

ISSN 1665-2738

Revista Mexicana de Ingeniería Química

Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química, A.C.



Volumen 5, suplemento 1, Noviembre 2006

La **REVISTA MEXICANA DE INGENIERÍA QUÍMICA** es una publicación de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química, A.C. (AMIDIQ).

Se edita cuatrimestralmente en la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Av. San Rafael Atlixco No. 186, Col. La Vicentina, Iztapalapa. CP 09340. México, D.F.

Tiraje 1000 ejemplares. ISSN 1665-2738.

Certificado de Reserva del Uso Exclusivo del Título No. 04-2002-050209594700-102, expedido por el Instituto Nacional del Derecho de Autor el 2 de mayo del 2002.

Derechos Reservados. Universidad Autónoma Metropolitana, 2002. Prolongación Canal de Miramontes No. 3855, Ex-Hacienda de San Juan de Dios, Tlalpan, CP 14387. México, D.F.

Certificado de Licitud de Título No. 12238.

Certificado de Licitud del Contenido No. 8891.

Editor Responsable: Dr. Tomás Viveros-García.

Impreso en México por Impresos América. Av. Hidalgo # 46 San Vicente Chicolopan, Edo. de México. Tel. 0445522814012

Nombre y domicilio del distribuidor: Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa. Av. San Rafael Atlixco No. 186. Col. La Vicentina, Iztapalapa. CP 09340. México, D.F.

E-mail: amidiq@xanum.uam.mx

La versión electrónica de la Revista Mexicana de Ingeniería Química puede consultarse en:
<http://www.iq.itc.mx/rmiq/rmiq.htm>

(Indizado en/Indexed in: Chemical Abstracts; Periódica; Latindex)
RMIQ pertenece al Índice de Revistas Mexicanas de Investigación Científica y Tecnológica del CONACYT

Vol. 5, Supl. 1 (2006)

Suscripciones:

Envíe giro postal o cheque a nombre de la "Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química, A.C." a:

Dr. Eduardo Jaime Vernon Carter
Universidad Autónoma Metropolitana-I
Área de Ingeniería Química
Edificio "T" 247
Av. San Rafael Atlixco No. 186
Col. Vicentina-Iztapalapa, México
Tel: (55) 58044648/51 Ext. 221
Fax: (55) 58044900
e- Mail: jvc@xanum.uam.mx

Suscripción Anual (2005)	Instituciones
Nacional: \$ 350 M. N.	Nacional:
\$1,500.00	
Extranjero \$ 35 USD	Extranjero \$ 135 USD

Portada: En el Lecho / Técnica Gouche.
Autor; Francisco Castro Pacheco, año 1944.

REVISTA MEXICANA DE INGENIERÍA QUÍMICA

Publicación de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química, A.C.

La **REVISTA MEXICANA DE INGENIERÍA QUÍMICA** publica artículos de investigación originales, con el fin de promover la rápida divulgación de investigaciones significantes en las varias disciplinas que abarca la Ingeniería Química y sus interfaces con otras disciplinas de la Ingeniería. Los temas incluidos son: Termodinámica, Catálisis y Reactores, Control, Simulación, Seguridad, Diseño de Procesos, Biotecnología, Tecnología de Alimentos, Ingeniería Ambiental, Cinética de Materiales, Matemáticas Aplicadas, y Educación.

EDITORES

Dr. J. Alberto Ochoa-Tapia

Dr. E. Jaime Vernon-Carter

Dr. Tomás Viveros-García

EDITOR TÉCNICO

Francisco J. Valdés-Parada

EDICIÓN INTERNET

Dr. Richart Vázquez-Román

COMITÉ EDITORIAL NACIONAL

Eduardo Barzana-García
*Departamento de Alimentos y Biotecnología.
Universidad Nacional Autónoma de México.*

Cesar I. Beristain-Guevara
*Instituto de Ciencias Básicas
Universidad Veracruzana.*

Eduardo Mendizábal-Mijares
*Departamento de Ingeniería Química.
Universidad de Guadalajara.*

Edgar Moctezuma-Velázquez
*Facultad de Ciencias Químicas. Universidad
Autónoma de San Luis Potosí.*

Roberto Olayo
*Departamento de Física. Universidad
Autónoma Metropolitana.*

Ramiro Rico-Martínez
*Departamento de Ingeniería Química. Instituto
Tecnológico de Celaya.*

Arturo Sánchez
*Departamento de Ingeniería Eléctrica y
Computación. Centro de Investigaciones y
Estudios Avanzados de IPN (Guadalajara).*

Jorge F. Toro-Vázquez
*Facultad de Ciencias Químicas. Universidad
Autónoma de San Luis Potosí.*

COMITÉ EDITORIAL INTERNACIONAL

Antonio Monzón
*Departamento de Ingeniería Química y
Ambiental. Universidad de Zaragoza. España.*

Eduardo Sáez
*Department of Chemical & Environmental
Engineering. University of Arizona. EUA.*

Hugo de Lasa
*Chemical Reactor Engineering Center.
University of Western Ontario. Canada.*

John Villadsen
*BioCentrum-DTU. Technical University of
Denmark. Dinamarca.*

Gustavo V. Barbosa-Cánovas
*Biological Systems Engineering Department.
Washington State University. EUA.*

Jesús Santamaría
*Departamento de Ingeniería Química y
Ambiental. Universidad de Zaragoza. España.*

Malcolm C. Bourne
*New York State Agricultural Experiment
Station. Cornell University. EUA.*

Michel Vrinat
*Institut de Recherches sur la Catalyse.
Francia.*

Ramón Cerro
*Chemical and Materials
Engineering Department University of
Alabama in Huntsville. EUA.*

Roberto Guzmán
*Department of Chemical &
Environmental Engineering. University of
Arizona. EUA.*

Stephen Whitaker
*Department of Chemical Engineering and
Material Science. University of
California at Davis. EUA.*

Lester Kershenbaum
*Department of Chemical
Engineering and Chemical
Technology. Imperial College,
University of London. Reino Unido*

