

AAU

AMERICAN ANDRAGOGY
UNIVERSITY



ANÁLISIS Y SIMULACIÓN
DE PROCESOS DE REFINACIÓN DEL PETRÓLEO

CONTENIDO

Prefacio	9
Introducción	11
Subdivisión de una refinería	15
Equipo principal en los procesos de una refinería	24
Principios para el análisis y simulación de procesos de refinación	26
Base de datos	27
Análisis termodinámico de procesos de refinación	33
Balance de materia	33
Sistemas con reacción química	33
Sistema sin reacción química	35
La conservación de la masa	35
Conservación de masa en procesos en estado no estacionario	38
Balance de energía y entropía	39
Trabajo	39
Calor	40
Balance de energía	41
Sistemas cerrados	42
Compresores y expansores operando en régimen permanente	42
Balance de entropía	43
Aprovechamiento y recuperación de energía	47
El reactor tubular catalítico	48
El regenerador	57
Simulación de procesos de refinación	61
Cómo realizar una simulación	65
Las técnicas de simulación digital	67
Diagramas de proceso	67
El problema de reflujos en plantas petroquímicas	68
La unidad de cómputo	69

Diagramas de información de flujo a partir de información del proceso	70
Información numérica a partir de diagramas de información de flujo	71
Base de datos	72
Propiedades físicas	72
Información sobre el equipo	74
Información sobre costos	74
Estrategia en la simulación	74
La decisión de modelar	76
Ejemplos	77
Desarrollo de un programa para modelar un mezclador de gases	78
Análisis macroscópico de los fenómenos de transporte en procesos de refinación	83
Transporte de <i>momentum</i>	83
Fluidos en reposo	84
Fluidos en movimiento	85
Segunda ley de Newton del movimiento	86
La ecuación de Bernoulli	88
Flujo en conductos cerrados	89
Transporte de calor	91
Conducción de energía	92
Convección de energía	93
Radiación de energía	95
Mecanismos combinados de transferencia de energía	96
Equipo industrial de transferencia de energía	97
Análisis de intercambiadores de paso sencillo.	98
Transporte de masa	100
Transferencia de masa de interfaz	102
Teoría de la doble resistencia	103
Equipo de transferencia de masa	106
Ecuaciones diferenciales para las transferencias de masa, <i>momentum</i> y de energía	108
Bibliografía	115

2 Análisis y simulación de procesos de refinación del petróleo

3. Realizar balances de materia, energía y entropía en un equipo de los que se encuentran en la operación de una refinería, identificando las entradas y salidas.
4. Analizar la o las transferencias de *momentum*, calor y masa que se estén llevando a cabo en un equipo.
5. Conocer los pasos fundamentales para la simulación de la operación de un equipo.
6. Ayudar a desarrollar la habilidad para realizar un análisis crítico de ingeniería de proceso en las operaciones principales que se pueden encontrar en una refinería de petróleo.

El trabajo no incluye un tratamiento matemático riguroso de las ecuaciones que en él se presentan; es decir, se da por sentado que el lector cuenta con los antecedentes académicos necesarios para tomar como ciertas todas las formulaciones de las leyes y de los principios involucrados en el libro. Tampoco incluye la parte económica relacionada con la inversión que se requiere para la instalación de una planta con cualquiera de los procesos que se tratan en el libro; en este aspecto se recomienda consultar la obra de Speight (1991).

La primera pregunta que se hace uno alrededor del petróleo es la de: ~~¿qué se hace en una refinería de petróleo? A continuación se responde en~~ términos de la utilidad que tiene para el ser humano.

Una refinería es una planta de manufactura de productos químicos y combustibles. Como se puede observar en la figura 1, la materia prima es petróleo crudo y los productos finales son gasolina, querosina, nafta, combustóleos, lubricantes, asfalto, azufre, gas y otros productos útiles para el hombre derivados del petróleo; aunque la proporción en que se elaboran estos productos cambia con el tiempo (Martin,1997) como se muestra a continuación:

<i>Año</i>	<i>1973</i>	<i>1990</i>	<i>2000</i>
Productos ligeros	29.5	35.0	38.0
Destilados intermedios	30.0	36.0	40.0
Productos pesados	40.5	29.0	22.0

Por otro lado, la dinámica que se observa de la refinación del petróleo en México señala que aunque la tendencia sea procesar más crudo pesado,

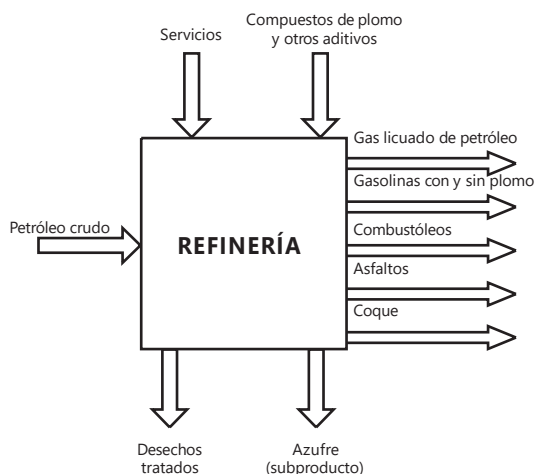


FIGURA 1. Entradas y salidas en una refinería.

la cantidad y la calidad de la gasolina va en aumento (Martin, 1997) y se requiere de una integración de refinación y petroquímica (Martin, 1997; Purvis, *et al.*, 1997 y González, 1997).

Las variaciones en características del crudo explican también las diferencias en su valor económico (Budusynski, 1988). En términos generales, los crudos ligeros, comúnmente de base parafínica o mixta, cuestan más que los crudos pesados ya que es más fácil obtener gasolina de ellos por métodos simples de refinación; sin embargo, se ha descubierto (Green, *et al.*, 1997) que la gasolina proveniente de crudos pesados tiene comúnmente mayores propiedades antidetonantes que la proveniente de crudos ligeros, esto ha cambiado drásticamente la situación tecnológica y de operación de una refinería.

En México, en una década, se han tenido cambios en las reservas de petróleo, así como también lo han hecho las características de los petróleos crudos. Esto se puede observar en el cuadro 1. Debido a los descubrimientos en la Sonda de Campeche ahora se cuenta con el crudo denominado Marino Ligero, aunque el sistema de refinación de Pemex procesa 1.3 millones de barriles por día de crudos Istmo-Maya-Olmeca en una relación 56.8/41.7/1.5, respectivamente (Manriquez, *et al.*, 2000).

