

SEP INSTITUTO TECNOLÓGICO de celaya

I.Q./073/98

Asunto: Aprobación de Impresión
de Tesis de Maestría

12 de junio de 1998.

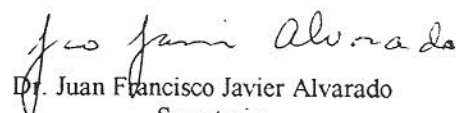
Dr. Rafael Chávez Contreras
Jefe del Depto. de Ingeniería Química.
Presente


De acuerdo con la convocatoria hecha por esa Jefatura a su digno cargo con el fin de determinar la aprobación de impresión del Proyecto de Tesis de Maestría, titulado: *"MODELO GENERAL PARA PREDECIR LA TRANSFERENCIA DE MASA Y LA CAIDA DE PRESION APLICADO EN EMPAQUES ESTRUCTURADOS"* presentado por el (la) Ing. JOSE JUAN GUALITO HERNANDEZ, comunico a usted que esta Comisión Revisora de tesis ha tenido a bien aprobar la impresión de este trabajo.

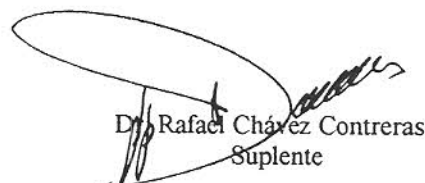
Lo anterior, para los efectos consiguientes.

Atentamente,


Dr. Antonio Rocha Uribe
Presidente


Dr. Juan Francisco Javier Alvarado
Secretario


Dra. Gloria María Martínez González
Vocal


Dr. Rafael Chávez Contreras
Suplente

Ilc*



MODELO GENERAL PARA PREDECIR LA TRANSFERENCIA DE MASA Y LA CAÍDA DE PRESIÓN APLICADO EN EMPAQUES ESTRUCTURADOS

por

José Juan Gualito Hernández

RESUMEN

Se propone un modelo generalizado para predecir la altura equivalente de un plato teórico HETP y la caída de presión ΔP en columnas de destilación que contengan empaques estructurados de metal, cerámica o plástico.

Primeramente se describe el modelo general con sus ecuaciones correspondientes. Después se presenta el trabajo experimental realizado con empaques estructurados de plástico; en seguida se presentan y discuten los parámetros necesarios para la aplicación del modelo general para empaques de metal, plástico y cerámica, encontrándose que las desviaciones promedio entre los valores calculados y los medidos son de 19 % para el HETP y del 2.5 % para la caída de presión. Posteriormente, se corrige el modelo para obtener una buena predicción para valores bajos y altos de caídas de presión. Al final, se presenta el efecto de las propiedades físicas sobre los valores puntuales del HETP.

Dirigida por: Dr. J. Antonio Rocha U.

DEDICATORIA

A mis padres José Gualito Rodríguez y Angelina Hernández por el gran apoyo que me brindaron.

A mis hermanos Guadalupe, Isabel, Federico, Espiridion y Mary quienes siempre me apoyaron y ayudaron a librar los obstáculos que se presentaban.

A mi esposa Tere Alejos y a mi hijo José Juan por la paciencia y cariño que me dan.

AGRADECIMIENTOS

Al comité de revisión por sus valiosos comentarios

Dr. Javier Alvarado.

Dr. Rafael Chavez.

Dra. Gloria María Martínez.

La amistad es uno de los dones mas valiosos y verdaderos en la vida.
Gracias:

Alan, Javier, Jorge, Raúl, Hector, Botello, Jacinto, Glafiro
Beto, Manuel, David, Figura, Piguí, Mac,
Toño R., Franco, Toño C.,
Ruso, Mario, Six,
Amauri, Pepe y Salo.

Al Dr. J. Antonio Rocha por su inagotable apoyo para la realización de este trabajo y por su constante deseo de superación.

A la maestra Macrina Carreño Juárez por darme la confianza para emprender un camino de superación.

CONTENIDO

Resumen	iii
Agradecimientos	iv
Lista de tablas	vii
Lista de figuras	viii
Nomenclatura	ix
Capitulo I	INTRODUCCIÓN
1.1 Generalidades	1
1.2 Empaque estructurado	5
1.3 Objetivo del trabajo	6
1.4 Descripción del trabajo	7
Capitulo II	ANTECEDENTES
2.1. Trabajos previos	8
2.2. Modelo generalizado para empaques metálicos estructurados	10
Capitulo III	TRABAJO EXPERIMENTAL
3.1. Trabajo experimental en columna de destilación.	15
Capitulo IV	DESARROLLO DEL MODELO GENERALIZADO
4.1. Modelo general para empaques estructurados de metal, cerámica y plástico.	19
4.1.1. Resultados y discusión de la predicción del modelo para transferencia de masa	28

4.1.2. Comparación de los valores de los mismos parámetros para empaques estructurados de metal, cerámica y plástico	31
Capítulo V MODELO GENERALIZADO A PRESIONES ALTAS	34
5.1. Modelo generalizado a altas presiones de operación	34
5.1.1 Caída de presión operando a alta presión	34
5.1.2 HETP a alta presión de operación.	38
5.1.3 Postulación del retromezclado y la correlación por el decremento del área interfacial efectiva.	40
5.2. Efectos de variación sobre propiedades físicas	42
Capítulo VI CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	45
6.1 Conclusiones	45
6.2 Recomendaciones	47
REFERENCIAS	48

LISTA DE TABLAS

TABLA	PAG
1. Comparación de dispositivos de columnas de destilación.	4
2. Ecuaciones para predecir el HETP en empaques estructurados de metal	11
3. Cálculo de parámetros hidráulicos	13
4. Dimensiones para empaques estructurados de metal, cerámica y polipropileno	16
5. Propiedades físicas de los sistemas utilizados	17
6. Parámetros necesarios para el desarrollo del modelo general para empaques de metal, cerámica y plástico	20
7. Datos experimentales de HETP para destilación a reflujo total con Flexeramic y Mellapak 250Y de polipropileno.	23
8. Ecuaciones para predecir el HETP en empaques estructurados de metal, cerámica y polipropileno	24
9. Cálculo de parámetros hidráulicos	26
10. Parámetros necesarios en el desarrollo del modelo general para empaques de metal, cerámica y plástico obtenidos en este trabajo	27
11. Valores relativos de algunos parámetros para comparar un empaque estructurado de metal (FL2) con un tamaño de empaque estructurado de plástico (PPM250) y dos tamaños de empaques estructurados de cerámica. (F28 Y F48)	32
12. Valores numéricos para varios parámetros cuando el modelo general de las Tablas 7 y 8 es aplicado a los datos de Fitz y col.(1995).	38

LISTA DE FIGURAS

FIGURA	PAG
1. Configuración física de un empaque estructurado.	5
2. Columna de destilación.	15
3. Comparación del HETP calculado y experimental a diferentes presiones, para Flexipac 2, usando ciclohexano/n-heptano a reflujo total.	28
4. Comparación del HETP calculado y experimental para Flexeramic 28 48, usando ciclohexano/n-heptano a reflujo total y presión atmosférica.	29
5. Comparación del HETP calculado y experimental para polipropileno 250Y Mellapak, usando ciclohexano/n-heptano a reflujo total y presión atmosférica.	29
6. Comparación del HETP calculado y experimental para algunos tamaños de Mellapak, usando clorobenceno/etilbenceno a reflujo total y 0.96 bar.	31
7. Valores relativos para algunos parámetros importantes cuando un empaque de metal, es comparado con un tamaño de empaque estructurado de plástico y dos tamaños de empaques estructurados de cerámica.	32
8. Gráfica de paridad para la caída de presión a diferentes presiones de operación para Mellapak 250Y, usando butano/isobutano a reflujo total y datos de Fitz y col. (1995).	37

9. Comparación del HETP calculado y experimental usando el factor de corrección para a_e dado por la ecuación 28. El sistema es butano/isobutano a diferentes presiones para el Mellapak 250Y, a reflujo total, los datos son de Fitz y col. (1995). 41
10. Efecto de las propiedades físicas y variación de la línea de equilibrio sobre el HETP 43

NOMENCLATURA

A, B, C, D	Constantes para el modelo general	
A_c	Área de la columna	m^2
a_e	Área efectiva del empaque	m^2/m^3
a_p	Superficie del empaque	m^2/m^3
B	Base del canal	m
D_G	Coefficiente de difusión del gas	m^2/s
D_L	Coefficiente de difusión del líquido	m^2/s
f	Factor de corrección de Shi - Mershamann	adimensional
F_s	Parámetro de flujo de vapor ($F_s = U_{GS} \rho_G^{0.5}$)	$m/s (Kg/m^3)^{0.5}$
F_{SE}	Factor de mejora para la superficie	adimensional
F_t	Factor de corrección para el holdup total	adimensional
Fr_L	Número de Froude para el líquido	adimensional
g	Aceleración de la gravedad	$9.81 m/s^2$
g_c	Factor de conversión	1.0 unidades SI
g_{eff}	Gravedad efectiva	m/s^2
h_L	Holdup del líquido	adimensional
h_{sc}	Caída de presión estática	Pa/m
H	Altura de una unidad individual de transferencia	m
HTU	Altura de una unidad de transferencia global	m

HETP	Altura equivalente de un plato teórico	m
k_G	Coefficiente de transferencia de masa del gas	m/s
k_L	Coefficiente de transferencia de masa del líquido	m/s
N_t	Número de platos teóricos	adimensional
P	Presión	Pa y bar
Q	Flujo volumétrico	m ³ /s
Re_L	Número de Reynolds para el líquido	adimensional
S	Dimensión de un lado de canal de un empaque estructurado.	m
U_{Ge}	Velocidad efectiva del gas	m/s
U_{Le}	Velocidad efectiva del líquido	m/s
U_{GS}	Velocidad superficial del gas	m/s
U_{LS}	Velocidad superficial del líquido	m/s
We_L	Número de Weber del líquido	adimensional
X_D	Fracción mol en el domo	adimensional
X_B	Fracción mol en el fondo	adimensional
Z	Altura del empaque	m

Letras Griegas

γ	Ángulo de contacto entre el líquido y el sólido	grados
ε	Fracción de huecos	adimensional
θ	Ángulo con la horizontal del canal	grados
μ	Viscosidad	kg/m s
ρ	Densidad	kg/m ³
σ	Tensión superficial	N/m
λ	Relación de pendientes, línea de equilibrio / línea de operación	adimensional

Subíndices

B	Fondo
eff	Efectiva
exp	Experimental
G	Fase gas
L	Fase líquida
m	Medida
s	Superficial
D	Destilado
<i>G_{oper}</i>	Velocidad de operación de la fase vapor

CAPITULO I

INTRODUCCIÓN

1.1 Generalidades

La destilación es uno de los procesos de separación más utilizados en la industria química y petroquímica; por lo mismo es uno de los más estudiados para lograr innovaciones que aumenten la eficiencia en la separación.

La destilación es un proceso físico de separación entre uno o más compuestos de una mezcla líquida o gaseosa, que se basa en los diferentes puntos de ebullición de los componentes. La destilación pone en contacto a contracorriente una fase líquida con otra fase vapor, los componentes más volátiles son transferidos a la fase vapor y los menos volátiles a la fase líquida.

A través del tiempo en que ha sido empleada la destilación, muchos dispositivos y métodos para lograr el contacto líquido-vapor han sido utilizados para favorecer la velocidad de transferencia de masa.

Convencionalmente el proceso de destilación es realizado en columnas o torres, que tienen como dispositivos internos platos o empaques. Los platos pueden ser perforados, de cachuchas o de válvulas. Los empaques se dividen en dos tipos, los aleatorios que son colocados dentro de la columna en una

forma aleatoria; y los estructurados que son colocados en forma ordenada y cuidadosamente dimensionados al diámetro de la columna.