Revista Mexicana de Ingeniería Química

CONTENIDO

Volumen 5, suplemento 1, 2006

- 1 Monitoreo en línea de un bioreactor continuo empleando observadores de modo deslizante
(On-line monitoring of continuous bioreactor using sliding-mode observers)
R. Aguilar-López, G. Soto-Cortés y M.I. Neria-González
- 5 Operación y rediseño de una tecnología para el tratamiento de aguas residuales en Cuernavaca
(Technology's operation and redesign for a wastewater treatment technology in Cuernavaca)
M. A. Braulio-Villalobos, E. A. Sandoval-Silva y J. U. Aréchiga-Viramontes
- 11 Interacciones molde-hidroxiapatita durante el vaciado de una aleación base cobalto biocompatible
(Mold-hydroxyapatite interactions during the casting of a biocompatible cobalt base alloy)
J.C. Escobedo-Bocardo, J.C. Ortiz-Cuellar, J. M. Almanza-Robles, D.A. Cortés-Hernández y M. A. Escobedo-Bocardo
- 15 Modelación atmosférica de la calidad del aire en la ciudad de Chihuahua.
(Chihuahua city air quality atmospheric modeling)
V. Rodríguez-Rosales, J. Parra-Berumen, A. Campos-Trujillo, A. De la Peña-Arellano, J. Rodríguez-Rosales y S. Valle-Cervantes
- 23 Tratamiento fermentativo-químico-mecánico del bagazo de maguey (*Agave Tequilana Weber*) para su aplicación en papel hecho a mano
(Fermentative-chemical and mechanical treatment of agave bagasse (*Agave Tequilana Weber*) for its application in hand crafted paper)
T. Escoto-García, E. M. Vivanco-Castellanos, M. G. Lomelí-Ramírez y A. Arias-García
- 29 Obtención de materiales compuestos a base de desechos vegetales y polietileno de alta densidad
(Preparation of composite materials from vegetal wastes and high density polyethylene)
R.H. Cruz-Estrada, P. Fuentes-Carrillo, O. Martínez-Domínguez, G. Canché-Escamilla y C. García-Gómez
- 35 Rapidez de secado reducida: una aplicación al secado convectivo de plátano *Roatán*
(Reduced drying rate: an application to convective drying of banana variety *Roatán*)
S. Sandoval-Torres, J. Rodríguez-Ramírez, L. Méndez-Lagunas y J. Sánchez-Ramírez
- 39 Obtención y caracterización de materiales compuestos de fibras de la "piña" de henequén y polipropileno
(Obtention and characterization of composites of henequen "pineapple" fibers and polypropylene)
R. J. Balam-Cocom, S. Duarte-Aranda y G. Canché-Escamilla
- 45 Un estudio sobre hidratos de metano tipo II a temperatura ambiente con dinámica molecular
(A study of type II methane hydrates at room temperature from molecular dynamics)
F. Castillo-Borja, R. Vázquez-Román y J. F. J. Alvarado

- 51 Comportamiento del aguacate Hass liofilizado durante la operación de rehidratación
(The behavior of freeze-dried Hass avocado during the rehydration process)
E. Arriola-Guevara, T. García-Herrera, G. M. Guatemala-Morales, J. Nungaray-Arellano, O. González-Reynoso y J.C. Ruíz-Gómez
- 57 Escalamiento del proceso de secado de bagazo de caña
(Scaling up the drying process of sugar cane bagasse)
P. A. Quintana-Hernández, L. E. Poot-Aguilar, G. M. Martínez-González y A. J. Castro-Montoya
- 67 Estudio experimental y numérico de la morfología de mezclas PS/PEAD preparadas por extrusión
(Experimental and numerical study of the morphology of PS/HDPE blends prepared by extrusion)
D. Ramírez-Arreola, D. Rodrigue y R. González-Núñez
- 79 Deshidratación de isopropanol con circonia superácida
(Dehydration of isopropanol with superacid circonia)
R. Fuentes-Ramírez, F. J. Romero-Ledesma, M. Martínez-Rosales y J. Romero
- 85 Caracterización de la absorción de Cu, Ni y Zn por el médano (*S. kali*) para propósitos de fitorremediación
(Characterization of Cu, Ni and Zn uptake in tumbleweed (*S. kali*) for phytoremediation purposes)
G. de la Rosa, J. R. Peralta-Videa, J. G. Parsons, G. Cruz-Jimenez, I. Cano-Aguilera y J. L. Gardea-Torresdey
- 93 Efecto de la configuración de redes en el área total de intercambio de calor en sistemas de enfriamiento
(Effect of the network arrangement on the total heat transfer surface area in cooling systems)
A. Morales-Fuentes, M. Picón-Núñez y M. Martínez-García
- 101 Simulación de la columna de destilación petlyuk usando el modelo de etapa en no equilibrio
(Petlyuk distillation column simulation by using a nonequilibrium stage model)
E. F. Abad-Zárate, J. G. Segovia-Hernández, S. Hernández y A. R. Uribe-Ramírez
- 109 Efecto de la derivación del reflujo en destilación discontinua
(Reflux derivation effect on batch distillation)
J. C. Zavala-Loría, A. V. Córdova-Quiroz, J. C. Robles-Heredia, F. Anguebes-Franseschi, A. Narváez-García y N. Elvira-Antonio
- 115 Diseño de procesos de destilación reactiva en equilibrio: producción de MTBE y metil-acetato
(Equilibrium reactive distillation processes design: MTBE and methyl-acetate production)
O. Sánchez-Daza, E. Ortiz-Muñoz y C. Luna-Ortega
- 121 Aplicación de técnicas de colocación en el diseño de columnas de destilación petlyuk
(Application of collocation techniques to the design of petlyuk distillation columns)
M. Vaca, A. Jiménez-Gutiérrez y R. Monroy-Loperena
- 129 Diseño de procesos de destilación reactiva bajo control cinético caso: metátesis de penteno
(Design of kinetically controlled reactive reactive distillation process case: pentene methathesis)
O. Sánchez-Daza, E. S. Pérez-Cisneros, E. Ortiz-Muñoz y C. Luna-Ortega

