
*



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

MAESTRIA EN INGENIERÍA QUÍMICA

**“ANÁLISIS Y MODELADO DEL PROCESO DE DESTILACIÓN POR LOTES PARA
COMPUESTOS FENILAMINICOS”**

**COMO REQUISITO PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA QUÍMICA**

PRESENTA:

ROGELIO FLORES ESTRADA

DIRECTOR:

DR. IRVING ISRAEL RUIZ LÓPEZ

BUAP

H. Puebla de Z., Agosto de 2021

Agradecimientos

Para Mónica que me ha apoyado a lo largo de este camino para alcanzar mis objetivos.

Para mis Padres y hermanos que han sido el ejemplo y la motivación para continuar preparándome profesionalmente.

Para mis amigos y colaboradores que me han brindado su tiempo y comentarios para enriquecer este trabajo.

A la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla que me dio la oportunidad de estudiar la maestría.

Al doctor Irving López que me brindo su orientación, tiempo y paciencia para completar este trabajo.

“Todos los grandes pensamientos son concebidos al caminar”

Resumen

Flores, Estrada Rogelio. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. Mayo 2021. **Análisis y modelado del proceso de destilación por lotes para compuestos fenilamínicos.** Director: Dr. Irving Israel Ruiz López. Codirector: Dr. Nombre1 Nombre2 Paterno Materno.

La destilación por lotes es un proceso de separación ampliamente utilizado en las industrias química, farmacéutica, bioquímica y en general de especialidades donde es necesario obtener la mayor pureza del producto final cumpliendo con las especificaciones de costo y calidad requeridas. En este estudio se analiza el proceso de separación por medio de este tipo de destilación de un componente fenilamínico utilizado en la industria de especialidades químicas para la formulación de aceites lubricantes, donde se buscarán las condiciones de separación (presión y temperatura) para cumplir con la especificación de mercado y posteriormente se diseñará el equipo de recuperación principal (condensador) de cada uno de los cortes de la destilación.

El producto a separar es un componente de mediano peso molecular que como principal característica tiene una presión de vapor muy baja (0.001 kPa a 300 °C), es decir no se considera para fines del estudio que se puede separar, el primer y segundo corte corresponden con componentes mas ligeros que por medio de la destilación se recuperaran para su re-utilización en el proceso. El primer corte es un componente altamente volátil, siendo el solvente donde se lleva a cabo la mezcla, con bajo peso molecular (124 kg/kmol) y alta presión de vapor (227 kPa a 180°C). El segundo corte corresponde con parte del reactivo en exceso de la síntesis que no reaccionó, es de un peso molecular medio (187 kg/kmol) y una presión de vapor baja (3.2 kPa a 180°C).

La estrategia a seguir para el proceso de separación es mantener la carga térmica alimentada al destilador para obtener una velocidad de destilación mas o menos constante a lo largo del proceso, la razón principal es tratar de asemejar las condiciones industriales del proceso donde el área de transferencia del destilador es constante y el flujo del medio de calentamiento se encuentra limitado por la disponibilidad del cabezal de suministro y las válvulas de control de temperatura.

Un aspecto importante de estudio es la obtención de las curvas residuales donde se observará el perfil de composiciones en las fases líquidas y vapor, este tipo de información en algunas ocasiones no se encuentra disponible, ya que se obtiene de experimentos, sin que se complementen con una base teórica. El modelo a utilizar para conocer el proceso de separación es el desarrollado por Doherty y Perkins (1978) que es un trabajo más detallado que el propuesto por Rayleigh (1902).

Una parte importante de este estudio es poder diseñar un equipo de recuperación (condensador) capaz de manejar las dos fracciones. A diferencia de los procesos continuos el diseño de estos equipos es complicado ya que las condiciones de un corte pueden no ser las adecuadas desde el punto de vista termohidráulico para la otra fracción; el criterio utilizado para el diseño del equipo es el correspondiente a la fracción que contenga la mayor carga térmica. Por medio de un simulador de proceso se llevará a cabo el diseño detallado del equipo y con una simulación dinámica se analizará el comportamiento para los diferentes cortes aplicando perturbaciones a las condiciones de diseño, con la finalidad de conocer bajo que condiciones el proceso de destilación será factible que se lleve a cabo cuando por cuestiones de demanda se cambie sus condiciones actuales, se tenga un problema de control o una falla en el equipo (por perdida de área de transferencia de calor o ensuciamiento).

Índice

Resumen	I
Índice de tablas	V
Índice de figuras	VII
Nomenclatura	1
Introducción	1
I Antecedentes	3
1.1 Modelado de procesos	3
1.2 Destilación por lotes	6
1.2.1 Ecuación de Rayleigh	7
1.2.2 Curvas de agotamiento	9
1.2.3 Entalpía latente de vaporización	10
1.2.4 Presión de vapor	11
1.3 Intercambiadores de calor	12
1.3.1 Intercambiadores de tubos y carcasa: detalles de construcción.	12
1.3.1.1 Códigos y estándares de los intercambiadores de calor.	18
1.3.2 Coeficiente global de transferencia de calor	19
1.3.3 Factor de ensuciamiento	21

1.3.3.1	Tubos	23
1.3.4	Velocidad recomendada	27
1.4	Diferencia de temperatura promedio	27
1.5	Compuesto fenilamínicos	29
II	Justificación, objetivos e hipótesis	32
2.1	Justificación	32
2.2	Objetivos	32
2.2.1	General	32
2.2.2	Específicos	32
2.3	Hipótesis	33
III	Materiales y métodos	35
3.1	Descripción del sistema	35
3.2	Consideraciones del modelo	35
3.3	Modelo de destilación simple por lotes	37
3.4	Carga térmica del condensador	45
3.5	Metodología de resolución del equilibrio de la mezcla	48
3.6	Condiciones iniciales del modelo	52
3.7	Propiedades del sistema	53
3.8	Desarrollo a presión y temperatura variable	55
3.9	Diseño del condensador	55
3.9.1	Consideraciones generales	55
3.9.2	Condiciones mecánicas del diseño	57
3.10	Simulación dinámica del proceso	58
IV	Resultados y discusión	62

4.1	Diseño del proceso de destilación a presión atmosférica	62
4.2	Diseño del proceso de destilación a presión y temperatura variable . . .	65
4.3	Diseño del intercambiador de calor principal	69
4.4	Simulación dinámica del proceso de destilación por lotes	81
V	Conclusiones	88
	Bibliografía	89

Índice de tablas

1.1	Nomenclatura para las partes de los intercambiadores de calor.	16
1.2	Coefficientes de transferencia de calor recomendados.	22
1.3	Factores de ensuciamiento (valores recomendados).	24
1.4	Velocidades recomendadas para agua de torre (m/s) y su factor de ensuciamiento ($\text{m}^2\text{K}/\text{kW}$).	27
3.1	Carga inicial al destilador.	52
3.2	Condiciones iniciales de la destilación a presión constante.	53
3.3	Condiciones molares de carga al destilador.	53
3.4	Parámetros de la ecuación de Antoine.	54
3.5	Constantes para el calculo de los calores específicos a presión constante.	54
3.6	Coefficientes para la estimación de la entalpía de vaporización.	54
3.7	Condiciones mecánicas de diseño del condensador.	58
3.8	Condiciones de simulación dinámica.	60
4.1	Condiciones de diseño del condensador para cada corte.	69
4.2	Condiciones de diseño termohidráulico del condensador.	70
4.3	Opciones de configuración del condensador.	71
4.4	Diseño termohidráulico final del condensador.	72
4.5	Información mecánica del condensador.	73
4.6	Separación de mamparas del condensador.	74

Índice de figuras

1.1	Intercambiador de calor tipo BEM.	13
1.2	Intercambiador de calor tipo Tubos en U.	14
1.3	Intercambiador de calor tipo AET.	14
1.4	Intercambiador de calor tipo AES.	14
1.5	Intercambiador de calor tipo AEP.	15
1.6	Intercambiador de calor tipo AKU.	15
1.7	Nomenclatura TEMA para intercambiadores de calor de tubo y coraza.	20
1.8	Arreglos de tubos en intercambiadores de calor.	26
1.9	Figura Factor F_t para un intercambiador de calor en configuración de 2 pasos por la coraza y 4 por los tubos	29
3.1	Representación esquemática del modelo del destilador por lotes.	36
3.2	Diagrama de resolución del modelo a presión constante y temperatura variable.	49
3.3	Diagrama de resolución del modelo a presión y temperatura variable.	51
3.4	Tipo de mampara seleccionada para el condensador.	56
3.5	Diagrama de simulación dinámica.	59
4.1	Perfil de agotamiento del proceso a presión constante.	63
4.2	Perfil de presiones parciales para la destilación a presión constante.	64
4.3	Perfil de agotamiento a presión y temperatura variable del primer corte.	66

4.4	Perfil de agotamiento a presión variable para el segundo corte.	67
4.5	Diagrama de presiones parciales para la destilación a vacío del primer corte.	67
4.6	Perfil de presiones parciales en el destilador para el segundo corte. . . .	68
4.7	Comparativa en la velocidad de agotamiento en el destilador.	68
4.8	Distribución espacial de la carga térmica en el condensador.	77
4.9	Distribución espacial del área de transferencia de calor en el condensador.	77
4.11	Distribución espacial de la velocidad de los vapores en la coraza (sección de ventana).	78
4.10	Distribución espacial del coeficiente de transferencia de calor en el con- densador.	78
4.12	Distribución espacial de la velocidad de los vapores en la coraza (sección de cruces).	79
4.13	Distribución espacial de la temperatura general (lado coraza).	79
4.14	Distribución espacial de la temperatura de película (lado coraza). . . .	80
4.15	Distribución espacial de la temperatura general (lado tubos).	80
4.16	Distribución espacial de la temperatura de película (lado frío).	81
4.17	Rampa velocidad de incremento de flujo para el vapor en el primer corte.	84
4.18	Perfil de incremento de temperatura a la salida del líquido en el conden- sador.	84
4.19	Rampa de incremento de flujo del segundo corte.	85
4.20	Control de temperatura del segundo corte con incremento de flujo del corte 2.	85

4.21	Perfil de flujo de agua con disminución del 50 % de flujo para el corte 1. Tet - Temperatura de entrada de los tubos, Tst - Temperatura de salida de los tubos, Tec - Temperatura de entrada de la coraza, Tsc - Temperatura de salida de la coraza.	86
4.22	Perfil longitudinal de temperaturas en el condensador con reducción de flujo de agua para el corte 1. Tpc, Tpt: Temperaturas de película del lado coraza y lado tubos, respectivamente.	86
4.23	Perfil de reducción de flujo de agua en el condensador para el corte 2. Tet: Temperatura de entrada de los tubos, Tst: Temperatura de salida de los tubos, Tec - Temperatura de entrada de la coraza, Tsc - Temperatura de salida de la coraza.	87
4.24	Perfil longitudinal de temperaturas en el condensador con reducción de flujo de agua del corte 2. Tpc - Temperatura de película del lado coraza, Tpt - temperatura de película lado tubos.	87

Introducción

Actualmente existe una tendencia clara en la industria química global de optimizar los procesos para encontrar las condiciones que permitan obtener los mejores resultados en términos de tiempo, costo y calidad de los productos, lo que aumenta las ganancias de las compañías, reduce el impacto ambiental y mejora la utilización de los recursos. Para ello se han desarrollado diferentes estrategias y herramientas para alcanzar dicho fin, que van desde el modelado hasta la simulación de los procesos, muchos de los procesos se iniciaron hace bastante tiempo cuando el nivel de madurez y disponibilidad de las herramientas no es el que se tiene actualmente, por lo que conforme se analizan estos procesos se identifican áreas de oportunidad y mejora. Cabe mencionar que se considera que cualquier proceso está sujeto a mejora, aun cuando se utilicen herramientas tan sofisticadas como los controles avanzados de proceso propietarios de compañías especializadas en el área, no se puede aseverar que un proceso opera de manera óptima.

En México existe un rezago considerable en el tema de la mejora y optimización de los procesos, principalmente en la industria local, ya que las empresas transnacionales tienen en su mayoría departamentos dedicados a dicha tarea, ya que no se invierte en este tipo de análisis o en algunos casos ni siquiera se desarrolla una ingeniería adecuada para que los procesos sean operados bajo condiciones satisfactorias, de igual manera en el aspecto del desarrollo de infraestructura que pueda brindar este tipo de servicios. En este sentido no se conocen las ventajas de desarrollar los modelos de los procesos para identificar y conocer las variables que afectan su desempeño, por lo que este trabajo está enfocado en una aplicación industrial real donde se analiza y modela el proceso de destilación por lotes de un compuesto fenilamínico para identificar bajo

que condiciones es adecuado operar el proceso, como se debe diseñar su equipo de recuperación principal y se simula de manera dinámica el comportamiento de cada uno de los cortes del proceso para entender la respuesta del sistema cuando existen perturbaciones, que durante la operación es normal que ocurran.

El proceso de destilación por lotes es el más complejo de los procesos de separación por destilación ya que es un proceso completamente dinámico, a pesar de ser el que requiere de menor equipo, en este caso solo se tiene un destilador por lotes sin columna de rectificación, un condensador principal y un tanque de recuperación de fracciones, no se necesita de más ya que el producto a separar consta de tres componentes, el producto principal, el corte ligero y el corte de mediano peso molecular con volatilidades relativas con una orden de magnitud mayor a 2 dígitos por lo que la separación en general es más sencilla.

En el Capítulo I se presentan los fundamentos teóricos a utilizar para el desarrollo del modelo y el diseño del equipo de recuperación principal, se abordan las bases teóricas de la destilación diferencial, modelos existentes de dicha destilación, así como los tipos de intercambiadores de calor, códigos de diseño y sus características. En el Capítulo II se desarrolla el modelo de la destilación y el modelo del diseño del condensador. En el Capítulo III se presenta el cálculo de cada una de los cortes de destilación así como del condensador y la simulación dinámica del proceso. En el Capítulo IV aparece el análisis de los resultados obtenidos tanto del modelo de destilación como del desempeño del sistema de recuperación de cada de corte. En el Capítulo V aparecen las conclusiones de este estudio.

I. Antecedentes

1.1. Modelado de procesos

Modelo

En general se puede definir a un modelo como una representación o descripción matemática de un fenómeno, puede ser generado a partir de observaciones experimentales o formulado por medio de conceptos teóricos. Su utilidad radica en la necesidad de comprender como se ve afectado el fenómeno cuando existen cambios en las diferentes variables que lo componen y poder predecir el comportamiento del mismo.

El modelado de procesos industriales se refiere a la representación matemática de un fenómeno físico y/o químico. Desde las primeras etapas de conceptualización de un proceso industrial se utiliza el modelado, tanto para las pruebas a escala piloto (laboratorio) como para generar la llamada ingeniería conceptual, conforme se madura el proceso se generan diferentes tipos de modelos hasta llegar a la ingeniería básica del mismo.

Sistemas

Es importante definir el tipo de sistema a modelar, se pueden clasificar de la siguiente manera:

- **Sistemas uniformes.** En este tipo de sistemas las propiedades intensivas son idénticas en todo el sistema, es decir, si se analizara un fragmento diferencial del sistema sus propiedades son idénticas y no existen variaciones espaciales, la única variable independiente es el tiempo y se representan por medio de ecuaciones diferenciales ordinarias.

- Sistemas distribuidos. En este tipo de sistemas las propiedades intensivas del sistema son diferentes dependiendo de la ubicación de la materia. En este tipo de sistemas el tiempo y el espacio son variables independientes y se representan por medio de ecuaciones diferenciales parciales.

Los sistemas también se pueden clasificar como:

- Sistemas abiertos. En este tipo de sistemas se intercambia materia y energía.
- Sistemas cerrados. Los sistemas cerrados únicamente intercambian energía sin que exista transferencia de masa.
- Sistemas aislados. En este tipo de sistemas no se transfiere materia ni energía.

Estados

Los sistemas están sujetos a diferentes estados, dependiendo del comportamiento de las propiedades con respecto al tiempo, los estados se pueden clasificar de la siguiente manera:

- Estado estacionario. En este tipo de estados las propiedades del sistema no cambian con respecto al tiempo.
- Estado dinámico. En los procesos dinámicos las propiedades del sistema cambian con respecto al tiempo

Propiedades de un sistema

Las propiedades de un sistema se pueden definir de la siguiente manera:

- Propiedades intensivas. Este tipo de propiedades no dependen de la cantidad de materia que contiene un sistema, ejemplos de este tipo de propiedades son: presión, temperatura, concentración, volumen específico.

- Propiedades extensivas. Las propiedades extensivas son aquellas que dependen de la cantidad de materia de un sistema, ejemplo de estas son: masa, volumen.

Formulación del modelo

La formulación de un modelo obedece a las siguientes etapas de acuerdo con Upreti (2017):

1. Establecer objetivos del modelo. Para la formulación de cualquier modelo es necesario conocer que es lo que motiva para el desarrollo del mismo, que se busca obtener o conocer de las propiedades de un sistema sujeta a uno o más procesos.
2. Descripción del sistema. Con los objetivos definidos es necesario establecer el sistema que se modelará, el comportamiento anticipado de las propiedades del sistema identificará las características del mismo.
3. Establecer las consideraciones que seguirá el modelo. En esta etapa se define el grado de desarrollo que tendrá el modelo, que procesos y subprocesos son considerados o descartados, durante el ciclo de desarrollo del modelo se validarán estas consideraciones.
4. Relación de las propiedades del sistema. En esta etapa las relaciones fundamentales y constitutivas son utilizadas para describir el comportamiento del sistema basándose en los objetivos y consideraciones hechas.
5. Consolidación de ecuaciones resultantes. En esta etapa las ecuaciones obtenidas son revisadas para verificar la consistencia dimensional, se establecen las relaciones constitutivas en su forma de ecuaciones existentes y se establecen las condiciones iniciales y límite basándose en las consideraciones y especificaciones. Finalmente, todos los parámetros necesarios para resolver las ecuaciones son identificados. El conjunto resultante de ecuaciones forma el modelo.

1.2. Destilación por lotes

La destilación por lotes es una operación unitaria ampliamente utilizada en las industrias farmacéuticas, alimenticia, química de alta especialidad y bioquímica donde a una mezcla multicomponente se les separa aquellos componentes o residuos de la síntesis para cumplir una especificación de producto, recuperando en algunas ocasiones el solvente y subproductos del proceso para su posterior utilización en la síntesis o disposición final por regulaciones ambientales (Liu y Peng, 2006). Existe una variedad de configuraciones para la destilación por lotes, para efectos de este estudio se mencionará la destilación diferencial o de una etapa, que corresponde con el arreglo más sencillo de este tipo de destilación, donde se tiene un depósito con calentamiento y se alimenta la mezcla a separar, por la parte superior se tiene un condensador para recuperar cada una de las fracciones, por medio del calentamiento continuo se lleva a cabo la separación por evaporación ya sea a presión constante o variable. Como lo mencionan Doherty y Malone (2001), el proceso de destilación más complejo corresponde con la destilación simple o abierta de una mezcla. El líquido es vaporizado y los vapores son removidos del seno del líquido tan pronto como son formados. Por lo tanto, la composición del líquido cambiará continuamente con el tiempo, debido a que los vapores son más ricos en los componentes más volátiles que el líquido del cual proviene. La trayectoria de la composición del líquido empezando de algunos puntos iniciales es llamada la curva residual; la colección de todas estas curvas para una mezcla dada es llamada el mapa de curvas residuales. Las curvas residuales sirven para determinar la factibilidad de separación de una secuencia de separación (Taylor, Baur, y Krishna, 2004).

La destilación por lotes tiene la ventaja de que es flexible en comparación con la destilación continua, para una mezcla multicomponente de nc componentes se requieren $nc - 1$ columnas para poder separar todos los componentes de la mezcla. Para las

industrias indicadas anteriormente se requiere de un control estricto de calidad que puede ser proporcionado por la destilación por lotes en comparación con una destilación continua, ya que por la naturaleza de los volúmenes manejados en una destilación continua resulta muy complejo tomar una decisión que pueda ajustar los parámetros de calidad de algún producto sin que implique tener una capacidad de almacenamiento muy elevada.

1.2.1. Ecuación de Rayleigh

La ecuación de Rayleigh fue establecida en 1902 por John William Strutt (Lord Rayleigh), es una ecuación teórica que trata con la relación entre los cambios de la composición y la fracción remanente en una solución binaria en un proceso de destilación simple (Matsubaya y Matsuo, 1982).

