

### 9.3. Bibliografía

- Ahmad, Berit S., Barton, Paul I., "Homogeneous Multicomponent Azeotropic Batch Distillation", *AIChE Journal*, **42**, 3419-3433 (1996)
- van Antwerpen, F.J., "Bubble Tray Design Manual", *American Institute of Chemical Engineers*, The Science Press Inc., New York (1958)
- Barolo, Massimiliano, Guarise, G. Berto, Ribon, Nicola, Rienzi, Sergio, Trotta, Antonio, "Some Issues in the Design and Operation of a Batch Distillation Column with a Middle Vessel", *Computers Chem. Engng*, **20** Suppl, 37-42 (1996)
- Bernot, Christine, Doherty, Michael F., Malone, Micheal F., "Design an Operating Targets for Nonideal Multicomponent Batch Distillation", *Ind. Eng. Chem. Res.* **32**, 293-301 (1993)
- Bonny, L., "Strategies for handling mixtures in a campaign of several multicomponent batch distillations", *Chemical Engineering and Processing*, **34**, 391-399 (1995)
- Bonny, L., "Strategies for handling mixtures in a campaign of several multicomponent batch distillations with slop recycle", *Chemical Engineering and Processing*, **34**, 401-414 (1995)
- Bonny, L., Domenech, S., Floquet, P., Pibouleau, L., "Recycling of slop cuts in multicomponent batch distillation", *Computers Chem. Engng*, **18** Suppl., 75-79 (1994)
- Chilton, T.H., Colburn, A.P., "Distillation and Absorption in Packed Columns", *Ind. Eng. Chem.* **27**, 255-260 (1935)
- Colección de fórmulas para la materia "Termodinámica multicomponente" del Instituto II de Ingeniería Química de la universidad RWTH Aachen, Prof. Dr.-Ing. Hugo Hartmann
- Danckwerts, P.V., "Gas absorption accompanied by chemical reaction", *AIChE Journal*, **1**, 456-463 (1955)
- Diwekar, U.M., "Simulation, design, and optimization of multicomponent batch distillation columns", Ph.D. thesis, Indian Institute of Technology, Bombay, India (1988)
- Diwekar, U.M., Malik, R.K., Madhavan, K.P., "Optimal reflux rate policy determination for multicomponent batch distillation columns", *Computers Chem. Engng*, **11**, 629-637 (1994)

- Diwekar, Urmila M., "Batch Distillation", Editorial Taylor and Francis, Washington (1996)
- Drickamer, H.G., Bradford, J.R., "Overall plate efficiency of commercial hydrocarbon fractionating columns as a function of viscosity", *Trans. Am. Inst. Chem. Eng.*, **39**, 319-327 (1943)
- Duncan, J.B, Toor, H.L., "Experimental Study of three Component Gas Diffusion", *AIChE Journal*, **8**, 38-41 (1962)
- Fair, James R., Null, Harold R., Bolles, William L., "Scale-up of Plate Efficiency from Laboratory Oldershaw Data", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, **22**, (1983)
- Fuller, E.N., Schettler, P.D., Giddings, J.G., "New Method for Prediction of Binary Gas-Phase Diffusion Coefficients", *Ind. Eng. Chem.*, **58**, 18-27 (1966)
- Górak, A., "Simulation Methods for Steady-State Multicomponent Distillation in a Packed Column", *ICHEME Symp. Ser.*, **104**, A413-A424 (1987)
- Górak, A., "Berechnungsmethoden der Mehrstoffrektifikation, Theorie und Anwendungen", Habilitationsschrift, RWTH Aachen (1990)
- Górak, A., "Simulation thermischer Trennverfahren fluider Vielkomponentengemische", Skriptum Lehrstuhl thermische Verfahrenstechnik, Universität Dortmund (1994)
- Hansen, Tomas T., Jorgensen, Sten Bay, "Optimal Control of Binary Batch Distillation in Tray or Packed Columns", *The Chemical Engineering Journal*, **33**, 151-155 (1995)
- Higbie, R., "The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure", *Trans. Amer. Inst. Chem. Engrs.*, **3**, 365-369 (1935)
- Jeltsch, R., "Skriptum zur Vorlesung Numerische Mathematik I (Teil A und Teil B)", Institut für Geometrie und Praktische Mathematik, RWTH Aachen, 3. Auflage (1985)
- Kaltenbacher, E., "Über den Einfluß der Blasengrößenverteilung und der Stoffübertragung auf die Trennwirkung von Siebböden", Dissertation TH Karlsruhe (1982)
- Kooijman, H.A., Taylor, R., "A Nonequilibrium Model for Dynamic Simulation of Tray Distillation Columns", *AIChE Journal*, **41** (1995)
- Krishna, A., "A note on the film and penetration models for multicomponent mass transfer", *Chemical Engineering Science*, **33**, 765-767 (1978)