La columna empacada es un dispositivo que permite hacer más eficiente y continuo el contacto vapor líquido, maximiza la utilización del área circular y el volumen de la columna. En su forma más simple consiste en una cantidad de empaques que son depositados dentro de la columna. El líquido es vertido desde la parte superior del empaque por medio de un distribuidor. Este líquido (fase dispersa) entonces desciende en forma de película sobre la superficie del empaque y en su trayecto hace contacto con el vapor (fase continua) que va ascendiendo; la concentración de los compuestos es diferente en la fase líquida que baja y la fase gaseosa que sube. Este arreglo de contacto a contracorriente y concentraciones diferentes provee la fuerza impulsora o diferencial para que el proceso de transferencia de masa se realice. El arreglo es utilizado para la destilación, absorción, agotamiento, humidificación, deshumidificación y extracción líquido-líquido.

En la Tabla 1 se presentan las principales características y diferencias de los diferentes dispositivos de contacto de las fases líquido-vapor en una columna de destilación. (platos, empaques aleatorios y empaques estructurados).

TABLA 1. Comparación de Dispositivos de Columnas de Destilación.
Fair, J. R, (1965)

Propiedad	Platos de cachuchas	Platos perforados	Platos de válvula	Platos de doble flujo	Empaque aleatorio	Empaque estructurado
Capacidad de vapor	3	4	4	5	5	5
Capacidad de líquido	4	4	4	5	5	5
Eficiencia	4	3	4	3	4	5
Flexibilidad	5	3	5	1	4	5
Caída de presión	2	3	3	3	4	5
Costo	3	5	4	5	2	1
Capacidad para sistema sucio	3	3	3	4	2	1
Confianza del diseño	4	4	3	2	3	3

5 = Excelente 4 = Muy bueno 3 = Bueno 2 = Regular 1 = Malo

Las ventajas que ofrecen los empaques estructurados son:

- Reducen los acanalamientos asociados con los empaques aleatorios.
- Tienen muy poca caída de presión sin disminuir la eficiencia.
- Su gran área superficial por unidad de volumen aumenta la eficiencia.
- Los grandes espacios entre las hojas adyacentes paralelas proveen alta capacidad a lo largo de la columna con poca caída de presión.

La selección del material del empaque está basada tanto en el costo como en la resistencia a la corrosión. Los empaques de acero al carbón son usualmente la primera elección para servicios no corrosivos, ya que el acero inoxidable representa aproximadamente cuatro veces más el costo del acero al carbón. Los empaques de cerámica son utilizados cuando se requieren altas temperaturas y materiales inertes. Los empaques de plástico son usados cuando hay bajas o moderadas temperaturas.

Una forma de medir la eficiencia de las columnas de destilación que contienen platos es mediante la eficiencia global de la columna, la cual se obtiene dividiendo el número de platos teóricos entre el número de platos reales necesarios en la práctica, para efectuar la operación deseada. Cuando la columna tiene empaques, la forma de medir la eficiencia es utilizando el concepto de la **altura equivalente a un plato teórico o HETP** (La altura de empaque requerida para lograr la separación de una etapa teórica), entre menor sea el HETP del empaque, mayor será su eficiencia

1.2. Empaque estructurado

Los empaques estructurados se forman con láminas corrugadas, que pueden ser fabricados de metal, cerámica y plástico. La geometría física de un empaque estructurado se muestra en la Figura 1

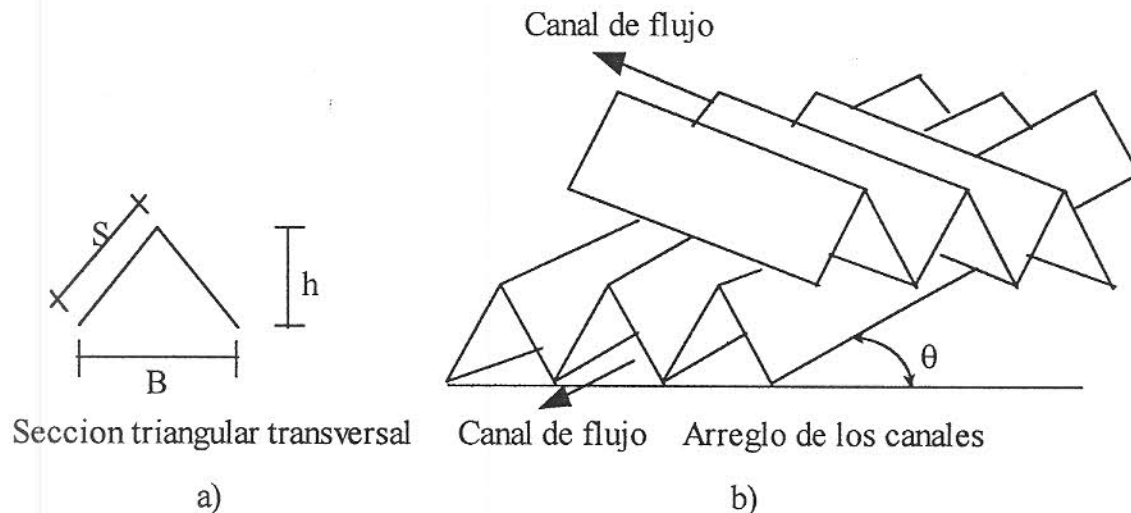


Figura 1 Configuración física de un empaque estructurado

La Figura 1a) muestra que las relaciones de "B" a "h" y "S" a "h" definen la geometría del canal de flujo; de la Figura 1b) se observa que el ángulo de corrugación (θ) influye en el tiempo de residencia del líquido que desciende por las paredes en forma de película, mientras que el gas asciende por el espacio triangular. Los ángulos de la corrugación varían entre 28° y 45° y las relaciones base - altura desde 2:1 a 4:1. Los lados del triángulo mostrado en la Figura 1, son redondeados, para reducir la fricción y evitar la acumulación de los líquidos en las esquinas.

Los empaques ofrecen una gran superficie de contacto a todo lo largo de la columna, lo cual permite que la transferencia de masa sea mayor que en las columnas de platos. Son fabricados para las dimensiones de la columna y deben de quedar ajustados para evitar canalizaciones sobre la pared. Por su parte, la superficie del empaque estructurado puede tener un tratamiento especial, tal como un repujado, acanalado o perforado con el objeto de ayudar a la distribución del líquido a través de la superficie mejorando la turbulencia y aumentando la transferencia de masa. Los elementos del empaque son instalados en capas orientados uno de otro a 90° para mejorar el mezclado de las dos fases; las láminas corrugadas son usualmente inclinadas a 45° o 60° de la horizontal.

1.3. Objetivo del trabajo.

El objetivo de la tesis es generalizar el modelo propuesto por Bravo y col. (1992), que se aplica al análisis o al diseño de columnas de destilación con empaques estructurados metálicos, para que pueda ser utilizado con los diferentes materiales con los que se construyen los empaques (plástico, cerámica y metal).

Para lo anterior, se proporcionan correlaciones y parámetros necesarios para la predicción del comportamiento de la caída de presión y la velocidad de transferencia de masa.

1.4. Descripción del trabajo.

El presente trabajo está dividido en seis capítulos. En el capítulo 2, se dan los antecedentes de este trabajo y se presenta el modelo generalizado para empaques estructurados de metal. En el capítulo 3, se presenta el trabajo experimental realizado. En el capítulo 4, el modelo general es descrito y las ecuaciones involucradas son presentadas así como los parámetros para cada tipo de material. En el capítulo 5, el modelo generalizado se amplía para poder ser utilizado a presiones en operación superiores a 6 atmósferas. Finalmente en el capítulo 6, se exponen las conclusiones y recomendaciones.

CAPITULO II

ANTECEDENTES

2.1. Trabajos previos

El primer modelo fundamental y mecanístico para la predicción de la eficiencia de los empaques estructurados fue el utilizado para el empaque Sulzer BX fabricado de gasa metálica (tela metálica entretejida). Este tipo de empaques era muy costoso y por ello algunos empaques de hojas metálicas (Mellapack, Flexipac, Intalox, Maxpac, Montz, etc.) lo desplazaron en el mercado industrial.

Una ventaja de los empaques Sulzer es que por su construcción de alambre entretejido, la humectabilidad es más completa. Bravo y col. (1985) asumieron que el área superficial efectiva del empaque Sulzer era igual al área superficial del empaque y presentaron el primer modelo para el análisis de transferencia de masa en empaques estructurados. El modelo propone una correlación para predecir la altura equivalente de un plato teórico (HETP), que se incluye en la ecuación de diseño de la altura efectiva de empaque en una columna de destilación, Ecuación (1)

$$Z = N, HETP \quad (1)$$

Fair y Bravo (1990) proponen un método para predecir el HETP en empaques de hojas metálicas basado en el modelo original de Bravo y col.

(1985), pero usando un factor para el área parcial mojada de la superficie total del empaque.

Aparte de la altura efectiva del empaque calculada con la Ecuación (1), otro parámetro de diseño importante, es el diámetro de la columna, que puede ser calculado cuando se determina la velocidad de inundación o la velocidad de operación de la fase vapor a una caída de presión por longitud de empaque especificada. Cuando la velocidad de operación es establecida, el área de la columna se calcula con la Ecuación (2), conociendo el flujo volumétrico de la fase gaseosa Q_G

$$A_c = \frac{Q_G}{U_{G,oper}} \quad (2)$$

Bravo y col. (1986) propusieron una correlación para predecir la caída de presión válida para los empaques estructurados metálicos y de gasa. Los modelos combinados de Bravo y col. (1985, 1986) se realizaron en el Separations Research Program (SRP) de la Universidad de Texas en Austin y dan forma al modelo SRP para predecir la eficiencia y la caída de presión.

Históricamente, el desarrollo del modelo de transferencia de masa y el de caída de presión han sido llevados en forma independiente. En este trabajo, se llama a este procedimiento modelo de la primera generación.

Otros autores que han propuesto modelos o correlaciones de la primera generación para predecir HETP son: Spiegel y Meier (1987), Billet (1990), Billet y Shultes (1991).

Para la predicción de caída de presión con modelos de la primera generación, los investigadores que han contribuido son: Spiegel y Meier (1987), Stichlmair y.col. (1989) y Robbins (1991).

2.2. Modelo generalizado para empaques metálicos estructurados

Es bien conocido, que entre más mecanicista o fenomenologista sea la representación de los modelos, es mayor la posibilidad de una buena aproximación, pero muchas veces la complejidad constituye un factor importante en el cálculo de los modelos y es necesario hacer simplificaciones.

En la operación de las columnas de destilación de cualquier tipo, los fenómenos de flujo de fluidos (hidráulica) y la transferencia de masa, ocurren simultáneamente y hay un parámetro que vincula los dos fenómenos: el holdup del líquido (es la cantidad de líquido retenida en la columna empacada). Esto se toma en cuenta en el modelo de la segunda generación.

En el análisis hidráulico, el incremento en la velocidad de flujo de cualquiera de las fases, incrementa el espesor de la película y el holdup del líquido, esto a su vez produce un incremento en la caída de presión.

Para el análisis de transferencia de masa, el incremento en el holdup, produce un incremento en el área interfacial y esto proporciona una alta transferencia de masa o alta eficiencia (bajos valores para el HETP).

Billet (1988), Billet y Shultes (1992) y Hanley y col. (1994 A-B) señalaron también la relación entre la caída de presión y la transferencia de masa.