- 137 Estudio de sistemas de destilación térmicamente acoplados con reacción química
(Study of thermally coupled distillation systems with chemical reactions)
F. O. Barroso-Muñoz, S. Hernández -Castro, J. G. Segovia-Hernández y A. F. Aguilera-Alvarado
- 143 Análisis de superficies y actividad catalítica de catalizadores de Ni, Co, Ru/WO₃, MoO₃/SiO₂
(Surface analysis and catalytic activity of catalysts of Ni, Co, Ru/WO₃, MoO₃/SiO₂)
P. Bartolo-Pérez, F. Becerra-Gutiérrez, F. Huerta y R. Rangel
- 147 Método simplificado de cálculo de orden de reacción para una reacción homogénea de un solo reactivo
(Simple method to calculate the reaction order in a homogeneous one reactant reaction)
J. Ramírez-Flores, R. Fuentes-Ramírez y E. Rubio-Rosas
- 151 Diseño conceptual de un reactor para la producción de alcóxidos de silicio mediante aproximación geométrica en la zona de alcance
(Conceptual stage in the chemical reactor design to obtain silicon alcoxides using the attainable region approach)
J. G. Zavala-Oseguera, A.F. Aguilera y J. Cervantes
- 157 Estudio comparativo de la hidroconversión de aromáticos C8 sobre catalizadores Pt/mordenita y Pt/SiO₂-Al₂O₃
(Comparative study of the hydroconversion of C9 aromatics over Pt/mordenite and Pt/SiO₂-Al₂O₃)
H. González-Rodríguez, E. Ramírez-Álvarez, J. Ramírez-Solís, J. L. Rico-Cerda y J. Lara-Romero
- 167 Modelo no acoplado de un reactor electroquímico tubular para la remoción de cromo hexavalente
(Uncoupled model of a tubular electrochemical reactor for hexavalent chromium removal)
G. Soto-Cortés, R. Aguilar-López y F. Rivera-Trejo
- 173 Influencia de las interacciones electrostáticas sobre la transición entre el espesamiento y el adelgazamiento al corte de soluciones micelares de CTAT
(Influence of electrostatic interactions on transitions from shear thickening to shear thinning behavior of CTAT micellar solutions)
N. Tepale, E. R. Macías, J.I. Escalante, F. Bautista, J.F.A. Soltero, O. Manero y J. E. Puig
- 177 Detección de fallas en un proceso continuo utilizando descomposición de valores singulares
(Faults detection in a continuous process using singular value decomposition)
C.A. García-Rodríguez y S. Valle-Cervantes
- 183 Uso de los wavelets para identificar el comportamiento de un proceso
(On use of wavelets for identify process performance)
H. I. Olmos-Castillo

(Indizado en/Indexed in: Chemical Abstracts; Periódica; Latindex)

**RMIQ pertenece al Índice de Revistas Mexicanas de Investigación
Científica y Tecnológica del CONACYT**

SIMULACIÓN DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN PETLYUK USANDO EL MODELO DE ETAPA EN NO EQUILIBRIO

PETLYUK DISTILLATION COLUMN SIMULATION BY USING A NONEQUILIBRIUM STAGE MODEL

E. F. Abad-Zárate, J. G. Segovia-Hernández*, S. Hernández y A. R. Uribe-Ramírez

Universidad de Guanajuato. Facultad de Química, Noria Alta s/n, Guanajuato, Gto., 36050, México.

Recibido 9 de Junio 2005; Aceptado 4 de Diciembre 2005

Resumen

En este trabajo se analiza la columna de destilación Petlyuk considerando los modelos de etapa en equilibrio y no equilibrio. Las simulaciones rigurosas fueron realizadas usando el modulo RATEFRAC de Aspen Plus™ para la separación de una mezcla ternaria. De acuerdo al modelo de equilibrio, el diseño de la columna Petlyuk requiere que el componente intermedio sea extraído del punto máximo en el perfil de composición de este componente en la columna principal. Se encontró que, para el componente intermedio, la transferencia de masa ocurre de la fase vapor a la fase líquida de la parte superior de la columna a la etapa donde la corriente lateral es extraída, de este punto la transferencia de masa ocurre en dirección opuesta. Este punto, considerando el modelo de etapa en no equilibrio, corresponde a la etapa en la cual la velocidad de transferencia de masa total es cero. Para el caso de dos platos por segmento, se encontró que las cargas térmicas predichas por el modelo de equilibrio son significativamente mas bajas que las obtenidas usando el modelo de no equilibrio. Lo cual es consistente con resultados previos reportados. Sin embargo, es importante decir que ambos modelos predicen importantes ahorros de energía.

Palabras clave: modelo de no equilibrio, ahorro de energía, columna Petlyuk.

Abstract

A Petlyuk distillation column, considering equilibrium and nonequilibrium stage models, was studied. Rigorous simulations were conducted by using Aspen Plus™ RATEFRAC Module for the separation of ternary mixtures. According to the equilibrium model, the energy-efficient design of the Petlyuk column requires that the intermediate component be extracted from the maximum point in the composition profile of the intermediate component in the main column. It was found that, for the intermediate component, mass transfer occurs from the vapour to the liquid phase from the top of the column to the stage where the sidestream is extracted, from this point mass transfer occurs in the opposite direction. This point, considering the nonequilibrium model, corresponds to the stage in which the net mass transfer rate is zero. For the case of two segments per stage, it was found that the heat duties predicted by the equilibrium model are significantly lower than those obtained by using the nonequilibrium model, which is consistent with previous reported results. However, it is important to say that despite of the higher energy duty predicted by the nonequilibrium model, both models predict significant energy savings.

Keywords: nonequilibrium distillation model, energy savings, Petlyuk column.