- Krishna, R., Standart, G.L., "Mass and Energy Transfer in Multicomponent Systems", *Chem. Eng. Commun.*, **3**, 210-275 (1979)
- Krishna, R., "Problems and Pitfalls in the Use of the Fick Formulation for intraparticle diffusion", *Chemical Engineering Science*, **48**, 845-861 (1993)
- Krishnamurthy, R., Taylor, R., "A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes", *AIChE Journal*, **31**, 449-456 (1985)
- Lockett, M.J., "Distillation Tray Fundamentals", Cambridge University Press: Cambridge. U.K. (1986)
- Logsdon, Jeffery S., Biegler, Lorenz T., "Accurate determination of optimal reflux policies for the maximum distillate problem in batch distillation", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **32**, 692-700 (1993)
- Maxwell, J.C., "On the dynamical theory of gases", *Phil. Trans. R. Soc.*, **2**, 10-15 (1867)
- McCabe, W.L., Thiele, E.W., "Graphical Design of Fractionating Columns", *Ind. Eng. Chem.*, **17**, 605-611 (1925)
- Mehlhorn, A., Espuña, A., Górak, A., Puigjaner, L., "Modeling and Experimental Validation of Both Mass Transfer and Tray Hydraulics in Batch Distillation", *Comp. Chem. Engng*, **20**, 575-580 (1996)
- Mehlhorn, A., Nougues, J.M., Puigjaner, L., "Using Rate-Based Approach under Consideration of Different Contacting Regimes for Multicomponent Batch Distillation Simulation", *Comp. Chem. Engng*, **22**, Suppl., 645-649, (1998)
- Mujtaba, I.M., Macchietto, S., "Optimal Design of multicomponent batch distillation columns - single and multiple separation duties", *Proceedings of PSE '94* 179-184 (1994)
- Murphee, E.V., "Graphical Rectifying Column Calculations", *Ind. Eng. Chem.*, **17**, 960-964 (1925)
- Perry, R.H., Chilton, C.H., Editor "Chemical Engineers' Handbook"; McGraw-Hill: New York, (1995)
- Porter, K.E., Davies, B.T., Wong, P.F.Y., "Mass transfer and bubble sizes in cellular foams and froths", *Trans IChemE*, **45**, 265-274 (1967)
- Potthoff, R., "Maldistribution in Füllkörperkolonnen", *Fortschrittsberichte VDI, Reihe 3*, Nr. 349 (1994)
- Prado, Miguel, Fair, James R., "Fundamental Model for the Prediction of Sieve Tray Efficiency", *Ind. Eng. Chem. Res.* **29**, 1031-1042 (1990)