El Programa de Investigación de Separaciones de la Universidad de Texas en Austin y el Instituto Tecnológico de Celaya (ITC) han estado

trabajando en cooperación para el desarrollo de una correlación que permita el diseño de columnas de destilación que utilizan empaques estructurados. En 1989-1990 desarrollaron el modelo SRP II, que une la caída de presión y la transferencia de masa utilizando el holdup del líquido. El resultado de este trabajo fue presentado en partes: por Bravo y col. (1992) y por Rocha y col. (1993, 1996). En las Tablas 2 y 3, se presentan las principales ecuaciones que se utilizan.

TABLA 2. Ecuaciones para predecir el HETP en empaques estructurados de metal.

Adaptado de Bravo y col. (1992)

$$\text{HETP} = HTU \left[\frac{\ln \lambda}{\lambda - 1} \right] = [H_G + \lambda H_L] \left[\frac{\ln \lambda}{\lambda - 1} \right] = \left[\frac{U_{GS}}{k_G a_e} + \lambda \frac{U_{LS}}{k_L a_e} \right] \left[\frac{\ln \lambda}{\lambda - 1} \right] \quad (3)$$

$$k_G = 0.054 \left(\frac{D_G}{S} \right) \left(\frac{(U_{Ge} + U_{Le}) \rho_G S}{\mu_G} \right)^{0.8} \left(\frac{\mu_G}{D_G \rho_G} \right)^{0.33} \quad (4)$$

$$k_L = 2 \sqrt{\frac{D_L U_{Le}}{\pi S}} \quad (5)$$

$$U_{Ge} = \frac{U_{GS}}{\varepsilon (1 - h_L) \sin \theta} \quad (6)$$

$$U_{Le} = \frac{U_{LS}}{\varepsilon h_L \sin \theta} \quad (7)$$

$$\frac{a_e}{a_p} = F_{SE} \frac{29.12 (We_L Fr_L)^{0.15} S^{0.359}}{Re_L^{0.2} \varepsilon^{0.6} (1 - 0.93 \cos \gamma) (\sin \theta)^{0.3}} = F_{SE} F_t \quad (8)$$

$$We_L = \frac{U_{Ls}^2 \rho_L S}{\sigma} \quad (9)$$

$$Fr_L = \frac{U_{Ls}^2}{S g} \quad (10)$$

$$Re_L = \frac{U_{Ls} S \rho_L}{\mu_L} \quad (11)$$

Para empaques estructurados de metal:

$$\cos \gamma = 0.90 \quad \text{para } \sigma < 0.055 \text{ N/m} \quad (12)$$

$$\cos \gamma = 5.211 \times 10^{-16.835 \sigma} \quad \text{para } \sigma > 0.055 \text{ N/m} \quad (13)$$

Para empaques estructurados de gasa metálica:

$$\frac{a_e}{a_p} = 0.65 \quad (14)$$

TABLA 3. Cálculo de parámetros hidráulicos

Adaptado de Rocha y col. (1993)

1.- Teniendo: $\rho_L, \rho_G, \mu_L, \mu_G, S, \varepsilon, \theta, U_{LS}, U_{GS}$

2.- Estimar la caída de presión seca:

$$\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{dry} = \frac{0.1775 \rho_G}{S \varepsilon^2 (\text{sen} \theta)^2} U_{GS}^2 + \frac{88.774 \mu_G}{s^2 \varepsilon \text{sen} \theta} U_{GS} \quad (15)$$

3.- Calcular el factor de corrección para el holdup total:

$$F_t = \frac{29.12 (We_L Fr_L)^{0.15} S^{0.359}}{Re_L^{0.2} \varepsilon^{0.6} (1 - 0.93 \cos \gamma) (\text{sen} \theta)^{0.3}} \quad (16)$$

4.- Dar las condiciones iniciales para iterar:

$$\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{New} = \left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{dry} \quad (17)$$

5.- Ejecución del proceso de iteración:

$$h_L = \left[\frac{4 F_t}{S} \right]^{2/3} \left\{ \frac{3 \mu_L U_{Ls}}{\rho_L \varepsilon \text{sen} \theta g \left[\left(\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_L} \right) \left(1 - \frac{\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right)_{new}}{\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right)_{Flood}} \right) \right]} \right\}^{1/3} \quad (18)$$

$$\frac{\Delta P}{\Delta Z} = \frac{\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{dry}}{\left[1 - (0.614 + 71.35 S)h_L\right]^5} \quad (19)$$

6.- Checar la convergencia:

$$\frac{\Delta P}{\Delta Z} \neq \left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{new} \quad \text{entonces} \quad \left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{new} = \left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right) \quad \text{Si:} \quad \text{Ir al paso 5} \quad (20)$$

$$\text{Si:} \quad \frac{\Delta P}{\Delta Z} \approx \left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{new} \quad \text{parar} \quad (21)$$

En 1990 cuando el modelo SRP II fue desarrollado, no se contaba con datos completos (caída de presión y transferencia de masa) para empaques estructurados de cerámica, ni de plástico, ni para altas presiones en los de metal (más de 5 bars).

El ITC generó un modelo que pudiera predecir la transferencia de masa en los diferentes tipos de material con los que se construyen los empaques estructurados, tomando en cuenta bajas y altas presiones de operación.

Uresti Meléndez (1993) y Cerino Córdoba (1995) experimentaron con dos tamaños diferentes de empaques estructurados de cerámica: Flexeramic 28 y Flexeramic 48.

El autor de esta tesis, utilizó empaques estructurados de plástico Mellapak 250Y, realizando destilaciones a reflujo total y a presión atmosférica con el sistema ciclohexano / heptano.

CAPITULO III

TRABAJO EXPERIMENTAL

3.1 Trabajo experimental

Este trabajo se llevó a cabo en una columna de destilación de acero inoxidable, con un diámetro interno de 0.245 metros y una altura de empaque estructurado de plástico (Mellapak 250Y) de 2.75 metros. En la Figura 2 se muestra el equipo básico. La destilación binaria se llevó a cabo a reflujo total y presión atmosférica usando mezclas equimolares de ciclohexano y n-heptano.

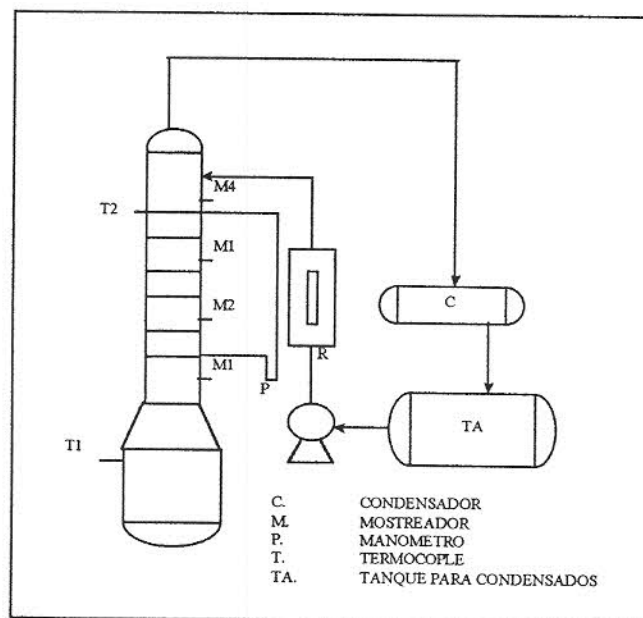


Figura 2. Columna de destilación

En el desarrollo del modelo general se utilizan los datos experimentales obtenidos en la columna de destilación que se ha descrito. También se necesitan las propiedades geométricas de los empaques y las propiedades físicas de los sistemas utilizados para la generación de los parámetros necesarios para el modelo.

Las características de los empaques y las propiedades físicas de los sistemas mencionados y los del sistema aire-agua son mostrados en las Tablas 4 y 5.

TABLA 4. Dimensiones para empaques estructurados de metal, cerámica y polipropileno

Datos de boletines informativos de Koch Engineering Co. (1989) y Sulzer Chemtech.(1991)

	Flexipac 2 FL 2	Flexeramic 28 F-28	Flexeramic 48 F-48	Flexeramic 88 F-88	Polipropileno Mellapak 250Y PPM250Y
Superficie del empaque a_p (m^2/m^3)	233.0	282.15	157.5	101.7	250.0
Lado corrugado S (m)	0.018	0.0120	0.022	0.044	0.0135
Fracción de huecos ϵ (adimensional)	0.95	0.70	0.74	0.85	0.92
Ángulo del canal θ (Grados)	45	45	45	45	45

TABLA 5. Propiedades físicas de los sistemas utilizados

Datos tomados de Spigel y Meier (1987), Cerino Córdoba (1995), y Fitz y col. (1995)

sistema	P bar	ρ_L kg/m ³	ρ_G kg/m ³	μ_L kg/m/s	μ_G kg/m/s	D_L m ² /s	D_G m ² /s	σ N/m	λ
clorobenceno /etilbenceno	0.05	925.0	0.35	4.11e-4	7.6e-6	4.33e-9	28.0e-6	0.027	1.05
clorobenceno /etilbenceno	0.10	927.0	0.39	4.01e-4	7.82e-6	4.42e-9	27.33e-6	0.026	1.05
clorobenceno /etilbenceno	0.40	905.0	2.00	3.2e-4	8.5e-6	6.0e-9	15.0e-6	0.022	1.04
clorobenceno /etilbenceno	0.96	858.0	3.26	2.50e-4	9.37e-6	7.55e-9	4.09e-6	0.018	1.04
metanol / etanol	1.00	756.0	1.20	4.50e-4	8.5e-6	4.0e-9	9.10e-6	0.031	1.1
airé / agua	1.00	1000	1.30	1.0e-3	18.0e-6			0.072	
ciclohexano / n- heptano	1.00	625.0	3.36	3.01e-4	7.58e-6	4.9e-9	4.30e-6	0.014	0.978
isobutano / n- butano	6.90	523.0	17.0	11e-5	8.4e-6	1.05e-8	0.797e-6	0.0073	1.3
isobutano / n- butano	11.4	487.0	30.0	8.8e-5	9.0e-6	1.38e-8	0.549e-6	0.0048	1.23
isobutano / n- butano	20.7	426.0	58.0	6.2e-5	9.8e-6	2.08e-8	0.356e-6	0.0021	1.15
isobutano / n- butano	27.2	383.0	85.0	4.9e-5	10.2e-6	2.68e-8	0.291e-6	0.0011	1.10

El procedimiento para la operación de la columna de destilación a reflujo total se anexa en el Apéndice 1.

Cabe hacer mención que para los empaques estructurados de plástico, la temperatura del líquido nunca excedió los 195 °F en ninguna de las pruebas; sin embargo, el empaque estructurado de polipropileno fue parcialmente destruido después de varias corridas. Se especula que el daño fue debido a los cambios de temperatura durante las etapas de arranque y paro de la columna de destilación. Entonces para mantener la integridad de los empaques estructurados de polipropileno se recomienda que la temperatura no exceda los 150° F.

Para la determinación de las concentraciones se utilizó como método analítico la refractometría.

CAPITULO IV

DESARROLLO DEL MODELO

4.1. Modelo general para empaques estructurados de metal, cerámica y plástico.

Los empaques estructurados Flexeramic que están hechos de cerámica y los Mellapak 250Y que están hechos de polipropileno, fueron utilizados para extender el modelo general a estos materiales.

Se sabe que el material del empaque puede afectar la fracción y la forma en la que la fase líquida humedece la superficie sólida del empaque, lo anterior fue tomado en cuenta cuando se desarrollo el modelo para predecir el comportamiento de los empaques metálicos.