El trabajo desarrollado por Lord Rayleigh ha sido la base para la mayor parte de los estudios de la destilación diferencial o por lotes; su importancia radica en que fue el primero en discutir el cambio continuo en la composición de la mezcla binaria en la destilación. Las cantidades en moles de los componentes 1 y 2 de una mezcla son n_1 y n_2 , la suma de estos es N y sus respectivas fracciones molares son x_1 y x_2 :

$$n_1 + n_2 = N \tag{1.1}$$

$$\frac{n_1}{N} = x_1 \tag{1.2}$$

$$\frac{n_2}{N} = x_2 \tag{1.3}$$

Cuando una cantidad diferencial dN de una solución es destilada, la fracción del com-

ponente 1 en el destilado (x'_1) y la cantidad en la solución remanente (x_1) no son las mismas en general. Lord Rayleigh puso la relación entre x'_1 y x_1 de la siguiente manera:

$$x'_1 = f(x_1) \quad (1.4)$$

Por otro lado, x'_1 puede ser expresado como

$$x'_1 = \frac{dn_1}{dN} = \frac{d(x_1N)}{dN} \quad (1.5)$$

Combinando las Ecuaciones (1.4) y (1.5) se obtiene

$$\frac{d(x_1N)}{dN} = f(x_1) \quad (1.6)$$

Integrando la Ecuación (1.6) con los valores iniciales de $x_{1,0}$ y N_0 produce

$$\int_{x_{1,0}}^{x_1} \frac{dx_1}{f(x_1) - x_1} = \ln \frac{N}{N_0} \quad (1.7)$$

Aquí se considera

$$x'_1 = f(x_1) = kx_1 \quad (1.8)$$

Combinando las Ecuaciones (1.7) y (1.8) da como resultado

$$\frac{x_1}{x_{1,0}} = \left(\frac{N}{N_0}\right)^{k-1} \quad (1.9)$$

o

$$\ln \frac{x_1}{x_{1,0}} = (k - 1) \ln \frac{N}{N_0} \quad (1.10)$$

Mujtaba (2004) en su denominado modelo tipo 1 de destilación por lotes desarrolla una expresión similar tomando como base la derivación de Rayleigh, pero con la diferencia que la función denominada $f(x_1)$ es igualada con la composición del vapor que sale del destilador (y), se encuentra en equilibrio con la composición del líquido x_1 :

$$\ln \frac{N_0}{N_1} = \int_{x_1}^{x_{1,0}} \frac{dx_1}{y - x_1} \quad (1.11)$$

e introduce el concepto de la volatilidad relativa α de manera constante para determinar la composición molar en el vapor:

$$y = \frac{\alpha x_1}{1 + (\alpha - 1)x_1} \quad (1.12)$$

De acuerdo con Kister (1992) la parte derecha de la Ecuación (1.12) puede ser evaluada por medio de una integración gráfica asumiendo que el vapor y el líquido se encuentran en equilibrio, siempre que el sistema a separar sea ideal o muy cercano a la idealidad, cuando no se comporte de esa manera es necesario realizar mediciones experimentales para obtener las composiciones correspondientes.

1.2.2. Curvas de agotamiento

Con el objetivo de entender mejor el comportamiento de un proceso de separación por destilación en un sistema multicomponente la construcción de las curvas residuales es de gran ayuda. Esto es importante cuando se presentan azeótropos binarios o superiores en una mezcla. Las curvas residuales describen el cambio en la composición de una mezcla (L) en un recipiente por evaporación abierta .

Las curvas residuales pueden determinarse experimentalmente por evaporación abierta garantizando exactamente una etapa de equilibrio. Durante la evaporación, los com-

ponentes menos volátiles son enriquecidos en el recipiente. Con un incremento en la cantidad de componentes pesados en el recipiente, la temperatura se incrementará.

Las curvas residuales también pueden ser calculadas por medio de la integración numérica de la ecuación diferencial de evaporación abierta (ecuación de Rayleigh) si el equilibrio líquido-vapor es conocido (ver Sección 1.2.1).

Los modelos que se han desarrollado para describir las curvas residuales en el proceso de destilación por lotes tienen dos tipos de consideraciones o simplificaciones, el primero corresponde con aquellos basados en el proceso de transferencia de fases, es decir utilizando el equilibrio termodinámico para describir el comportamiento del sistema, en el cuál el vapor que deja el recipiente de destilación se encuentra en equilibrio con el líquido contenido. La segunda clase de consideraciones contempla que el proceso no se encuentra en equilibrio, donde se calcula la transferencia de masa y energía entre las fases explícitamente, este último se representa como un conjunto de ecuaciones diferenciales algebraicas.

De acuerdo con (Taylor y cols., 2004) los dos modelos son consistentes, para fines de este estudio se utilizará el modelo considerando que el sistema obedece al equilibrio termodinámico.

1.2.3. Entalpía latente de vaporización

Es la energía necesaria para hacer el cambio de fase de líquido a vapor. Dependiendo de las características del sistema y el fluido se puede representar de diferentes maneras. Existe una relación termodinámica exacta que describe la relación, con la presión de saturación, los volúmenes de vapor y líquido en estado de saturación, se conoce como la ecuación de Clausius Clapeyron (Gmehling, Kolbe, Kleiber, y Rarey, 2012):

$$\Delta H_v = T(v^v - v^l) \frac{dP^s}{dT} \quad (1.13)$$

donde ΔH_v es la entalpía de vaporización (kJ/kmol), T es la temperatura (K), v^v es el volumen molar de la fase gasosa (m^3/kmol), v^l es el volumen molar del líquido (m^3/kmol) y P^s es la presión de saturación (kPa).

Para gases ideales o a presiones de vacío el volumen del líquido puede ser despreciable y la ecuación se simplifica de la siguiente manera:

$$\Delta H_v = \frac{RT^2}{P^{sat}} \frac{dP^s}{dT} \quad (1.14)$$

donde ΔH_v es la entalpía de vaporización (kJ/kmol), T es la temperatura (K), R es la constante de los gases (8.314 J/mol/K) y P^{sat} es la presión de saturación (kPa).

El término dP^s/dT puede determinarse por medio de las ecuaciones de Wagner, Antoine o alguna regresión matemática adecuada cuando se dispone de datos experimentales.

1.2.4. Presión de vapor

Cuando un líquido se encuentra en equilibrio con su fase vapor la presión resultante de dicho estado termodinámico se le conoce como presión de vapor. Como se aprecia en las ecuaciones de Clapeyron y Wagner, la dependencia de la energía para realizar el cambio de fase de líquido a vapor esta en función de la presión de vapor y la temperatura, esta relación se obtiene comúnmente por medio de la medición experimental de los vapores de estas variables para un determinado sistema. Existen diferentes modelos que partiendo de datos experimentales ajustan los valores para obtener ecuaciones que relacionen el comportamiento del cambio de fase líquido-vapor, la más conocida, por

la cantidad de datos disponibles, la ecuación de Antoine:

$$\ln P^{sat} = A - \left(\frac{B}{T + C} \right) \quad (1.15)$$

donde A , B y C son constantes determinadas experimentalmente, P^{sat} es la presión de vapor expresada en cualquier sistema de unidades de presión y T es la temperatura expresada en cualquier sistema de unidades de temperatura. El punto de ebullición de una sustancia se puede calcular a partir de la relación anterior como la temperatura a la cual se igual su presión de vapor con la presión total del sistema.

1.3. Intercambiadores de calor

En la mayoría de los procesos industriales químicos la transferencia de calor desde y hacia fluidos es una parte primordial de los mismos, el equipo de proceso utilizado para este fin es el intercambiador de calor. Existe una gran variedad de intercambiadores de calor, se pueden clasificar por su construcción o servicio, para el desarrollo de este estudio se tomará en cuenta unicamente el tipo mas utilizado, que es el intercambiador de tubos y coraza.

1.3.1. Intercambiadores de tubos y carcasa: detalles de construcción.

Como se menciona anteriormente el intercambiador de tubo y carcasa es con mucho el equipo de intercambio de calor más común utilizado en las industrias químicas y afines. Sus ventajas son:

1. La configuración ofrece una gran área superficial en un volumen pequeño.

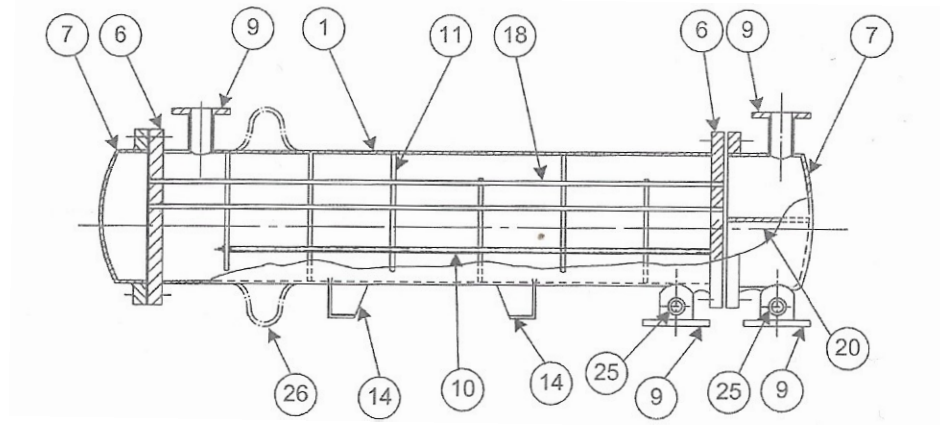


Figura 1.1. Intercambiador de calor tipo BEM. Tomado de Towler (2012).

2. Buen diseño mecánico: capacidad de operar a presión.
3. Técnicas de fabricación bien establecidas.
4. Se pueden utilizar en su construcción numerosos tipos de materiales.
5. Limpieza fácil.
6. Procedimientos de diseño bien establecidos.

Esencialmente, un intercambiador de tubo y carcasa consiste en un haz de tubos encastrados en una carcasa cilíndrica. Los extremos de los tubos se acoplan en unas láminas que separan los fluidos externo e interno del tubo. La carcasa tiene unos deflectores que dirigen el caudal y soportan los tubos. El conjunto de deflectores y tubos se mantiene unido mediante barras de soporte y espaciadores.

En las Figuras 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5 y 1.6 se muestran los principales tipos de intercambiador de tubo y carcasa.

En la Tabla 1.1 se indica la nomenclatura estándar usada para los intercambiadores de tubo y carcasa; los números se refieren a las características mostradas en las Figuras 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5 y 1.6.

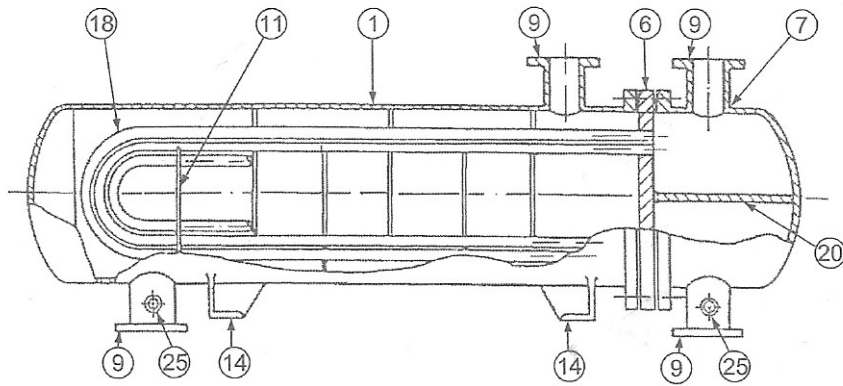


Figura 1.2. Intercambiador de calor tipo Tubos en U. Tomado de Towler (2012).

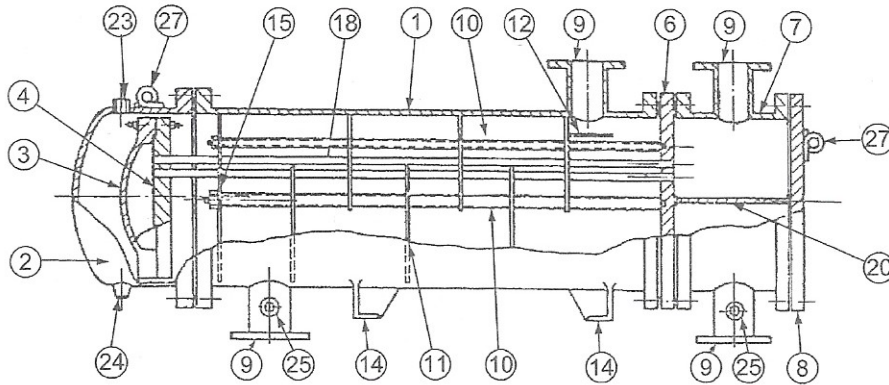


Figura 1.3. Intercambiador de calor tipo AET. Tomado de Towler (2012).

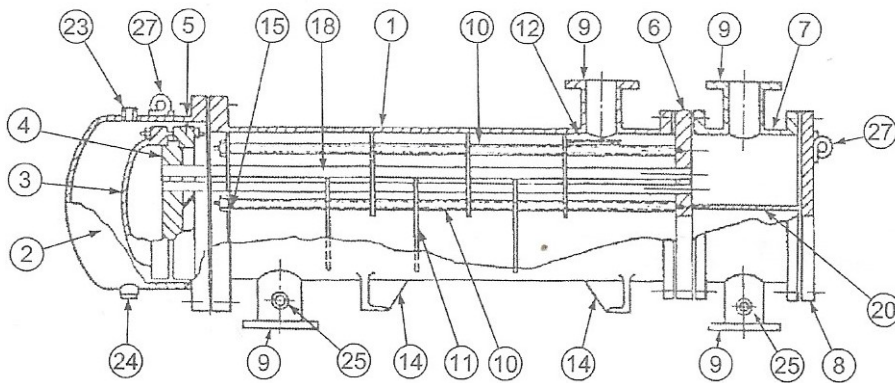


Figura 1.4. Intercambiador de calor tipo AES. Tomado de Towler (2012).

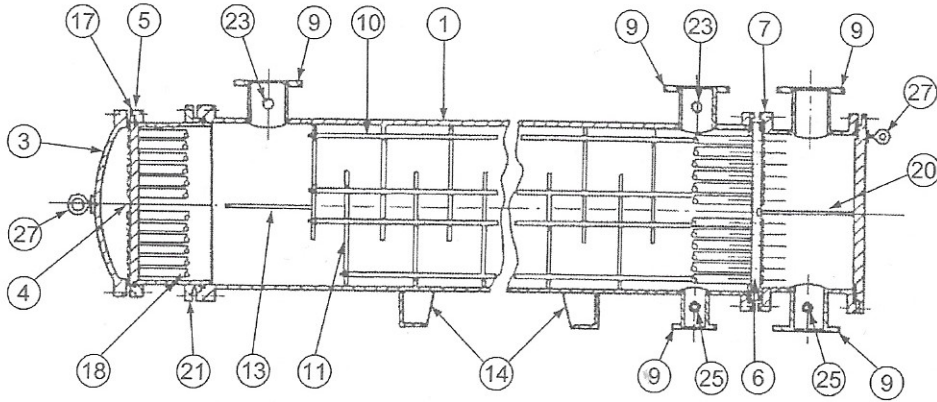


Figura 1.5. Intercambiador de calor tipo AEP. Tomado de Towler (2012).

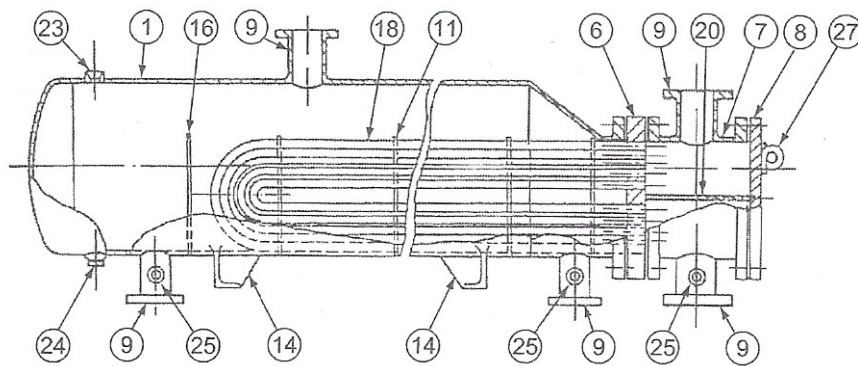


Figura 1.6. Intercambiador de calor tipo AKU. Tomado de Towler (2012).

Tabla 1.1. Nomenclatura para las partes de los intercambiadores de calor.

1. Carcasa.	15. Soporte del cabezal flotante.
2. Cubierta de la carcasa.	16. Rebosadero.
3. Cubierta del cabezal flotante.	17. Anillo de separación.
4. Plato de tubos flotantes.	18. Tubo.
5. Abrazadera anular.	19. Haz de tubos.
6. Placa de tubos fijos (plato de tubos).	20. Partición de paso.
7. Canal (caja final o cabezal).	21. Prensa-estopa del cabezal flotante (prensaestopas relleno).
8. Cubierta del canal.	22. Anillo del prensaestopas del cabezal flotante.
9. Rama (boquilla).	23. Conexión de venteo.
10. Barrera de unión y espaciador.	24. Conexión de drenaje.
11. Deflector de cruz o plato de soporte de tubos.	25. Conexión de ensayo.
12. Deflector de choque.	26. Bucles de expansión.
13. Deflector longitudinal.	27. Anillo de elevación.
14. Soporte de ensayo.	

Tomado de Towler (2012)

El tipo de intercambiador de tubos y carcasa más sencillo y económico es el diseño de placa de tubos fijados mostrados en la Figura. 1.1 (BEM tipo TEMA). Las principales desventajas de este tipo son que no se puede sacar el haz de tubos para su limpieza y no se ha tenido en cuenta la dilatación diferencial de la carcasa y los tubos. Como la carcasa y los tubos estarán a diferentes temperaturas, y pueden ser de diferente material, la dilatación diferencial puede ser considerable por lo que el uso de este tipo está limitado a diferencias de temperaturas hasta de 80°C. Para tener en cuenta la dilatación se puede incluir un bucle en la carcasa (mostrando punteado en la Figura. 1.1) pero únicamente puede utilizarse si las presiones de la carcasa son bajas; hasta aproximadamente 8 bar. En los otros tipos, se fija únicamente un extremo de los tubos y el haz se puede dilatarse libremente.

El tipo tubo en U (haz-U) mostrado en la Figura. 1.2 sólo requiere una lámina de tubo y es más barato que los tipos de cabezal flotante. Este es el tipo de intercambiador TEMA BEU, que se usa ampliamente pero únicamente con fluidos relativamente limpios, ya que los tubos y el haz son difíciles de limpiar. También es más difícil reemplazar un tubo de este tipo.

Los intercambiadores con cabezal interno flotante, Figuras 1.3 y 1.4 (tipo TEMA AET y AES) son más versátiles que los intercambiadores de tubo U y cabezal fijo. Pueden soportar diferencias de temperaturas elevadas y, como los tubos se pueden baquetear de inicio y fin y el haz de tubos se puede desmontar, son más fáciles de limpiar y se pueden usar para líquidos que produzcan incrustaciones. Una desventaja del diseño de este tipo de intercambiador, Figura 1.3, es que el espacio entre los tubos más externo del haz y la carcasa ha de ser mayor que en los diseños tubo-U y fijo para acomodar los bordes de la cabeza flotante, lo que permite que el flujo puente los tubos. El anillo de abrazadera (diseño de brida de partición), Figura 1.4, se usa para

reducir la holgura necesaria. Siempre existirá un peligro de fuga a través de las bridas internas en estos diseños de cabezal flotante.

En los diseños de cabezal externo flotante, Figura 1.5 (tipo TEMA AEP), la unión de la cabeza flotante está localizada fuera de la carcasa, y la carcasa sellada con una junta de prensa-estopa de deslizamiento que emplea una caja de empaquetadura. Debido al peligro de fugas a través de la prensa-estopa la presión del lado de la carcasa, en este tipo, generalmente está a aproximadamente 20 bar, y no se deben usar materiales inflamables o tóxicos en el lado de la carcasa.

