

Cálculo de operaciones de separación con Mathcad®

Asunción Santafé Moros
José Marcial Gozávez Zafrilla
Jaime Lora García

$$2 \times \pi \times R \times \frac{V}{\pi R^2}$$
$$+ \pi R^2$$
$$= \sqrt[3]{\frac{100}{3,14}} = 3,17$$
$$(a+b)x + (4a^3$$

Asunción Santafé Moros
José M. Gozávez Zafrilla
Jaime Lora García

Cálculo de operaciones de separación con Mathcad

EDITORIAL
UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Los contenidos de esta publicación han sido revisados por el departamento de Ingeniería Química y Nuclear de la UPV

Colección Académica

Para referenciar esta publicación utilice la siguiente cita: SANTAFÉ-MOROS, A., GOZÁLVEZ-ZAFRILLA, J.M., y LORA-GARCÍA, J.(2013). *Cálculo de operaciones de separación con Mathcad*. Valencia: Universitat Politècnica

Primera edición, 2013 (versión impresa)
Primera edición, 2013 (versión electrónica)

© Asunción Santafé-Moros
José M Gozávez-Zafrilla
Jaime Lora-García

© de la presente edición: Editorial Universitat Politècnica de València
Distribución: Telf.: 963 877 012 / <http://www.lalibreria.upv.es> / Ref.6132

ISBN: 978-84-9048-094-6 (versión impresa)
ISBN: 978-84-9048-095-3 (versión electrónica)

Queda prohibida la reproducción, la distribución, la comercialización, la transformación y, en general, cualquier otra forma de explotación, por cualquier procedimiento, de la totalidad o de cualquier parte de esta obra sin autorización expresa y por escrito de los autores.

PRÓLOGO

Este libro trata sobre los métodos de cálculo de operaciones de separación, resultando interesante tanto para el aprendizaje de estos cálculos como material de apoyo para cálculos industriales.

Si bien a lo largo de todo el libro se recuerdan constantemente los conceptos teóricos necesarios, hay que destacar que el objetivo de este libro no es enseñar la teoría de los procesos de separación o describir los equipos de separación sino que debe ser utilizado tras haber recibido conceptos teóricos de operaciones de separación a través de otros libros. Los autores indicamos en el apartado de bibliografía algunas referencias que desarrollan la teoría de las operaciones de separación estudiadas en este libro.

Todos los cálculos del libro están realizados de forma completa en MATHCAD® acompañados de explicaciones. El motivo de la elección de este entorno de cálculo es la similitud del código con la notación matemática convencional, por lo que resulta muy adecuado para ilustrar los cálculos.

Los autores esperamos que disfruten aprendiendo con este libro y que les sea de utilidad.

ÍNDICE

1	EQUILIBRIO DE LA ABSORCIÓN.....	13
1.1	Introducción	13
1.2	Notación empleada en absorción y desorción	14
1.2.1	Conversión entre fracción y razón.....	15
1.3	Equilibrio de la absorción	15
1.3.1	Leyes de Henry y de Raoult	15
1.3.2	Uso de modelos para casos no ideales	17
1.3.3	Interpolación a partir de datos experimentales	19
1.3.4	Función de equilibrio en razones	19
2	ABSORCIÓN ISOTERMA	23
2.1	Introducción	23
2.2	Caso ABS-1: Torre de absorción isoterma.....	23
2.3	Balances en una torre de absorción.....	24
2.4	Línea de operación mínima	26
2.5	Corriente líquida dada la relación de líquido respecto del mínimo	30
2.6	Número de platos ideales a partir de la línea de operación	31
2.7	Número de platos reales a partir de la línea de operación.....	35
2.8	Caso ABS-2: Absorción en flujo cruzado	38
2.9	Cálculo de la operación de absorción en flujo cruzado.....	38
3	DESORCIÓN.....	43
3.1	Introducción	43
3.2	Caso DES-1: Torre de desorción	43
3.3	Cálculos previos y balances en la torre de desorción	45
3.4	Determinación de la situación mínima.....	46
3.5	Determinación del flujo de gas necesario.....	47
3.6	Número de platos ideales a partir de la línea de operación	48
3.7	Número de platos reales a partir de la línea de operación.....	50
3.8	Caso DES-2: Etapas de desorción en flujo cruzado	52