1. Introducción

La destilación es la operación de separación mas ampliamente usada para la mayoría de las mezclas de fluidos. Desafortunadamente, las columnas de destilación no solo requieren una gran cantidad de energía para lograr la separación deseada (Tedder y Rudd, 1978) sino también esta técnica de separación es muy ineficiente en su uso debido a su baja eficiencia termodinámica (Flores y col., 2003). Como resultado, la búsqueda de esquemas de destilación energéticamente eficientes es un reto actual en ingeniería de procesos. Una manera de

reducir la demanda de energía en destilación es usando secuencias de destilación térmicamente acopladas. Un importante esfuerzo se ha enfocado en el desarrollo de nuevos diseños y métodos de optimización para columnas de destilación térmicamente acopladas, las cuales pueden proporcionar ahorros de energía de arriba del 30 % en el costo total anual para la separación de algunas mezclas multicomponentes, en comparación con las secuencias de destilación clásicas basadas en columnas convencionales (Triantafyllou y Smith, 1992; Hernández y Jiménez, 1999; Hernández y col., 2003; Rong y col., 2000; Blancarte-Palacios y

*Autor para la correspondencia: E-mail: gsegovia@quijote.ugto.mx
Tel: (473) 73 20006 ext 8142, Fax: (473) 73 20006 ext 8139

col., 2003; Agrawal, 2000; Rong y col., 2003). Tales secuencias de destilación acopladas usan acoplamientos térmicos que pueden ser implementadas eliminando un rehervidor o un condensador e introduciendo corrientes de reciclo en la fase vapor o en la fase líquida respectivamente. La secuencia de destilación térmicamente acoplada más importante es la columna Petlyuk (con acoplamiento térmico total) que usa un prefraccionador unido por dos corrientes de reciclo (Fig. 1). Esta secuencia de destilación ha sido implementada en algunas industrias químicas a través del uso de una sola coraza y una pared divisoria, y los ahorros reportados en los costos de energía y capital han sido de alrededor de 30 % (Kaibel y Schoenmarkers, 2002). La eficiencia termodinámica de estas columnas se ha atribuido a la ausencia de remezclado en la columna principal; por ejemplo, la corriente lateral es colocada donde el valor de concentración máximo del perfil composición del componente intermedio está localizada (Triantafyllou y Smith, 1992; Hernández y col., 2003). Métodos de diseño para la columna petlyuk deben tomar esto en cuenta para garantizar la reducción del consumo de energía.

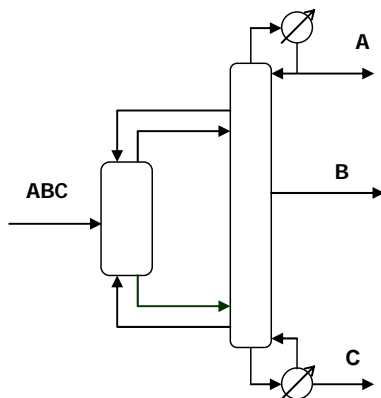


Fig. 1. Columna de destilación Petlyuk

La mayor parte de los trabajos relacionados al diseño, optimización y control de columnas de destilación usan la aproximación del modelo de equilibrio, obteniendo, para el caso de la columna Petlyuk, ahorros de energía arriba del 50 %. Sin embargo, la aproximación del modelo de no equilibrio no se ha hecho hasta ahora para el estudio de la columna de destilación Petlyuk. Como resultado, en este trabajo se lleva a cabo la simulación de esta columna, usando un modelo riguroso de etapa en no equilibrio para entender su comportamiento en estado estable.

Las ecuaciones básicas para el modelo de no equilibrio pueden ser encontradas por otra parte en (Seader y Henley, 1998). Estas ecuaciones incluyen balances de masa en cada fase, balances de energía en cada fase, relaciones de equilibrio, velocidad de transferencia de masa en la fase vapor, velocidad de transferencia de masa en la fase líquida, y velocidad

de transferencia de energía. El modelo completo está descrito a detalle en el apéndice A. Para un análisis más profundo sobre el modelo de no equilibrio se puede consultar en (Krishna y Taylor, 1993).

Es importante mencionar que algunos trabajos, considerando el modelo de no equilibrio han sido reportados, pero estos trabajos solo tratan con columnas sencillas. Importantes trabajos fueron reportados por Krishnamurthy y Taylor (1985a; 1985b). Ellos usaron el modelo de etapa en no equilibrio en la simulación de columnas de destilación usando algunas técnicas de solución basadas en el método de Newton. También compararon sus resultados con datos experimentales.

Taylor y col. (2003) extendieron la aplicación de la aproximación del modelo de no equilibrio para el modelamiento de diferentes casos de destilación, y encontraron que esta representación puede llevar a resultados más realistas, aun para destilación compleja, por ejemplo: destilación reactiva, destilación en tres fases, destilación azeotrópica heterogénea, etc.

En este trabajo, se presenta la aplicación del modelo de etapa en no equilibrio para la simulación de la columna Petlyuk. El módulo RATEFRAC de Aspen Plus se usó para obtener los perfiles de composición, velocidades de transferencia de masa y cargas térmicas óptimas para esta columna compleja.

2. Metodología

El diseño eficiente de la columna Petlyuk fue obtenido usando el modelo basado en el equilibrio descrito por Hernández y Jiménez (1999). Brevemente el método es descrito en la Fig. 2. La secuencia de destilación convencional mostrada en la Fig. 2a resulta del uso de los métodos cortos de destilación de Fenske-Underwood-Gilliland, optimizando con el modelo riguroso de etapa en equilibrio incluido en el módulo RADFRAC de Aspen Plus. El número de etapas del prefraccionador mostrado en la Fig. 2b es igual al número de etapas de la columna C1 de la Fig. 2a (Sección 1 y 2), el número total de etapas en la columna principal de la secuencia Petlyuk (Fig. 2b) es igual a la suma de las etapas en la columna C2 (sección 3 y 4) y C3 (sección 5 y 6) mostradas en la Fig. 2a. Las dos corrientes de interconexión son introducidas en la secuencia Petlyuk. Las velocidades de flujo másico de ambas corrientes de reciclo son variadas hasta que el requerimiento mínimo de energía en el rehervidor es encontrado. La estrategia de optimización es explicada en detalle en el trabajo de Hernández y Jiménez, (1999).