La caldera con tubos-U (tipo TEMA AKU) mostrado en la Figura 1.6 es la más comúnmente usada para calderas y evaporadores que se calientan con vapor, ya que el vapor es un servicio que no produce incrustaciones. También se usa ampliamente el tipo TEMA BKU sin una cubierta de canal renovable para este tipo de calderas.

1.3.1.1. Códigos y estándares de los intercambiadores de calor.

Las características del diseño mecánico, la fabricación, los materiales de construcción, y las pruebas de los intercambiadores de tubo y carcasa están especificados en los estándares de la American Tubular Exchanger Manufacturers Association, TEMA. Los estándares TEMA se aplican a tres clases de intercambiador: la clase R se aplica a intercambiadores que generalmente trabajan en duras condiciones con petróleo o industrias afines, la clase C se aplica a los intercambiadores que trabajan en condiciones moderadas en aplicaciones de procesos comerciales y generales, y la clase B abarca a los intercambiadores usados en las industrias de procesos químicos. Los estándares TEMA deben consultarse para conocer todos los detalles de las características de diseño mecánico de los intercambiadores de la carcasa y tubo; en éste capítulo sólo darán unos pocos detalles. Internacionalmente, también se usan algunas veces los estándares BS

3274, aunque los códigos TEMA son los que se siguen con más frecuencia.

Los estándares TEMA identifican el tipo de intercambiador de calor por un código de tres letras. La primera letra denota el tipo de cabezal de los tubos, también conocido como la tapa frontal. La segunda letra identifica el tipo de carcasa y la tercera letra define el terminal posterior. La Figura 1.7 ilustra la nomenclatura TEMA.

Los estándares ofrecen las dimensiones de tubo y carcasa preferentes, el diseño y las tolerancias de construcción, la tolerancia a la corrosión, y las tensiones de diseño recomendadas para los materiales de construcción. La carcasa de un intercambiador es un recipiente a presión y se diseñará de acuerdo con los correspondientes códigos o estándares de recipientes a presión nacionales. En los estándares TEMA vienen dadas las dimensiones de las bridas estándar para intercambiadores de calor.

En los estándares británicos y TEMA, las dimensiones vienen dadas en pies y pulgadas, por ello estas unidades se utilizan en este capítulo con los valores equivalentes en unidades SI dadas entre corchetes.

1.3.2. Coeficiente global de transferencia de calor

El objetivo primordial en el diseño de un intercambiador de calor es determinar el área de transferencia de calor requerido para cumplir con las condiciones de trabajo establecidas en el proceso, la ecuación general de transferencia de calor en una superficie es:

$$Q = UA\Delta T \quad (1.16)$$

Donde Q es el calor transferido (W), U es el coeficiente global de transferencia de calor ($\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C}$), A es el área de transferencia de calor (m^2).

El coeficiente global de transferencia de calor es el recíproco de la resistencia global a

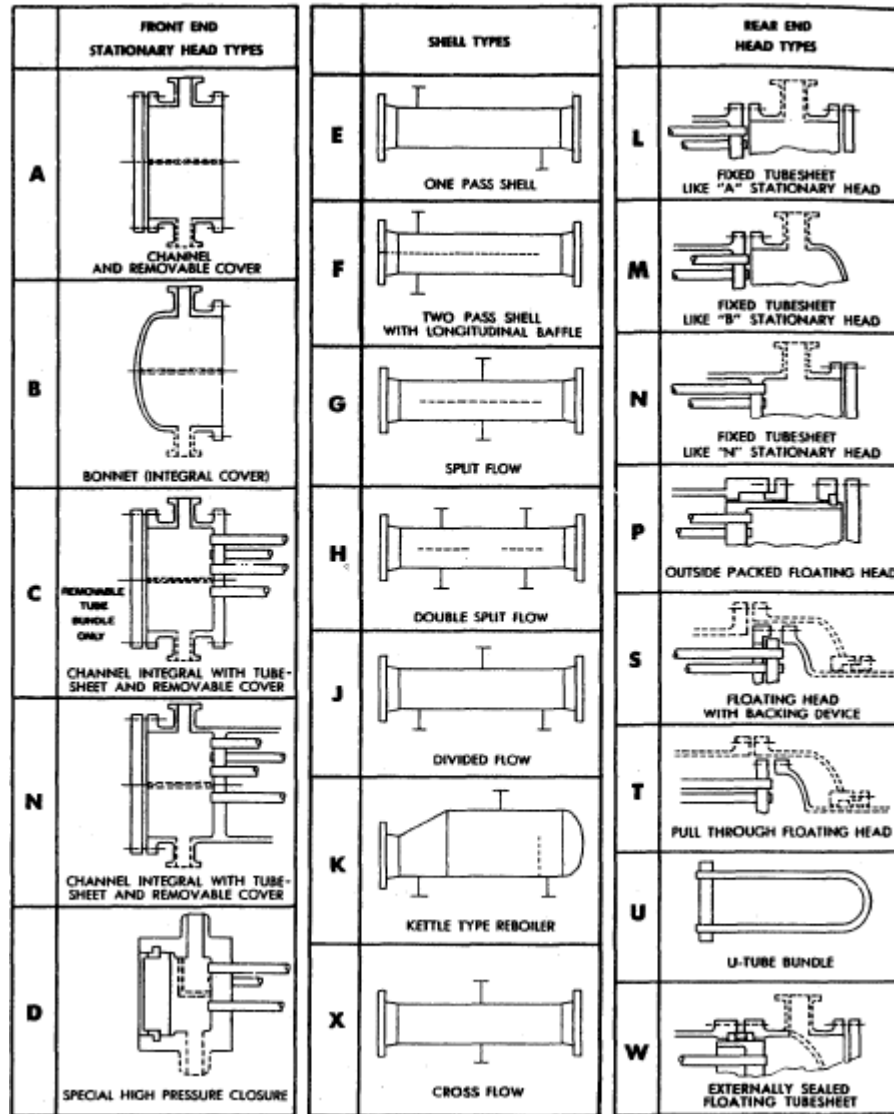


Figura 1.7. Nomenclatura TEMA para intercambiadores de calor de tubo y coraza.
Tomado de Towler (2012).

la transferencia de calor, que es la suma de las diversas resistencias individuales. En el intercambio de calor a través de un tubo de intercambiador típico, la relación entre el coeficiente global y los coeficientes individuales, que son los inversos de las resistencias individuales, viene dada por:

$$\frac{1}{U_o} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_{od}} + \frac{d_o \ln \frac{d_o}{d_i}}{2k_w} + \frac{d_o}{d_i} \frac{1}{h_{id}} + \frac{d_o}{d_i} \frac{1}{h_i} \quad (1.17)$$

donde U_o es el coeficiente global basado en el área exterior del tubo ($\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C}$), h_o es el coeficiente de película del fluido exterior ($\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C}$), h_i es el coeficiente de película del fluido interior ($\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C}$), h_{od} es el coeficiente de suciedad exterior (factor de ensuciamiento ($\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C}$), h_{id} es el coeficiente de suciedad interior ($\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C}$), k_w es la conductividad térmica del material de la pared del tubo ($\text{W}/\text{m}^2/^\circ\text{C}$), d_i es el diámetro interior del tubo (m) y d_o es el diámetro exterior del tubo (m).

El valor de los coeficientes individuales dependerá de la naturaleza del proceso de transferencia de calor (conducción, convección, condensación, ebullición o radiación), de las propiedades físicas de los fluidos, de los caudales de los fluidos y de la disposición física de la superficie de transferencia de calor.

En la tabla 1.2 se muestran los valores típicos para los coeficientes de transferencia de calor dependiendo del servicio:

1.3.3. Factor de ensuciamiento

La mayoría de los fluidos de servicio y de procesos van dejando incrustaciones en las superficies de transferencia de calor de un intercambiador en mayor o menor medida. El material depositado normalmente tendrá una conductividad térmica relativamente baja y reducirá el coeficiente global. Por lo tanto es necesario sobre-dimensionar el intercambiador de calor para tener en cuenta la reducción del rendimiento durante su

Tabla 1.2. Coeficientes de transferencia de calor recomendados.

Fluido caliente	Fluido frío	U (W/m ² /°C)
Agua	Agua	800-1500
Disolventes orgánicos	Disolventes orgánicos	100-300
Aceites ligeros	Aceites ligeros	100-400
Aceites pesados	Aceites pesados	50-300
Gases	Gases	10-50
Disolventes orgánicos	Agua	250-750
Aceites ligeros	Agua	350-900
Aceites pesados	Agua	60-300
Gases	Agua	20-300
Disolventes orgánicos	Salmuera	150-500
Agua	Salmuera	600-1200
Gases	Salmuera	15-250
Vapor de agua	Agua	1500-4000
Vapor de agua	Disolventes orgánicos	500-1000
Vapor de agua	Aceites ligeros	300-900
Vapor de agua	Aceites pesados	60-450
Vapor de agua	Gases	30-300
Dowtherm	Aceites pesados	50-300
Dowtherm	Gases	20-200
Gases de chimenea	Vapor de agua	30-100
Gases de chimenea	Vapores de hidrocarburos	30-100
Vapores acuosos	Agua	1000-1500
Vapores orgánicos	Agua	700-1000
Compuestos orgánicos	Agua	500-700
Condensadores a vacío	Agua	200-500
Vapor de agua	Soluciones acuosas	1000-1500
Vapor de agua	Compuestos orgánicos ligeros	900-1200
Vapor de agua	Compuestos orgánicos pesados	600-900

Tomado de Towler (2012).

funcionamiento. Para tener en cuenta las incrustaciones en el diseño, se pueden incluir coeficientes de ensuciamiento internos y externos como se indica en la Ecuación (1.17). Los coeficientes de ensuciamiento generalmente se denominan como resistencias de transferencia de calor, más que coeficientes, son muy difíciles de predecir y generalmente, se basan en experiencias anteriores. La estimación de los factores de ensuciamiento introduce una incertidumbre considerable en el diseño de un intercambiador; el valor asumido para el factor de ensuciamiento puede sobrepasar la precisión de los valores previstos de los otros coeficientes.

En la Tabla (1.3) se muestran valores típicos de los factores de ensuciamiento.

1.3.3.1. Tubos.

El estándar de diseño TEMA permite diámetros de tubo entre 1/4 in (6.4 mm) y 2 in (50 mm), pero los diámetros de tubo de 5/8 in (16 mm) a 2 in (50 mm) son los que se utilizan habitualmente. Los diámetros menores, de 5/8 a 1 in (16 a 25 mm), son los que se utilizan en la mayoría de los casos, ya que permiten construir intercambiadores más compactos, y, por lo tanto, más económicos. Los tubos grandes son más fáciles de limpiar por métodos mecánicos y son los preferidos cuando se utilizan fluidos que producen muchas incrustaciones.

Se ha seleccionado un espesor de tubo (calibre) que permite resistir la presión interna y externa (del lado de la carcasa) y ofrezca suficiente tolerancia a la corrosión. El BS 3606 (tamaños métricos) normaliza los tubos de acero que se utilizan en intercambiadores de calor; los estándares aplicados a otros materiales se ofrecen en BS 3274. En Tabla D-7 de los estándares TEMA (D7-M en unidades métricas), reproducida en el manual de ingenieros Químicos de Perry (Green y Perry, 2007), se ofrecen las dimensiones de los tubos estándares TEMA. El espesor más comúnmente usado corresponde

Tabla 1.3. Factores de ensuciamiento (valores recomendados).

Fluido	Coefficiente x 10 ³ (W/m ² /°C)	Factor de resistencia x 10 ⁴ (m ² °C/W)
Agua de río	3-12	3-1
Agua de mar	1-3	10-3
Agua de enfriamiento (torres)	3-6	3-1.7
Agua de ciudad (blanda)	3-5	3-2
Agua de ciudad (dura)	1-2	1-5
Condensador de vapor de agua	1.5-5	6.7-2
Vapor de agua (sin aceite)	4-10	2.5-1
Vapor de agua (trazas de aceite)	2-5	5-2
Salmuera refrigerada	3-5	3-2
Aire y gases industriales	5-10	2-1
Gases de chimenea	2-5	5-2
Vapores orgánicos	5	2
Líquidos orgánicos	5	2
Hidrocarburos ligeros	5	2
Hidrocarburos pesados	2	5
Orgánicos en ebullición	2.5	4
Orgánicos condensantes	5	2
Fluidos de transferencia de calor	5	2
Soluciones acuosas de sal	3-5	3-2

Tomado de Towler (2012).

a los numerosos pares en unidades B.W.G. (Birmingham Wire Gauge).

Las longitudes preferentes de tubos para intercambiadores de calor son: 6 ft (1.83 m), 8 ft (2.44 m), 12 ft (3.66 m), 16 ft (4.88 m), 20 ft (6.10 m) y 24 ft (7.32 m). Para una superficie dada, el uso de tubos más largos reducirá el diámetro de la carcasa. Generalmente esto da lugar a intercambiadores de menor coste, especialmente si se trata de carcasas que han de soportar grandes presiones, pero conducirá a un aumento de la caída de presión y de potencia de las bombas. La relación óptima entre la longitud del tubo y el diámetro de la carcasa, generalmente cae dentro del intervalo de 5 a 10.

Si se usan tubos en U, los tubos en el exterior del haz serán más largos que aquellos que están en el interior. Se ha de estimar la longitud promedio para utilizarla en el diseño térmico. Los tubos en U son tubos de longitud estándar que se doblan y se cortan para que tengan el tamaño adecuado.

El tamaño del tubo generalmente se concreta en los estándares del departamento de mantenimiento de la planta, ya que claramente es una ventaja reducir el número de tamaños de tubos de recambio que se deben tener en el almacén.

Con guía 3/4 in (19 mm) es un buen diámetro de prueba con el que empezar los cálculos del diseño.

Generalmente los tubos en un intercambiador están dispuestos en forma de triángulo equilátero, cuadrado o cuadrado rotado; véase Figura 1.8:

Las disposiciones de cuadro rotado y triángulo, ofrecen velocidades mayores de transferencia de calor, pero a expensas de mayor caída de presión que la disposición en cuadrado. Una disposición en cuadrado o cuadrado rotado, se usa con fluidos que produzcan muchas incrustaciones, y hagan necesaria la limpieza mecánica de la parte exterior de los tubos. La distancia entre centros del tubo (distancia entre los centros de los tubos) recomendado es 1.25 veces el diámetro exterior del tubo, y esto es lo que se

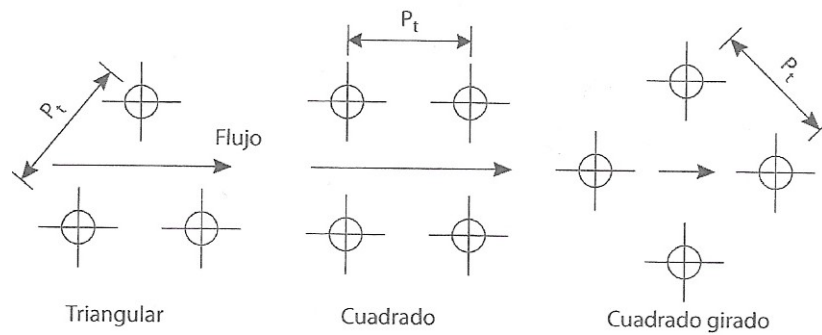


Figura 1.8. Arreglos de tubos en intercambiadores de calor. Tomado de Towler (2012).

utiliza normalmente, a menos que los requisitos del proceso hagan recomendado otro valor. Cuando, por su fácil limpieza, se usa un patrón cuadrado, el espacio mínimo recomendado entre los tubos será 0.25 (6.4 mm).

El fluido en el tubo generalmente se direcciona en una circulación de ida y vuelta en un número de pasos a través de los grupos de tubos dispuestos en paralelo, para aumentar la longitud de la trayectoria de la circulación. Se ha de seleccionar un número de pasos para conseguir la velocidad a través de los tubos que necesita el diseño.

Los intercambiadores de calor pueden ser clasificados dependiendo de su servicio o sus características de construcción:

1. Por su servicio se pueden clasificar como: calentadores, enfriadores, re-hervidores, condensadores, etc.
2. Dependiendo de sus características de construcción se pueden clasificar como: intercambiadores de tubo y coraza, intercambiadores de placas, intercambiadores de tubos en U.

Tabla 1.4. Velocidades recomendadas para agua de torre (m/s) y su factor de ensuciamiento (m^2K/kW).

Temperatura del medio caliente	hasta 115°C		115-200 °C	
Temperatura del agua	50°C		mas 50°C	
	velocidad del agua m/s		velocidad del agua m/s	
	1.0 y menor	Mas de 1	1.0 y menor	Mas de 1
Torre enfriamiento				
Tratada	0.088	0.088	0.17	0.17
Sin tratar	0.35	0.17	0.53	0.35

Tomado de Towler (2012).

1.3.4. Velocidad recomendada

Es un parámetro establecido como una buena práctica de ingeniería basada en el conocimiento experimental con respecto a un determinado servicio, en el diseño de los intercambiadores de calor juega un papel fundamental en las fases preliminares de diseño y selección del equipo ya que a partir de este parámetro se puede establecer el flujo del medio de enfriamiento o calentamiento y ajustar el balance de calor requerido por el proceso, así como comunicar en las fases tempranas del diseño la necesidad de los servicios auxiliares. Steinhagen (2010) desarrolló los diferentes mecanismos de ensuciamiento de los intercambiadores de calor y enfatiza que una correcta selección de la velocidad de flujo en los fluidos garantizará el correcto desempeño del equipo a lo largo del ciclo de vida. En la Tabla (1.4) se muestran las velocidades recomendadas para agua de enfriamiento y el factor de ensuciamiento:

1.4. Diferencia de temperatura promedio

Para poder utilizar la ecuación 1.16 se debe conocer la diferencia de temperaturas promedio entre las corrientes del intercambiador de calor, como base de aproximación para conocer este valor se utiliza la diferencia media logarítmica de temperaturas,

definida como a continuación se describe:

$$\Delta T_m = \frac{(T_1 - T_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \frac{(T_1 - t_2)}{(T_2 - t_1)}} \quad (1.18)$$

Donde T_1 y T_2 corresponden con la temperatura de entrada y salida del lado caliente respectivamente y t_1 y t_2 del lado frío, en unidades de temperatura acordes al sistema de unidades utilizado. Esta expresión aplica para flujo en contracorriente, siendo la misma para flujo en cocorriente, con el cambio de que las temperaturas terminales sera $(T_1 - t_1) - (T_2 - t_2)$.