La refinería convierte el petróleo crudo y produce una variedad de derivados a través de una serie compleja de reacciones químicas y de cambios físicos que se pueden englobar básicamente en las seis siguientes operaciones principales:

CUADRO 1. Propiedades del petróleo crudo mexicano y su evolución

Crudo, propiedades	Istmo		Maya		Olmeca		Marino ligero	
	1991	2000	1991	2000	1991	2000	1991	2000
Gravedad, °API	34.8	32.9	22.2	21.5	39.8	38.9	NE	34.5
Azufre, % peso	1.5	1.4	3.3	3.4	0.8	0.93	NE	1.23
Viscosidad, cst	7.4	8.8	205.0	170.1	4.1	4.22	NE	6.71
	25 °C	20 °C	20 °C	20 °C	20 °C	20 °C		20 °C
Punto de fluidez, °C	45	36	36	30	39	45	NE	42
Residuo de carbón Conradson, % peso	4.0	4.5	12.0	10.8	1.5	2.8	NE	3.87
Acidez, mg KOH/g	0.14	0.46	0.28	0.43	0.029	0.8	NE	0.26
Vanadio/niquel, ppm	41/7	38/8	314/52	278/53	0.9/0.1	8/2.5	NE	23.9/5.2
C ₅ , % en volumen	0.2	1.3	0.1	0.3	1.0	1.8	NE	0.2
		(C ₄)				(C ₄)		(C ₄)

Fuente: Manriquez, *et al.*, (1991) y Manriquez, *et al.*, (2000)

Fraccionar: porque separa una mezcla de hidrocarburos líquidos en diversos grupos específicos que incluyen a la gasolina, el diesel, los combustibles y otras sustancias más ligeras.

Desintegrar: porque rompe los hidrocarburos grandes, convirtiéndolos en compuestos más pequeños y de mayor utilidad. La desintegración puede llevarse a cabo térmica o catalíticamente.

Rearreglar: porque con altas temperaturas y con catalizadores rearregla la estructura química de los hidrocarburos del petróleo. Algunos hidrocarburos de cadena lineal son transformados en hidrocarburos cíclicos o de cadena circular; del mismo modo los hidrocarburos cíclicos son transformados.

Combinar: porque hace reaccionar dos o más hidrocarburos o no hidrocarburos, tales como el azufre o el hidrógeno, para obtener otros productos que son considerados como *mejorados*.

Tratar: porque convierte materiales contaminantes a una forma tal que pueden ser desechados al medio ambiente sin causar problemas ecológicos.

Mezclar: porque combina diferentes líquidos para producir los materiales finales con ciertas propiedades deseadas.

Así, una refinería recibe petróleo crudo, fracciona, desintegra, reforma, combina y mezcla materiales para producir: gasolina con o sin mejorador del octanaje o también llamado antidetonante que es un compuesto oxigenado que se le adiciona a la gasolina (Chang y Leiby, 1992), gas licuado de petróleo o gas LP, combustóleos, asfaltos, coque y azufre como subproducto, agrega otros compuestos aditivos. Así como, usa (genera y/o compra) una variedad de servicios y materiales tales como la electricidad, aire, agua, nitrógeno, hidrógeno y catalizadores y finalmente retorna materiales de desecho al medio ambiente, después de que se les ha dado un tratamiento adecuado para evitar la contaminación.

Subdivisión de una refinería

Una refinería típica podría ser subdividida en doce procesos o unidades, aunque en ocasiones podrá contar con más, dependiendo de si se integran los procesos que elaboran compuestos oxigenados. En este libro solamente mencionaremos brevemente la relación operacional que tienen estos procesos, así como la función principal que cumplen, los flujos que manejan y los productos elaborados en cada uno de ellos. Esta relación se puede observar esquemáticamente en la figura 1.

Destilación primaria de crudo: este proceso inicia la refinación del petróleo y su función es separar los diferentes componentes del crudo en una torre de destilación. Los productos del proceso son gas combustible, gasolina de destilación directa, naftas ligera y pesada, combustóleos y crudo reducido (véase la figura 2).

Destilación al vacío: en este proceso se alimenta el crudo reducido de la destilación primaria y su función es la de separar aún más esta fracción realizando una destilación al vacío. Los productos obtenidos son los siguientes: gasóleos ligero y pesado, aceites lubricantes, asfalto o combustóleo pesado y la alimentación del coquizador (véase la figura 3).

Hidrodesulfuración: en esta unidad se purifica la corriente alimentada eliminándole básicamente los compuestos de azufre; también se eliminan nitrógeno, oxígeno y metales pesados. Todo esto es con objeto de proteger los catalizadores empleados en otros procesos de la refinería. Los flujos de entrada que se manejan en este proceso son hidrocarburos seleccionados de la destilación primaria con hidrógeno convirtiendo los compuestos de

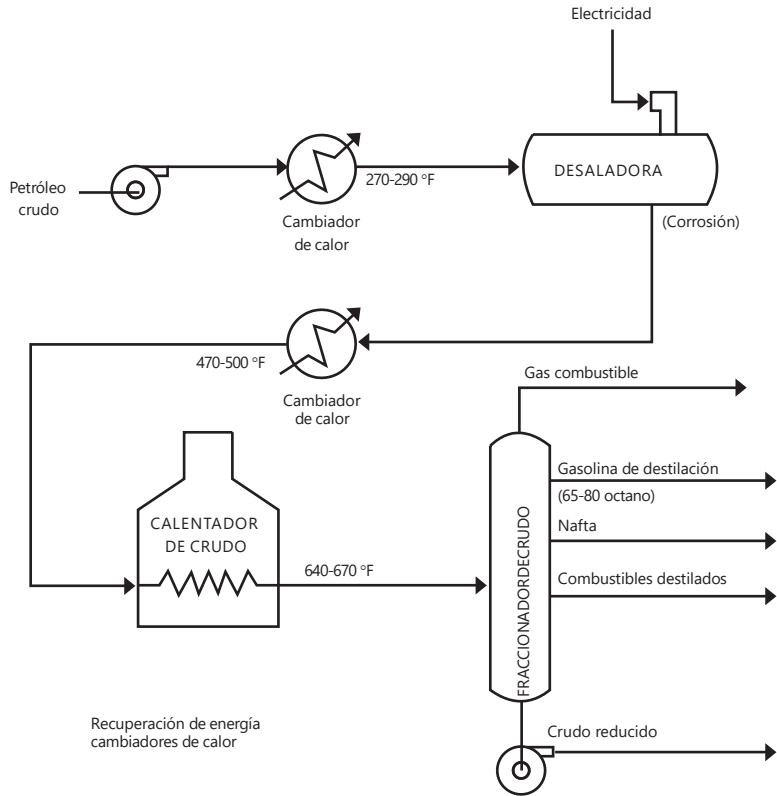


FIGURA 2. Destilación primaria.