3.9	Cálculo de la operación de desorción en flujo cruzado.....	52
4	EQUILIBRIO DE LA DESTILACIÓN	57
4.1	Introducción	57
4.2	Notación empleada en los temas de destilación	57
4.3	Definición del equilibrio en destilación.....	58
4.3.1	Funciones de interpolación de los datos de equilibrio	59
4.3.2	Presión de vapor de los compuestos	60
4.3.3	Modelo ideal del equilibrio líquido-vapor	60
4.3.4	Empleo de modelos termodinámicos para definir el equilibrio... ..	62
4.4	Definición de la entalpía de las mezclas en Mathcad	65
4.4.1	Mezcla ideal.....	65
4.4.2	Mezclas no ideales	66
5	DESTILACIÓN INSTANTÁNEA	71
5.1	Introducción	71
5.2	Caso DEST-1: Destilación instantánea	71
5.3	Balances de materia en la etapa de destilación.....	72
5.4	Calor necesario.....	74
5.5	Equilibrio de reparto en una etapa ideal.....	74
5.5.1	Subrutina para el cálculo del reparto.....	74
5.5.2	Cálculo del reparto mediante la subrutina reparto	76
5.5.3	Resoluciones alternativas del reparto	77
5.6	Estudio del efecto del grado de vaporización.....	78
6	TORRES DE DESTILACIÓN: MÉTODO DE McCABE-THIELE	83
6.1	Introducción	83
6.2	Caso DEST-2: Torre de destilación (McCabe-Thiele).....	84
6.3	Balances globales en la torre	84
6.4	Número mínimo de etapas ideales.....	85
6.5	Obtención de la relación de reflujo mínima	87
6.6	Obtención del número de etapas ideales.....	88
6.6.1	Representación gráfica.....	90

6.7	Perfiles de flujos, composición y temperatura.....	91
6.8	Estudio del efecto del reflujo sobre el número de etapas ideales.....	92
7	TORRES DE DESTILACIÓN: MÉTODO DE PONCHON-SAVARIT.....	97
7.1	Introducción.....	97
7.2	Caso DEST-3: Torre de destilación (Ponchon-Savarit).....	97
7.3	Número mínimo de etapas ideales.....	97
7.4	Relación de reflujo mínima:.....	100
7.5	Cargas térmicas del condensador y calderín.....	101
7.6	Cálculo de las etapas ideales de la rectificación.....	103
7.6.1	Representación del número de etapas.....	104
7.7	Cálculo de los flujos a partir de balances de materia.....	106
7.8	Estudio de la variación del número de etapas con el reflujo.....	109
8	EQUILIBRIO DE EXTRACCIÓN LÍQUIDO – LÍQUIDO.....	113
8.1	Introducción.....	113
8.2	Notación empleada en extracción líquido-líquido.....	113
8.3	Definición del equilibrio en extracción líquido-líquido.....	115
8.3.1	Definición de las composiciones en base libre de disolvente..	117
8.4	Definición en Mathcad del equilibrio de extracción líquido-líquido.....	117
8.4.1	Interpolación del equilibrio a partir de datos experimentales...	118
8.5	Cálculo del reparto para una etapa de equilibrio ideal.....	120
9	EXTRACCIÓN LÍQUIDO – LÍQUIDO EN FLUJO CRUZADO.....	125
9.1	Introducción.....	125
9.2	Caso de estudio ELL-1:.....	125
9.3	Cálculo de una etapa de equilibrio mediante balances.....	126
9.4	Aplicación a varias etapas de flujo cruzado.....	130
9.5	Disolvente necesario para realizar el proceso con una etapa.....	133
9.6	Estudio en función del número de etapas empleado.....	134
10	EXTRACCIÓN LÍQUIDO-LÍQUIDO A CONTRACORRIENTE.....	139
10.1	Introducción.....	139
10.2	Caso de estudio ELL-2.....	139