Esta ecuación es aplicable cuando se presentan ciertas condiciones ideales de flujo, flujo real en contracorriente y cocorriente y comportamiento lineal de entalpia - temperatura, sin cambio de fase, permitiendo su aplicación para cambios de fase a presión constante para un solo componente. En la práctica esto no ocurre, por lo que es conveniente utilizar un factor de corrección para la ecuación 1.18, el denominado factor F_t . Este factor se aplica modificando la ecuación 1.18 de la siguiente manera:

$$\Delta T_m = F_T \Delta T_{lm} \quad (1.19)$$

Para su aplicación requiere del calculo de dos factores adimensionales de temperatura denominados R y S, que se definen como:

$$R = \frac{T_1 - T_2}{t_2 - t_1} \quad (1.20)$$

$$S = \frac{t_2 - t_1}{T_1 - t_1} \quad (1.21)$$

Existen correlaciones para configuraciones específicas de intercambiadores de calor

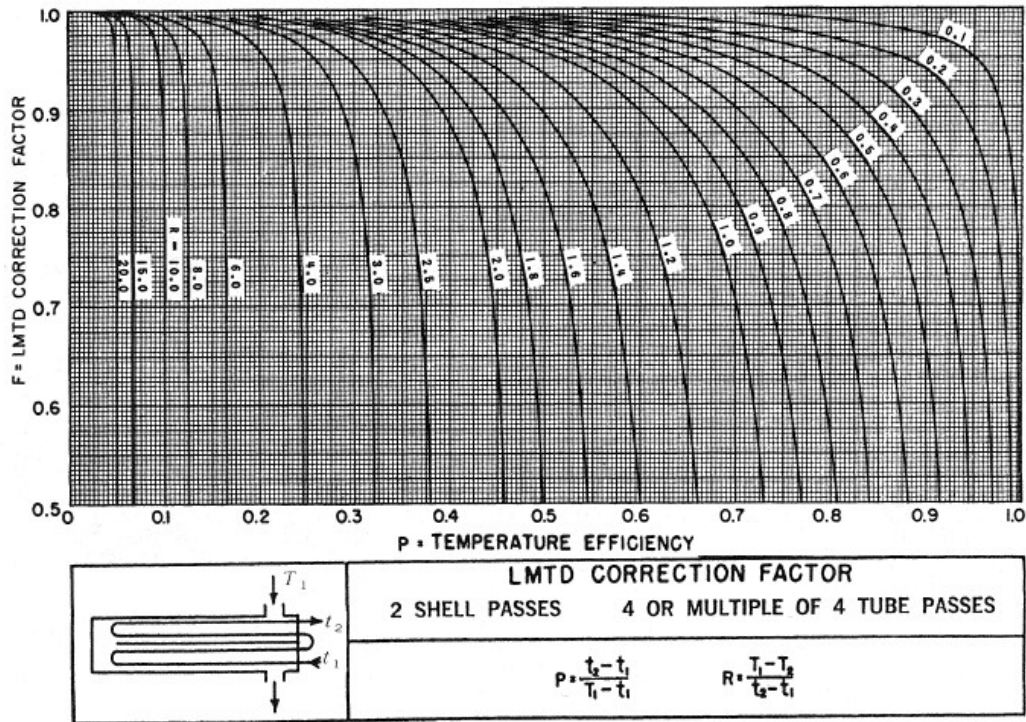


Figura 1.9. Figura Factor F_t para un intercambiador de calor en configuración de 2 pasos por la coraza y 4 por los tubos

para calcular el factor F_t de manera directa o en caso de que la configuración no corresponda con la correlación se dispone de un compendio de gráficas, Kern (1999); Ludwig (2007) presentan un buen compendio de dichas gráficas, como ejemplo se presenta la figura 1.9, tomada de Kern (1999), donde se puede tomar el factor, una vez que se calcularon los factores R y S para un intercambiador de calor.

1.5. Compuesto fenilamínicos

Los compuestos fenilamínicos son utilizados en diferentes industrias químicas, la familia que se estudia en este trabajo corresponde con la empleada para la formulación de componentes antioxidantes para aceites lubricantes, pero también se puede emplear

en la fabricación de polímeros sintéticos y compuestos de caucho vulcanizados. Su función es disminuir o evitar la oxidación de los aceites, que es una reacción de oxidación generada ya sea por la presencia de agentes oxidantes, como el oxígeno y acelerada por metales, como el cobre y el hierro (común en la mayoría de las aleaciones metálicas que se tienen en motores, turbinas y elementos de compresión). Es de vital importancia que el aceite lubricante logre su mejor desempeño ya que de otra manera se producirá el daño prematuro de los elementos rotatorios de las máquinas o dispositivos.

Tabil (2018) mencionan que el mecanismo de reacción general para la oxidación de los aceites lubricantes corresponde con las siguientes tres etapas:

1. Inicio. En esta etapa un agente externo, elemento oxidante, genera un radical libre orgánico o un electrón sin enlace como parte del lubricante.
2. Propagación. El compuesto generado en la etapa inicial, que es altamente reactivo, reaccionará con oxígeno formando un peróxido extremadamente reactivo que reaccionará con los componentes del lubricante y continuará la descomposición del aceite y sus componentes.
3. Terminación. Los compuestos generados en la etapa inicial y de propagación se combinan para formar compuestos orgánicos altamente estables, con lo que la generación de radicales libres se termina y no existen más radicales libres o peróxidos para reaccionar. Dos tipos de productos se generan en esta etapa, los denominados productos solubles (peróxidos, alcoholes, ácidos, ésteres y acetonas) y los insolubles (componentes de alto peso molecular)

El producto fenilamínico es clasificado como removedor de radicales, debido a que la mezcla de compuestos del producto final son potenciales donadores de hidrógeno desde el nitrógeno hacia los radicales de peróxido, tienen hasta una capacidad de reemplazar

hasta 4 radicales de peróxido en comparación con los compuestos monofenólicos estéricamente impedidos lo cuál hace que tengan un amplio rango de aplicación, después de realizar la sustitución de dichos radicales el componente reaccionará hasta formar nuevamente el compuesto fenilamínico original y un componente estable final producto de la sustitución de los radicales de peróxido.

II. Justificación, objetivos e hipótesis

2.1. Justificación

Existen varios trabajos desarrollados para comprender la destilación por lotes para diferentes sistemas, la mayoría enfocados en la naturaleza de la separación sin asociar la parte energética, su relación con los equipos de recuperación de cada uno de los cortes y el impacto que se tiene sobre el desempeño a lo largo del ciclo de vida del proceso. Por lo tanto en este proyecto de tesis se plantea el estudio en esta tesis de ambos componentes, la destilación y el diseño de su equipo de recuperación, para visualizar que a pesar de tener un proceso de separación bien diseñado no se tendrá una operación adecuada sin que su equipo de recuperación esté dimensionado correctamente.

2.2. Objetivos

2.2.1. General

Desarrollar el modelo de la destilación simple por lotes para una mezcla de compuestos fenilamínicos con la finalidad de comprender la naturaleza de la separación de la mezcla en estudio incluyendo el equipo de recuperación principal.

2.2.2. Específicos

1. Obtener la curva residual de destilación a presión constante y temperatura constante.
2. Obtener la curva residual de destilación por lotes a presión y temperatura varia-

ble.

3. Obtener el diseño base del equipo de recuperación principal.
4. Desarrollar el diseño detallado del equipo de recuperación principal.
5. Desarrollar la simulación dinámica del proceso considerando el incremento de carga de vapor en la destilación.
6. Desarrollar la simulación dinámica del proceso considerando la disminución del flujo de agua en la destilación.

2.3. Hipótesis

El proceso de destilación por lotes de compuestos fenilamínicos es completamente dinámico por lo que mantener una velocidad constante de destilación permite aproximar el comportamiento de las fases líquida y vapor estableciendo incrementos diferenciales para cada cambio en la composición en el destilador, por medio de la modificación de la presión y temperatura de operación hasta que la envolvente de operación sea factible de llevar a cabo, desde los puntos de vista financiero como técnico. En ocasiones no es posible hacer un trabajo experimental para aproximar el comportamiento descrito en la parte de arriba para instalaciones industriales existentes por lo que el modelado teórico del proceso de destilación por lotes permite la mejor toma de decisiones ante situaciones que requieren el cambio de las condiciones actuales de operación (incremento de la demanda) o cuando se tienen imprevistos asociados a fallas inesperadas (reducción en los servicios auxiliares disponibles). El modelado no solo debe estar enfocado en el equipo de destilación, debe considerar que el condensador utilizado para

recuperar las diferentes fracciones pueda cubrir las diferentes condiciones de operación, ya que sin este equipo el proceso no funcionará de manera adecuada.

III. Materiales y métodos

3.1. Descripción del sistema

El sistema que se estudiará es un sistema abierto formado por un recipiente destilador simple sin columna de rectificación, un condensador total, un recipiente colector de destilado y una bomba de vacío. El recipiente está provisto de una chaqueta de calentamiento por donde se hará fluir el medio de calentamiento. La mezcla que se alimenta al equipo está formada por un componente altamente volátil denominado, A , un componente de mediano peso molecular B y un componente de moderado peso molecular C , producto de una reacción de síntesis, que después de filtrar se destila en el equipo descrito anteriormente. El análisis identificará cuál de las dos políticas de operación planteadas es la más adecuada desde el punto de vista económico para el diseño de los equipos y cumpliendo los requerimientos de demanda del producto. El diagrama del sistema se muestra en la Figura 3.1.

3.2. Consideraciones del modelo

Las siguientes consideraciones son válidas para el modelo:

1. Las propiedades en el destilador son uniformes, debido a la agitación en el interior del equipo.
2. No se consideran pérdidas de calor en la transición del destilador al condensador, se considera un aislamiento perfecto en la tubería de transferencia del vapor.
3. La temperatura de alimentación de los medios de enfriamiento y calentamiento

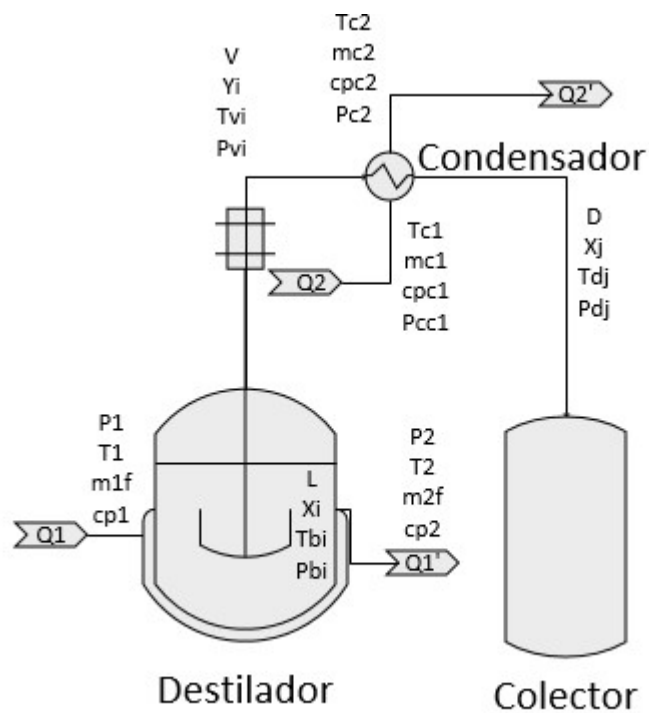


Figura 3.1. Representación esquemática del modelo del destilador por lotes.

es constante para el estado estable y en el estado dinámico se modificará para validar el desempeño del equipo.

4. El medio de enfriamiento a utilizar es agua de torre.
5. El medio de calentamiento a utilizar es un aceite térmico orgánico.
6. El vapor sigue un comportamiento ideal debido a las condiciones de operación planteadas, presión atmosférica y vacío.
7. La entalpía de vaporización se considera constante a lo largo del proceso para cada uno de los componentes.
8. Para la resolución del estado estable del proceso se asume una velocidad de destilación constante.
9. El arreglo de los fluidos será en contracorriente.
10. El condensador que se evaluará es horizontal, el vapor fluirá por el lado coraza y el medio de enfriamiento por el lado tubos.

3.3. Modelo de destilación simple por lotes

El modelo a seguir para describir la destilación por lotes corresponde con el desarrollado por Doherty y Perkins (1978). Este trabajo formuló de manera adecuada la relación entre las curvas de destilación, curva residual y la resolución matemática de las ecuaciones diferenciales fundamentales del proceso de destilación por lotes, de igual manera clarifica la influencia de la transferencia de calor y su impacto en el tiempo requerido para llevar a cabo la separación. La importancia de entender el comportamiento de un sistema multicomponentes a destilar y predecir el resultado partiendo

de cualquier punto de la mezcla (composición) facilita los análisis y ajustes necesarios para obtener los productos con las características deseadas. Es conveniente indicar que el proceso de destilación por lotes es el proceso más complejo de destilación, el comportamiento es completamente dinámico, las ecuaciones diferenciales describen un comportamiento no lineal e independiente y que están sujetas al equilibrio termodinámico en cada una de las etapas de la separación (Doherty y Malone, 2001). El balance de masa partiendo de la Figura 3.1 corresponde con lo siguiente

$$\frac{dWx}{dt} = -Dy \quad (3.1)$$

Desarrollando el lado derecho de la ecuación

$$\frac{dx}{dt}W + x\frac{dw}{dt} = -Dy \quad (3.2)$$

donde W representa la cantidad de líquido en el destilador, en unidades molares (kmol), x representa la composición molar del líquido en el destilador (kmol componente / kmol mezcla), D es el flujo molar de vapor que sale del destilador (kmol/seg), y es la composición molar del vapor que sale del destilador (kmol del componente / kmol mezcla).

Del balance global de masa se tiene

$$\frac{dW}{dt} = -D \quad (3.3)$$

Sustituyendo la Ecuación (3.3) en la (3.2) se tiene

$$\frac{dx}{dt}W + x(-D) = -Dy \quad (3.4)$$

Reagrupando los términos,

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{D}{W}(y - x) \quad (3.5)$$

Los parámetros D y W están en función del tiempo, como lo indica el balance de energía que se desarrolla más adelante. La resolución del término D/W es complejo ya que implica ecuaciones no lineales independientes, por lo que de acuerdo con Doherty y Perkins (1978) se introducirá una escala no lineal de tiempo denominada ε , definida como $(\frac{dW}{W})$, Gmehling y cols. (2012) simplificaron el desarrollo anterior utilizando dicha escala con lo que la ecuación se expresa de la siguiente manera

$$\frac{dx}{d\varepsilon} = y - x \quad (3.6)$$

Esta ecuación se puede integrar numéricamente para obtener

$$x_i^1 = x_i^0 + (y_i^0 - x_i^0)\Delta\varepsilon \quad (3.7)$$

Al modificar el valor de $\Delta\varepsilon$ con valores negativos se puede obtener la curva de agotamiento o residual en el interior del destilador. La Ecuación (3.7) se utilizará en el desarrollo del análisis.

Por otro lado se debe resolver el balance de energía, ya que sin este no es posible obtener el tiempo de destilación del proceso

$$Q - h^V D = \frac{dh^L W}{dt} \quad (3.8)$$

donde Q es la cantidad de calor suministrada al proceso (kJ/s), h^V es la entalpía de vaporización molar (kJ/kmol) y h^L es la entalpía molar del líquido en el destilador

(kJ/kmol).

Utilizando la Ecuación (3.3) y sustituyendo en la Ecuación (3.8) obtenemos

$$Q - h^V \frac{dW}{dt} = \frac{dh^L W}{dt} \quad (3.9)$$

Desarrollando el lado derecho de la ecuación y agrupando

$$Q - h^V \frac{dW}{dt} = W \frac{dh^L}{dt} + h^L \frac{dW}{dt} \quad (3.10)$$

Reacomodando la ecuación

$$\frac{dW}{dt} = \frac{W}{h^V - h^L} \frac{dh^L}{dt} - Q \quad (3.11)$$

Dado que las expresiones dW/dt y dh^L/dt se pueden expresar como expansiones de Taylor lineales en la Ecuación (3.11) se resuelve la ecuación para el tiempo obteniendo

$$\zeta t = \frac{(h_{n+1}^L + h_n^L)W_{n+1} - (h^V - h^L)_{n+1}(W_{n+1} - W_n)}{Q} \quad (3.12)$$

donde ζt es el tiempo de separación expresando en segundos.

Finalmente para obtener la velocidad de agotamiento en el interior del destilador se utiliza la Ecuación (3.5) y se desarrolla la Ecuación (3.6) con la aproximación de Gmehling y cols. (2012)

$$\frac{dx_i}{\frac{dW}{W}} = y_i - x_i \quad (3.13)$$

Dividiendo la Ecuación (3.13) con respecto al tiempo y pasando el término al lado derecho de la ecuación

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{dW}{dt} \frac{1}{W} (y_i - x_i) \quad (3.14)$$

Dividiendo la Ecuación (3.13) entre la Ecuación (3.14) obtenemos

$$\frac{dt}{dx_i} = \frac{dW}{dt} \frac{1}{W} \quad (3.15)$$

Integrando

$$\varepsilon = \ln \frac{W_0}{W_t} \quad (3.16)$$

La composición del vapor en el sistema es una función de la temperatura, presión y composición del líquido, además del tipo de equilibrio termodinámico que describe la mezcla.

Se considera que el sistema es ideal tanto en la fase líquida como en la fase vapor, por lo que el equilibrio termodinámico obedece a la Ley de Raoult, debido a que no se dispone de datos confiables para determinar los coeficientes de fugacidad y actividad y el sistema se pretende que opere a condiciones atmosféricas y a vacío.

La Ley de Raoult se expresa como

$$y_i P = x_i p_i \quad (3.17)$$

Por simple extensión

$$P = \frac{\sum x_i p_i}{\sum y_i} \quad (3.18)$$

De igual manera la composición molar de cualquier componente en la fase vapor se puede determinar de la siguiente manera

$$y_i = \frac{x_i y_i P^s}{p} \quad (3.19)$$

La presión de vapor se determinará a partir del modelo propuesto por la ecuación de

Antonie utilizando las siguientes expresiones

$$\ln P^s = A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT^E \quad (3.20)$$

Esta forma de la ecuación se utilizara para el componente más volátil

$$\ln P^s = A + \frac{B}{T + C} + D \ln T \quad (3.21)$$

Esta forma corresponde para el componente de mediano peso molecular.

donde P^s en las Ecuaciones (3.20) y (3.21) es la presión de saturación (kPa) y T es la temperatura (K).

Las constantes son tomadas de Poling, Wilding, Thomson, Friend, y Rowley (2008).

El término $(h^V - h^L)$ en la Ecuación (3.12) corresponde a la entalpía de vaporización ΔH^v (kJ/kmol), para determinarla se utilizará la siguiente ecuación

$$\Delta H^v = \sum y_i \frac{\ln \left(\frac{P_{i,n+1}^s}{P_{i,n}^s} \right)}{\left(\frac{1}{T_{n+1}} - \frac{1}{T_n} \right)} R \quad (3.22)$$

El término h^L corresponde con la entalpía del líquido, se determina por medio del calor específico a presión constante

$$h^L = C_p T = A + BT + CT^2 \quad (3.23)$$

donde C_p se expresa en kJ/kmol/°C, T en °C, A , B y C son constantes determinadas para cada compuesto.

La entalpía de líquido en la mezcla se calculará con la siguiente ecuación

$$h^L = \sum x_i h^{Li} \quad (3.24)$$

El calor suministrado Q es un parámetro del modelo que está en función del área de transferencia de calor, el coeficiente de transferencia de calor y la media logarítmica de temperatura entre el medio de calentamiento y el contenido del destilador, para efectos del estudio se definirán dos valores para el análisis.

El tiempo para la determinar la progresión en el modelo se calculará de la siguiente manera

$$\Delta\tau = t_o + t_n \quad (3.25)$$

Se debe generar una gráfica que represente la dinámica de la destilación representado las siguientes variables con respecto al tiempo:

1. Fracción molar del componente A en el líquido.
2. Fracción molar del componente A en el vapor.
3. Fracción molar media del componente A en el vapor.
4. Temperatura del destilador.
5. Masa en el destilador.

A partir de los datos obtenidos en este escenario se obtendrán las ecuaciones de las variables en función el tiempo que se utilizaran para la evaluación del condensador. En el segundo escenario se plantea hacer una curva de destilación a presión y temperatura variable. Se evaluará el comportamiento del sistema a vacío.

Se usarán las ecuaciones descritas en la primera parte, únicamente cambiará la resolución de la ecuación de Rayleigh considerando que cada una de los cambios será en paso por variable, es decir primero se incrementa la temperatura y en el siguiente paso se modificar la presión, de manera sucesiva hasta que se obtenga la especificación requerida del proceso.

Ahora las siguientes variables del sistema se graficarán con respecto al tiempo:

1. Fracción molar del componente A en el líquido.
2. Fracción molar del componente A en el vapor.
3. Fracción molar media del componente A en el vapor.
4. Temperatura del destilador.
5. Masa en el destilador.
6. Presión del sistema.

Para el análisis final del sistema se desarrollará el análisis de controlabilidad en estado dinámico verificando la condensación de cada uno de los componentes sujeto a las siguientes variables:

1. Caída de presión en el condensador.
2. Composición de la fase vapor que sale del condensador.
3. Perfil de temperaturas del condensador.
4. Perfil de temperaturas del medio de enfriamiento.
5. Velocidad del medio de enfriamiento en los tubos.

6. Temperatura de pared en el condensador.

Se conoce que el segundo corte está sujeto a solidificación cuando la temperatura es menor a 40°C por lo que esta será la restricción para validar el comportamiento del equipo a lo largo del proceso de destilación.

3.4. Carga térmica del condensador

El proceso descrito en la sección anterior es completamente dinámico. El diseño tanto del destilador como de sus componentes auxiliares debe realizarse considerando cada una de las etapas de la destilación, es decir, en cada corte se deberán evaluar las condiciones máximas a las cuales se tendrá el servicio. A diferencia de los procesos continuos no se tendrán condiciones fijas para el dimensionamiento de los equipos, por lo que se deberán contemplar las condiciones máximas en cada etapa del proceso para hacer el diseño de los equipos, para el alcance de este estudio únicamente se diseñará el condensador principal del proceso. Se considera que el destilador tiene la suficiente área de transferencia de calor, agitación y capacidad para llevar a cabo el proceso de separación.