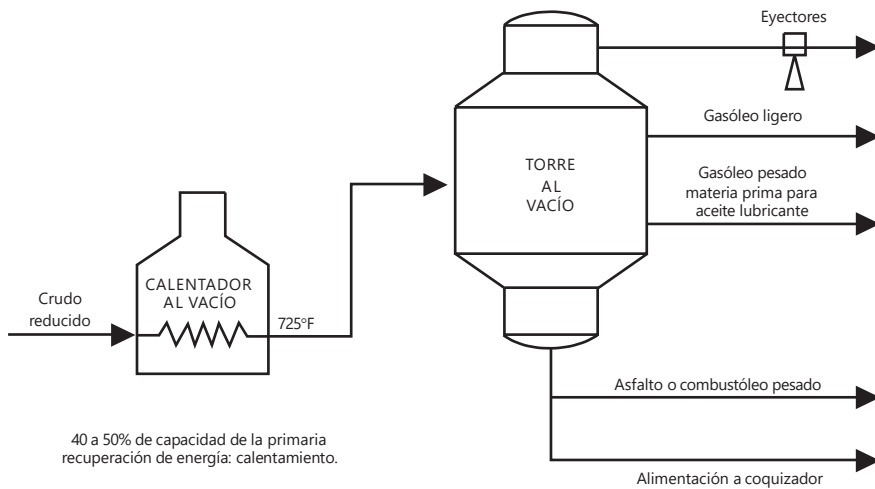


FIGURA 3. Destilación al vacío.

azufre en sulfuro de hidrógeno el cual se elimina en forma gaseosa. Los productos del proceso son: gasolina desulfurizada, naftas ligera y pesada desulfurizada, o combustóleos desulfurizados o combustóleos catalíticos desulfurizados (véase la figura 4).

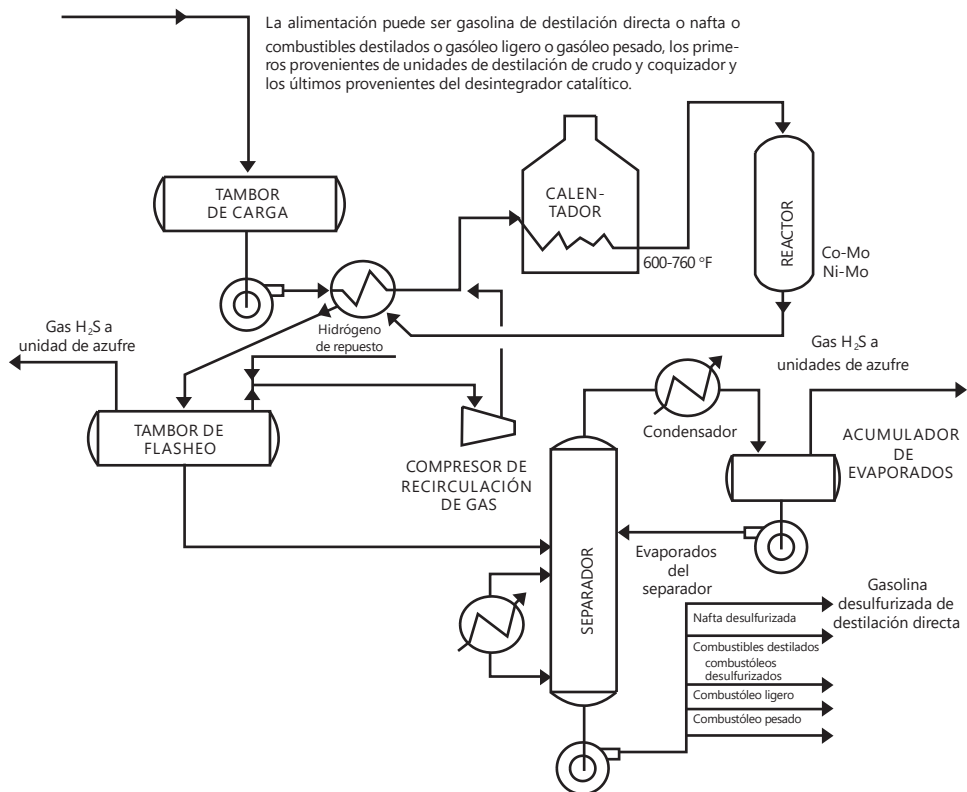


FIGURA 4. Hidrodesulfuración.

Reformación: la nafta desulfurizada se bombea a este proceso, el cual cumple la función de reorganizar los hidrocarburos por medio de desintegración en catalizadores de platino-aluminio y bimetálico para producir gasolina de alto octano. Los productos de la unidad son: gasolina reformada de alto octano, hidrógeno, gas combustible y residuos ligeros como los propanos C_3H_8 y butanos C_4H_{10} (véase la figura 5).

Isomerización: en este proceso se emplea como materia prima la gasolina producto de la destilación primaria y desulfurizada por la hidrodesulfuración. En este proceso también son reorganizados o reacomodados los

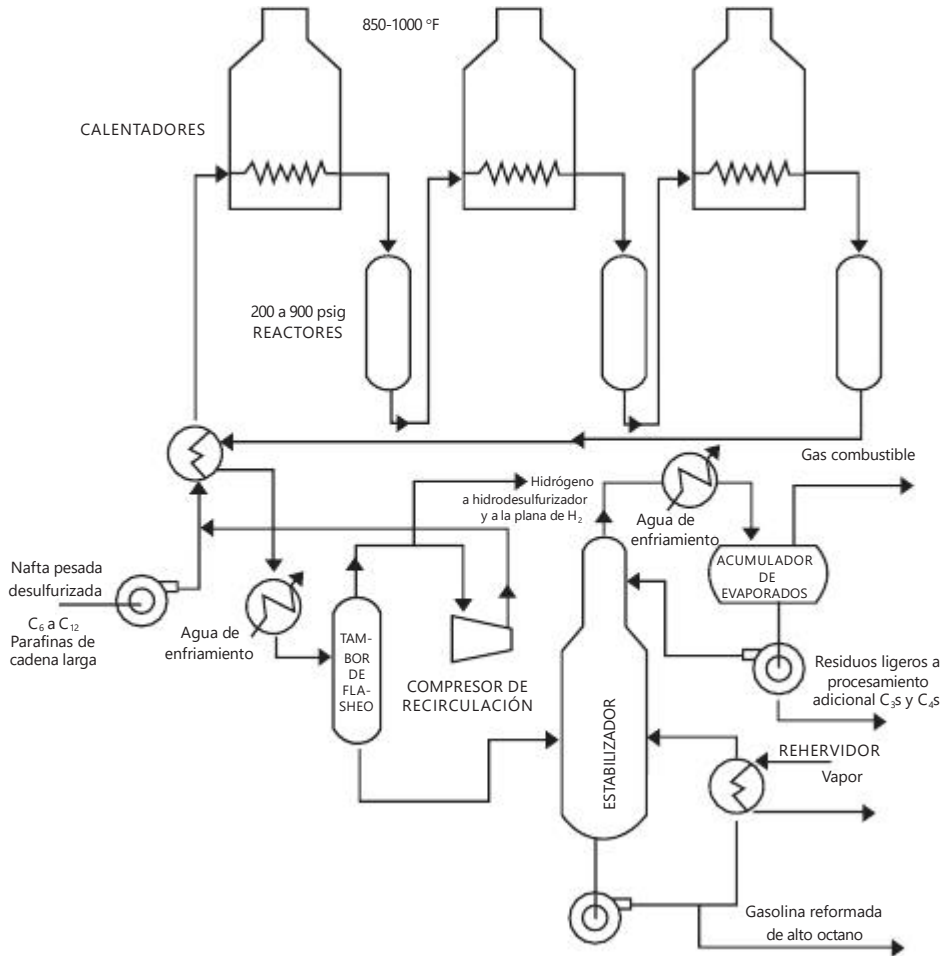


FIGURA 5. Reformación.

hidrocarburos de la gasolina, en presencia de un catalizador de platino o de cloruro de aluminio. El producto es la gasolina de alto octano y gas combustible (véase la figura 6).