10.3 Cálculo de la cantidad mínima de disolvente	139
10.4 Cálculo del número de etapas teóricas	142
11 EQUILIBRIO DE EXTRACCIÓN SÓLIDO – LÍQUIDO.....	149
11.1 Introducción	149
11.2 Notación empleada en extracción sólido-líquido.....	149
11.3 Definición del equilibrio en extracción sólido-líquido.....	151
11.4 Definición en Mathcad del equilibrio de extracción sólido-líquido.....	152
11.5 Cálculo del reparto para una etapa	154
12 EXTRACCIÓN SÓLIDO – LÍQUIDO EN FLUJO CRUZADO.....	157
12.1 Introducción	157
12.2 Caso de estudio ESL-1.....	157
12.3 Cálculo de las etapas de extracción.....	157
13 EXTRACCIÓN SÓLIDO-LÍQUIDO A CONTRACORRIENTE	165
13.1 Introducción	165
13.2 Caso de estudio ESL-2.....	165
13.3 Cálculo de la cantidad mínima de disolvente	165
14 PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE LA EVAPORACIÓN	171
14.1 Introducción	171
14.2 Propiedades del agua.....	171
14.3 Entalpía de las disoluciones acuosas de NaOH.....	173
14.4 Rectas de Dühring para disoluciones acuosas de NaOH	174
15 EVAPORACIÓN EN EFECTO SIMPLE	179
15.1 Introducción	179
15.2 Notación empleada en evaporación	179
15.3 Caso de estudio EVAP-1	180
15.4 Cálculo de la cantidad de vapor de calefacción	180
15.5 Cálculo de la superficie de calefacción	182
16 ANEXO DE MÉTODOS MATEMÁTICOS	187
16.1 Interpolación	187
16.2 Resolución numérica de una ecuación.....	189

16.3 Resolución numérica de sistemas de ecuaciones algebraicas	191
16.3.1 Búsqueda de errores dentro de la zona Given-find	197
16.4 Subrutinas auxiliares en Mathcad	198
16.4.1 Líneas	198
16.4.2 Intersecciones	198
16.4.3 Tangencia	200
16.4.4 Inversión de coordenadas de vectores	200
16.4.5 Vector de puntos espaciados uniformemente	201
16.4.6 Paso de valores de etapa a coordenadas gráficas	201
BIBLIOGRAFÍA	205

CAPÍTULO 1

EQUILIBRIO DE LA ABSORCIÓN

1 EQUILIBRIO DE LA ABSORCIÓN

1.1 Introducción

La absorción es una operación de separación desde un gas mediante la intermediación de un líquido. El fundamento físico de la operación es que uno o varios componentes presentes en el gas tienen una afinidad por el líquido muchísimo más grande que el resto y que al ponerse en contacto el gas con el líquido pasan al seno de éste, es decir son absorbidos (Figura 1.1). Los componentes que no son absorbidos apreciablemente se denominan como 'inertes'.

En nuestro caso se estudiará la absorción de un componente clave al que se denominará 'componente A', si bien, los cálculos son fácilmente adaptables a la absorción de más de un componente.

El equilibrio de absorción se ve favorecido generalmente por el aumento de la presión y el descenso de la temperatura. También para favorecer la absorción se añade al líquido una sustancia capaz de reaccionar con el componente que se absorbe. La absorción con reacción química no es tratada en los problemas, si bien la aproximación de cálculo etapa a etapa que se ofrece en el libro puede servir para desarrollarla.