Aprovechando los datos con empaque estructurado de cerámica generados por Uresti (1993) y por Cerino (1995), y los obtenidos en este trabajo con empaque estructurado de plástico, la principal contribución de este estudio es proponer un modelo general para el diseño de columnas de destilación con empaques estructurados de metal, cerámica y plástico.

El modelo es una generalización de las Tablas 2 y 3, pero especificando los parámetros A_1 , A_2 , B_1 , B_2 , σ_{ref} , C_1 , C_2 , D_1 , y D_2 , que difieren para cada material de empaque. En la Tabla 6 se muestran las relaciones de estos parámetros y su utilización en las ecuaciones del modelo generalizado designado como E_{GM} que posteriormente será definido.

Los datos de caída de presión fueron obtenidos experimentalmente por la compañía Koch para Flexeramic 28, 48, y 88 y reportados en su boletín de

Koch KCP-1 (1989), y el Boletín de Sulzer Chemtech No. 22.13.06..4-XI (1991) para el empaque estructurado de polipropileno. Para ambos empaques se utilizó el sistema aire-agua a presión atmosférica.

TABLA 6. Parámetros necesarios para el desarrollo del modelo general para empaques de metal, cerámica y plástico.

Símbolo	usado para el calculo de:		E c. No.
A ₁ y A ₂	F _t	corrección del factor para el holdup	(E _{GM} -13)
	a/a _p	relación de las áreas interfacial y de empaque	(E _{GM} -6)
B ₁ , B ₂ , y σ _{ref}	cos (γ)	capacidad de humectabilidad del empaque	(E _{GM} -10) (E _{GM} -11)
C ₁ y C ₂	(ΔP/ΔZ) _{dry}	caída de presión seca	(E _{GM} -12)
D ₁ y D ₂	(ΔP/ΔZ)	caída de presión irrigada	(E _{GM} -16)

Uno de los problemas que se encontró al usar el modelo general, fue el uso de un valor único de la caída de presión en inundación (ΔP/ΔZ)_{flood}, en la Ecuación (E_{GM}-15), Bravo y col. (1992) reportan valores entre 900 y 1200 Pa/m.

Cuando se usa el valor menor, la curva (ΔP/ΔZ) contra F_s es más pronunciada y las predicciones de holdup, caída de presión y capacidad máxima parecen ser mejores; pero uno de los problemas al fijar el valor numérico de la caída de presión en inundación en los rangos bajos, es que algunos de los puntos que estaban en el rango de operación eran tomados como inoperables por los cálculos del programa de computación que se desarrolló. De la otra forma, si se asignan valores altos al término (ΔP/ΔZ)_{flood}, entonces la capacidad del empaque es extendida y la curva de caída de presión predicha puede ser más vertical que la real.

Uresti y Rocha (1993) tuvieron el mismo problema, pues ellos eligieron el valor de 2050 Pa/m (2.5 pulgadas de líquido/ft de empaque). El cual en algunos casos no representó el punto de inundación

En los reportes de caída de presión del Boletín KCD-1 (1989) de Kochl, para el Flexeramic y en el Boletín 22.13.06.4-XI (1991) de Sulzer para el Mellapak 250Y de Polipropileno, se observó que la caída de presión irigada contra, el factor F_s para altos flujos volumétricos, necesitan valores elevados de $(\Delta P/\Delta Z)_{flood}$, mientras que se requieren valores menores de $(\Delta P/\Delta Z)_{flood}$ para flujos volumétricos bajos, lo anterior, da la idea de no usar un valor constante para $(\Delta P/\Delta Z)_{flood}$.

McNulty y Hsieh (1982) en un excelente reporte, proveen valores de caída de presión y holdup, para cuatro tamaños de Flexipac, para altos flujos de líquido, ellos reportan valores mayores que 3000 Pa/m sin alcanzar la inundación.

De los datos de McNulty y Hsieh se observó que existía una relación lineal entre la velocidad superficial de la fase líquida y los valores de $(\Delta P/\Delta Z)_{flood}$. Esta observación es contraria a los comentarios de Fair y Bravo (1990) para caídas de presión en el punto de inundación usando el modelo de Stichlmair y col. (1989).

Los datos mencionados se correlacionaron y se propuso la Ecuación (22):

$$\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{flood} = 1500 + 65000 U_{LS} \quad (22)$$

Aplicando esta ecuación, los valores para $(\Delta P/\Delta Z)_{flood}$. Caen en el rango de 1540 y 3300 Pa/m.

Una importante consideración en el modelo general fue el usar la corrección del factor F_t dado por la Ecuación (16) que fue adoptada del trabajo de Shi y Mersmann (1985).

$$\frac{a_e}{a_p} = F_t F_{SE} = \frac{(We_L Fr_L)^{0.15} 0.76 f F_{SE}}{Re_L^{0.2} \varepsilon^{0.6} (1 - 0.93 \cos \gamma) (\sin \theta)^{0.3}} = \frac{(We_L Fr_L)^{0.15} A_1 S^{A_2} F_{SE}}{Re_L^{0.2} \varepsilon^{0.6} (1 - 0.93 \cos \gamma) (\sin \theta)^{0.3}} \quad (23)$$

Este factor es un importante parámetro para la determinación del holdup del líquido con la Ecuación (18) y también es relevante para el cálculo del área interfacial a través de la Ecuación (8).

Shi y Mersmann (1985) dicen que los valores de A_1 y A_2 son función del material del empaque; ellos reportaron valores de estos parámetros para empaques aleatorios de cerámica y plástico.

En este trabajo los valores de A_1 y A_2 fueron calculados basándose en el reporte de caída de presión y transferencia de masa llevado a cabo por Uresti Meléndez (1993), y por Cerino Córdoba (1995) para empaques estructurados de cerámica, y en este estudio se realizaron pruebas para empaques estructurados de polipropileno Mellapak 250Y. La Tabla 7 muestra un resumen de los datos de transferencia de masa obtenidos experimentalmente en el ITC.

Para este modelo y los llamados de segunda generación, los parámetros de transferencia de masa están vinculados con factores hidráulicos. Entonces, antes de, o simultáneamente, al calcular A_1 y A_2 , es necesario determinar la caída de presión seca, la caída de presión irrigada y el holdup total.

Las Tablas 8 y 9 presentan las ecuaciones requeridas para aplicar el modelo general propuesto. Las Ecuaciones (E_{GM}-1) a (E_{GM}-18) representan el modelo general junto con los correspondientes valores de las constantes de la A hasta la D para empaques estructurados de hojas de metal, cerámica y polipropileno.

TABLA 7. Datos Experimentales de HETP para destilación a reflujo total con empaques Flexeramic y Mellapak 250Y de Polipropileno.

No.	Fs	Sistema	Empaque	HETP	HETP calc	% Error
A1	0.55	Metanol/ Etanol	F-28	0.6230*	0.6921	11.1
A2	0.77	Metanol/ Etanol	F-28	0.5956*	0.6705	12.6
A3	0.99	Metanol/ Etanol	F-28	0.5956*	0.6560	10.1
A4	1.22	Metanol/ Etanol	F-28	0.5222*	0.6458	23.70
B1	0.61	Metanol/ Etanol	F-48	1.0280*	1.3213	28.5
B2	0.73	Metanol/ Etanol	F-48	1.1000*	1.3024	18.4
B3	0.85	Metanol/ Etanol	F-48	0.6530*	1.2869	97.1
B4	1.05	Metanol/ Etanol	F-48	0.8960*	1.2672	41.4
C1	0.29	C ₆ / C ₇	F-28	0.4370*	0.4696	07.5
C2	0.46	C ₆ / C ₇	F-28	0.5144*	0.4651	09.6
C3	0.81	C ₆ / C ₇	F-28	0.5610*	0.4601	18.0
C4	2.32	C ₆ / C ₇	F-28	0.6221*	0.4917	21.0
D1	0.31	C ₆ / C ₇	F-48	0.9042*	0.8643	04.4
D2	0.46	C ₆ / C ₇	F-48	0.8904*	0.8684	02.5
D3	0.55	C ₆ / C ₇	F-48	0.8904*	0.8697	02.3
D4	0.69	C ₆ / C ₇	F-48	0.8164*	0.8712	06.7
		Promedio	Flexeramic			19.68
E1	0.36	C ₆ / C ₇	PP-M250Y	0.7397**	0.6782	08.3
E2	0.54	C ₆ / C ₇	PP-M250Y	0.6541**	0.6739	03.0
E3	0.66	C ₆ / C ₇	PP-M250Y	0.7000**	0.6715	04.1
E4	0.74	C ₆ / C ₇	PP-M250Y	0.9359**	0.6700	28.4
E5	1.97	C ₆ / C ₇	PP-M250Y	0.7159**	0.6668	06.9
		Promedio	PP-M250Y			10.14

- Datos de HETP experimentales reportados por Cerino Córdoba (1995)
- ** Datos de HETP experimentales obtenidos en el presente trabajo

TABLA 8. Ecuaciones para predecir el HETP en empaques estructurados de Metal, Cerámica, y Polipropileno

$$\text{HETP} = HTU \left[\frac{\ln \lambda}{\lambda - 1} \right] = [H_G + \lambda H_L] \left[\frac{\ln \lambda}{\lambda - 1} \right] = \left[\frac{U_{GS}}{k_G a_e} + \lambda \frac{U_{LS}}{k_L a_e} \right] \left[\frac{\ln \lambda}{\lambda - 1} \right] \quad (\text{EGM-1})$$

$$k_G = 0.054 \left(\frac{D_G}{S} \right) \left(\frac{(U_{Ge} + U_{Le}) \rho_G S}{\mu_G} \right)^{0.8} \left(\frac{\mu_G}{D_G \rho_G} \right)^{0.33} \quad (\text{EGM-2})$$

$$k_L = 2 \sqrt{\frac{D_L U_{Le}}{\pi S}} \quad (\text{EGM-3})$$

$$U_{Ge} = \frac{U_{GS}}{\varepsilon (1 - h_L) \text{sen} \theta} \quad (\text{EGM-4})$$

$$U_{Le} = \frac{U_{LS}}{\varepsilon h_L \text{sen} \theta} \quad (\text{EGM-5})$$

$$\frac{a_e}{a_p} = \frac{(We_L Fr_L)^{0.15} A_1 S^{A_2} F_{SE}}{\text{Re}_L^{0.2} \varepsilon^{0.6} (1 - 0.93 \cos \gamma) (\text{sen} \theta)^{0.3}} \left[\frac{1.2}{1 + 0.2 \cdot e^{\left(\frac{30 U_{LS}}{2 U_{GS}} \right)}} \right] \quad (\text{EGM-6})$$

$$We_L = \frac{U_{LS}^2 \rho_L S}{\sigma} \quad (\text{EGM-7})$$

$$Fr_L = \frac{U_{LS}^2}{S g} \quad (\text{EGM-8})$$

$$\text{Re}_L = \frac{U_{LS} S \rho_L}{\mu_L} \quad (\text{EGM-9})$$

TABLA 8. Cont. Ecuaciones para predecir el HETP en empaques estructurados de Metal, Cerámica, y Polipropileno

Para empaques estructurados de metal, cerámica y plástico:

$$\cos \gamma = 0.90 \quad \text{Para } \sigma < \sigma_{\text{ref}} \text{ N/m} \quad (\text{E}_{\text{GM}}-10)$$

$$\cos \gamma = B_1 \times 10^{B_2 \sigma} \quad \text{Para } \sigma > \sigma_{\text{ref}} \text{ N/m} \quad (\text{E}_{\text{GM}}-11)$$

TABLA 9. Cálculo de parámetros hidráulicos

1.- Datos: $\rho_L, \rho_G, \mu_L, \mu_G, S, \varepsilon, \theta, U_{LS}, U_{GS}$