Desintegración catalítica: el gasóleo ligero producido en la destilación al vacío sirve esencialmente de carga en este proceso, el cual cumple la función de romper los hidrocarburos del gasóleo con ayuda de un catalizador que normalmente es de compuestos de sílice-aluminio. Durante el proceso se forma coque (depósitos de carbón), que se deposita en el catalizador reduciendo con esto su actividad catalítica. El catalizador se regenera quemando el coque con aire. Los productos en este proceso son gasolina cata-

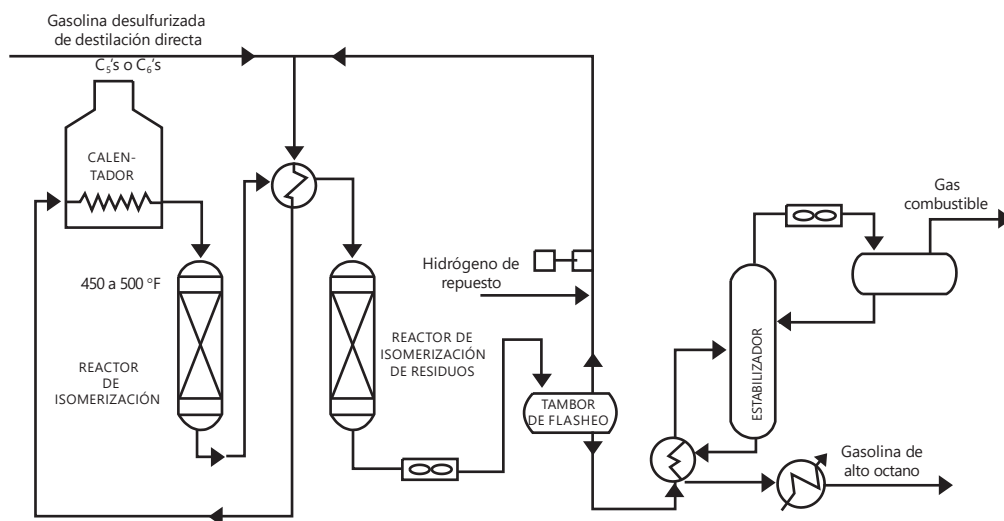


FIGURA 6. Isomerización.

lítica, destilados ligeros y gasolina que se emplean como combustóleos destilados (véase la figura 7).

Alquilación: los compuestos de cuatro átomos de carbono, butilenos y butanos y algunas veces los de tres átomos de carbono, propilenos, que provienen de otros procesos en la refinería, se hacen reaccionar en esta unidad de alquilación para formar el alquilado ligero. En esta unidad se utiliza como catalizador el ácido fluorhídrico o ácido sulfúrico. Los productos del proceso son: alquilado ligero de alto octano y gas licuado del petróleo o LP (véase la figura 8).

Polimerización: en este proceso son aprovechados los polipropilenos que se producen en la desintegración catalítica haciéndolos reaccionar entre sí y en presencia de un catalizador con base en el ácido fosfórico o de sílice. En este proceso se producen la gasolina de polimerización de alto octano y gas licuado del petróleo o LP (véase la figura 9).

Coquización: los residuos de la destilación al vacío son desintegrados térmicamente para convertirlos en combustibles ligeros y en coque. Los productos en este proceso son: gas combustible, nafta, gasóleos ligeros y pesados y coque (véase la figura 10).

Recuperación de azufre: en varios procesos de una refinería se produce ácido sulfhídrico (H₂S); en la mayoría de las hidrodesulfuradoras éste es recolectado en forma gaseosa o disuelto en soluciones de amina y es con-

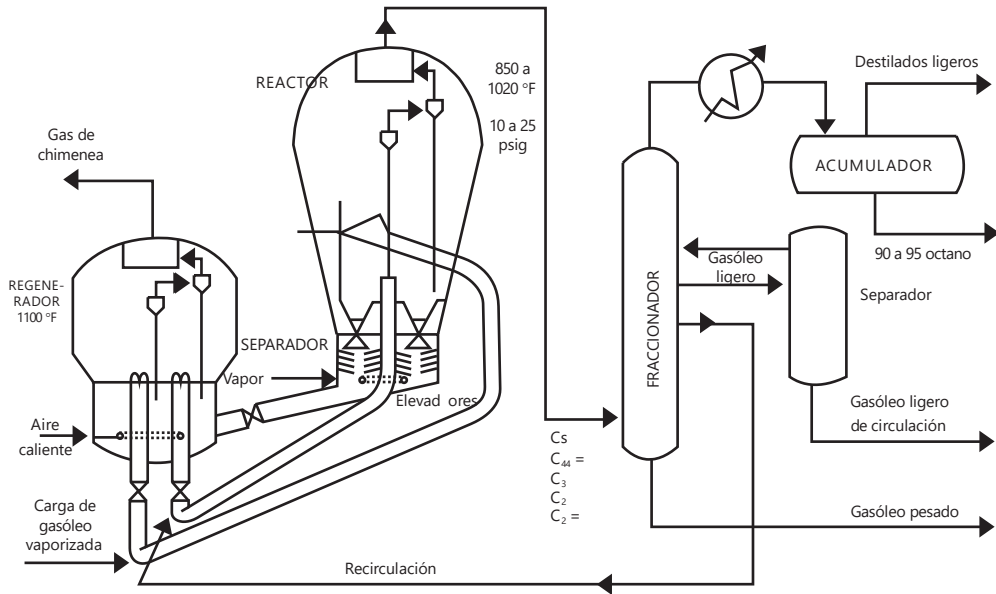


FIGURA 7. Desintegración catalítica.