- Reid, C., Prausnitz, J.M., Poling, B.E., "The properties of gases and liquids ; McGraw-Hill Book Company, 4<sup>th</sup> Edition (1993)
- Santamaria Ramiro, J. M., Braña Aísa, P. A., "Análisis y reducción de riesgos en la industria química", Editorial Mapfre, S.A., (1993)
- Safrit, Boyd T., Westerberg, Arthur W., "Improved Operational Policies for Batch Extractive Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 436-443 (1997)
- Schlünder, E.-U., "Über die Auslegung von Wärme- und Stoffaustauschapparaten mit Hilfe von Wärme- und Stoffübergangskoeffizienten - Vorzüge, Grenzen, Alternativen" *Chemie Ingenieur Technik*, **48**, 212-226 (1976)
- Scholz, Eugen, "Karl-Fischer-Titration", Springer Verlag, Berlin, (1984)
- Speedup User Manual, Aspen Tech. Inc., Cambridge, MA, (1995)
- Stefan, J., "Über das Gleichgewicht und die Bewegung, insbesondere die Diffusion von Gasmengen", *Sitz. Ver. Akad. Wiss. Wien* **63** (1871)
- Stewart, W.E., Prober, R., "Matrix Calculation of Multicomponent Mass Transfer in Isothermal Systems", *Ind. Eng. Chem. Fundam.* **3**, 224-235 (1964)
- Stichlmaier, J., comunicación personal (1995)
- Stichlmaier, J, "Grundlagen der Dimensionierung des Gas / Flüssigkeit-Kontaktapparates Bodenkolonnen", Verlag Chemie, Weinheim (1978)
- Sundaram, S., Evans, L.B., "Shortcut Procedure for Simulating Batch Distillation Operations", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **32**, 511-518 (1993)
- Taylor, R., Krishna, R., "Multicomponent mass transfer", John Wiley and Sons, Inc., New York, (1993)
- Taylor, R., Kooijman, H.A., Hung, J.S., "A Second Generation Nonequilibrium Model for Computer Simulation of Multicomponent Separation Processes", *Computers Chem. Engng.* **18**, 205-217 (1994)
- Taylor, R., Achuthan, K., Lucia, A., 'Complex Domain Distillation Calculations', *Computers Chem. Engng.* **20**, 93-111 (1996)
- Toor, H.L., "Diffusion in Three Component Gas Mixtures", *AIChE Journal* **3**, 198-207 (1957)
- Toor, H.L., Marchello, J.M., "Film Penetration Model for Mass and Heat Transfer", *AIChE Journal*, **4**, 97-101 (1958)

- Toor, H.L., Burchard, J.K., "Plate Efficiencies in Multicomponent Distillation", *AIChE Journal*, **6**, 202-206 (1960)
- Toor, H.L., "Solution of the Linearized Equations of Multicomponent Mass Transfer", *AIChE Journal*, **10**, 448-445,460-465 (1964)
- Treybal, Robert E., "Operaciones de Transferencia de Masa", McGraw-Hill Book Co., New York (1988)
- VDI Wärmeatlas, 6. erweiterte Auflage, VDI-Verlag GmbH, Düsseldorf, (1991)
- Vickery, D.J., Taylor, R., "Path-Following Approaches to the Solution of Multicomponent, Multistage Separation Process Problems", *AIChE Journal*, **32**, 547-556 (1986)
- Vickery, David J., Taylor, Ross, Gavalas, George A., "A Novel Approach to the Calculation of Mass Transfer Rates from the Linearized Equations", *Computers Chem. Engng.*, **8**, 179-184 (1984)
- Voigtländer, C., "Modellierung des instationären Wärme- und Stoffaustausches in Blasen zur Simulation thermischer Trennverfahren" VDI-Verlag, (1995)
- Walter, J.F., Sherwood, T.K., "Gas Absorption in Bubble-Cap Columns", *Ind. Eng. Chem.* **33**, 493-501 (1941)
- Wesselingh, J.A., comunicación personal (1995)
- Wesselingh, J.A., Krishna, R., "Mass Transfer", Ellis Horwood, Chichester, (1990)
- Woodward, John L., Moosemiller, Micheal D., Chopp, Robert, "Applying Risk Assessment Principles to a Batch Distillation Column", *Process Safety Progress* **15**, (1996)
- Yu, S., "Steady State Simulation of a Packed Distillation Column", *J. Chin. Inst. Chem. Eng.*, **15**, 129-142, (1984)

