \frac{\eta c_p}{\lambda}$$

$$Re \quad \text{Reynolds:} \quad Re = \frac{2 u_\infty R_0}{\nu}$$

$$Sh \quad \text{Sherwood:} \quad Sh = \frac{2 k R_0}{D_{i,j}}$$

$$Fo \quad \text{Fourier:} \quad Fo = \frac{\tau \nu}{R_0^2}$$

$$Le \quad \text{Lewis:} \quad Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{\lambda}{Dc_p \rho}$$

$$Sc \quad \text{Schmidt:} \quad Sc = \frac{\mu D}{\rho}$$

General

() vector

[] matriz

()^T transpuesto

[U] matriz unitaria

ierfc función complementaria de error