3. Caso de estudio

Para asegurar la aplicación del modelo de etapa en no equilibrio, se consideró la separación de una mezcla ternaria de hidrocarburos: n-butano, n-

pentano y n-hexano con fracciones molares de 0.4, 0.2 y 0.4 respectivamente. Recuperaciones de 98.7 %, 98% y 94 % respectivamente fueron obtenidos para cada componente de la mezcla ternaria. Tres diferentes tipos de plato de destilación fueron analizados: de malla, de válvula y de burbuja. Las presiones de operación fueron fijadas para garantizar el uso de agua de enfriamiento en los condensadores. Las condiciones de operación son mostradas en la Tabla 1. Se asumió una caída de presión de 0.68 atm para cada columna.

Tabla 1. Condiciones de operación.

Secuencia Convencional	Columna Petlyuk
Columna C-1	Prefraccionador
Sección 1 = 10	Sección 1 = 10
Sección 2 = 10	Sección 2 = 10
Etapas de alimentación = 11	Etapas de alimentación = 11
Presión alimentación [atm] = 4.21	Presión alimentación [atm] = 4.21
Relación de reflujo = 2.50	
Columna C-2	Columna principal
Sección 3 = 8	Sección 3 = 8
Sección 4 = 8	Sección 4 = 7
Etapas de alimentación = 9	Sección 5 = 9
Presión alimentación [atm] = 4.5	
Relación de reflujo = 0.95	Sección 6 = 7
Columna C-3	Presión alimentación [atm] = 4.5
Sección 5 = 9	Relación de reflujo = 2.41
Sección 4 = 7	
Etapas de alimentación = 10	
Presión alimentación [atm] = 1.37	
Relación de reflujo = 5.42	

4. Resultados

El estudio se llevó a cabo en dos etapas, en la primera parte, el diseño y optimización de la columna Petlyuk fue obtenido usando un modelo riguroso de etapa de equilibrio, mientras que en la segunda parte, el diseño optimizado se probó a través del uso del modelo de etapa en no equilibrio.

Las secciones de platos reportados en la Tabla 1, fueron determinadas a través del uso del método de optimización y diseño reportados en Hernández y Jiménez (1999) asumiendo operación en equilibrio. Cuando el modelo de etapa en no equilibrio se usó para la simulación de la columna Petlyuk, un importante aspecto a notar en la Fig. 3 es que la corriente lateral es obtenida del punto máximo en el perfil de concentración del componente intermedio (etapa 17). Esto garantiza un buen diseño con respecto al consumo de energía (aunque este puede no ser el valor óptimo global).

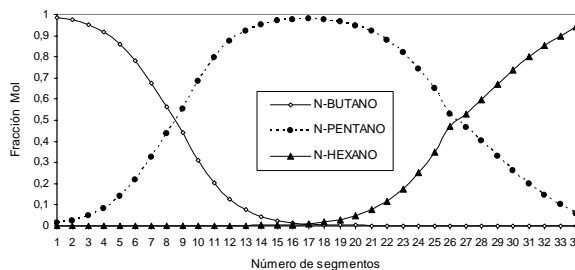


Fig. 3. Perfiles de concentración en la columna Petlyuk (modelo de etapa en no equilibrio)

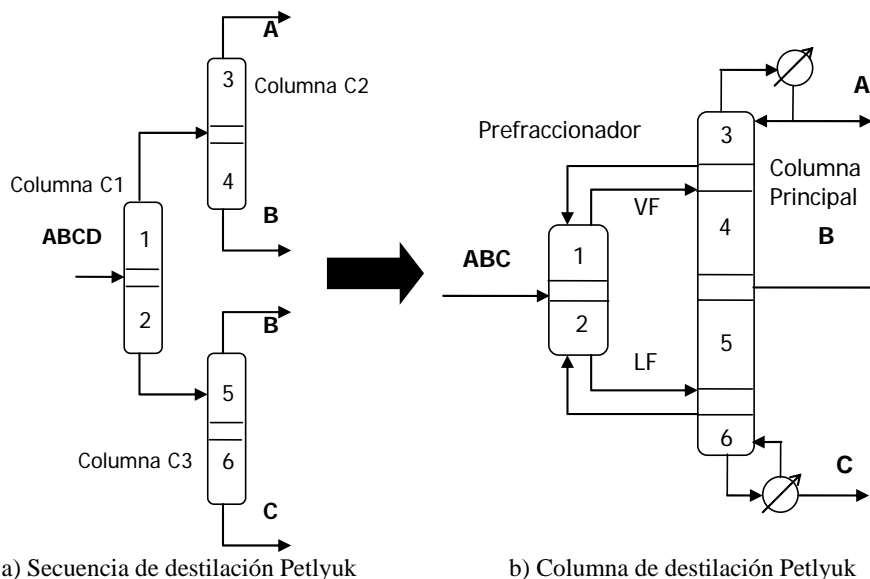


Fig. 2. Estrategia de diseño para la columna Petlyuk de una secuencia de destilación

En la Fig. 4 se muestra la minimización del consumo de energía para las dos corrientes de reciclo usando el modelo de no equilibrio. Es importante notar que la superficie de optimización es muy similar a la obtenida usando el modelo de equilibrio, como se reporta en el trabajo de Jiménez y col. (2002). La optimización fue llevada a cabo considerando dos platos por cada segmento, esto esta de acuerdo con el trabajo de Peng y col. (2002). La Fig. 5 muestra pequeñas diferencia entre los perfiles de composición para el componente intermedio predichas usando lo dos modelos, pero se observa la misma tendencia.