Tabla 10: Propiedades de los componentes usados en los experimentos

Líquido	Fórmula	masa molar Kg /kmol	Densidad normal <sup>1)</sup> kg/m <sup>3</sup>	Temperatura de fusión °C	Entalpía de fusión kJ/kg	Temperatura de ebullición °C (1013mbar)	Entalpía de vaporización kJ/kg (1013mbar)	Datos Críticos			Densidad /[kg/m <sup>3</sup> ]	
								T/°C	p / bar	$\rho$ [10 <sup>3</sup> kg/m <sup>3</sup> ]	0 grados	100 grados
Benzeno	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	78,11	(3,49)	5,53	127,7	80,15	394	288,95	48,9	0,302	900	793
Tolueno	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	92,14	(4,11)	-95,15	72,0	110,65	360	318,55	41,1	0,292	885	793
o-Xileno	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	106,17	(4,74)	-25,15	129,8	144,45	348	357,05	37,3	0,288	905	808
m-Xileno	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	106,17	(4,74)	-47,85	108,9	139,15	345	346	35,5	0,282	881	795
p-Xileno	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	106,17	(4,74)	13,25	160,4	138,35	339	343,05	35,2	0,280	861(20 C)	790
Metanol	CH <sub>3</sub> O	32,04	(1,43)	-97,65	103,0	64,65	1100	239,45	81,0	0,272	812	714
Etanol	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O	46,07	(2,06)	-114,05	108,0	78,35	846	243,05	63,8	0,276	806	716
Isopropanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O	60,10	(2,68)	-88,45	89,2	82,25	670	235,15	47,6	0,273	801	785(20 C)
Propanol	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O	60,10	(2,68)	-126,25	86,7	97,25	691	263,55	51,7	0,275	804(20 C)	733
n-Butanol	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> O	74,12	(3,31)	-89,25	125,2	117,75	590	289,75	49,6	0,271	825	810(20 C)
Ciclohexano	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	84,16	(3,75)	6,55	31,4	80,75	360	280,25	40,7	0,273	797	700
Tolueno	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	92,14	(4,11)	-95,15	72,0	110,65	360	318,55	41,1	0,292	885	793
Clorobenzeno	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Cl	112,56	(5,02)	-45,55	84,9	131,75	325	359,25	45,2	0,365	1128	1019

<sup>1)</sup> Densidad a 0°C y 1013 mbar. Valores entre paréntesis están calculados para un gas hipotético en este estado.

## 9.4. Símbolos

<i>Letra</i>	<i>Descripción</i>	<i>Unidad</i>
<i>A</i>	superficie	m <sup>2</sup>
<i>A<sub>plato</sub></i>	superficie del plato	m <sup>2</sup>
<i>B</i>	moles en calderín (bottom)	kmol
<i>B</i>	elementos de la matriz invertida de coeficientes de difusión	s/m <sup>2</sup>
<i>c</i>	calor específico	kJ/kmol K
<i>c</i>	concentración molar	kmol/ m <sup>3</sup>
<i>C<sub>f</sub></i>	constante de inundación	m/s
<i>d</i>	diámetro	m
<i>d<sub>h</sub></i>	diámetro hidráulico de un agujero	m
<i>D'</i>	coeficiente de difusión de Maxwell-Stefan	m <sup>2</sup> /s
<i>D</i>	coeficiente de difusión de Fick	m <sup>2</sup> /s
<i>Ė</i>	potencia transferida por la interficie	W
<i>F</i>	factor-F (carga de vapor)	$\sqrt{\text{kg} / \text{s}^2 \text{m}}$
<i>g</i>	aceleración gravitatoria	m/s <sup>2</sup>
<i>G</i>	energía de Gibbs específica	kJ/kmol
<i>Ġ</i>	caudal de vapor	kmol/s
<i>h</i>	entalpía específica	J/mol
<i>H</i>	entalpía específica	kJ/kmol
<i>J</i>	caudal difusivo por superficie	kmol/s m <sup>2</sup>
<i>k</i>	coeficiente de transmisión de calor (cap. 2)	W/ m <sup>2</sup> K
<i>k</i>	coeficiente de difusión (cap. 4 y 5)	m/s
<i>K</i>	coeficiente de equilibrio	-
<i>l</i>	espesor de la lámina	mm
<i>Ġ</i>	caudal de líquido	kmol/s
<i>L</i>	longitud total de tubo (cap. 2)	m
<i>Ṁ<sub>L</sub></i>	caudal de masa del condensado	kg/s
<i>M</i>	número de componentes (cap. 4, 5 y 6)	-