2.- Estimar la caída de presión seca :

$$\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{dry} = \left(\frac{\rho_G}{\rho_{air,1bar}}\right)^{0.4} \left(\frac{C_1 \rho_G U_{GS}^2}{S \varepsilon^2 (\sin \theta)^2} + \frac{C_2 \mu_G U_{GS}}{S^2 \varepsilon \sin \theta}\right) \quad (E_{GM-12})$$

3.- Calcular el factor de corrección para el holdup total:

$$F_t = \frac{a_e}{a_p} = \frac{(We_L Fr_L)^{0.15} A_1 S^{A_2}}{Re_L^{0.2} \varepsilon^{0.6} (1 - 0.93 \cos \gamma) (\sin \theta)^{0.3}} \quad (E_{GM-13})$$

4.- Condición inicial para las iteraciones:

$$\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{new} = \left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{dry} \quad (E_{GM-14})$$

5.- Ejecución del proceso de iteración:

$$h_L = \left[\frac{4 F_t}{S} \right]^{2/3} \left\{ \frac{3 \mu_L U_{LS}}{\rho_L \varepsilon \sin \theta g \left[\left(\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_L} \right) \left(1 - \frac{\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right)_{new}}{\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z} \right)_{Flood}} \right) \right]} \right\}^{1/3} \quad (E_{GM-15})$$

$$\frac{\Delta P}{\Delta Z} = \frac{\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{dry}}{[1 - (D_1 + D_2 S) h_L]^5} \quad (E_{GM-16})$$

TABLA 9. Cont. Cálculo de parámetros hidráulicos

6.- Checar convergencia:

Si: $\frac{\Delta P}{\Delta Z} \neq \left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{new}$ entonces $\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{new} = \left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)$ Ir al paso 5 (E_{GM}-17)

Si: $\frac{\Delta P}{\Delta Z} \approx \left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{new}$ Entonces parar (E_{GM}-18)

Los parámetros A_1 , A_2 , B_1 , B_2 , σ_{ref} , C_1 , C_2 , D_1 , y D_2 , que difieren para cada material de empaque utilizados en las Tablas 8 y 9 se muestran en la Tabla 10

TABLA 10. Parámetros necesarios en el desarrollo del modelo general para empaques de metal, cerámica y plástico obtenidos en este trabajo.

MATERIAL	A_1	A_2	B_1	B_2	σ_{ref}	C_1	C_2	D_1	D_2	F_{SE}
Metal	29.12	0.36	5.21	-16.83	0.045	0.17	88.77	0.614	71.3	0.35 Flexipack
Cerámica	11.54	0.36	1.52	-3.51	0.065	0.24	0.0	0.532	92.2	0.46 Flexeramic
Polipropileno	9.51	0.36	10.8	-30.92	0.035	0.13	44.06	0.633	130.9	0.46 PPMellapak

4.1.1. Resultados y discusión de la predicción del modelo para transferencia de masa

La aplicación del modelo general puede ser parcialmente observada en las Figuras 3 a 5: que muestran los valores experimentales y calculados para el HETP en los empaques estructurados de metal, cerámica y polipropileno.

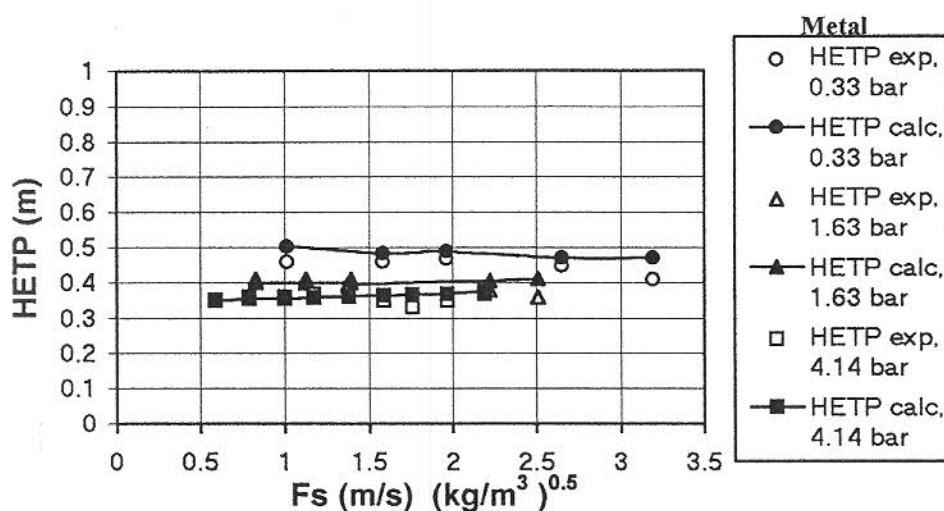


Figura 3. Comparación del HETP calculado y experimental a diferentes presiones para Flexipac 2, usando ciclohexano/n-heptano a reflujo total.

Datos reportados por Spigel y Meier (1987).

De las Figuras 3 a 5 se observa que:

- Los empaques estructurados metálicos dan una eficiencia regular; la eficiencia mejora cuando aumenta la presión, ya que el holdup se incrementa y hay mayor transferencia de masa.

- El empaque de cerámica con más área (Flexeramic 28), provee una eficiencia similar a la de los empaques metálicos pero con 20 por ciento más de área, esto debido a que por el tipo de material, la fracción de huecos es mayor para el empaque de metal.
- El Flexeramic 48 con 0.56 de área con respecto al Flexeramic 28, tiene un valor de HETP mayor en un 83 %.
- El empaque estructurado de Polipropileno debido a la baja capacidad del plástico para humedecerse con la fase líquida, presenta menor eficiencia por unidad de área.

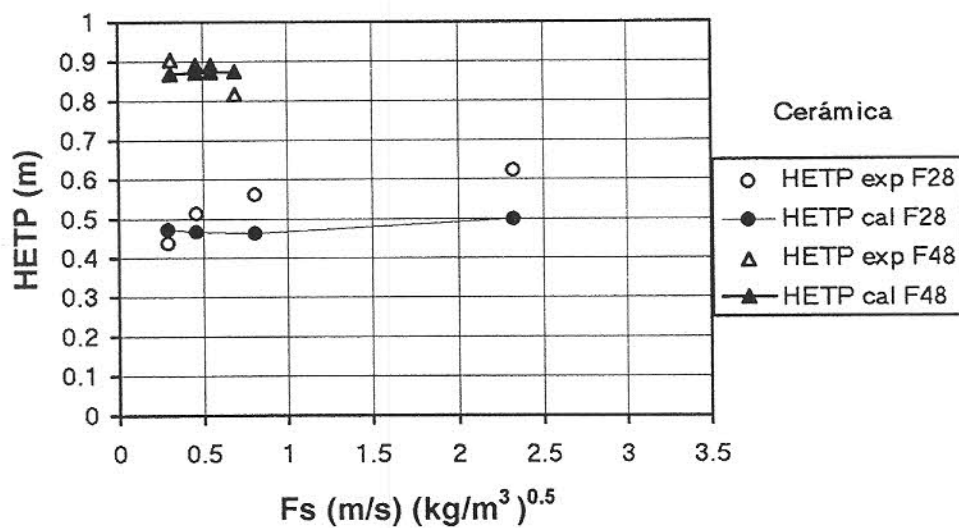


Figura 4. Comparación del HETP calculado y experimental para Flexeramic 28 y 48, usando ciclohexano/n-heptano a reflujo total y presión atmosférica.

Datos reportados por Cerino Córdoba (1995)

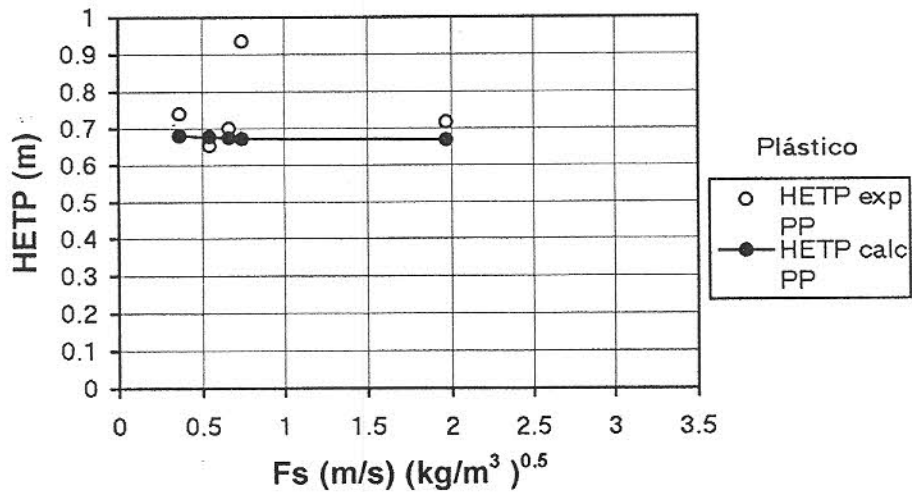


Figura 5. Comparación del HETP calculado y experimental para polipropileno 250Y Mellapak, usando ciclohexano/n-heptano a reflujo total y presión atmosférica.

Datos obtenidos en el presente trabajo

En el Capítulo anterior, se mencionó que los empaques estructurados de plástico, se deformaron a las temperaturas de las pruebas experimentales, que no rebasaron los 190 °F, por lo que se recomienda tomar en cuenta este factor.

La calidad de un modelo depende de varios factores, pero son las comparaciones de sus predicciones contra los datos experimentales a condiciones diferentes, lo que generalmente toma en cuenta el ingeniero para decidir sobre la confiabilidad y selección de un modelo. La Figura 6 muestra la predicción del modelo de transferencia de masa para el HETP de diferentes tamaños de empaques metálicos.

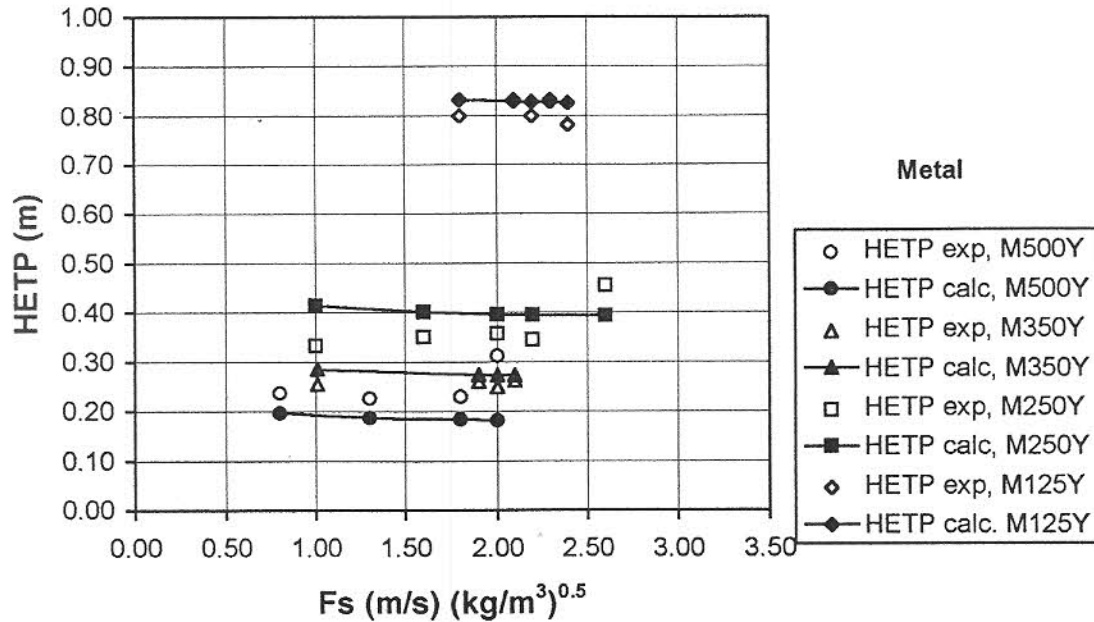


Figura 6. Comparación del HETP calculado y experimental para algunos tamaños de Mellapak, usando clorobenceno/etilbenceno a reflujo total y 0.96 bar.