Cuando se habla de las condiciones máximas del proceso se hace referencia a la carga térmica máxima del proceso, el flujo máximo de vapor que se alimenta al equipo, la temperatura máxima por corte y la presión mínima de la etapa. El balance de materia y energía se resuelve de la siguiente manera

$$q = \frac{H_0 - H_i}{\zeta} P M_{promedio} \quad (3.26)$$

donde q es el flujo másico del vapor que se alimenta al condensador (kg/s), H_0 es la cantidad inicial en el destilador (kmol), H_i es la cantidad residual en el destilador

después del paso diferencial de destilación (kmol), ζ es el tiempo diferencial de destilación (s), $PM_{Promedio}$ es el peso molecular promedio del vapor que sale del destilador (kg/kmol). Para el cálculo del peso molecular promedio de la mezcla en el vapor se utiliza la siguiente ecuación

$$PM_{Promedio} = PM_A y_A + PM_B y_B + PM_C y_C \quad (3.27)$$

donde PM_A es el peso molecular del componente A , y_A es la fracción molar del componente A en el vapor, PM_B es el peso molecular del componente B , y_B es la fracción molar del componente B en el vapor, PM_C es el peso molecular del componente C y y_C es la fracción molar del componente C en el vapor.

Para cada punto se resuelve el balance de energía en el destilador de la siguiente manera

$$Q_{Total} = Q_V + Q_{Sensible} \quad (3.28)$$

donde Q_{Total} es el calor total que se deberá considerar para el diseño del condensador (kJ/s), Q_V es el calor latente de vaporización (kJ/s) y $Q_{Sensible}$ es el calor requerido para subenfriar el condensado (kJ/s).

El cálculo del calor latente de vaporización se realiza por medio de la siguiente ecuación

$$Q_V = \Delta H_{VM}(H_0 - H_i) \quad (3.29)$$

donde ΔH_{VM} es la entalpía latente de vaporización (kJ/s)

$$\Delta H_{VM} = \Delta H_{VA} y_A + \Delta H_{VB} y_B + \Delta H_{VC} y_C \quad (3.30)$$

De manera similar que el peso molecular promedio, ΔH_{VA} , ΔH_{VB} , ΔH_{VC} son las entalpías molares de cada componente a la temperatura de burbuja de la mezcla (kJ/kmol) y y_A , y_B , y_C las fracciones molares de cada componente en la fase vapor.

El calor sensible se calcula de la siguiente manera:

$$Q_{Sensible} = \frac{H_0 - H_i}{\zeta} C_{pL}(T_R - T_{fe}) \quad (3.31)$$

donde C_{pL} es la capacidad calorífica a presión constante del líquido (kJ/kmol/K), se estimará la capacidad calorífica promedio tomando en consideración el perfil de temperaturas para cada uno de los cortes, T_R es la temperatura de burbuja de la mezcla (K) y T_{fe} es la temperatura de salida del líquido esperada en el condensador (K). La temperatura de salida del condensado T_{fe} se calcula por medio de la siguiente ecuación

$$t_{fe} = \frac{T_v + t_w}{2} \quad (3.32)$$

donde t_{fe} (°C), T_v es la temperatura del vapor (°C) y t_w es la temperatura de pared (°C).

El cálculo detallado del condensador se realizará por medio del simulador ASPEN B-JAC donde se modificará la geometría y arreglo de las mamparas hasta que la transferencia de calor y caída de presión sea la requerida por el proceso tanto para el lado del cuerpo como del lado de los tubos.

De la base de datos de los simuladores se tomarán las propiedades de cada componente para la simulación del condensador, es importante mencionar que el programa que se utiliza para el diseño del equipo del condensador desarrolla un modelo de parámetros distribuidos para estimar de manera detallada los cambios en la carga térmica,

temperatura, velocidad, caída de presión, coeficientes de transferencia de calor y demás parámetros a lo largo del equipo.

3.5. Metodología de resolución del equilibrio de la mezcla

Para el análisis del proceso de destilación en primera instancia se resolverá el equilibrio que sigue el sistema, es decir entender como es la composición en las fases vapor y líquido conforme la destilación progresa, como se menciono anteriormente (Taylor y cols., 2004). Sin entender la trayectoria que sigue la mezcla y validar la factibilidad de la separación se pueden generar errores considerables al momento de diseñar los equipos que conforman el sistema de destilación, en este caso el condensador.

La primera etapa se realizará desarrollando la destilación a presión constante, la presión seleccionada es atmosférica, esto con el objetivo de replicar un experimento simple de laboratorio. Este es el caso más sencillo por el cual se puede llevar a cabo la separación, la única variable que se modificará es la temperatura de la mezcla hasta que el equilibrio descrito por medio de la ley de Raoult se alcance, es decir se obtenga por medio de las presiones parciales de cada componente la presión total del sistema de 100 kPa. En la Figura 3.2 se describe la forma en que se resolverá el modelo para la destilación a presión constante.

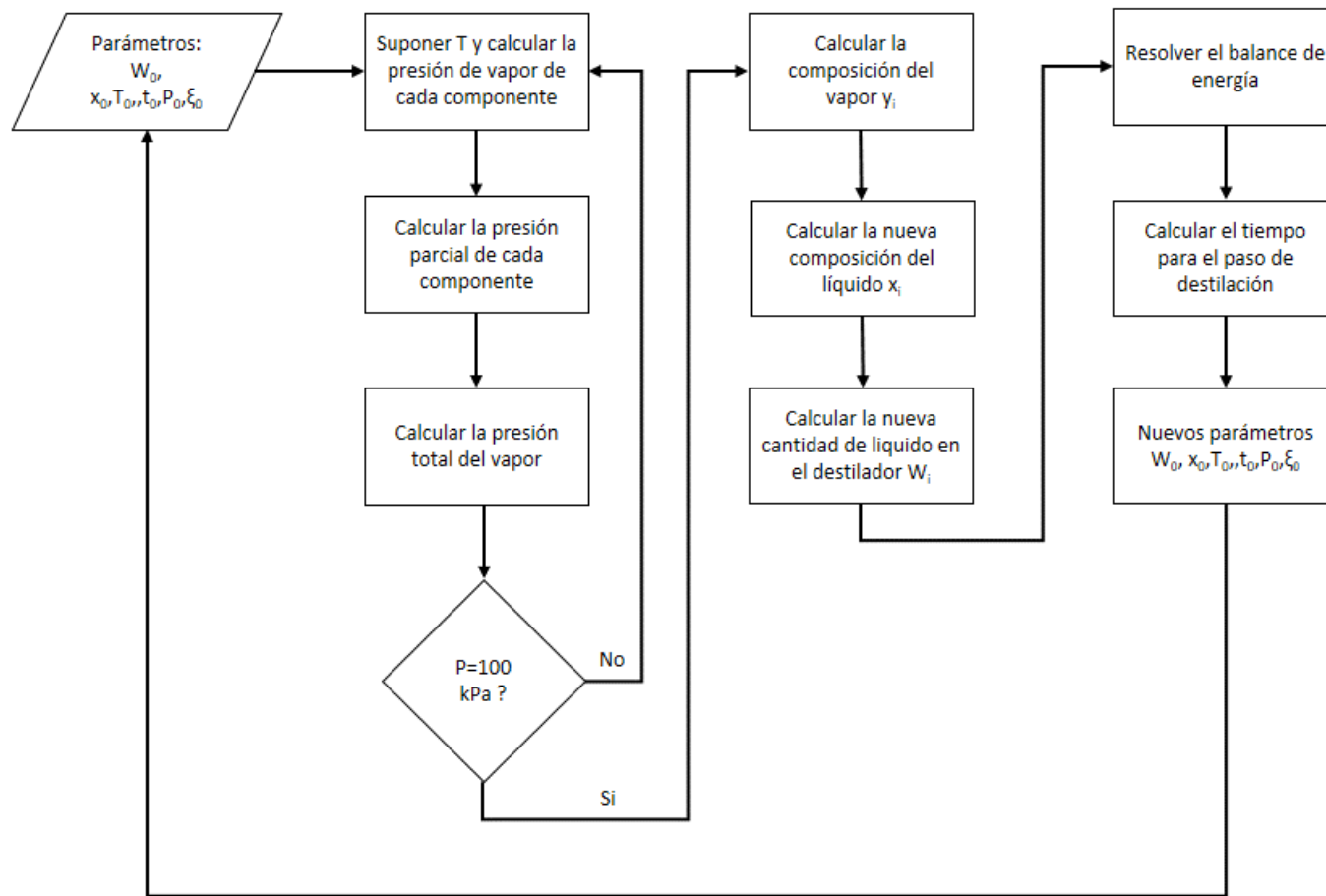


Figura 3.2. Diagrama de resolución del modelo a presión constante y temperatura variable.

En caso de que no sea factible desarrollar la separación de la mezcla con condiciones de operación razonables en escala industrial se plantea modificar la presión de operación del sistema, en este caso se considerará que el sistema opera a vacío probando varias presiones reducidas hasta que el agotamiento de la mezcla en el destilador por lotes tenga una resolución aceptable. El algoritmo para el modelo de destilación a presión y temperatura variable se muestra en la Figura 3.3.

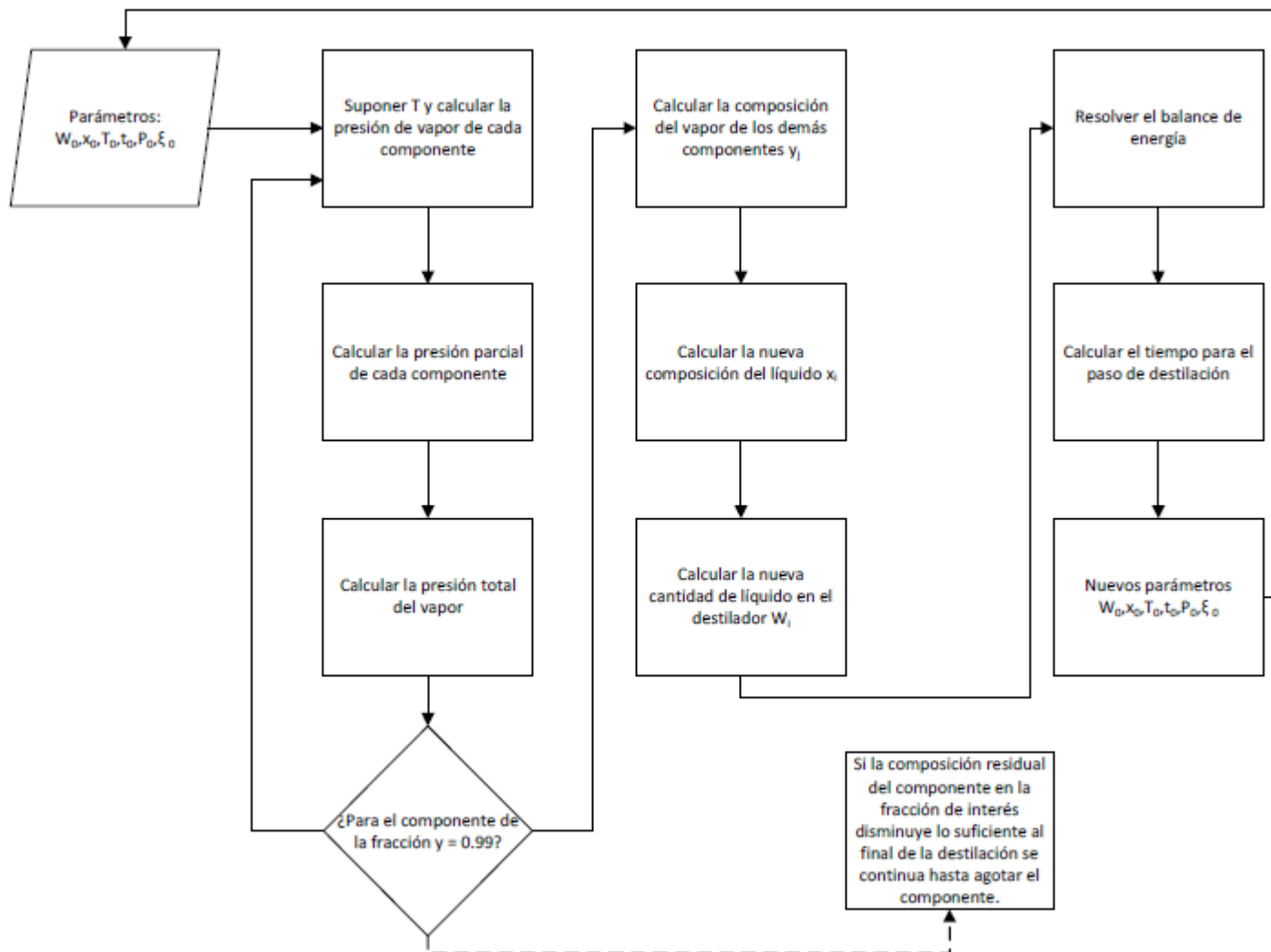


Figura 3.3. Diagrama de resolución del modelo a presión y temperatura variable.

Tabla 3.1. Carga inicial al destilador.

Componente	Carga Inicial (kg)	Peso molecular (kg/kmol)
A	2500	124.2
B	1800	187.2
C	5500	354
Total	9800	-

3.6. Condiciones iniciales del modelo

Para el desarrollo del modelo se detallan a continuación las condiciones iniciales de la carga del destilador. El objetivo del proceso de destilación es eliminar los componentes *A* y *B* de la mezcla y dejar únicamente el componente *C*. En realidad es muy difícil eliminar en su totalidad los componentes *A* y *B*, se pueden tener trazas (ppm) aún llevando a cabo varias etapas de separación, por lo que para considerar que el modelo esta resuelto se definirá como parámetro de aceptación que la mezcla residual no tenga mas del 0.1 % de los componentes *A* y *B* al final del proceso. Se considera una carga teórica de aproximadamente 10 toneladas, en escala industrial este es un tipo de capacidad común para un destilador por lotes, la Tabla 3.1 nos muestra el detalle de la carga inicial de la mezcla:

6

En el caso de la destilación a presión atmosférica se deberá obtener una primera estimación de la temperatura de burbuja de la mezcla que será nuestro punto de partida para simular el comportamiento de la mezcla, en este caso se establece que la mezcla comienza a ebulir a 170°C, en la Tabla 3.2 se muestra el conjunto de condiciones iniciales para esta etapa. En la Tabla 3.3 se describen las composiciones molares de cada componente como condiciones iniciales del proceso. El componente *C* no se considera

Tabla 3.2. Condiciones iniciales de la destilación a presión constante.

Variable	Valor	Unidades
Temperatura	170	°C
Presión	100	kPa
ξ	0	-
Q (1er Corte)	800000	kJ/hr
Q (2do Corte)	116121	kJ/hr

Tabla 3.3. Condiciones molares de carga al destilador.

Componente	Carga Inicial (Moles)	Fracción mol x_i
A	20.13	0.445
B	9.62	0.212
C	15.54	0.343
Total	45.28	1.00

que se separará por su baja presión de vapor (<0.01 mbar a 300°C).

Conforme a lo indicado por Doherty y Perkins (1978) en el desarrollo numérico se establecerá un decremento de la composición de los componentes de la mezcla conforme a la curva de agotamiento explicada en dicho trabajo ($\text{delta_epsilon} = -0.01$).

Para los cálculos de los requerimientos energéticos para el proceso de separación se indican los calores sensible, latente de vaporización y total de la separación. Algunos autores, (Binous y Al-Harhi, 2012) mencionan que la contribución del calor sensible es despreciable, a escala de laboratorio probablemente sea válida esta consideración pero en equipos de escala industrial se pueden generar errores considerables.

3.7. Propiedades del sistema

Para efectos de simular el proceso de separación se han tomado los valores de las constantes para la estimación de las propiedades de presión de vapor, capacidad calorífica y entalpía de vaporización del Manual del Ingeniero Químico (Poling y cols.,

Tabla 3.4. Parámetros de la ecuación de Antoine.

Componente	A	B	C	D	E	T	P
A	63.313	-7040.4	-5.8055	7.5753E-18	6	K	Pa
B	53.3732	-9838.2	0	-4.98449	4.9514E-19	K	kPa
C	-	-	-	-	-	-	-

Tabla 3.5. Constantes para el calculo de los calores específicos a presión constante.

Componente	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	T	C_p
A	254490	-298.06	1.1707	0	0	K	J/kmol
B	237.87	-0.7055	-0.0006	0	0	K	kJ/kmol
C	250	0.8	-0.0009	0	0	K	kJ/kmol

2008), en las Tablas 3.4, 3.5 y 3.6 se muestran dichos valores.

Algo que es importante de señalar es que no se conoce el equilibrio del sistema, se asume que es ideal tanto en la fase líquida como en la fase vapor, en el caso de la fase líquida se puede inferir que no sigue una idealidad por la diferencia en la estructura molecular de los componentes, para la fase vapor al operar a condiciones atmosféricas se puede asumir que es un comportamiento ideal.

Tabla 3.6. Coeficientes para la estimación de la entalpía de vaporización.

Componente	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	T	ΔH_v
A	59057E7	0.61039	-0.54533	0.0683	593.1	K	J/kmol
B	84519	-51.563	-	-	-	K	kJ/kmol
C	-	-	-	-	-	-	-

3.8. Desarrollo a presión y temperatura variable

Para llevar a cabo el proceso a presión y temperatura constante es necesario probar una serie de condiciones hasta que el perfil de separación produzca una temperatura razonable conforme a lo comentado en la sección de la separación a presión atmosférica, es decir una temperatura alrededor de 260°C, después de realizar varios cálculos se identifica que el punto de partida para el proceso puede ser de 120°C y una presión de 20.78 kPa (una presión de vacío con una temperatura moderada). Se sigue la estrategia de mantener la presión relativamente constante y se incrementa la temperatura hasta que la composición en la fase vapor, que se analizará más adelante, no cambie. En este punto se modifica la presión del destilador para que continúe la separación, que en la práctica industrial es normal realizar este tipo de secuencia de operación, en cada uno de los cambios se buscó que la presión del componente *A* sea la mayor en comparación con la del componente *B*, para alcanzar los niveles de pureza en la recuperación del componente *A* sea lo más elevada, es normal que conforme se agota el componente *A* el componente *B* comienza a aparecer en la fase vapor y se tendrá un cierto nivel de mezcla con el componente *A*. Dado que el componente *C* tienen una presión de vapor muy baja no se aprecia su contribución en el primer corte.

3.9. Diseño del condensador

3.9.1. Consideraciones generales

Las consideraciones generales para el diseño del condensador son las siguientes:

1. Se considera condensación diferencial, (J., 2017), debido al tipo de mamparas que se utilizarán. En este caso como el proceso opera a vacío y se debe cuidar que la

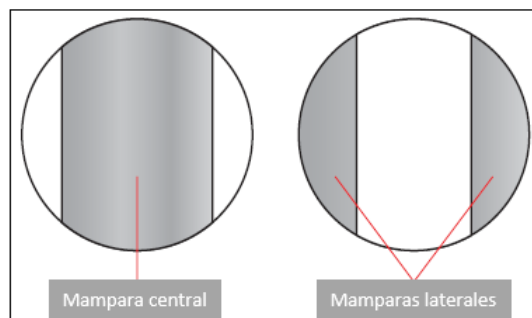


Figura 3.4. Tipo de mampara seleccionada para el condensador.

caída de presión en el equipo sea adecuada se selecciona de manera preliminar el tipo doble segmentada paralelas al proceso (Bouhairie, 2012). En la Figura 3.4 se muestra el tipo de mampara doble segmentada. El primer paso en diseñar un condensador es seleccionar el tipo de coraza que se utilizará, el segundo es seleccionar el tipo de mampara para el proceso.