$[M]$	matriz de derivadas de la línea de equilibrio (cap. 4)	mol/mol
$M$	peso molar (cap.4)	kg/kmol
$n$	cantidad total de moles	kmol
$N$	número de unidades de transferencia (cap.5)	-
$N$	número de platos	-
$N$	número de componentes	-
$N_A$	número Avogadro	-
$\bar{N}$	flujo molar promedio por superficie	kmol/s m <sup>2</sup>
$\dot{N}$	flujo molar por superficie	kmol/s m <sup>2</sup>
$N_H$	Hold-up encima del plato	mol
$p$	presión	Pa
$p_j$	presión en el plato j	Pa
$q$	residual en la ecuación de Underwood	-
$Q$	energía, calor	kJ
$R$	relación de reflujo (cap.5)	-
$R$	constante de gases ideales (cap. 4)	kJ/kg K
$s$	renovaciones de superficie por intervalo de tiempo	1/s
$S$	entropía específica	kJ/kmol K
$t$	tiempo	s
$t_e$	tiempo de exposición / de contacto	s
$t$	espaciamiento de la torre (cap. 2)	m
$T$	temperatura	K
$u$	velocidad de moléculas	m/s
$U$	energía interna	kJ/kmol
$[U]$	matriz unitaria	-
$V$	volumen	m <sup>3</sup>
$\dot{V}$	caudal de vapor	m <sup>3</sup> /s
$w$	velocidad de vapor	m/s
$w_f$	velocidad de vapor límite	m/s
$Z_L$	longitud del trayecto de líquido en el plato	m



**Símbolos griegos**

<i>Letra</i>	<i>Descripción</i>	<i>Unidad</i>
$\alpha$	volatilidad relativa (cap. 5)	-
$\alpha$	coeficiente de transferencia de calor (cap. 2 y 4)	W/m <sup>2</sup> K
$\beta$	coeficientes de matriz "bootstrap"	-
$\gamma$	actividad de líquido	-
$\Gamma$	factor termodinámico de corrección	-
$\delta$	parámetro de convergencia (cap. 5)	-
$\delta$	espesor (cap. 2 y 6)	mm
$\delta$	delta de "Kronecker" (cap. 4)	-
$\Delta$	diferencia	-
$\varepsilon$	relación de vapor en zona bifásica (cap.5)	-
$\varepsilon$	grado de rugosidad (cap. 2)	mm
$\lambda$	conductividad de calor	W/m
$\lambda$	calor de evaporación (cap. 4 y 5)	kJ/kmol
$\Lambda$	calor de evaporación relativo	-
$\mu$	potencial químico	kJ/kmol
$\eta$	distancia adimensional (cap. 4)	-
$\eta$	eficiencia de plato de Murphee (cap. 5 y 6)	-
$\eta$	viscosidad dinámica (cap. 2)	kg/ms
$\nu$	coeficiente de indicación de tipo de transferencia	-
$\nu$	volúmenes de difusión (cálculo del coeficiente de difusión)	-
$\varphi$	fugacidad	-
$\phi$	relación superficie de agujeros / superficie plato (cap. 4)	-
$\phi$	parámetro de enlace (ecuaciones Underwood) (cap.5)	-
$\Phi$	factor adimensional de transferencia	-
$\psi$	función de distribución de superficie	1/s
$\rho$	densidad de masa	kg/m <sup>3</sup>
$\sigma$	tensión superficial	N/m

$\vartheta$	temperatura	C
$\zeta$	factor adimensional de transferencia	-
$\Xi$	factor de corrección de flujo	-

### Subíndices

b	bulk
B	bottom
D	destilado
E	entrada
e	exposición
ext	exterior
i	número de componente (de 1 hasta M)
int	interior
IN	entrada
j	número de plato (de 1 hasta N+1 [calderín])
o	"overall"
OUT	salida
OV	"overall vapor", total vapor
P	pared
S	salida
t	total
TV	tubo vacío
w	agua (water)
ZB	zona bifásica
tot	suma total de todos los componentes
BB	burbujas grandes "big bubbles"
SB	burbujas pequeñas "small bubbles"

### Superíndices

D	desequilibrio (se refiere a la parte de vapor que no está en equilibrio)
E	equilibrio (se refiere a la parte de vapor en equilibrio)

I	en la interficie
IN	entrada
L	líquido
OUT	salida
$\dot{V}$	vapor
·	indicación para un valor por unidad de tiempo (1/sec)
*	condición de operación de flujo alto
*	equilibrio
-	promedio

### Números adimensionales

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

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

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

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

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

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

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

### General

( ) vector

[ ] matriz

( )<sup>T</sup> transpuesto