Datos reportados por Meier y col.(1979).

4.1.2. Comparación de los valores de los mismos parámetros para empaques estructurados de metal, cerámica y plástico.

El factor de corrección para el holdup del líquido F_t dado por la Ecuación (16) es el principal parámetro para las diferentes relaciones a/a_p que afectan los valores de eficiencia en lo predicho y lo medido.

Si se aplican las ecuaciones del modelo general para corridas hipotéticas a reflujo total, con el sistema ciclohexano/n-heptano a presión atmosférica usando el mismo factor F_s de 1.0 para los empaques estructurados Flexipac 2,

Flexeramic 28 y 48, y PP-Mellapak- 250Y, se obtienen los valores comparativos mostrados en la Tabla 11 y en la Figura 7.

TABLA 11. Valores relativos de algunos parámetros para comparar un empaque estructurado de metal (FL2) con un tamaño de empaque estructurado de plástico (PPM250) y dos tamaños de empaques estructurados de cerámica. (F28 Y F48)

Empaque	ΔP_{dry}	h_L	ΔP	F_t	a_e	U_{le}	U_{ge}	K_G	K_L	HETP
FL2	0.28	1.00	0.34	1.00	1.00	0.39	0.75	0.72	0.59	0.43
F28	1.00	0.73	1.00	0.34	0.55	0.67	1.00	1.00	1.00	0.52
F48	0.49	0.49	0.50	0.36	0.33	1.00	0.94	0.89	0.86	1.00
PPM250	0.30	0.57	0.31	0.31	0.46	0.67	0.75	0.78	0.93	0.75

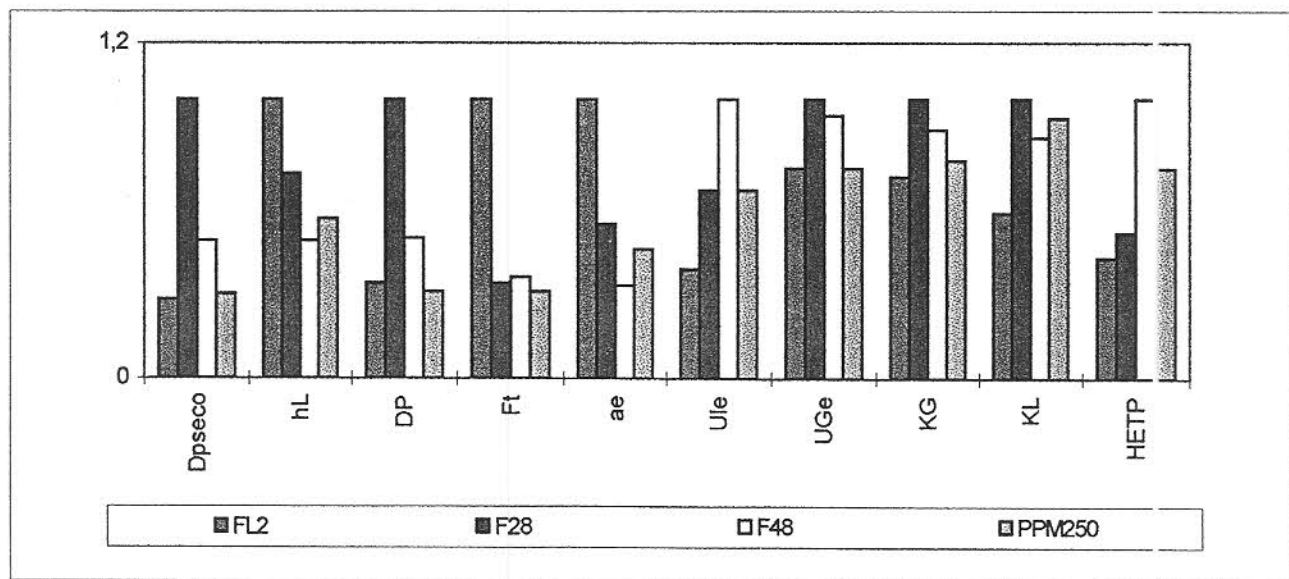


Figura 7. Valores relativos para algunos parámetros importantes cuando un empaque de metal (FL2), es comparado con un tamaño de empaque estructurado de plástico (PPM250) y dos tamaños de empaques estructurados de cerámica (F28 Y F48).

De la Figura 7 se observa:

- La caída de presión seca en los empaques estructurados de metal tiene valores bajos, mientras que los empaques de cerámica F28 tienen valores altos.
- Para el holdup del líquido, el Flexeramic 48 presentó valores bajos y los empaques metálicos valores más altos.
- Para la presión irrigada, los empaques de plástico tiene valores bajos, mientras que el empaque de cerámica pequeño, presenta valores más altos.
- Los empaques de plástico tienen valores pequeños de F_t y los empaques de metal valores más altos.
- Para el área interfacial, los empaques metálicos muestran valores altos mientras que el F48 de cerámica muestra valores bajos.
- Los empaques estructurados metálicos no tienen los más altos valores para velocidades efectivas o para la velocidad de transferencia de masa, por lo que se infiere que la influencia del área efectiva interfacial es más importante; si se fija la eficiencia de los empaques estructurados de metal como un valor base igual a la unidad, entonces el empaque pequeño Flexeramic 28 provee 83 % de la eficiencia del empaque metálico; los empaques estructurados de plástico presentan 57 % de la eficiencia del metálico; el empaque largo de cerámica F48 provee solamente 43 % de la eficiencia del empaque estructurado de metal.

CAPITULO V

MODELO GENERALIZADO A PRESIONES ALTAS

5.1. Modelo generalizado a altas presiones de operación

Fitz y col. (1995) mostraron que el modelo SRP II predice muy mal la caída de presión de las columnas operando a presiones de 6.8 a 27.2 bar. Se menciona que el modelo SRP II fue desarrollado usando datos de 0.05 a 4.14 bar.

Los datos de Fitz y col. (1995) son los primeros disponibles sobre caídas de presión y eficiencias para empaques estructurados metálicos operando a presiones altas. Usando estos datos, en este capítulo se intenta corregir el modelo para operación a altas presiones. Sería conveniente aplicar un análisis más profundo, pero por el momento, sólo se realizan correcciones que permitan aplicar el modelo general para bajas y altas presiones de operación.

5.1.1 Caída de presión operando a alta presiones

De los datos para altas presiones del artículo de Fitz y col.(1995) y aplicando el modelo SRP II, se analizó la causa de la mala predicción en las caídas de presión para sugerir la modificación que nos lleve a una buena predicción. Un análisis similar se hizo para la predicción de los HETP. Ha sido observado por varios investigadores que la eficiencia es mejor (bajos HETP) operando a altas presiones. Ver Figura 3 de este trabajo y los datos reportados por Sakata (1972).

Del análisis se observa que la caída de presión seca predicha fue muy baja y más o menos la misma, para las cuatro presiones de operación: 6.8 bar (100 psia); 11.2 bar (165 psia); 20.7 bar (300 psia); y 27.2 bar (400 psia) reportadas en el artículo de Fitz y col.(1995) También del análisis se observa que cada grupo de caídas de presión podría multiplicarse por un factor el cual se incrementaría al incrementarse la presión de operación.

Analizando las propiedades físicas para encontrar un factor de corrección adecuado, se encontró que la viscosidad y densidad del gas, se incrementan con el aumento de la presión de operación. Se eligió la densidad del gas ya que el incremento es mayor al incrementar la presión.

Por otra parte se hizo una revisión de varios reportes y artículos que contenían datos a diferentes presiones, encontrando también que a bajas presiones de operación la caída de presión era más alta para presiones de operación mayores, lo que corresponde a altos valores de densidad. Esto es claro en el artículo de Meier y col. (1979) para el sistema clorobenceno / etilbenceno a 0.05, 0.10, 0.40, y 1.0 bar.

Stephan y Mayinger (1992) muestran la caída de presión total formada por dos partes, una la contribución de la presión hidrostática (igual a $\rho_G g$), y otra la contribución debida al flujo de ambas fases, en este caso las presiones de operación son de 10 a 20 bars y la densidad del gas es del rango de 38 a 75 kg/m^3 . Para estos casos la contribución de la caída de presión hidrostática es la mitad del total de la caída de presión.

En los casos del sistema de isobutano / n-butano usados por Fitz y col. (1995) las presiones de operación reportadas son 6.9, 11.4, 20.7 y 27.6 bar. La contribución de la caída de presión hidrostática estaría en los rangos de 171 - 833 Pa/m. Sin embargo la caída de presión reportada es del rango de 16 a 1200

Pa/m. Los datos experimentales reportados por Fitz y col. (1995) fueron obtenidos en el Fractionation Research Institute (FRI), y se sabe que el FRI descuenta la caída de presión hidrostática en la medición de los datos, intentando reportar solamente la caída de presión debida al empaque. En este trabajo y en lo futuro adoptaremos la forma del FRI para reportar la caída de presión. La Ecuación (24) muestra la relación entre estos términos:

$$\Delta P_{exp.meas} = \Delta P_{packing} + h_{sc} \quad (24)$$

Donde $\Delta P_{exp.meas}$ es la caída de presión experimental medida, $\Delta P_{packing}$ es la caída de presión debida al empaque y h_{sc} es la caída de presión hidrostática en la columna.

Cuando se desarrolló el modelo SRP II, se utilizaron solamente presiones de operación bajas y la caída de presión hidrostática no se tomo en cuenta, pero se observa que para presiones de operación moderadas y altas es muy importante la caída de presión hidrostática. También, se observó que algunos investigadores (como Stephan y Mayinger, 1992) reportan la caída de presión total medida experimentalmente (la del empaque y la estática).

Rigurosamente, para tomar en cuenta la caída de presión hidrostática ignorada en la determinación de la caída de presión seca por el modelo SRP, debería adicionarse un término a la ecuación, pero en este caso se utiliza un factor como lo indica la Ecuación (25):

$$\left(\frac{\Delta P}{\Delta Z}\right)_{dry,new} = \left(\frac{\rho_G}{\rho_{air,1bar}}\right)^{0.4} \left(\frac{C_1 \rho_G U_{GS}^2}{S \varepsilon^2 (\sin\theta)^2} + \frac{C_2 \mu_G U_{GS}}{S^2 \varepsilon \sin\theta} \right) \quad (25)$$

Con este factor, la caída de presión a bajas presiones y densidad del gas casi coinciden con los valores calculados; pero a altas presiones de operación al usar la ecuación para caída de presión irrigada, la predicción es muy cercana a los valores experimentales como se muestra en la Figura 8.