1. No se considera algún componente inerte en el sistema (nitrógeno, aire por fugas, etc.), una vez que el equipo inicia el proceso de destilación se suspende la alimentación de nitrógeno, este es utilizado para mantener una atmósfera inerte, pero como la cantidad que se alimenta es muy pequeña, realmente el equipo se encuentra saturado del componente mas rico con el espacio vapor del destilador, su contribución se considera despreciable. Kumar y Kishore (2017) desarrollaron un estudio para verificar el efecto que tienen los incondensables en este tipo de equipos, en el cual describen que en presencia de incondensables los mecanismos de transferencia de calor deben considerar la difusión de los componentes no condensables y evaluar por secciones la transferencia de calor, ya que conforme se enriquece la mezcla de incondensables a lo largo de la trayectoria del condensador los coeficientes de transferencia de calor se reducen incrementando el área de transferencia de calor de manera considerable.

2. Se considera que el proceso de condensación obedece a la teoría de condensación por capa (Kern (1999);Vuddagiri y Eubank (1998)).
3. Se considera que el condensador y la tubería se encuentran perfectamente aislados, es decir, no se tendrá cambio en la temperatura en la trayectoria del destilador (tubería de alimentación de vapor) y la entrada al condensador, en los procesos reales cuando se tiene un mal aislamiento se pueden tener diferencias de temperatura hasta del orden de 2 cifras, dependiendo del estado del aislamiento, el diámetro de la tubería, la ventilación en el área y la posición de los medidores de temperatura.
4. Se utilizará agua de torre de enfriamiento con características promedio.
5. Se considera que la disponibilidad de agua de torre es ilimitada.

3.9.2. Condiciones mecánicas del diseño

Las condiciones de diseño se determinan como se describe a continuación. Se elige la temperatura de diseño de 300°C debido a que es una temperatura mayor que la máxima esperada por el proceso y está por encima de la temperatura de suministro del medio de calentamiento en 14°C. La presión de diseño se especifica para reducir la inversión por protección por sobrepresión del equipo siendo mayor en 150 kPa que la presión máxima de suministro del medio de enfriamiento. Finalmente se especifica que el lado caliente debe resistir condiciones de vacío total considerando que una falla en la operación puede generar que la bomba de vacío asociada al proceso pueda ejercer una presión muy cercana a este valor. Las condiciones de diseño mecánico aparecen en la Tabla 3.7.

Tabla 3.7. Condiciones mecánicas de diseño del condensador.

Condición	Lado caliente	Lado Frío	Unidades
Temperatura	300	300	°C
Presión	600 / -101.35	600	kPa

3.10. Simulación dinámica del proceso

Con el diseño del condensador a la carga térmica máxima se realizará la simulación dinámica del proceso para verificar su comportamiento con los diferentes cortes que tendrá el proceso. El primer paso en la simulación corresponde con la resolución del modelo en estado estacionario, una vez que este modelo es resuelto se establecerán las relaciones de presión y flujo de cada componente para poder realizar la simulación dinámica, realizando el dimensionamiento preliminar de los elementos de control del destilador.

Para el desarrollo del modelo en estado dinámico se debe ajustar el diagrama de flujo para que tenga los elementos de control que servirán para la simulación del proceso a diferentes condiciones. En la Figura 3.5 se muestran los controles y elementos de control que se utilizarán para la simulación dinámica. Como se aprecia, el modelo planteado entre el simulador de diseño del intercambiador de calor y el simulador de proceso es consistente.

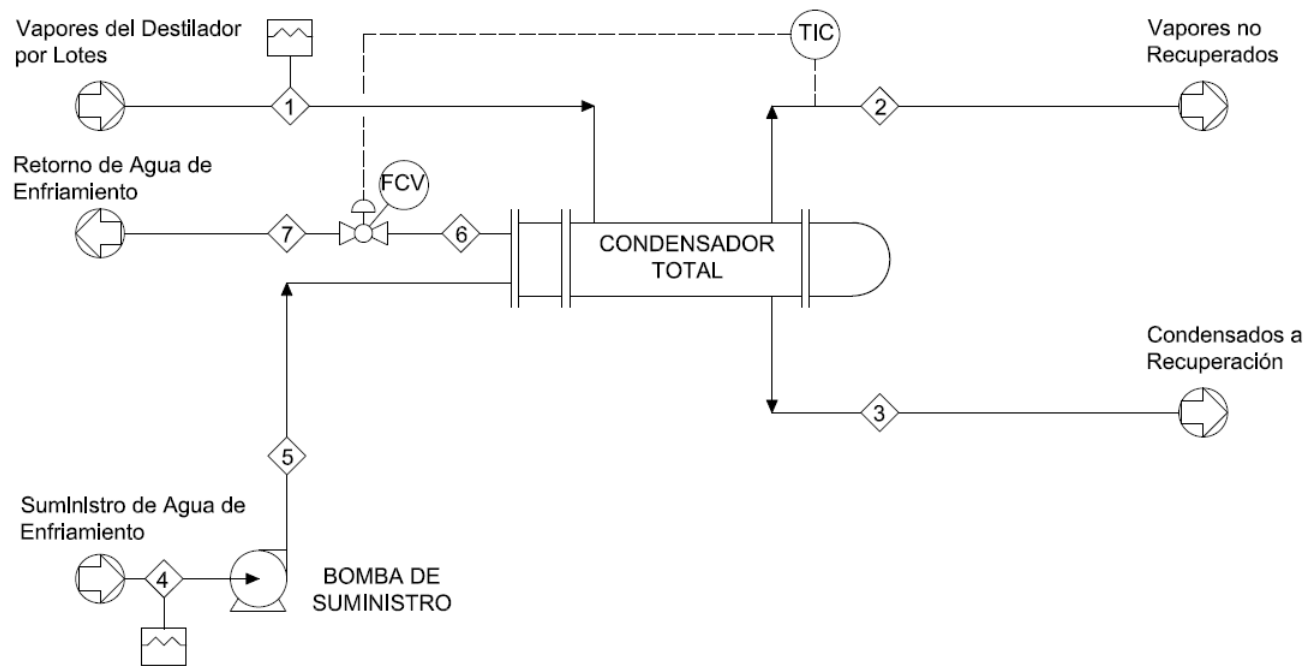


Figura 3.5. Diagrama de simulación dinámica.

Tabla 3.8. Condiciones de simulación dinámica.

Condición	Parámetros	Objetivo
Incremento de flujo de vapor	100 % carga por corte	Identificar el límite operativo del sistema y planificar el incremento de capacidad futura de la instalación.
Reducción de flujo de agua	50 % carga por corte	Simular la falla en el circuito de agua, incrustación del condensador y/o pérdida de área de transferencia de calor.

El objetivo de hacer la simulación dinámica es identificar las condiciones de operación bajo las cuales la destilación será funcional, establecer las políticas de operación y de seguridad que el sistema podrá manejar, así como los límites en los cuales el desempeño no será el adecuado. En la Tabla 3.8 se muestran las condiciones de simulación, parámetros de simulación y el objetivo de cada una de estas.

Para llevar a cabo la simulación dinámica tanto para el primer corte como para el segundo se instalará una función de transferencia que simule una rampa con el incremento en el flujo másico del vapor que se alimenta al condensador. Esta función de transferencia tendrá un valor mínimo de salida de 2000 kg/h y un máximo de 4000 kg/h para el rango de 0 a 100 % de salida de la variable de proceso, con una duración de 580 segundos.

En cada una de los diagramas de flujo se ha provisto de controles de temperatura en la salida de la corriente de condensado, denominada salida de condensado, con el objetivo de verificar el caso en el incremento de la demanda, en la práctica esto corresponde con la instalación de un elemento primario de temperatura, un transmisor

de temperatura y el control configurado, ya sea en un controlador lógico programable o un sistema de control distribuido, el control de temperatura tendrá como elemento de control la válvula de control de flujo de agua, afectando la posición de la válvula. Es muy importante que en el estado estable de la simulación se dimensione correctamente la válvula para garantizar que la respuesta del sistema será la adecuada.

En el estado dinámico es necesario que todas las corrientes tengan un elemento de presión, en este caso se deben colocar válvulas de control que simulen la diferencia de presión que genera un flujo en el simulador, salvo aquellas que tengan un elemento de incremento de presión, como una bomba.

El simulador no puede calcular el condensador en estado riguroso como en el estado estable, pero se especificará como un diseño ponderado, especificando los volúmenes de cada lado del equipo y caída de presión permisible. Las especificaciones dinámicas serán el balance de calor y la aproximación mínima de la temperatura, obtenidos del diseño riguroso del equipo. Para cada uno de los controles y la función de transferencia se graficarán las siguientes variables:

1. Punto de ajuste.
2. Valor de proceso.

IV. Resultados y discusión

4.1. Diseño del proceso de destilación a presión atmosférica

Se desarrolló el cálculo de agotamiento en el destilador por lotes para las composiciones en las fase vapor, líquido y su correspondiente temperatura a presión atmosférica conforme a lo establecido en el diagrama de flujo presentado en la Figura 3.2. En la Figura 4.1 se muestra la trayectoria obtenida para esta etapa. De la curva de agotamiento en la fase vapor se aprecia que la mayor contribución durante la destilación a presión atmosférica corresponde al componente más ligero (A); en cambio, el componente B no tiene una presión de vapor elevada sino hasta que se alcanzan temperaturas superiores a los 300°C, lo cual indica que las volatilidades relativas entre estos dos componentes de la mezcla son muy elevadas y existe la oportunidad de modificar el comportamiento del sistema para que la separación sea lo más eficiente posible.

En la Figura 4.2 se muestra el cálculo de las presiones parciales de la mezcla con respecto al tiempo donde se confirma que la diferencia de potenciales en términos de volatilidades relativas es grande para cada uno de los componentes. Se puede observar que para obtener una composición en la fase líquida del componente A de 0.017 se requirieron alrededor de 2.8 horas y una temperatura de 318°C, por lo no se continua el cálculo, ya que se excede el rango de temperatura de 40 a 260°C recomendado para una destilación de este tipo Turton, Bailie, Whiting, y Shaeiwitz (2009).

El hecho de adquirir equipo diseñado para alta temperatura implica la selección de materiales especiales de construcción, análisis mecánicos cíclicos y procedimientos

especiales de fabricación. Otro problema de tratar de operar a altas temperatura radica en obtener un medio de calentamiento que al menos se encuentre 20°C por encima de la temperatura del proceso. En este caso se requiere que el medio de calentamiento este a una temperatura aproximada de 340°C , que implicaría utilizar vapor de muy alta presión o un aceite térmico estable a altas temperaturas, además de que el equipo de generación de vapor o generador de aceite térmico tendría que ser especial para cubrir el rango de operación completo.

El escenario anteriormente expuesto lleva a modificar la condición de presión del equipo. Esta se reducirá analizando las diferentes composiciones del vapor tomando en cuenta que las volatilidades relativas son considerables para cada corte. Además, desde el punto de vista de seguridad no es conveniente operar a altas temperaturas ya que se puede alcanzar la temperatura de autoignición de la mezcla y en caso de una liberación accidental generar fuego o explosión.

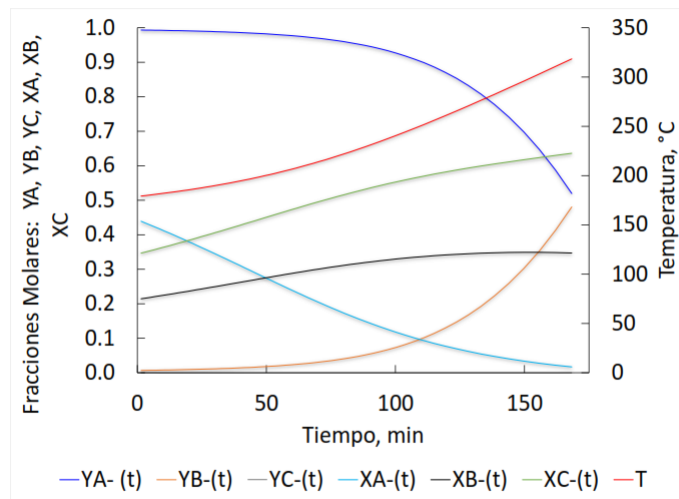


Figura 4.1. Perfil de agotamiento del proceso a presión constante.

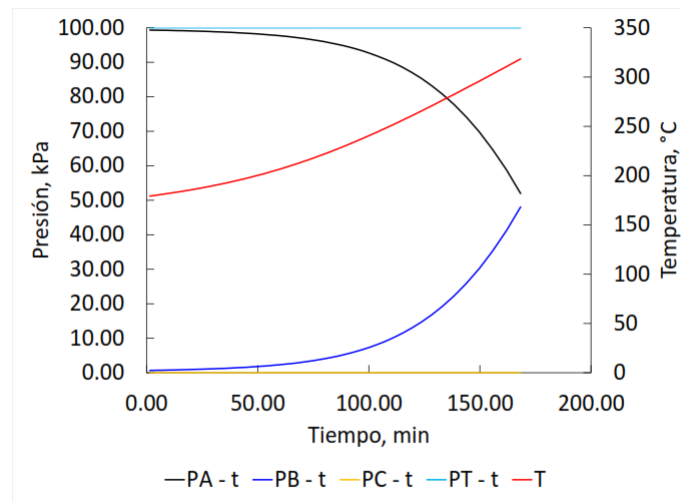


Figura 4.2. Perfil de presiones parciales para la destilación a presión constante.

4.2. Diseño del proceso de destilación a presión y temperatura variable

En la Figura 4.3 se muestra la relación de composiciones en el destilador durante el primer corte, su fracción molar en la fase líquida y en la fase vapor. Para el componente A se logra una separación adecuada a lo largo de la trayectoria del primer corte con composiciones en la fase vapor superiores al 90 % y únicamente en la última parte de este corte se tendrá una cierta cantidad del componente B. En la Figura 4.6 se muestra el perfil de presión en el segundo corte que a diferencia del primero se efectúa con una disminución en la presión, ya que la separación con respecto al componente C no se puede realizar si se mantiene constante la presión.

La Figura 4.4 muestra las composiciones en el destilador durante el segundo corte para cada una de las fases, donde el componente B se encontrará con valores mayores al 90 % en la fase vapor. En este caso se tuvo que hacer un arreglo para eliminar la fase A del vapor, ya que aunque se agote en el primer corte existirán trazas (ppm) en la fase líquida por lo que por simplicidad se estableció su fracción como cero al término del primer corte. Lógicamente, el componente C en la fase líquida se incrementa hasta quedar puro; sin embargo, en la práctica esto no sucede y siempre se tendrán trazas de algún componente

Las presiones de operación del destilador para cada uno de los cortes se presentan en las Figuras 4.5 y 4.6. Para obtener una recuperación aceptable de cada uno de los cortes, es decir, valores de concentración mayores al 90 %, es conveniente iniciar a una presión de vacío de 20 kPa y terminar el proceso a 0.57 kPa.

En la Figura 4.7 se muestra la velocidad de cambio en la cantidad de la mezcla en el destilador hasta que se termina la separación. En el caso de la curva a presión cons-

tante a un tiempo estimado de 168 minutos no se alcanza la especificación residual del componente A (0.017), mientras que en el caso de la curva residual a presión variable el componente A ya se agotó hasta el valor de concentración requerido (0.00029). Esta tendencia se verificó en un periodo de tiempo menor encontrando que los valores de la concentración en cada uno de los componentes es menor, por ejemplo, para un tiempo estimado de 120 minutos la composición del componente A cambia considerablemente, a presión constante se obtiene una composición residual en el destilador de 0.077 mientras que en la destilación a presión variable se alcanza un valor de 0.033, que representa una condición de operación factible a escala industrial.

Podemos establecer que el proceso de destilación por lotes se deberá realizar a vacío con una rampa de calentamiento moderada para alcanzar los niveles de pureza para cada una de las fracciones sin necesidad de utilizar una instalación o equipo especial para dicho fin.

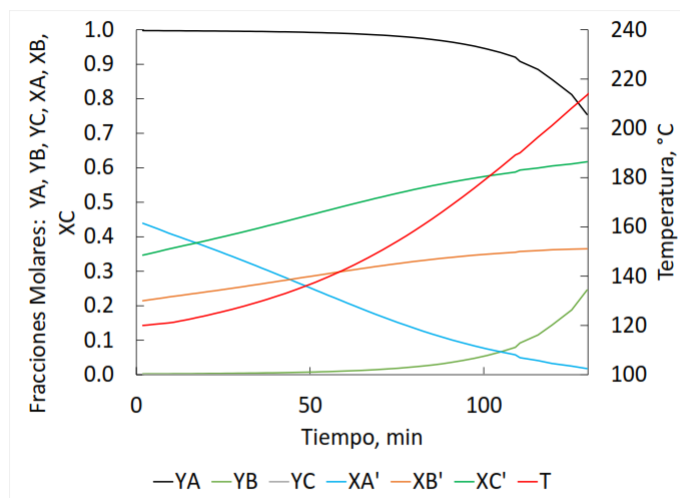


Figura 4.3. Perfil de agotamiento a presión y temperatura variable del primer corte.

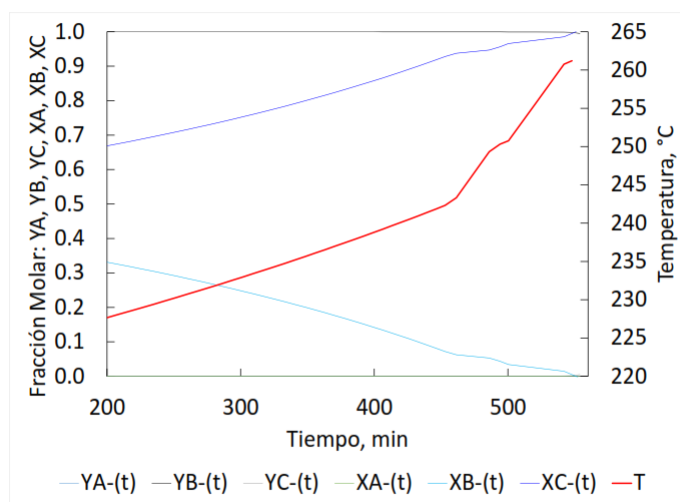


Figura 4.4. Perfil de agotamiento a presión variable para el segundo corte.

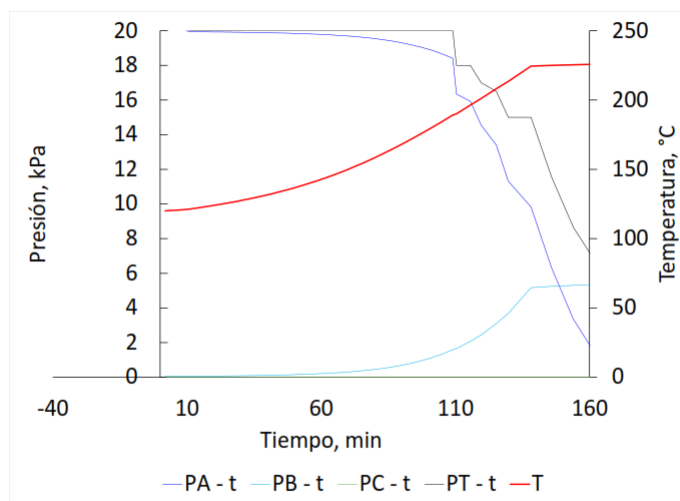


Figura 4.5. Diagrama de presiones parciales para la destilación a vacío del primer corte.

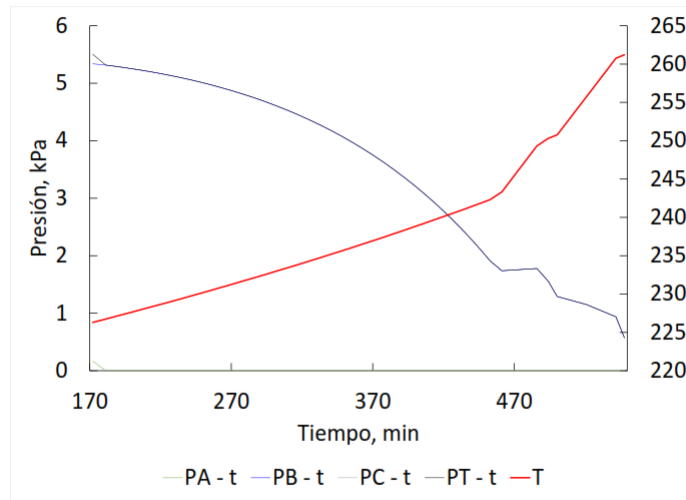


Figura 4.6. Perfil de presiones parciales en el destilador para el segundo corte.