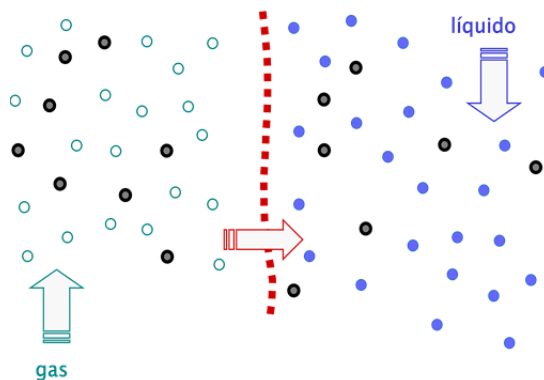


Figura 1.1. Fenómeno de absorción

1.2 Notación empleada en absorción y desorción

La notación empleada en los temas de absorción y desorción se puede ver en la Tabla 1.1. Respecto de las variables que se refieren a la composición (fracciones o razones) hay que notar que si no se especifica ningún componente se refieren al componente 'A'.

Tabla 1.1. Notación del tema

<i>Variables</i>	
x	Fracción (de A) en el líquido
y	Fracción (de A) en el gas
z	Fracción (de A) (en líquido o gas)
X	Razón (de A) en el líquido
Y	Razón (de A) en el gas
Z	Razón (de A) (en líquido o gas)
L	Flujo molar de líquido
G	Flujo molar de gas
T	Temperatura
<i>Subíndices</i>	
A	Componente que se transfiere entre líquido y gas
B	Componente(s) inerte(s) del líquido (no transferidos)
C	Componente(s) inerte(s) del gas (no transferidos)
i	Componente genérico
a	Cabeza de la torre (extremo superior)
b	Cola de la torre (extremo inferior)
e	Corriente de entrada a una etapa
k	Corriente saliente de la etapa k
s	Corriente de salida de una etapa

1.2.1 Conversión entre fracción y razón

La fracción de A representa la relación entre la cantidad de A y la cantidad total, de esta manera si existe en la mezcla solo otro componente B , se tiene:

$$z = \frac{m_A}{m_A + m_B}$$

La razón de A representa la relación entre la cantidad de A y lo que no es A . Si existe en la mezcla exclusivamente otro componente B , se tiene:

$$Z = \frac{m_A}{m_B}$$

Es fácil demostrar las siguientes expresiones que permiten convertir de un tipo de variable a otro:

Paso de fracción a razón:

$$\text{razón}(z) := \frac{z}{1 - z}$$

Paso de razón a fracción:

$$\text{fracción}(Z) := \frac{Z}{1 + Z}$$

1.3 Equilibrio de la absorción

Para poder calcular la absorción se necesita definir el equilibrio, es decir conocer como es la composición del gas a partir de la composición en el líquido.

En los cálculos de absorción en torre de relleno interesa que la composición esté en fracciones, pero para el cálculo de etapas resulta más conveniente la expresión en razones.

1.3.1 Leyes de Henry y de Raoult

La Figura 1.2 muestra el comportamiento de la fugacidad del componente frente a la composición en un sistema binario. A presiones moderadas, la fugacidad puede asimilarse a la presión parcial. Como se puede ver, las mezclas ideales

cumplen la ley de Raoult en todo el rango de composición siendo la presión parcial del componente en el gas proporcional a la presión de vapor del componente. Las mezclas no ideales no cumplen la ley de Raoult, pero sí ley de Henry para concentraciones suficientemente bajas, según esta ley la presión parcial de un componente en la fase gaseosa muestra una relación lineal aproximada con la fracción de componente en el líquido.