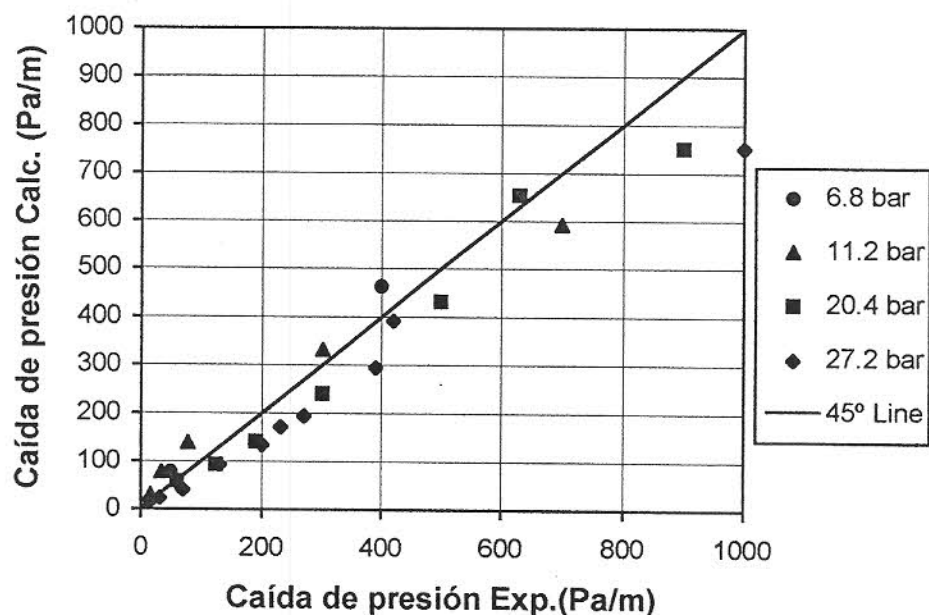


Figura 8. Gráfica de paridad para la caída de presión a diferentes presiones de operación para Mellapak 250Y, usando butano/isobutano a reflujo total y datos de Fitz y col. (1995).

La comparación de los resultados es estimulante y da la posibilidad de una buena predicción para otros sistemas a alta presión.

general, obtenemos predicciones menores de HETP para las pruebas²⁸ reportadas por Fitz y col. (1995) a 6.8, 11.2, 20.4 y 27.2 bar.

Usando los datos experimentales de Fitz y col. para rangos de valores de F_s de 0.6 a 0.8 (m/s)(kg/m³)^{0.5}, se obtienen los resultados mostrados en la Tabla 12.

TABLA 12. Valores numéricos para varios parámetros cuando el modelo general de las Tablas 8 y 9 es aplicado a los datos de Fitz y col. (1995).

Presión (bar)	Promedio HETP (m)	H_L/HTU	a_c/a_p	$U_{LS}/(2 U_{GS})$
6.8	0.30	0.29	0.88	0.0162
11.4	0.28	0.36	1.00	0.0308
20.7	0.40	0.46	1.27	0.0681
27.2	0.60	0.54	1.47	0.1110

Se observa que para el rango de presión de operación por abajo de 10 bar, la eficiencia de los empaques estructurados mejora con el incremento de la presión, para rangos de 10 a 15 bar, probablemente la eficiencia no se afecte con la presión pero para presiones arriba de 15 bar, la eficiencia del empaque estructurado se deteriora.

De los datos numéricos de la Tabla 11, observamos que la resistencia a la transferencia de masa en la fase líquida aumenta en importancia. Para

presiones a vacío o atmosféricas, la contribución del líquido a la resistencia total esta entre 10 y 25 por ciento y por esta razón algunas veces es ignorada (Spiegel y Meier, 1987). Pero es claro que la resistencia de la fase líquida se incrementa importantemente para presiones alta y medias de destilación.

Del ultimo párrafo se ve que a presiones altas el retromezclado es severo y asumir flujo pistón ya no es válido. Entonces, en analogía con el calculo de columnas de discos rotatorios en extracción líquido-líquido (Kosters, 1983) y también con las columnas de destilación (Zuiderweg y Nutter, 1992), la altura de la unidad de transferencia total puede ser correlacionada por la adición de un término debido al mezclado axial. Este término podrá ser la altura del líquido de una unidad de transferencia (H_L); o el factor de corrección puede ser aplicado al área interfacial efectiva.

En cualquiera de los casos el factor de corrección para el retromezclado, seria conectado con el número de Peclet (Pe_Z) o el coeficiente axial de dispersión (E_Z). De acuerdo con Sherwood y col. (1975) y Cussler (1984) estos dos términos están relacionados con la Ecuación (26):

$$Pe_Z = \frac{U_{LS} S}{E_Z} = 2 \quad (26)$$

Entonces el coeficiente para el mezclado axial es:

$$E_Z = \frac{U_{LS} S}{2} \quad (27)$$

Para tener un parámetro adimensional se divide el coeficiente de mezclado axial entre la velocidad superficial de la fase gas por el tamaño del lado corrugado del empaque S , obteniéndose el parámetro ($U_{LS}/2U_{GS}$).

Zuiderweg y Nutter (1992) propusieron la relación (U_{LS}/U_{GS}) para el retromezclado del vapor en empaques aleatorios. Se puede notar que la correlación del parámetro $U_{LS}/(2 U_{GS})$ es la relación de ρ_G/ρ_L .

5.1.3 Postulación del retromezclado y la correlación por el decremento del área interfacial efectiva.

Del cálculo a_e/a_p a altas presiones mostrado en la Tabla 11, se ve que el área efectiva del empaque excede el área del empaque. Mientras esto puede explicarse por la formación de olas y gotas de líquido dispersas en la fase gas, la ecuación matemática del modelo considera que el flujo del líquido descendiendo en la columna solamente es la película sobre las hojas de empaque. Usando los datos de Fitz y col. (1995), para la separación de butano e iso-butano, se inserta el factor de corrección que decrementará el valor de la relación a_e/a_p pero solamente a altas presiones. Para desarrollar el factor de corrección se utiliza la relación de las velocidades superficiales de la fase líquida y gas, esta relación viene de considerar el retromezclado y el hecho de que el número de Peclet para flujos a través de lechos empacados es muy cercano a 2.0.

Usando la citada consideración, el factor de corrección para la relación del área interfacial efectiva y el área del empaque es introducido en (E_{GM-6}) como:

$$\frac{a_e}{a_p} = F_t F_{SE} \left(\frac{1.2}{1 + 0.2 \cdot e^{\left[30 \frac{U_{LS}}{2 \cdot U_{GS}} \right]}} \right) \quad (28)$$

La adición del factor de corrección no afecta mucho el valor calculado de a_e/a_p a bajas presiones donde el valor para $(U_{LS}/2U_{GS})$ está entre el rango 0.0002 a 0.0020 m/s.

Cuando la correlación a_e/a_p es aplicada en la (E_{GM-1}) se obtienen los resultados mostrados en la Figura 9. Observamos que el método predice la inflexión en el HETP a presiones de operación arriba de 15 bar.

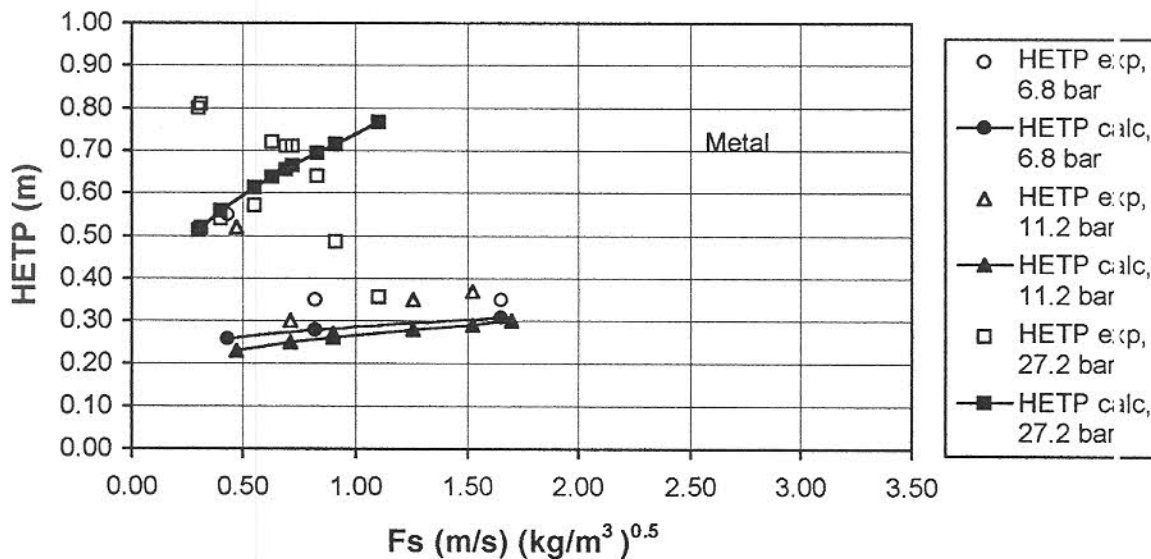


Figura 9. Comparación del HETP calculado y experimental usando el factor de corrección para a_e dado por la Ecuación 28. El sistema es butano/isobutano a diferentes presiones para el Mellapak 250Y, a reflujo total, los datos son de Fitz y col. (1995).

5.2. Efectos de variación sobre propiedades físicas

Debido a que el HETP es una especie de promedio de la eficiencia de la transferencia de masa del empaque, la mayoría de las veces solamente un juego de las propiedades físicas es usado para los cálculos, algunas veces estas propiedades son fijadas a un promedio de temperatura y a un promedio de composición entre el fondo y el domo del lecho empacado. Otros autores prefieren fijar la temperatura del fondo para calcular (a esta temperatura) las propiedades físicas de la mezcla con promedio de la composición.

Para algunos investigadores conocer la variación del HETP con respecto a la temperatura a lo largo de la posición en la columna de destilación es relevante y para encontrar la respuesta, la computadora puede ser usada para estimar la altura equivalente de un plato teórico en cualquier punto de la columna; esto es, calcular un valor de HETP puntual.

Para contestar la pregunta del punto anterior, se hicieron pruebas con el modelo general:

- A) Usando el modelo general para calcular la variación en el HETP del empaque estructurado metálico Flexipac 2 para el sistema C6/nC7, a reflujo total con una presión de 4.14 bar; la altura del empaque de 3.0 metros, y la temperatura en la cabeza y fondo de 283 °F y 303 °F respectivamente.
- B) Usando el modelo general para calcular la variación en el HETP para el mismo sistema pero para una columna que pueda hacer una mejor separación entre ciclohexano y n-pentano a presión atmosférica usando un empaque de cerámica el Flexeramic 28 (F28).

Para el caso A se asumió que en el domo de la columna, las propiedades físicas de la mezcla son las de una fracción mol de 0.99 de C6 a 283 °F, la relación de la línea de equilibrio y de operación ($\lambda=0.753$) calculada del diagrama de la línea de equilibrio a una fracción mol de 0.8817 para ciclohexano. También se supuso que en el fondo de la columna la composición de la mezcla era de 0.99 fracción mol de C7 a 303 °F, con un valor de $\lambda = 1.176$

Los HETP para cada juego de condiciones fue calculada y los resultados se observan en la Figura 10.