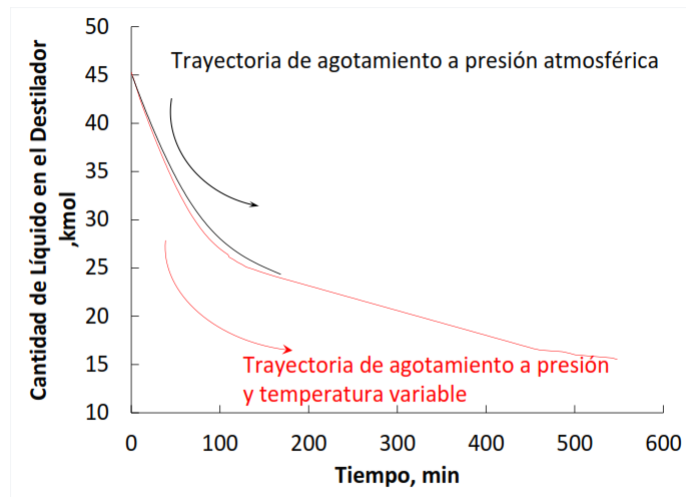


Figura 4.7. Comparativa en la velocidad de agotamiento en el destilador.

4.3. Diseño del intercambiador de calor principal

En la Tabla 4.1 se muestran las condiciones de diseño del equipo para cada uno de los cortes.

Tabla 4.1. Condiciones de diseño del condensador para cada corte.

Corte	Calor, kJ/hr	Flujo Másico, kg/hr	Temperatura de alimentación, °C	Temperatura de salida, °C	Presión, kPa
1	1089017	2194	121	40	20
2	176	259	225	40	15
2	191	292	261	60	0.6
2	183	297	225	60	12

Se toma como caso crítico de servicio a aquel que corresponde con la carga térmica máxima. Este caso tiene más de un orden de magnitud de diferencia con las otras cargas térmicas.

En el caso del primer corte se elige la temperatura de 40°C debido a que la presión de vapor a las condiciones de vacío es baja y en caso de que no se tenga subenfriamiento en el equipo se puede presentar la vaporización del líquido en el tanque acumulador del primer corte. Además, las características del producto del primer corte representan un riesgo latente de fuego o explosión debido a su alta inflamabilidad. Cabe señalar que en el primer corte se tendrá una mezcla en el vapor del componente A y B, y se sabe que en solución el componente B del segundo corte no solidifica y se puede hacer la destilación considerando la temperatura de salida de 40°C.

En el caso del segundo corte se conoce que el compuesto fenilamínico que se está separando tiene una temperatura de fusión de alrededor de 60°C por lo que el proceso deberá considerar que al menos el líquido que salga del condensador tenga esa temperatura.

El proceso del diseño del condensador es iterativo y se deben proponer diseños básicos para poder encontrar una solución económica y técnicamente factible, del balance de materia y energía se obtiene las condiciones de diseño preeliminares, como se muestra en la Tabla 4.2.

Tabla 4.2. Condiciones de diseño termohidráulico del condensador.

Datos de proceso	Lado Coraza		Lado Tubos	
Fluido	Componente A		Agua de enfriamiento	
Flujo total (kg/hr)	2194.21		85276.5	
Vapor (Entrada / Salida)	2194.21	0	0	0
Líquido (Entrada / Salida)	0	2194.21	85276.5	85276.5
Temperatura de entrada / salida (°C)	121	40	25	28.08
Gravedad específica	-	0.7156	0.9975	0.9966
Presión de alimentación (kPa)	20.08		448.166	
Caída de presión permitida (kPa)	5		68.949	
Viscosidad (mN·s/m ²)	0.00063	0.4949	0.8905	0.8312
Calor Especifico (kJ/kg/°C)	2.0794	2.173	4.1797	4.179
Conductividad térmica (W/m/°C)	0.0163	0.126	0.6112	0.6157
Factor de ensuciamiento (m ² K/W)	0.000176		0.000352	

Del cálculo descrito en la sección anterior se obtienen 4 diseños que cumplen con los requerimientos del servicio, en la Tabla 4.3 se muestran las diferentes configuraciones que puede tener el condensador:

Tabla 4.3. Opciones de configuración del condensador.

Parámetro	Diseño 1	Diseño 2	Diseño 3	diseño 4
Área (m ²)	34.16	35.04	47.45	35.04
Carga Térmica (MW)	47.8	53.9	54.2	53.9
LMTD (°C)	47.8	53.9	54.2	53.9
U (W/m ² /K)	304.3	353.7	334.4	353.7
h Coraza (W/m ² /K)	431.2	538.6	508.5	538.6
h tubos (W/m ² /K)	6587.9	6487.4	5118.7	6487.4
Velocidad de la coraza (m/s)	2.92	0.18	0.19	0.18
Velocidad de los tubos (m/s)	1.46	1.43	1.06	1.43
Caída de presión lado coraza (kPa)	0.023	0.143	0.111	0.134
Caída de presión lado tubos (kPa)	18.12	17.4	10.6	17.4
% Sobrediseño	62.71	117.4	179.9	117.4

El diseño se selecciona y se optimiza para garantizar el funcionamiento del equipo en términos de área de transferencia de calor, sobrediseño y velocidad en los tubos, el diseño final se muestra en las Tablas 4.4 y 4.5:

Tabla 4.4. Diseño termohidráulico final del condensador.

Datos de Proceso Lado Coraza Lado Tubos				
Fluido	Componente A		Agua de Enfriamiento	
Flujo total (kg/hr)	2194.21		85276.5	
Vapor (Entrada / Salida)	2194.21	0	0	0
Líquido (Entrada / Salida)	0	2194.21	85276.5	85276.5
Temperatura de entrada / salida (°C)	121	40	25	28.08
Gravedad específica	-	0.7156	0.9975	0.9966
Presión (Entrada / Salida) (kPa)	20.08		448.166	
Caída de presión, total / permitida (kPa)	0.134	5	68.948	17.469
Velocidad, media / máxima (m/s)	0.18		1.43	
Coefficiente de película promedio (W/m ² /K)	538.68		6465.74	
Factor de ensuciamiento (m ² K/W)	0.000176		0.000352	
Desempeño General				
Coefficiente de transferencia de calor Requerido / Limpio / Actual (W/m ² /K)	162.71 / 454.93 / 353.8			
Calor Transferido, Calculado (MW)	0.3033			
Diferencia de temperatura efectiva (°C)	53.9			
DTE = MTD * Delta * (F/G/H) (°C)	55.1 / 0.9778 / 1			

Tabla 4.5. Información mecánica del condensador.

Información de construcción de la coraza			
Tipo de Coraza	AES	Diámetro interno (mm)	488.9
No. Corazas en Serie / Paralelo	1 / 1	Área total (m ²)	35
No. Pasos por la Coraza / Tubos	1 / 2	Área efectiva (m ²)	34.6
Información de las mamparas			
Tipo	Paralelo Doble Segmentada	% Corte	23.51
Pasos	7	Espesor (mm)	6.35
Espaciamiento de entrada (mm)	589.935	Espaciamiento de salida (mm)	303.745
Información de los tubos			
Tipo	Liso	Tubos por coraza	192
Longitud total (m)	3.05	Pct tubos	1.56
Longitud efectiva (m)	3.012	Diámetro externo (mm)	19.05
Espejo (mm)	38.1	Espesor (mm)	2.108
Relación de área (entrada / salida)	1.2842	Paso	28.575
Material	Acero Inoxidable 304	Arreglo °	30

La solución del diseño del condensador indica que es conveniente utilizar mamparas con distancia variable. En la Tabla 4.6 se indica el espaciamiento que deberán tener las mamparas para obtener la transferencia de calor adecuada así como la caída de presión requerida.

A continuación se presentan las gráficas correspondientes al diseño desarrollado del condensador para la carga térmica máxima del equipo. En la Figura 4.8 se aprecia que la mayor carga térmica corresponde con la entrada de los vapores, donde inicia el

Tabla 4.6. Separación de mamparas del condensador.

Región	Cruces por región	Separación de la mampara (mm)
Entrada	1	589.9
Salida	1	303.7
1	1	413.0
2	1	358.7
3	1	409.6
4	1	460.4
5	1	460.4

fenómeno de condensación, evidentemente conforme los vapores fluyen hacia la salida del equipo la carga térmica disminuye ya que el flujo de vapor másico es mucho menor y en el fondo del equipo únicamente se realiza el enfriamiento del líquido condensado, por eso es que sigue una tendencia mas o menos estable a lo largo del equipo.

En la Figura 4.9 se observa que se requiere mayor área de transferencia en la entrada de vapores y que disminuye ligeramente conforme el vapor avanza en el condensador, un aspecto interesante es que se incrementa en la parte frontal del equipo y esto se debe principalmente a que se necesita una mayor área de transferencia de calor para poder condensar el poco vapor remanente que fluye en el equipo.

En la Figura 4.10 se confirma el comportamiento del condensador al tener el coeficiente de transferencia de calor con el vapor más grande en la alimentación de los vapores y que a la salida del equipo se tendrá el coeficiente mas bajo por lo que si lo comparamos con la Figura 4.9 donde se incrementa el área de transferencia de calor se puede establecer que para completar la condensación es necesario tener dicho incremento del área de transferencia.

El perfil de velocidad del vapor en la coraza se muestra en las Figuras 4.11 y 4.12, donde los valores son cercanos entre cada uno de los pasos de la coraza (de 8 a 5 m/s como valores máximos), lo cual disminuye la posibilidad de vibraciones en el equipo.

En el caso de la velocidad de los tubos se mantiene un perfil constante a lo largo del equipo, con un valor 1.4 m/s. La temperatura de película de los tubos alcanza un valor máximo de casi 36°C (ver Figura 4.16), lo cual es un valor aceptable en términos de confiabilidad del proceso, la razón es que esta temperatura es baja, a pesar de que la diferencial de temperatura en términos generales entre el vapor y el líquido es de más de 90°C, evitará que se tenga una incrustación en la pared del tubo. Una alta temperatura puede producir un efecto de solubilidad inversa de las sales del agua que se utiliza como medio de enfriamiento, que con el tiempo produce la disminución de flujo de agua y como consecuencia puntos calientes en secciones específicas del condensador. Como lo menciona Steinhagen (2010), los fenómenos de incrustación o ensuciamiento pueden ocurrir de manera simultánea, es decir aparte de la formación de incrustamiento de sales se pueden tener otro tipo de fenómenos como la acumulación de sólidos (generalmente lodos que contiene el agua de enfriamiento o productos químicos del tratamiento de las torres de enfriamiento) por lo que con el perfil obtenido en este diseño podemos confirmar que la operación será estable a lo largo del ciclo de vida del proceso. Un aspecto importante es que una de las reglas heurísticas para el diseño de los intercambiadores de calor corresponde con mantener velocidades en los tubos para servicios de enfriamiento con un valor mínimo de 1.0 m/s, con este análisis detallado podemos aseverar que es correcta la recomendación y se puede utilizar como base para diseños iniciales.

Para la temperatura general tanto de la coraza como de los tubos se puede observar en las Figuras 4.13, 4.14 y 4.15 que en la entrada de vapores se tiene el gradiente de temperatura mayor tanto para el vapor que se encuentra condensando como para el agua de enfriamiento, cerca de 20°C en el lado de la coraza y casi 2°C en el lado de los tubos, lo cual es un comportamiento adecuado en términos de que no se requiere un

subenfriamiento excesivo del líquido condensado.

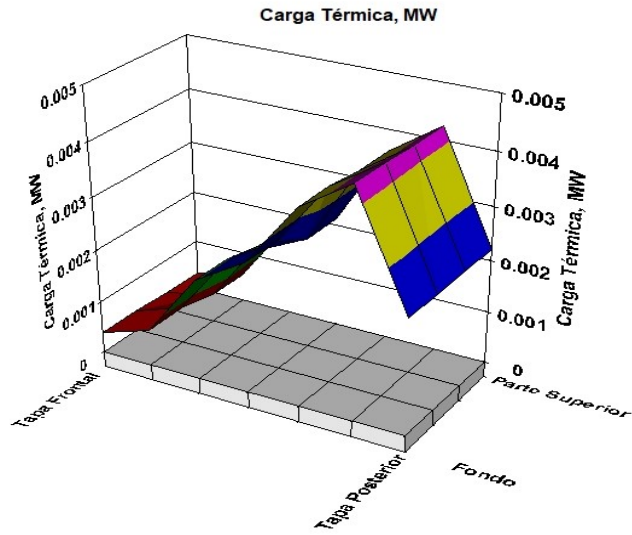


Figura 4.8. Distribución espacial de la carga térmica en el condensador.

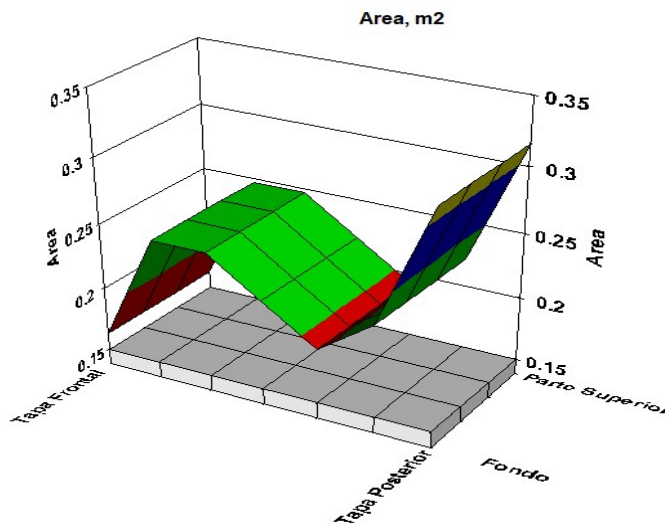


Figura 4.9. Distribución espacial del área de transferencia de calor en el condensador.

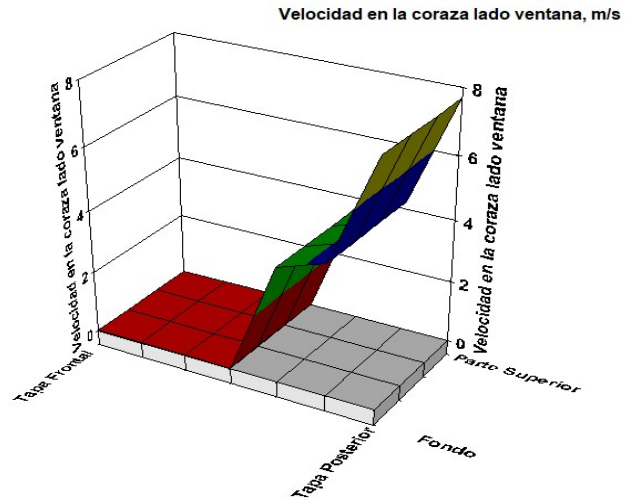


Figura 4.11. Distribución espacial de la velocidad de los vapores en la coraza (sección de ventana).

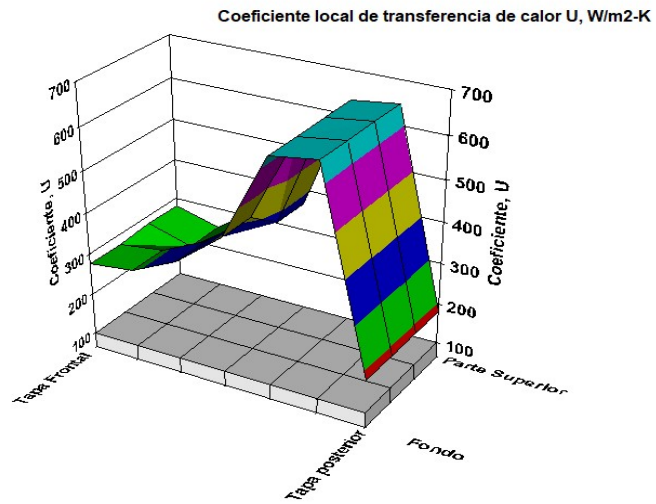


Figura 4.10. Distribución espacial del coeficiente de transferencia de calor en el condensador.

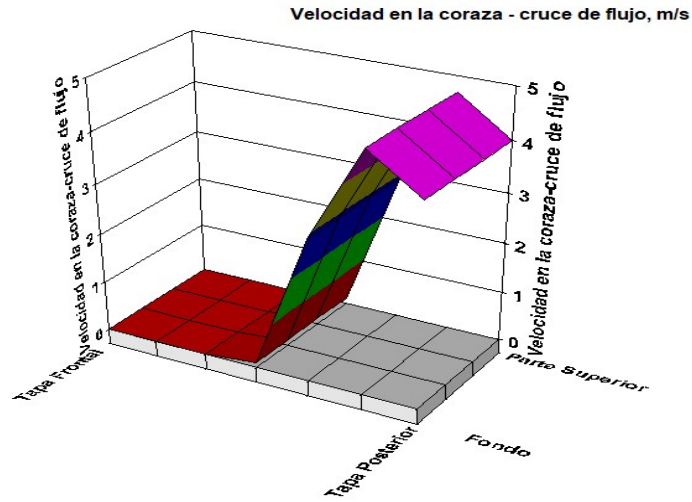


Figura 4.12. Distribución espacial de la velocidad de los vapores en la coraza (sección de cruces).

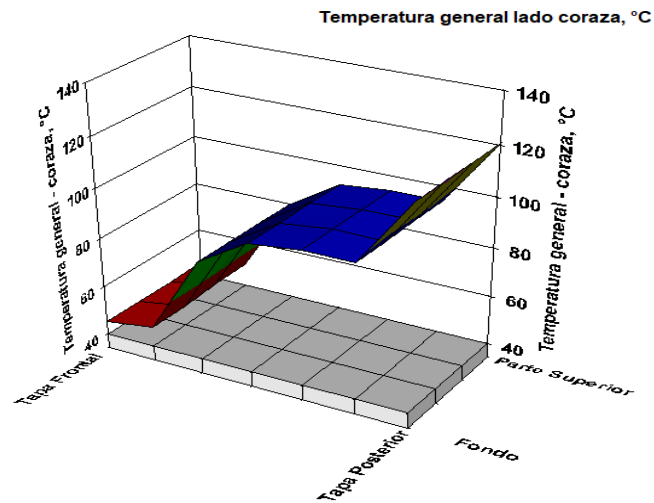


Figura 4.13. Distribución espacial de la temperatura general (lado coraza).

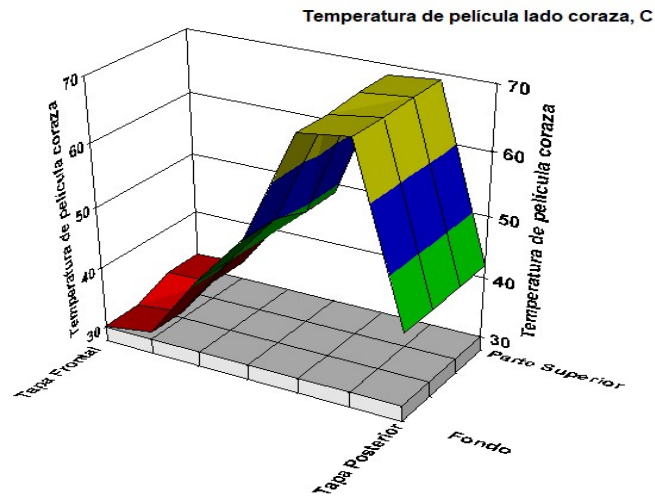


Figura 4.14. Distribución espacial de la temperatura de película (lado coraza).

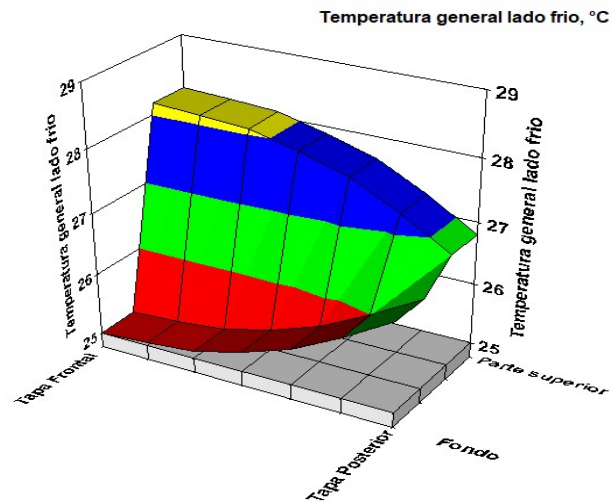


Figura 4.15. Distribución espacial de la temperatura general (lado tubos).