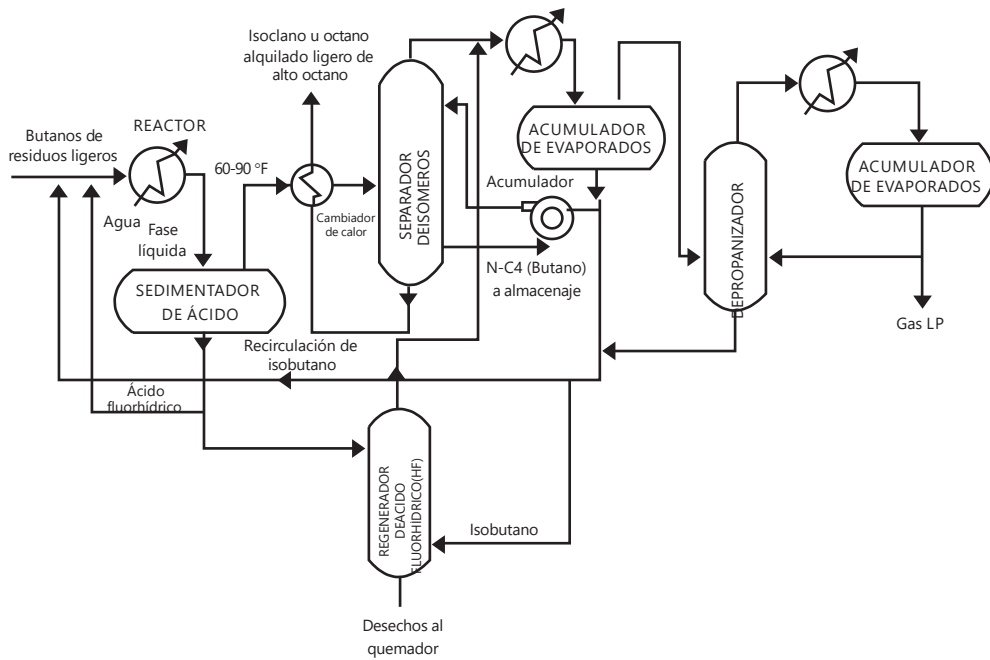


FIGURA 8. Alquilación.

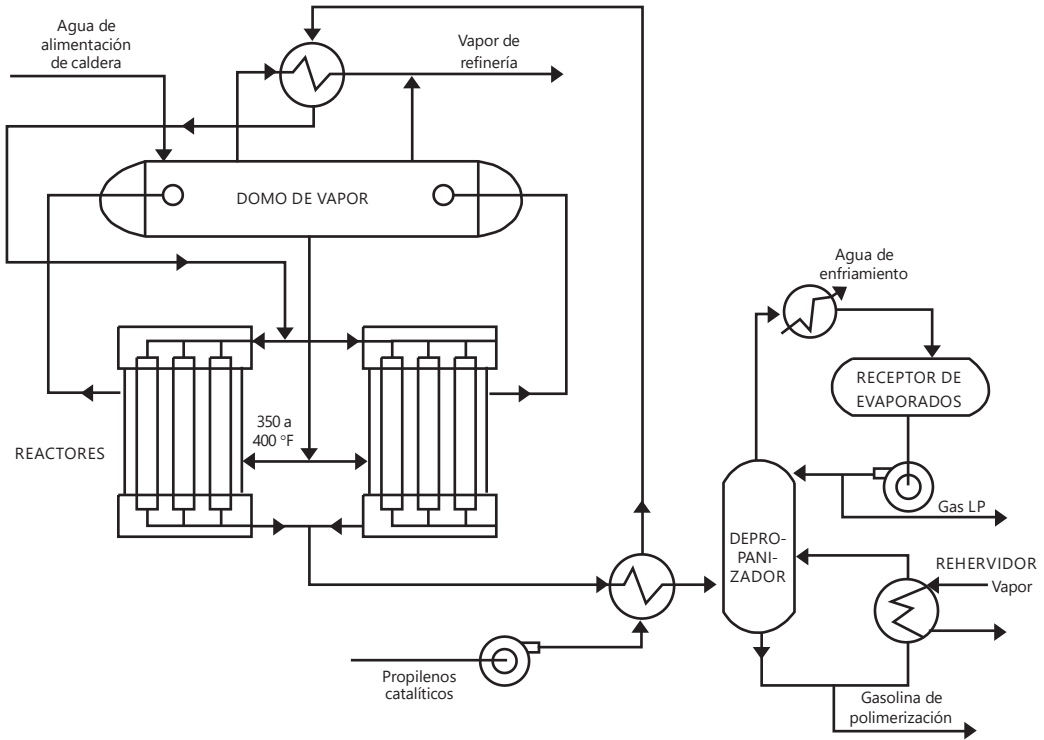


FIGURA 9. Polimerización.

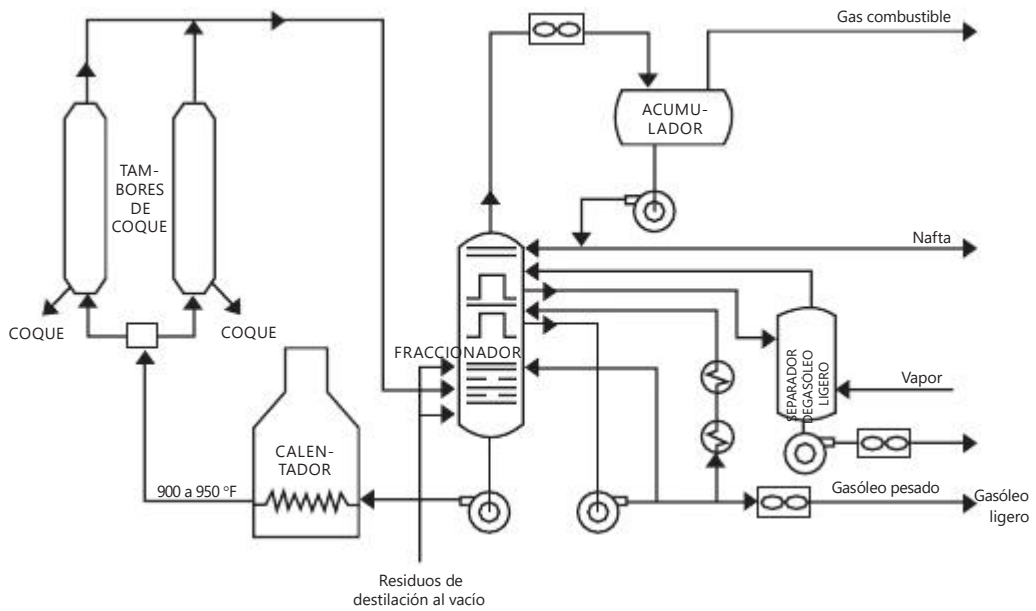


FIGURA 10. Coquización.

vertido en materiales más comerciales que son el azufre y el ácido sulfúrico. El producto de la unidad es azufre (véase la figura 11).