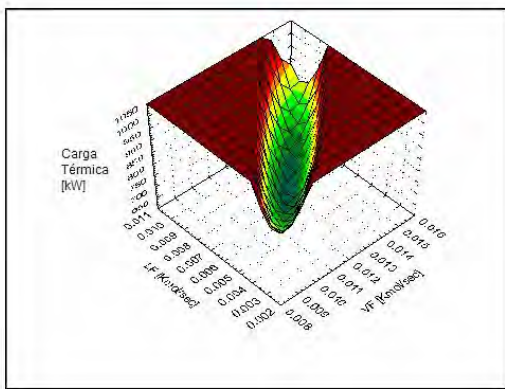


Fig. 4. Optimización de la columna Petlyuk (modelo de no equilibrio)

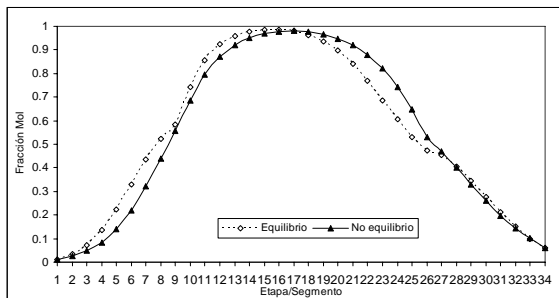


Fig. 5. Perfiles de composición para el componente intermedio considerando los modelos de etapa en equilibrio y no equilibrio.

Algunos aspectos importantes son observados cuando la columna Petlyuk es estudiada con el modelo de no equilibrio. Por ejemplo, en la Fig. 6 se puede observar que la transferencia de masa ocurre de la fase vapor a la fase líquida conforme nos movemos de la parte superior al plato de la corriente lateral, y en la dirección opuesta de este punto al plato del fondo. En la etapa 17, la velocidad de transferencia de masa neta es cero, lo cual corresponde al punto máximo en el perfil de composición mostrado en la Fig. 3. La velocidad de transferencia de masa neta para el componente más ligero ocurre de la fase líquida a la fase vapor en la parte superior de la columna y esta es cero en la parte

baja. Para el caso del componente más pesado, la velocidad de transferencia de masa neta es cero de la parte de superior a la etapa de la corriente lateral, y en el resto de la columna la transferencia es de la fase vapor a la fase líquida.

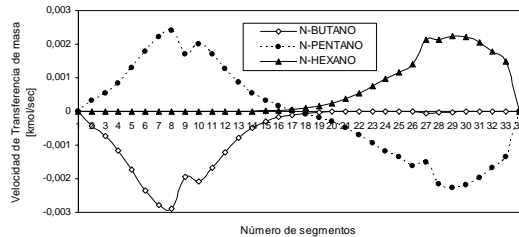


Fig. 6. Velocidades de transferencia de masa en la columna Petlyuk (modelo de etapa en no equilibrio)

El análisis de la eficiencia de plato (Fig. 7) nos muestra que el plato válvula es más eficiente en relación a los otros dos platos. La eficiencia de transferencia de masa se ve reflejada en los resultados de carga térmica, relación de reflujo, ahorro, y diámetros reportados en este trabajo para este tipo de plato ya que se reportan más bajos en comparación con los otros dos. Al comparar las velocidades de transferencia de masa predichas por cada plato se encontró que para el plato válvula se requería una menor transferencia.

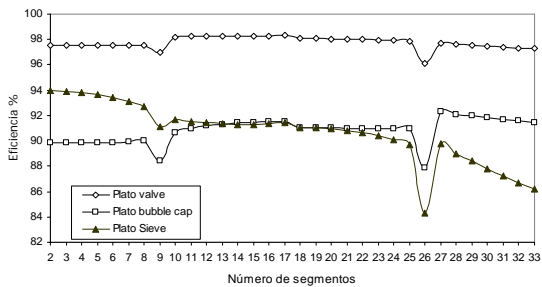


Fig. 7. Eficiencia de plato

Puesto que el área efectiva de transferencia de masa es muy importante en el caso del modelo de etapa en no equilibrio, la influencia del diámetro de la columna en el consumo de energía se muestra en la Fig. 8. Ese comportamiento no es predicho por el modelo de etapa en equilibrio. El diámetro de la columna es importante para la transferencia de masa, debido a que este influye en el área efectiva para la transferencia, al optimizar el diámetro se llega a un punto donde el área (diámetro) permite una mayor eficiencia de transferencia, al alejarse de este punto se observa un aumento en la carga térmica, lo que indica una menor eficiencia de transferencia de masa. En general se observa que la eficiencia de transferencia es dependiente de cada tipo de plato. En la Fig. 9, se puede observar que el consumo de energía es dependiente del tipo de plato,

presentándose el más bajo consumo para el tipo de plato válvula.

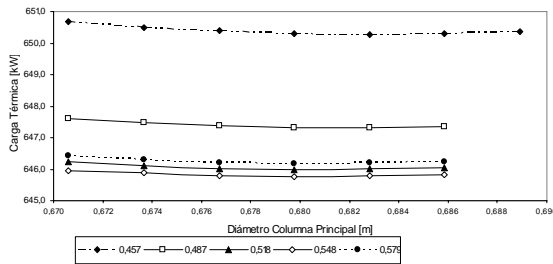


Fig. 8. Influencia del diámetro de la columna en el consumo de energía en la columna Petlyuk.

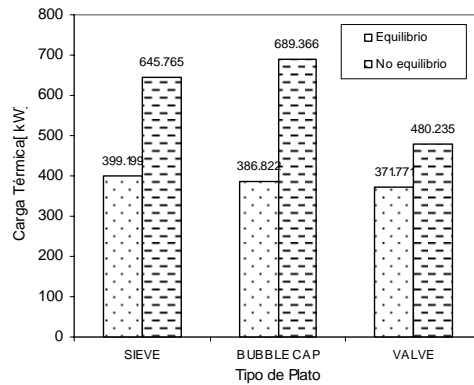


Fig. 9. Efecto del tipo de plato en el consumo de energía.

Otro aspecto importante para ser considerado es el desempeño de la energía en la columna de destilación Petlyuk y la secuencia convencional. En este sentido, el modelo de etapa en equilibrio predice ahorros de energía de arriba del 50 % más para la columnas Petlyuk que por la secuencia convencional. Las cargas térmicas requeridas para la separación, de las secuencias de destilación indicadas en las Figs. 2a y 2b usando ambos modelos el de equilibrio y no equilibrio son mostradas en la Tabla 2. Es importante decir que se utilizaron dos platos por segmento para el modelo de no equilibrio. Los resultados predicen ahorros de 50 % y 40 % para la columna Petlyuk usando el modelo de equilibrio y no equilibrio respectivamente. Las cargas térmicas son significativamente más bajas cuando las secuencias de destilación son modeladas usando el modelo de equilibrio; sin embargo los valores obtenidos usando el modelo de no equilibrio son más realistas.