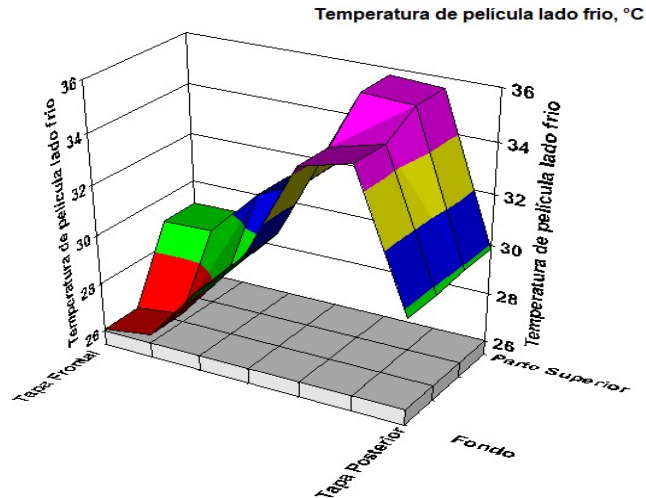


Figura 4.16. Distribución espacial de la temperatura de película (lado frío).

4.4. Simulación dinámica del proceso de destilación por lotes

Para el primer corte se desarrolló la rampa de incremento de flujo de vapor, en la Figura 4.17 se simuló que la carga del flujo másico de vapor es del doble del valor de diseño, ajustando los valores de la sintonía del control de la rampa tanto para los valores de ganancia proporcional como para la integral. Aproximadamente a los 500 segundos de la simulación el valor de la variable de proceso alcanza el punto de ajuste, mientras que la temperatura de salida del líquido condensado incrementa su valor de 40°C hasta casi 48°C, el control de temperatura del agua de enfriamiento trata de alcanzar el valor de 40°C y mueve el flujo de agua hasta un valor de 99550 kg/hr y una temperatura de salida de 28.8°C (ver Figura 4.18), lo cual representa un aumento en el valor del flujo de agua en comparación con el flujo de diseño del equipo de 85276 kg/hr, en términos generales el sistema tendrá que proporcionar 16.7% más del flujo de agua, dado que el diseño de la válvula de control preliminar se realizó considerando

un porcentaje de apertura del 30 % este cambio de flujo será fácilmente manejado por la válvula de control. La temperatura de salida del agua de enfriamiento cambia menos de un grado centígrado por arriba del valor de diseño por lo que se puede esperar que el desempeño del sistema sea el adecuado.

En el segundo corte se simuló el incremento de la carga de vapor, alcanzando el valor del punto de ajuste de 584 kg/hr en un tiempo de alrededor de 500 segundos, obteniéndose una temperatura de salida del líquido de 52 °C, lo cual representa un cambio de 2°C con respecto a las condiciones de diseño, el control de temperatura incrementa el flujo de agua de enfriamiento en respuesta al aumento en el flujo de vapor sin que sea perceptible el cambio en la temperatura del agua de enfriamiento, menos de 1°C (ver Figuras 4.19 y 4.20).

Como se aprecia el sistema responde de manera adecuada a los incrementos en la carga de la cantidad de vapor que se alimenta al equipo, tanto para el primer corte como para el segundo, por lo que podemos concluir que aunque en el futuro se requiera incrementar la velocidad de la destilación, con el diseño propuesto es posible llevar a cabo un aumento en la capacidad de la destilación sin que se requiera modificar la instalación únicamente se deberán ajustar los parámetros de control del sistema, garantizando que los flujos de agua de enfriamiento calculados en la simulación se puedan suministrar y que las válvulas de control se ajusten a dichos parámetros como condición inicial de prueba.

Para el caso de estudio 2 donde se simula que existe una reducción en el flujo de agua del 50 % del valor de diseño (ver Figuras 4.21 y 4.22), se encuentra que para el primer caso el líquido condensado incrementa su temperatura cerca de 3°C, sin que se identifique una pérdida de vapores durante la condensación, pero en el caso del medio de condensación, que es el agua de enfriamiento, la temperatura de salida se incrementa

en más de 6°C con respecto al valor de 28°C , lo cual es un cambio considerable para la operación de este medio. Para verificar el efecto que podría tener en la confiabilidad del equipo, a estas condiciones se lleva a cabo la simulación en estado estacionario del diseño detallado del condensador, encontrando que la temperatura de película de los tubos aumenta cerca de 7°C , obteniendo cerca de 42°C , que a pesar de no ser un valor muy elevado que fomente la incrustación en la pared de los tubos es un síntoma temprano de que el equipo está modificando su comportamiento, a estas condiciones se puede configurar una alarma en el sistema de monitoreo y control de proceso que permita de manera preventiva planear la inspección y limpieza del equipo. Tomando como referencia estos valores se podría establecer la alarma al valor de la mitad del resultado obtenido en esta simulación para el primer corte, es decir 31°C .

En el caso del segundo corte el efecto de disminuir el flujo del medio de enfriamiento no es perceptible, aun cuando la temperatura es muy elevada, debido principalmente a que este corte tiene la menor carga térmica y que, en comparación con el primer corte, el exceso de área para este corte podrá compensar la deficiencia de agua de enfriamiento sin tener un mayor problema en la destilación (ver Figuras 4.23 y 4.24). Un aspecto relevante para considerar es que la temperatura de película de los tubos es muy elevada cuando se reduce el flujo de agua a la mitad del valor, cerca de 61°C , por lo que en caso de que no se pueda realizar la limpieza del equipo se podría limitar el valor de la temperatura de alimentación de agua de enfriamiento hasta un valor de 45°C , donde se obtendrá una temperatura de película de aproximadamente 42°C siendo aceptable para evitar la formación de sales en el equipo. Dado que el valor de la alarma indicado en el caso del corte 1 es menor que la temperatura de salida del agua de enfriamiento del corte 2 podemos establecer que será válida para el proceso.

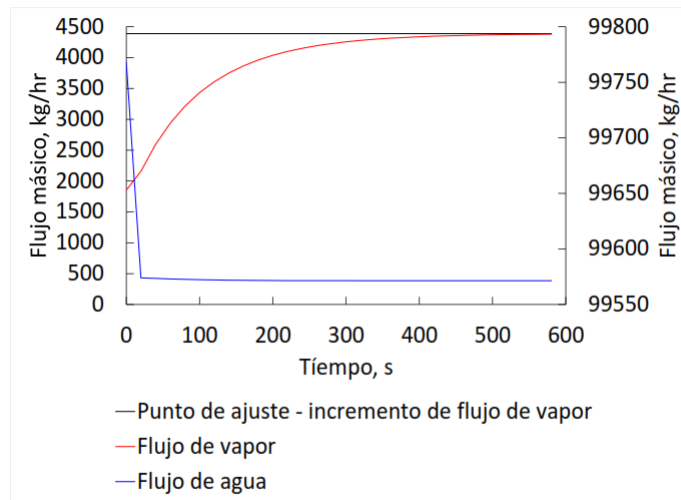


Figura 4.17. Rampa velocidad de incremento de flujo para el vapor en el primer corte.

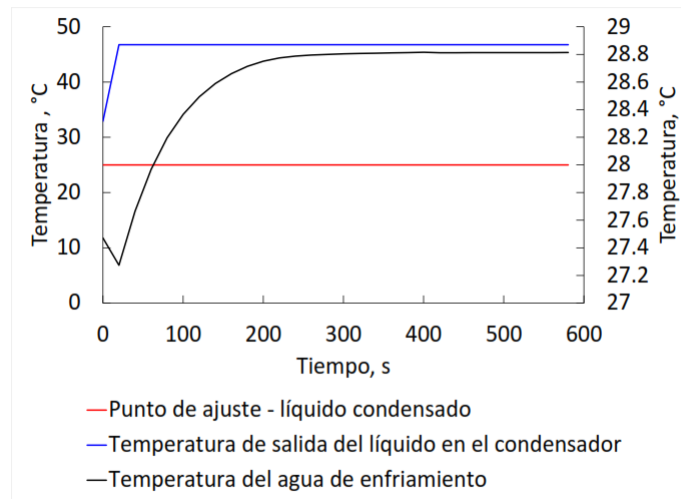


Figura 4.18. Perfil de incremento de temperatura a la salida del líquido en el condensador.

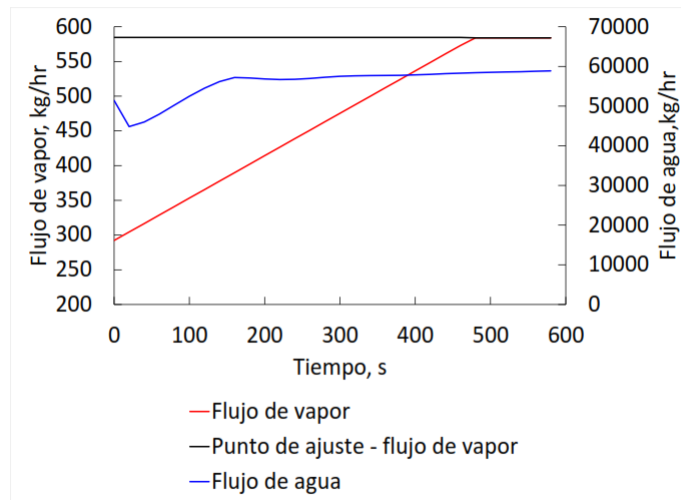


Figura 4.19. Rampa de incremento de flujo del segundo corte.

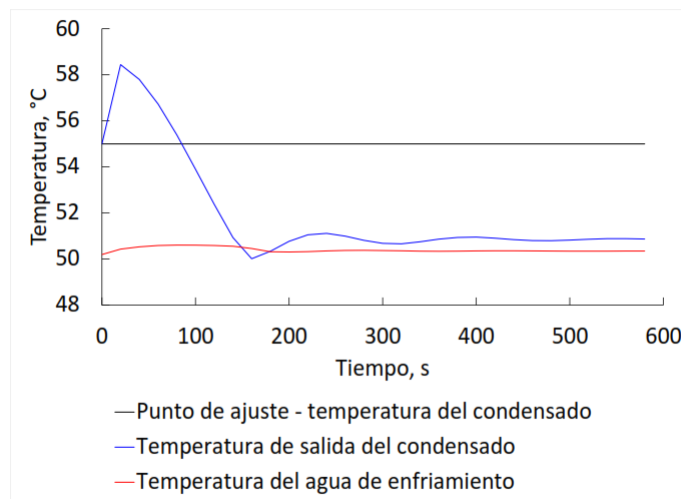


Figura 4.20. Control de temperatura del segundo corte con incremento de flujo del corte 2.

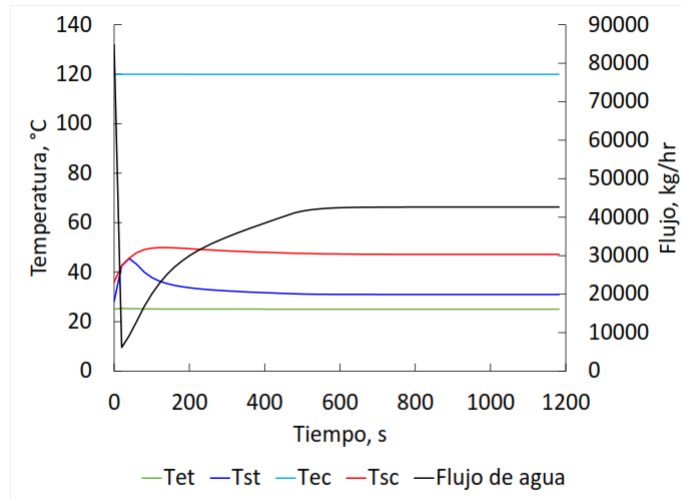


Figura 4.21. Perfil de flujo de agua con disminución del 50 % de flujo para el corte 1. Tet - Temperatura de entrada de los tubos, Tst - Temperatura de salida de los tubos, Tec - Temperatura de entrada de la coraza, Tsc - Temperatura de salida de la coraza.

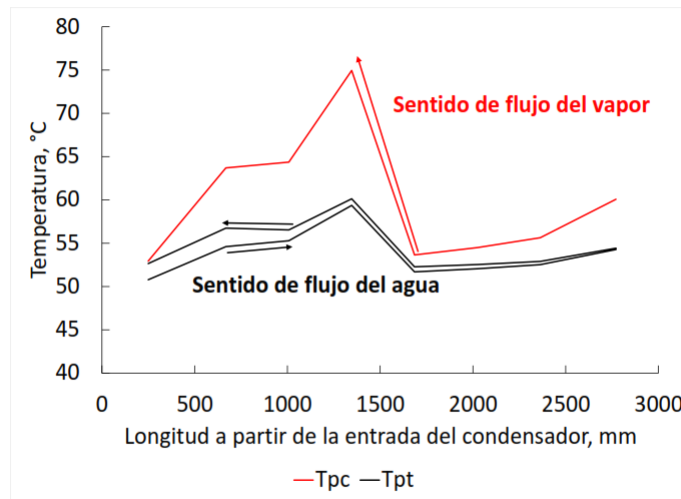


Figura 4.22. Perfil longitudinal de temperaturas en el condensador con reducción de flujo de agua para el corte 1. Tpc, Tpt: Temperaturas de película del lado coraza y lado tubos, respectivamente.

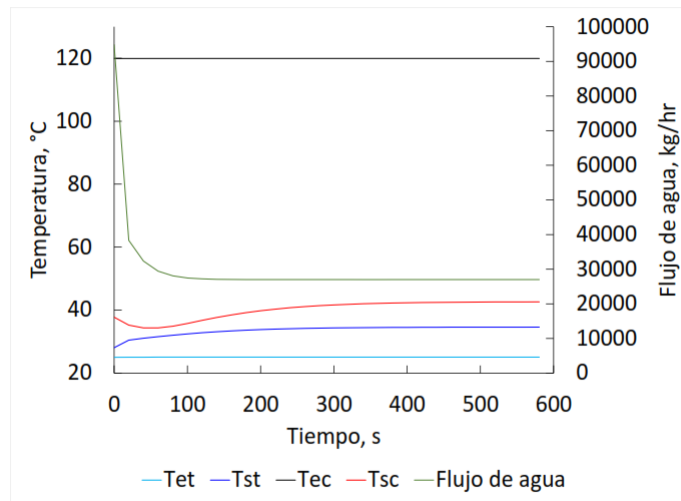


Figura 4.23. Perfil de reducción de flujo de agua en el condensador para el corte 2. Tet: Temperatura de entrada de los tubos, Tst: Temperatura de salida de los tubos, Tec - Temperatura de entrada de la coraza, Tsc - Temperatura de salida de la coraza.

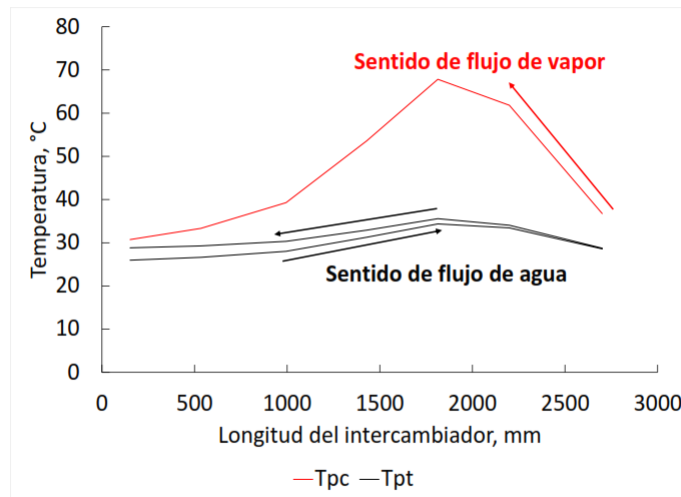


Figura 4.24. Perfil longitudinal de temperaturas en el condensador con reducción de flujo de agua del corte 2. Tpc - Temperatura de película del lado coraza, Tpt - temperatura de película lado tubos.

V. Conclusiones

A partir de las curvas de destilación obtenidas se puede concluir que la separación de la mezcla de compuestos fenilamínicos se debe llevar a cabo a presión reducida y temperatura variable, ya que una destilación a presión atmosférica no es factible por las elevadas temperaturas requeridas por el proceso.

La curva de agotamiento residual a presión y temperatura variable permite observar que la estrategia de mantener la presión en los pasos de separación e incrementar la temperatura de manera gradual en forma de rampa hace posible alcanzar elevadas concentraciones de los diferentes cortes, siendo necesario cambiar tanto la presión como la temperatura al final de éstos para que la cantidad residual de cada componente se separe.

El diseño del condensador para la carga térmica mayor de cada corte presenta la mejor opción en términos de flexibilidad, costo y confiabilidad del proceso. En este caso se utilizó la carga térmica del primer corte y se verificó con el segundo corte, obteniendo resultados satisfactorios para cada uno de los casos. Con la simulación dinámica del proceso se confirmó que a lo largo del ciclo de vida del proceso el desempeño de la destilación será el adecuado aun cuando se requiera reducir el tiempo de destilación o se tengan problemas de operación con el condensador.

Bibliografía

- Binous, H., y Al-Harhi, M. (2012). Simple batch distillation of binary mixture. *Computer Applications in Engineering Education*, 22(4), 649-657.
- Bouhairie, S. (2012). Selecting baffles for shell-and-tubes heat exchangers. *Chemical Engineering Progress*, 27-33.
- Doherty, M., y Malone, M. (2001). *Conceptual design of distillation systems*. McGraw-Hill.
- Doherty, M., y Perkins, J. (1978). On the dynamics of distillation processes-i. the simple distillation of multicomponent non-reacting, homogeneous liquid mixtures. *Chemical Engineering Science*, 33(3), 281-301.
- Gmehling, J., Kolbe, B., Kleiber, M., y Rarey, J. (2012). *Chemical thermodynamics for process simulation*. Wiley-VCH Verlag and Co.
- J., L. (2017). Key design considerations for vacuum process condensers. *Hydrocarbon Processing Magazine*, 77-81.
- Kern, D. Q. (1999). *Procesos de transferencia de calor*. Compañía Editorial Continental.
- Kister, H. Z. (1992). *Distillation design*. McGraw-Hill.
- Kumar, R., y Kishore, P. S. (2017). Experimental study of condensation in a shell and tube heat exchanger in the presence of a noncondensable gas. *Heat Transfer - Asian Research*, 46(6), 511-531.
- Liu, S. X., y Peng, M. (2006). The simulation of the simple batch distillation of multiple-component mixtures via rayleigh's equation. *Computer Applications in Engineering Education*, 15(2), 198-204.
- Ludwig, E. E. (2007). *Applied process design for chemical and petrochemical plants*.

Gulf Publishing.

- Matsubaya, O., y Matsuo, S. (1982). Limitation to the application of rayleigh distillation. *GEOCHEMICAL JOURNAL*, 16, 149-156.
- Mujtaba, I. M. (2004). *Batch distillation design and operation*. Imperial College Press.
- Poling, B. E., Wilding, W. V., Thomson, G. H., Friend, D. G., y Rowley, R. L. (2008). *Section 2 physical and chemical data. perrys chemical engineers handbook*. McGraw- Hill.
- Rayleigh, L. (1902). On the distillation of binary mixtures. *Philosophical magazine and journal of science*, 4, 521.
- Steinhagen, H. M. (2010). *Vdi atlas*. Springer.
- Tabil, M. S. . L. D. . L. D. W. . L. G. (Ed.). (2018). *Applications in lubricants lubrication tribology*. Intechopen.
- Taylor, R., Baur, R., y Krishna, R. (2004). Influence of mass transfer in distillation: Residue curves and total reflux. *AIChE Journal*, 50(12), 3134-3148.
- Towler, R. S. G. (2012). *Chemical engineering design*. Elsevier.
- Turton, R., Bailie, R. C., Whiting, W. B., y Shaeiwitz, J. A. (2009). *Analysis, synthesis, and design of chemical proceses*. Prentice Hall.
- Upreti, S. R. (2017). *Process modeling and simulation for chemical engineers theory and practice*. John Wiley and Sons.
- Vuddagiri, S. R., y Eubank, P. T. (1998). Condensation of mixed vapors and thermodynamics. *AIChE Journal*, 44(11), 2526-2541.