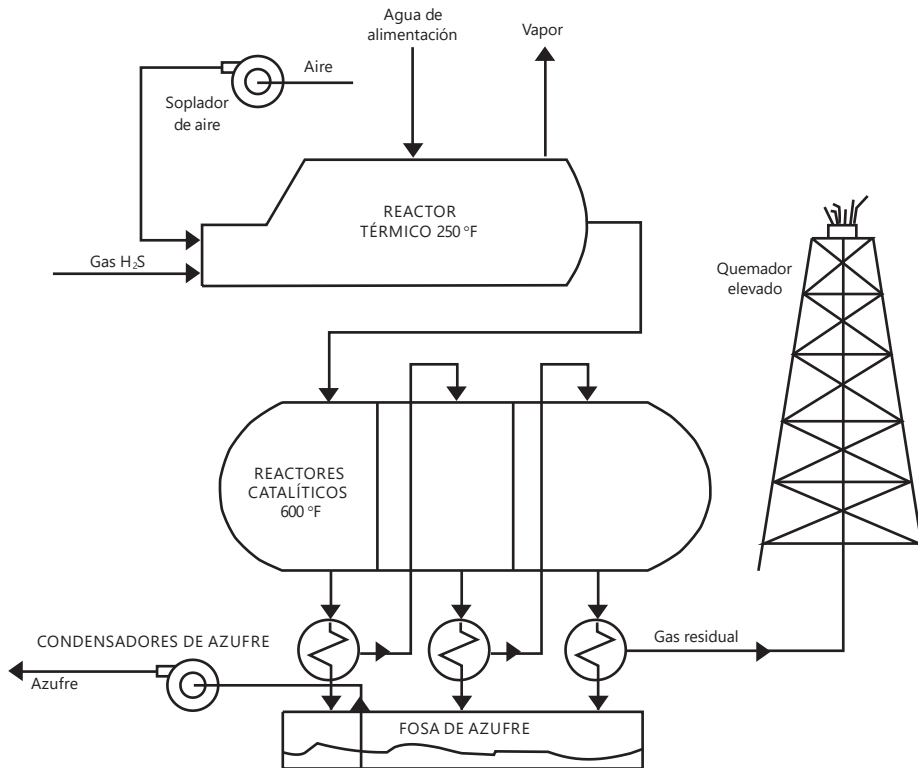
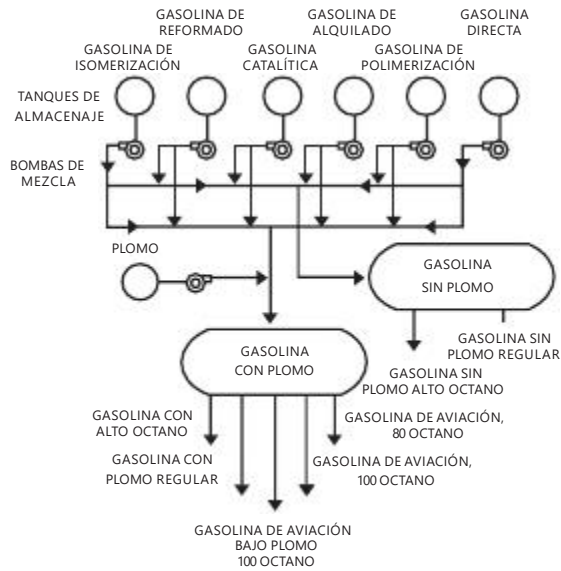


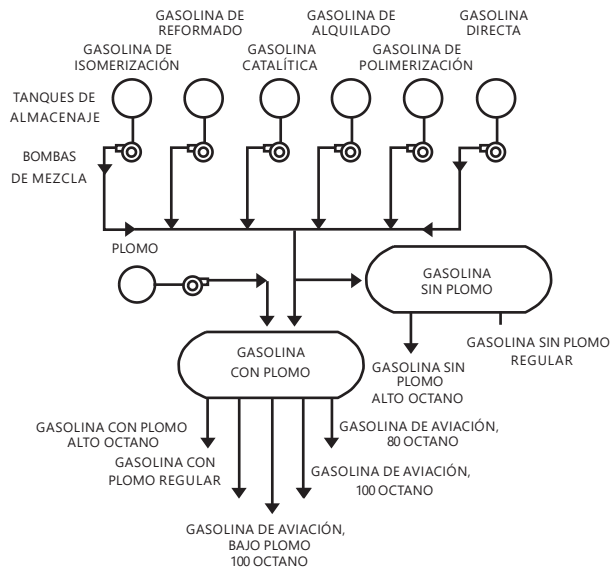
FIGURA 11. Recuperación de azufre.

Mezclado de gasolina: en esta unidad se reciben todos los componentes para el mezclado de gasolinas, estas provienen de diferentes unidades. Una vez formada una mezcla se le agregan aditivos que son compuestos oxigenados (Chang y Leiby, 1992); éter metil ter-butílico (MTBE) o éter metil ter-amílico (TAME)) que sirven como antidetonantes y que dan los grados de octanaje necesarios en las gasolinas con antidetonante de alto y bajo octano. Cuando no se les agrega ningún compuesto oxigenado se obtienen las gasolinas de alto y bajo octano y gasolina de aviación (véase la figura 12).

Unidad de servicios auxiliares: en esta unidad se da un soporte técnico a los otros once procesos suministrándoles vapor de agua de alta, media y baja presión, electricidad, aire comprimido y agua de enfriamiento. En al-



a) Mezclado continuo.



b) Mezclado por carga.

FIGURA 12. Preparación o mezclado de gasolinas (el mejorador del octanaje es un compuesto oxigenado que puede ser el éter metil ter-butílico (MTBE) o el éter metil ter-amílico (TAME)).

gunas refinерías se utiliza parte del vapor para producir electricidad y en otras la electricidad se compra y se utiliza totalmente el vapor generado en una caldera para los procesos. El calor necesario para la producción del vapor proviene del quemado de combustibles y derivados del petróleo de bajo valor comercial provenientes de los diferentes procesos (véase la figura 13).

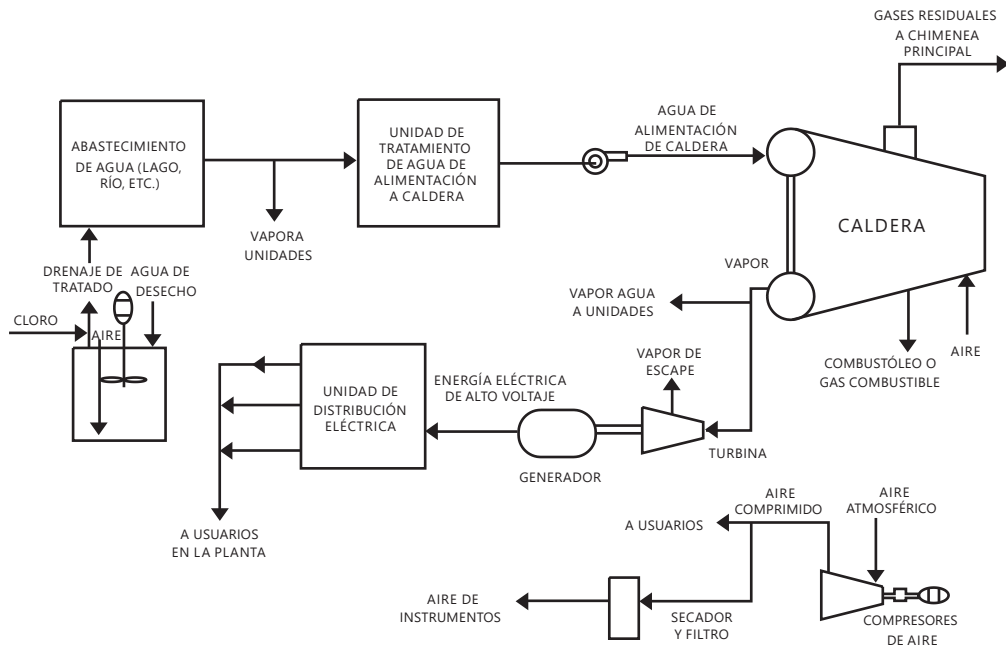


FIGURA 13. Unidad de servicios auxiliares.