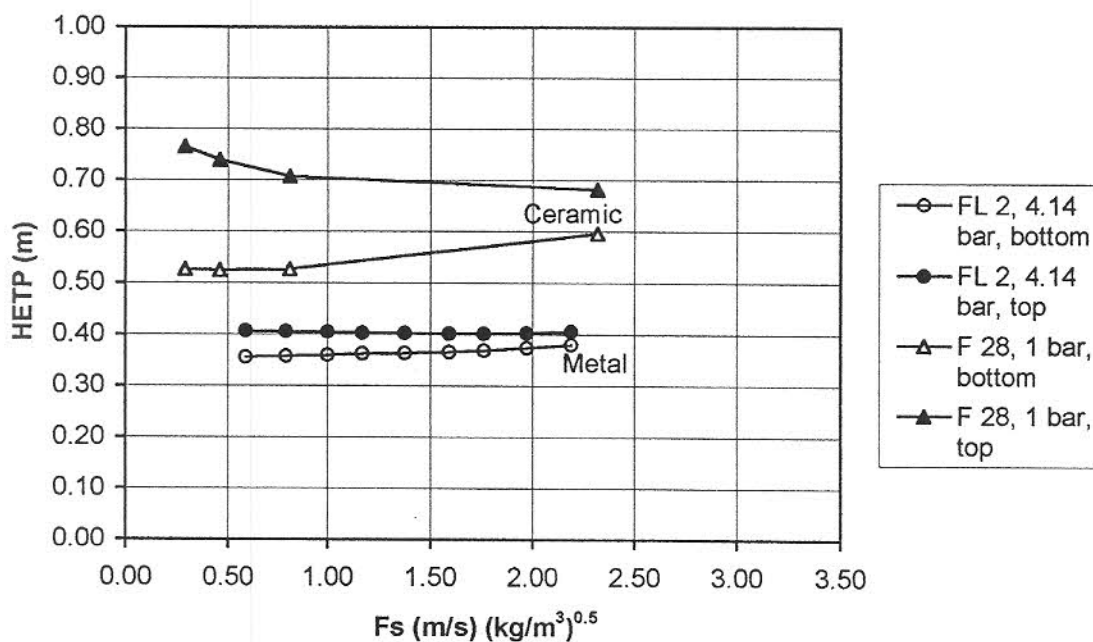


Figura 10. Efecto de las propiedades físicas y variación de la línea de equilibrio sobre el HETP.

Se observa que los valores de HETP en el domo son mayores en aproximadamente un 10 % que los HETP en el fondo de la columna. La eficiencia mayor en el fondo se puede explicar por la baja viscosidad de la mezcla. El rango de la desviación es 0.14 para pruebas con bajos valores de F_s y 0.07 para pruebas a altos valores de F_s . La desviación en los valores calculados de HETP es debida en parte al cambio en las propiedades físicas, pero se observa que la variación de λ es más importante.

En el caso B la variación en la temperatura es alrededor de 32 °F. Esta vez la variación en el HETP es alrededor de 0.25 si la relación de pendientes en las líneas de operación y equilibrio es tomada del diagrama de equilibrio como 0.6 para la cabeza y 1.66 para el fondo. Los resultados de los cálculos del HETP con los valores de cabeza y fondo de la columna de destilación son mostrados en la Figura 10. Donde se observa que la variación en el HETP con las propiedades físicas es afectado por la diferencias de temperatura entre el domo y el fondo y también por los valores de λ que dependen del diagrama de equilibrio.

Entonces, para el análisis o diseño de columnas de destilación con empaques estructurados, se recomienda hacer varios cálculos de HETP y caída de presión a diferentes condiciones de operación en varios puntos de la columna. El número de cálculos depende de las diferencias en la temperatura entre el domo y el fondo y también de la posición de la línea de operación y equilibrio. Pero por lo menos debe incluir un cálculo para el domo y otro para el fondo.

CAPITULO VI

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

6.1. Conclusiones

Los fenómenos de flujo de fluidos y de transferencia de masa en las columnas de destilación con empaques estructurados hechos de diferentes materiales depende principalmente de la interacción entre la fase líquida-gas y de la interacción de la fase líquido-sólido. Adaptando al modelo propuesto la correlación utilizada por Shi y Mersmann (1985) para estimar el área del empaque húmeda, fué posible predecir los parámetros hidráulicos y de transferencia de masa para destilación con empaques estructurados de diferentes materiales, generando entonces un modelo generalizado para el análisis y/o diseño de columnas de destilación con empaques estructurados de metal, cerámica y plástico.

El modelo general propuesto usa las ecuaciones dadas en las Tablas 8 y 9 más la correlación del factor provisto por la Ecuación (28) y un juego de nueve constantes que son específicas para el material del empaque:

- Los parámetros A_1 , y A_2 , para calcular el factor de correlación para el holdup y la relación del área efectiva y área de empaque;
- Los parámetros B_1 , B_2 , y σ_{ref} , para calcular el ángulo de contacto entre la fase líquida y sólida y la fracción del área mojada.
- Los parámetros C_1 , y C_2 para determinar la caída de presión seca.

- Los parámetros D_1 , y D_2 para estimar la caída de presión irrigada

Los parámetros listados han sido calculados usando datos reportados para caídas de presión seca y datos de HETP medidos experimentalmente.

El cálculo de la caída de presión se ha mejorado aplicando un factor de corrección sobre la caída de presión seca y el cálculo de HETP a altas presiones de operación por el uso del factor de corrección que decrece el área interfacial efectiva a altas presiones; de esta manera el modelo propuesto coincide con la tendencia de los datos experimentales.

Para más de 150 puntos experimentales reportados en el banco de datos, utilizando el modelo general para empaques de metal, cerámica y plástico corregidos para altas presiones de operación se obtiene una desviación promedio de 19 por ciento para el HETP y un 25 por ciento para la caída de presión.

Se espera que con el modelo generado en esta tesis, los ingenieros químicos que analizan o diseñan columnas de destilación con este tipo de empaques, puedan realizar su trabajo con mas confianza y exactitud.

6.2 Recomendaciones

Para mejorar el alcance y utilidad del modelo se hacen las siguientes recomendaciones:

Aplicar el modelo general a casos industriales, tratando de cubrir los tres diferentes materiales de construcción de los empaques (metal, plástico y cerámica).

Aplicar el modelo general a otros procesos de separación como la extracción líquido-líquido, la absorción y la desorción, verificando si con los valores diferentes de las propiedades físicas es suficiente para ajustar los datos experimentales en esas nuevas operaciones unitarias, o si es necesario modificar las expresiones de los coeficientes de transferencia de masa.

Adicionar al modelo, la aplicación del balance de energía para que junto con los balances de materia y de momentum se obtenga un modelo generalizado más completo y con una mejor predicción.

REFERENCIAS

- Billet, R. Relations hipbetween Residence Time, Fluid Dynamics and Efficiency in Countercurrent Flow Equipment, *Chem. Eng. Technol.* **1988**, 11, p 139.
- Billet, R. Contribution to Desing and Scale-Up of Packed Columns, *Fat Sci. Technol.* **1990**, 92, 9, p 361.
- Billet, R. Shultes, M. Modeling of pressure drop in packed columns, *Chem. Eng. Technol.* **1991**, 14, p 89.
- Billet, R., Shultes, M. Relationship between pressure drop and mass transfer in two-phase countercurrent-flow columns, *Fat Sci. Technol.* **1992**, 94, 4, p 138.
- Bravo, J. L., Rocha J. A., Fair J. R. Mass transfer in gauze packings, *Hydrocarbon Processing.* **1985**, 64, 1, p 91.
- Bravo, J. L., Rocha J. A., Fair J. R. Pressure drop in structured packings, *Hydrocarbon Processing.* **1986**, 65, 3, p 45.
- Bravo, J. L., Rocha J. A., Fair J. R. A comprehensive model in the performance of columns containing structured packings, *Distillation and Absorption.* **1992** Vol. 1. I. Chem. E. Symp. Ser. No. 128, PA48-A507

Cerino-Córdoba, J. Transferencia de masa en empaques estructurados de cerámica,
Tesis de Maestría, Instituto Tecnológico de Celaya, Agosto, 1995.

Cerino-Córdoba, J. Rocha, J. A. Distillation with ceramic structured packing, *AIChE
Spring Meeting, Houston, Tx., March, 1995*, p 25f

Cussler, E. L. Diffusion: Mass transfer in fluid systems, *Cambridge University Press,
Cambridge, England, 1984.*

Fair, J. R. Selecting fractionating-column internals, *Chemical Engineering*, 1965, July 5

Fair, J. R., Bravo J. L.. Distillation columns containing structured packings, *Chem. Eng.
Prog.* 1990, 82, 1, p 19.

Fitz, C. W., Shariat, M., Spiegel L. Performance of structured packings at high pressure,
AIChE Spring National Meeting, Houston, Texas, March 1995, p 25e

Hanley, B. Dounbobbins B., Bennet D. A unified model for countercurrent vapor/liquid
packed columns. 1 Pressure drop, *Ind. Eng. Chem. Res.* 1994, A33, 1208-1221

Hanley, B. Dounbobbins B., Bennet D. A unified model for countercurrent vapor/liquid
packed columns. 2 Equations for the mass transfer coefficients, mass transfer

area, the HETP, and the dynamic liquid holdup, *Ind. Eng. Chem. Res.* **1994**, B33, 1222-1230

Koch Engineering Co., Bulletin KCD - 1, **1989**

Kosters, W. C. G. Rotating-disk contactor, section 13.1 in *Handbook of Solvent Extraction*; Edited by Lo, T. T.; Baird, M. H. I.; Hanson, C., John Wiley & Sons, **1983**

Kunesh, J. G., Shariat, A., Packing efficiency on a commercial scale with good reflux distribution, *AIChE Spring National Meeting, Houston, Tx., March, 1993*.

McNulty, K., Hsieh, C. L., Hydraulic performance and efficiency of Koch Flexipac structured packing, *AIChE National Meeting, Los Angeles, Ca., Nov., 1982*

Meier W., Hunkeler, R., Socker, D., Performance of the new regular tower packing "MELLAPAK", *I. Chem. Eng. Symp. Ser.* **1979**, 56, p. 3.3/1- 3.3/17

Robbins, L. A., Improve pressure drop prediction with a new correlation, *Chem. Eng. Prog.* **1991**, 87, 5, 87.

Rocha, J. A., Bravo, J. L., Fair, J. R., Distillation columns containing structured packings:

A comprehensive model for their performance. 1. Hydraulic models, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **1993-A**, Vol. 32, No. 4, 641-651,

Rocha, J. A., Escamilla, E. M., Martínez, G. Basic design of distillation columns filled

with metallic structured packings, *Gas Separation & Purification*, **1993-B**, 7, 1, p 57-61,

Rocha, J. A., Bravo, J. L., Fair, J. R. Distillation columns containing structured packings:

A comprehensive model for their performance. 2. Mass transfer model, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **1996**, 35, 5, p 1660-1667,

Sakata, M. Test of 1000, 250, and 70 mm diameter columns with Koch sulzer packing;

plant test report No. 22, *Fractionation Research Inc. S. Pasadena, Calif., Feb. 15, 1972.*

Sherwood, T. K., Pigford, R. L., Wilke, C. R. *Mass Transfer*, Mc Graw Hill, **1975**

Shi, M., Mersmann, G. Effective interfacial areas in packed columns, *Ger. Chem. Eng.*

1985, 8, p 87

Stephan, M., Mayinger, F. Experimental and analytical study of countercurrent flow

limitation in vertical gas/liquid flows, *Chem. Eng. Technol.* **1992**, 15, p 51-62.

Stichlmair, J., Bravo, J. L., Fair, J. R. General model for prediction of pressure drop and capacity of countercurrent gas/liquid packed columns, *Gas Sep. & Purif.* **1989** 3, p 19.

Sulzer Chemtech. Bulletin 22.13.06.4-XI, **1991**

Uresti-Meléndez, J. Empaque Estructurado de Cerámica, *Tesis de Maestría, Instituto Tecnológico de Celaya, México, April, 1993.*

Uresti-Meléndez, Rocha, J.A. Pressure Drop in Ceramic Structured Packing, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **1993**, 32, 10, p 2247-2253.

Zuiderweg, F. J., Nutter, D. E. Evidence of vapor backmixing in packed columns in the case of high pressure distillation, , Distillation and Absorption. *Inst. of Chem. Eng. Symposium* **1992**. 128, 13, p A481