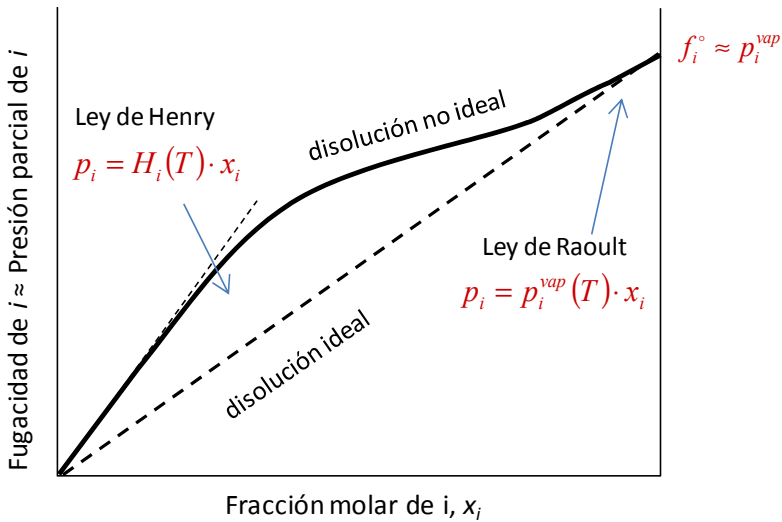


Figura 1.2. Leyes de Henry y de Raoult

Ley de Raoult:

$$y = \frac{p_{vap,A}(T)}{p_t} \cdot x$$

Ley de Henry:

$$y = \frac{H_A(T)}{p_t} \cdot x$$

1.3.2 Uso de modelos para casos no ideales

Para disoluciones no ideales es necesario corregir las leyes ideales utilizando coeficientes de actividad correspondiente a un modelo termodinámico determinado. De esta manera, se tendrían dos casos:

- a) Para temperatura por encima de la temperatura crítica del gas:

$$y = \left(\frac{\gamma_A(T, x)}{\gamma_A^\infty} \right) \cdot \frac{H_A(T)}{p_t} \cdot x$$

- b) Para temperatura por debajo de la temperatura crítica del gas:

$$y = \gamma_A(T, x) \cdot \frac{p_{vap,A}(T)}{p_t} \cdot x$$

Ejemplo 1-1

Se tiene un gas a 1 atm y 25°C (por encima de su temperatura crítica).

Se pide obtener la expresión de equilibrio para una constante de Henry de 2.3×10^6 Pa cuando los coeficientes de Van Laar entre el componente absorbido (1) y el componente mayoritario del líquido (2) son $A_{12} = 1.016$, $A_{21} = 1.355$.

Represéntese la curva de equilibrio y compárese con la expresión de Henry.

Los datos asignados en Mathcad son:

$$A_{12} := 1.016$$

$$A_{21} := 1.355$$

$$p_t := 101300 \cdot \text{Pa}$$

$$H := 2.3 \cdot 10^6 \cdot \text{Pa}$$

La expresión de equilibrio correspondiente a la ley de Henry es:

$$y_{\text{eqH}}(x) := \frac{H}{p_t} \cdot x$$

La expresión de Van Laar es:

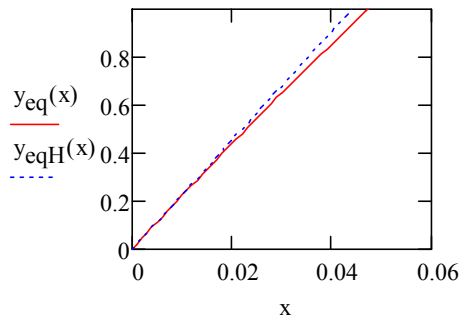
$$\ln(\gamma_A) = A_{12} \cdot \left(\frac{x_1}{x_2} \cdot \frac{A_{12}}{A_{21}} \right)^{-2}$$

A dilución infinita se tiene:

$$\ln(\gamma_A^\infty) = \lim_{x \rightarrow 0} [\ln(\gamma(x))] = A_{12}$$

$$y_{\text{eq}}(x) := \frac{\exp \left[A_{12} \cdot \left[1 + \frac{x}{(1-x)} \cdot \frac{A_{12}}{A_{21}} \right]^{-2} \right]}{\exp(A_{12})} \cdot \frac{H}{p_t} \cdot x$$

$$x := 0, 0.001 .. 0.05$$



Para seguir leyendo haga click aquí