Equipo principal en los procesos de una refinera

A pesar de las diferencias en función, y en los flujos y productos que maneja cada uno de los doce procesos esenciales de una refinera el equipo de proceso con que cuenta cada unidad es muy similar. De ahí que se pueda hacer un listado del equipo principal que se tiene en cada proceso y se pueden resumir operaciones modulares que sirvan para cualquiera de ellos.

Destilación primaria: bombas, cambiadores de calor, desaladora, calentador, y torre de fraccionamiento (véase la figura 2).

Destilación del vacío: calentador, torre de destilación al vacío, evector (véase la figura 3).

Hidrodesulfuración: tanque de carga, bomba, cambiador de calor, calentador, reactor, tanque de vaporización instantánea (flasheo), compresor, separador, rehervidor, condensador y acumulador (véase la figura 4).

Reformación: bombas, cambiadores de calor, calentador, reactor, enfriador, tanque de flasheo, compresor, estabilizador, rehervidor, condensador y acumulador (véase la figura 5).

Isomerización: calentador, reactor, cambiador de calor, enfriador por aire, tanque de flasheo, compresor y estabilizador (véase la figura 6).

Desintegración catalítica: reactor, sedimentador, regenerador, separador, rehervidor y torre de destilación depropanizadora (véase la figura 7).

Alquilación: reactor-sentador, separador de isómeros, torre de destilación (depropanizadora), sedimentador, acumulador y regenerador de ácido (véase la figura 8).

Polimerización: bomba, cambiador de calor, domo de vapor, reactor, torre de destilación depropanizadora, condensador, receptor y rehervidor (véase la figura 9).

Coquizador: tanques de coque, calentador, torre de fraccionamiento, enfriadores por aire, acumulador, bombas, cambiadores de calor, separador (véase la figura 10).

Recuperación de azufre: soplador, reactores, condensadores, quemador, fosa y bomba (véase la figura 11).

Mezclado de gasolina: tanques de almacenamiento y bombas (véase la figura 12).

Servicios auxiliares: calderas, bombas, compresor, generador eléctrico y sistemas de tratamiento de agua (véase la figura 13).

En esta manera se pueden resumir, en forma modular; las operaciones en donde cada módulo tiene cierta función que varía de proceso en proceso. La diferencia entre aplicar un cierto módulo de operación de un proceso a otro, serán los flujos de entrada y salida y sus características de composición.

Los módulos comunes son: bomba, cambiador de calor, compresor, expansor, torre de destilación, turbina, eyector, tanque, recipiente, reactor y flash. Los reactores pueden ser de diferente tipo según su geometría, su contenido y sus alimentaciones.

Principios para el análisis y simulación de procesos de refinación

Desde el punto de vista físico y químico la industria del petróleo es la más compleja de todas las industrias químicas de proceso. Sin embargo, se puede lograr un entendimiento total de su funcionamiento, sin adentrarse en los problemas de diseño, construcción y funcionamiento, a través del estudio de los principios o fundamentos en que se basa la operación de esta industria.

Como se ha mencionado la refinación del petróleo es esencialmente un proceso de separación que involucra principalmente la destilación y seguido de algunas modificaciones químicas necesarias para poder obtener productos deseables (procesos de reacción). Así, podría asegurarse que esta industria posee dos tipos de procesos: los físicos y los químicos. El estudio de estos procesos se puede realizar tomando en cuenta que éstos deben de cumplir ciertos requisitos fundamentales o principios en los cuales están basados. Estos principios son:

- a) La conservación de la materia
- b) La conservación de la energía
- c) La conservación del *momentum*
- d) El principio del incremento de entropía

Un análisis completo de los procesos se realiza cuando se estudian bajo estos principios. Cuando se aplican únicamente los tres primeros se dice que se aplican los fenómenos de transferencia o transporte de masa, energía y *momentum*, respectivamente y que se llevan a cabo en ellos como resultado de su operación o funcionamiento.

Por otro lado, como ya se ha dicho, el número de compuestos contenidos en el petróleo es vasto y así se hace necesaria la caracterización de los productos del petróleo en función de sus propiedades físicas, termodinámicas y de transporte, para con ello identificar las corrientes involucradas en una operación.

De aquí que, con la identificación de los fenómenos de transferencia, la caracterización de las diferentes corrientes y la aplicación de los principios fundamentales en cada operación del proceso de refinación del petróleo se puede lograr un análisis integral del mismo. El análisis se facilita a través del uso de la simulación del proceso.

A continuación daremos una breve y concisa descripción de lo que se considera más importante en el análisis de cualquier proceso lo cual corresponde a la base de datos físicos, termodinámicos y de transporte de los componentes que conforman las corrientes en las operaciones de la refinación del petróleo.

CUADRO 2. Fracciones obtenidas en la destilación primaria.

<i>Fracción</i>	<i>Intervalo en punto de ebullición en °C</i>	<i>Distribución aproximada de hidrocarburos presentes en la fracción</i>
Gas	Abajo de 32.2	C ₁ a C ₅
Nafta ligera	32.2 a 93.3	C ₅ a C ₇
Nafta pesada	76.7 a 204.4	C ₆ a C ₁₂
Querosina	176.7 a 287.8	C ₁₂ a C ₁₈
Combustóleo	198.9 a 326.7	C ₁₅ a C ₁₈
Gasóleo	Arriba de 260.0	C ₁₆ a C ₂₁
Residuo primario	Arriba de 301.7	C ₂₀ en adelante...