Tabla 2. Requerimientos de energía (kW) considerando los modelos de etapa en equilibrio y no equilibrio.

Modelo	Secuencia Convencional [kW] (Fig. 2a)	Columna Petlyuk [kW] (Fig. 2b)	Ahorro de Energía (%)
Equilibrio	825,7	399,2	51,6
No-equilibrio	1067,5	645,7	39,5

Conclusiones

En este trabajo se presenta la simulación de una columna de destilación térmicamente acoplada (Petlyuk) y una secuencia convencional para la separación de una mezcla ternaria de n-butano, n-pentano y n-hexano. La simulación fue llevada a cabo usando el modelo de etapa en equilibrio y en no equilibrio para los tipos de platos de malla, válvula y burbuja. Los resultados indican que ambos modelos predicen ahorros de energía significativos y que el consumo de energía depende fuertemente de las corrientes de interconexión. Sin embargo, el modelo de equilibrio predice consumos de energía significativamente más bajos que los obtenidos asumiendo el modelo de no equilibrio, siendo este último el más realista. La dependencia del consumo de energía con el diámetro de la columna de destilación solo puede ser predicho por el modelo de etapa en no equilibrio. Es importante notar que la corriente lateral en la columna principal para la secuencia Petlyuk debe ser colocada donde el punto máximo en el perfil de composición para el componente intermedio está localizado. En este caso del modelo de etapa en no equilibrio, este punto corresponde donde la velocidad de transferencia de masa neta es cero.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo financiero a este proyecto a CONACYT, la Universidad de Guanajuato y PROMEP.

Nomenclatura

- e_j^L velocidad molar de transferencia de calor de componentes en la fase líquida.
- e_j^V velocidad molar de transferencia de calor de componentes en la fase vapor.
- $f_{i,j}^L$ velocidad de flujo molar de la corriente de alimentación del componente i en la fase líquida.
- $f_{i,j}^V$ velocidad de flujo molar de la corriente de alimentación del componente i en la fase vapor.
- H_j^{LF} entalpía molar de la corriente de alimentación en la fase líquida.
- H_j^L entalpía molar del líquido en la etapa j .
- H_{j-1}^L entalpía molar de líquido de la etapa $j-1$.
- H_j^V entalpía molar de vapor en la etapa j .
- H_{j+1}^V entalpía molar de vapor de la etapa $j+1$.
- H_j^{VF} entalpía molar de la corriente de alimentación en la fase vapor.
- $K_{i,j}$ constante de equilibrio.

L_j velocidad de flujo molar de líquido que sale de la etapa j y entra a la etapa de abajo o sale de la columna.

L_{j-1} velocidad de flujo molar de líquido de la etapa $j-1$.

$N_{i,j}$ velocidad de transferencia de masa por componentes.

$N_{i,j}^L$ velocidad molar de transferencia de masa de componentes en la fase líquida.

$N_{i,j}^V$ velocidad molar de transferencia de masa de componentes en la fase vapor.

P_j presión en la etapa j .

P_{j-1} presión de la etapa $j-1$.

P_{j+1} presión de la etapa $j+1$.

Q_j^L velocidad de transferencia de calor en la etapa j en la fase líquida.

Q_j^V velocidad de transferencia de calor en la etapa j en la fase vapor.

r_j^L fracción del líquido que sale de la etapa.

r_j^V fracción del vapor que sale de la etapa

T_j^L temperatura del líquido en la etapa j .

T_{j-1}^L temperatura de líquido de la etapa $j-1$.

T_j^V temperatura del vapor en la etapa j .

T_{j+1}^V temperatura de vapor de la etapa $j+1$.

U_j velocidad de flujo molar de líquido de la corriente lateral.

V_j velocidad de flujo molar de vapor que sale de la etapa y entra a la etapa $j-1$ o sale de la columna.

V_{j+1} velocidad de flujo molar de vapor de la etapa $j+1$.

W_j velocidad de flujo molar de vapor de la corriente lateral.

$x_{i,j}^L$ fracción mol de líquido del componente i de la etapa j en la interfase.

$x_{i,j-1}$ fracción molar del componente i del líquido de la etapa $j-1$.

$y_{i,j}^V$ fracción mol de vapor del componente i de la etapa j en la interfase.

$y_{i,j+1}$ fracción molar del componente i de vapor de la etapa $j+1$.

Referencias

Agrawal, R. (2000). Multieffect Distillation for Thermally Coupled Distillation Configurations. *AIChE Journal* 46, 2211.

Blancarte-Palacios, J. L.; Bautista-Valdés, M. N.; Hernández, S.; Rico-Ramírez, V. y Jiménez, A. (2003). Energy-Efficient Designs of

Thermally Coupled Distillation Sequences for Four-Component Mixtures. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 42, 5157.

Flores, O.A.; Cárdenas, J.C.; Hernández, S. y Rico-Ramírez, V. (2003). Thermodynamic Analysis of Thermally Coupled Distillation Sequences. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 42, 5940.

Hernández, S. y Jiménez, (1999) A. Design of Energy-Efficient Petlyuk Systems. *Computers and Chemical Engineering* 23, 1005.

Hernández, S.; Pereira-Pech, S.; Jiménez, A. y Rico-Ramírez, V. (2003). Energy Efficiency of an Indirect Thermally Coupled Distillation Sequence. *The Canadian Journal of Chemical Engineering* 81, 1087.

Jiménez, A.; Ramírez, N.; Castro, A. y Hernández, S. (2003). Design and Energy Performance of Alternative Schemes to the Petlyuk Distillation Systems. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 81, 518.

Kaibel, G. y Schoenmakers. (2002). H. Process Synthesis and Design in Industrial Practice. Proc. ESCAPE-12 (Computer Aided Process Engineering, 10), Eds. J. Grievink and J.V. Schijndel, Elsevier, Amsterdam, 9.

Krishna, R. y Taylor, R. (1985). A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. Part I: Model Description and Method of Solution. *AIChE Journal* 31, 449.

Krishna, R. y Taylor, R. (2003). A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. Part II: Comparison with Experiment. *AIChE Journal* 31, 456.

Peng, J.; Lextrait, S.; Edgar, T. F. y Eldridge, R. B. (2002). A comparison of Steady-State Equilibrium and Rate-Based Models for Packed Reactive Distillation Columns. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 41, 2735.

Rong, B.; Kraslawski, A. y Nyström, L. (2000) The Synthesis of Thermally Coupled Distillation Flowsheets for Separations of Five-Component Mixtures. *Computers and Chemical Engineering* 24, 247.

Rong, B. G., Kraslawski, A. y Turunen, I. (2003). Synthesis of Heat-Integrated Thermally Coupled Distillation Systems for Multicomponent Separations. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 42, 4329.

Seader J. D.; Henley, E. (1998). Separation Process Principles, John Wiley and Sons, USA.

Taylor, R. y Krishna, R., (1993). *Multicomponent Mass Transfer*, John Wiley & Sons, Inc., New York.

Taylor, R.; Krishna, R. y Kooijman, H. (2003). Real-World Modeling of Distillation. *Chemical Engineering Progress* July, 28

Tedder, D.W. y Rudd, D. F. (1978). Parametric Studies in Industrial Distillation: Part I. Design Comparisons. *AIChE Journal* 24, 303.
 Triantafyllou, C. y Smith, R. (1992). The Design and Optimization of Fully Thermally Coupled Distillation Columns. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 70, 118.

Apéndice A

En el modelo de no equilibrio, los balances de transferencia de masa y energía alrededor de cada etapa (Fig. A) son reemplazados por balances separados para cada fase alrededor de la etapa, la cual puede ser un plato, una colección de platos, o un segmento de una columna empacada. En forma residual las ecuaciones son como siguen:

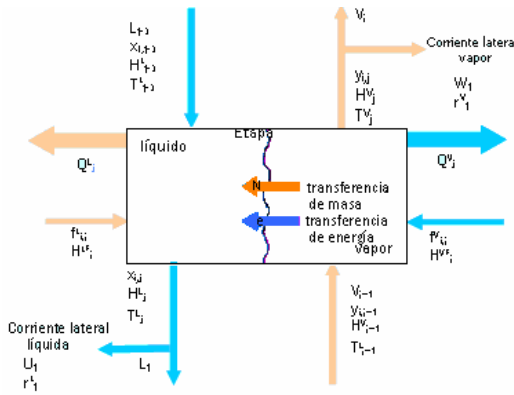


Fig. A. Etapa en no equilibrio

El modelo de no equilibrio esta conformado por las ecuaciones **MERSHQ** donde:

- **M** representa los balances de materia
- **E** representa los balances de energía
- **R** representa las ecuaciones de velocidad de transferencia de masa y calor
- **S** representa las ecuaciones de sumatoria
- **H** representa las ecuaciones hidráulicas para la caída de presión
- **Q** representa las ecuaciones de equilibrio

En forma residual, las ecuaciones son como siguen:

Balance de materia por componente en la fase líquida:

$$M_{i,j}^L \equiv (1+r_j^L)L_j x_{i,j} - L_{j-1} x_{i,j-1} - f_{i,j}^L - N_{i,j}^L = 0, \quad (A.1)$$

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

Balance de materia por componente en la fase vapor:

$$M_{i,j}^V \equiv (1+r_j^V)V_j y_{i,j} - V_{j+1} y_{i,j+1} - f_{i,j}^V + N_{i,j}^V = 0, \quad (A.2)$$

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

Balance de energía en la fase líquida:

$$E_j^L \equiv (1+r_j^L)L_j H_j^L - L_{j-1} H_{j-1}^L - \left(\sum_{i=1}^C f_{i,j}^L \right) H_j^{LF} + Q_j^L - e_j^L = 0 \quad (A.3)$$

Balance de energía en la fase vapor:

$$E_j^V \equiv (1+r_j^V)V_j H_j^V - V_{j+1} H_{j+1}^V - \left(\sum_{i=1}^C f_{i,j}^V \right) H_j^{VF} + Q_j^V + e_j^V = 0 \quad (A.4)$$

Para la interfase líquido-vapor I

$$E_j^I \equiv e_j^V - e_j^L = 0 \quad (A.5)$$

Las Ecs. (A.4) y (A.5) son acopladas por las velocidades de transferencia de masa por componentes:

$$R_{i,j}^L \equiv N_{i,j} - N_{i,j}^L = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (A.6)$$

$$R_{i,j}^V \equiv N_{i,j} - N_{i,j}^V = 0, \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (A.7)$$

Las ecuaciones para las sumatorias de la fracción mol para cada fase son aplicadas a la interfase liquido-vapor:

$$S_j^L \equiv \sum_{i=1}^C x_{i,j}^L - 1 = 0 \quad (A.8)$$

$$S_j^V \equiv \sum_{i=1}^C y_{i,j}^V - 1 = 0 \quad (A.9)$$

El equilibrio de fases para cada componente se asume que existe solo en interfase líquido-vapor:

$$Q_{i,j}^I \equiv K_{i,j} x_{i,j}^L - y_{i,j}^V = 0 \quad i = 1, 2, \dots, C-1 \quad (A.10)$$

Debido a que solo C-1 ecuaciones son escritas para las velocidades de transferencia de masa por componentes en (A.6) y (A.7), los balances de materia totales en la fase en términos de las velocidades de transferencia de masa totales, $N_{T,j}$ se puede adicionar al sistema:

$$M_{T,j}^L \equiv (1+r_j^L)L_j - L_{j-1} - \sum_{i=1}^C f_{i,j}^L - N_{T,j} = 0 \quad (A.11)$$

$$M_{T,j}^V \equiv (1+r_j^V)V_j - V_{j+1} - \sum_{i=1}^C f_{i,j}^V + N_{T,j} = 0 \quad (A.12)$$

donde

$$N_{T,j} = \sum_{i=1}^C N_{i,j} \quad (A.13)$$