Base de datos

La caracterización de las fracciones del petróleo en términos de sus propiedades físicas, termodinámicas y de transporte, es necesaria para realizar un análisis de las operaciones de la refinación del petróleo. La diversidad de productos y su composición es muy vasta en las corrientes que se manejan en la refinación; como ejemplo que ilustra lo anterior, se tienen las fracciones resumidas en el cuadro 2 en donde se puede observar una caracterización en términos del intervalo de punto de ebullición y la distribución de hidrocarburos presentes (Miquel y Castells 1993). Los parámetros básicos necesarios para el uso de métodos de correlación y predicción de las propiedades que se enlistan en el cuadro 3 son: promedios de puntos de ebullición (medio, molar, en peso, cúbico o volumétrico); gravedad específica; peso molecular; curvas de pendientes en el punto de ebullición; el factor de Watson, la temperatura crítica; la presión crítica; los parámetros de estados correspondientes, y ciertos análisis de tipo molecular (Kayan y Yorulmaz, 1977).

CUADRO 3. Propiedades necesarias para la caracterización de un producto o corriente en la refinación del petróleo.

Termodinámicas	Capacidad calorífica Entalpía Calor vaporización Relación o constante de vaporización Curva de vaporización instantánea (flash) Factor de compresibilidad
Transporte	Viscosidad Conductividad térmica Difusividad
Física	Volumen específico Densidad

T. Daubert (1980, 1991) ha revisado los métodos predictivos de propiedades físicas, termodinámicas y de transporte de productos y fracciones del petróleo. Esta referencia representa un buen punto de partida para conocer el estado actual en que se encuentran este tópico.

Con respecto al equilibrio líquido-vapor y la predicción en fracciones del petróleo Mikolaj y Dev (1971) han encontrado una correlación que predice este equilibrio y es aplicable a una amplia variedad de especies químicas y sobre un amplio intervalo de temperatura y presión. Todo esto representa para un ingeniero de proceso, desenvolviéndose en las industrias de la refinación del petróleo y petroquímica, no sólo algo deseable sino esencial. Por otro lado, los avances que se han logrado en materia de ecuaciones de estado y reglas de mezclado para la predicción no tan sólo del equilibrio líquido-vapor sino del equilibrio líquido-líquido, ayudan al ingeniero de proceso a manejar las corrientes en forma analítica (Díaz, 2000).

Las corrientes que se tienen en un proceso químico llevan a cabo cambios en composición, temperatura y presión por lo que el problema de mantener un conocimiento total sobre cada una de ellas es compleja. Sin embargo, ya que se ha entendido el cómo cada equipo afecta a cada corriente, el problema se transforma en una manipulación adecuada de las leyes de conservación de *momentum*, materia y energía. En los temas subse-

cuentas se hará una revisión de los principios fundamentales relacionados con:

- 1) El análisis termodinámico de los procesos de refinación
- 2) La simulación de los procesos de refinación
- 3) El análisis macroscópico de los fenómenos de transferencia en los procesos de refinación.

A continuación se realiza un cálculo que muestra el manejo de corrientes, la base de datos termodinámicos y el equilibrio líquido-vapor de mezclas de hidrocarburos que se pueden encontrar en cualesquiera de los doce procesos hasta ahora descritos.

CUADRO 4. Composición típica de una gasolina desulfurizada de destilación directa.

<i>Componente</i>	<i>Fracción Molar</i>
n-Butano	0.0061
Neo-pentano	0.2831
Iso-pentano	0.2859
n-pentano	0.0271
Ciclopentano	0.0398
2 metil-pentano	0.1200
3 metil-pentano	0.0690
n-hexano	0.1219
Metil-ciclopentano	0.0268
Benceno	0.0142
Ciclohexano	0.0050
n-heptano	0.0020

La figura 6 muestra el proceso de isomerización que se utiliza para generar gasolina de alto octano a partir de gasolina desulfurizada que contiene esencialmente hidrocarburos con cinco y seis átomos de carbono. Una composición típica, de esta gasolina, se muestra en el cuadro 4. Cuando ésta es mezclada con la corriente de hidrógeno y gases ligeros (conteniendo el hidrógeno de repuesto) da como resultado la alimentación al calentador que es la misma que la del reactor de isomerización (véase la figura 7);

la composición de esta corriente se muestra en el cuadro 5. La temperatura que alcanza esta mezcla está por debajo de la que debe ser alimentada al reactor de isomerización. Por esto se tiene el calentamiento previo hasta alcanzar una temperatura de entre 450 a 500°F (232 a 260°C).

CUADRO 5. Composición típica de la alimentación al reactor de isomerización y su composición a la temperatura de rocío (463.8 °K) a una presión de 33.8 *bar*.

<i>Componente</i>	<i>Fracción molar de la alimentación</i>	<i>Fracción molar del líquido en el punto de rocío</i>
Hidrógeno	0.1371	0.0265
Metano	0.0066	0.0018
Etano	0.0064	0.0027
Propano	0.0053	0.0030
Iso-butano	0.0001	9.4x10 ⁻⁵
n-Butano	0.0050	0.0039
Iso-pentano	0.2392	0.2362
n-pentano	0.2417	0.2522
2,2-dimetil butano	0.0225	0.0271
Ciclopentano	0.03389	0.0389
2 metil-pentano	0.10162	0.1311
3 metil-pentano	0.05831	0.0773
n-hexano	0.10304	0.1425
Metil-ciclopentano	0.02251	0.0319
Benceno	0.01144	0.0162
Ciclohexano	0.00403	0.0061
n-heptano	0.00135	0.0024

Después se muestra el cálculo del equilibrio de fases de la mezcla alimentada al calentador para mostrar los diferentes estados de agregación que se pueden alcanzar con una misma mezcla; ésta es manejada a diferentes condiciones de temperatura y presión. La presión a la que opera el reactor es de aproximadamente 34kg/cm² (33.8 *bar*). Realizando un cálculo, utilizando la ecuación de estado de Peng Robinson (1976), de la temperatura a la que puede condensarse la primera gota de la mezcla, en caso de que

estuviera completamente en fase gaseosa (temperatura de rocío) resultaría de 463.72°K (834.7°R). Por otro lado, si la mezcla estuviera completamente en estado líquido y se deseara conocer la temperatura a la que la mezcla produciría el primer vapor (temperatura de burbuja), la misma ecuación de estado da la respuesta de 50.0°K (90°R).

CUADRO 6. Equilibrio líquido-vapor de la mezcla reaccionante antes de la reacción de isomerización a $T = 433.15 \text{ }^\circ\text{K}$, $P = 37.8 \text{ bar}$ y $V/F = 0.295^*$.

<i>Componente</i>	<i>Fracción molar en el líquido</i>	<i>Fracción molar en el vapor</i>
Hidrógeno	0.0369	0.3766
Metano	0.0027	0.0157
Etano	0.0041	0.0119
Propano	0.0043	0.0076
Iso-butano	0.0001	0.0001
n-Butano	0.0049	0.0053
Iso-pentano	0.2577	0.1951
n-pentano	0.2658	0.1839
2,2-dimetil butano	0.0258	0.0144
Ciclopentano	0.0385	0.0230
2 metil-pentano	0.1194	0.0591
3 metil-pentano	0.0690	0.0327
n-hexano	0.1233	0.0546
Metil-ciclopentano	0.0271	0.0116
Benceno	0.0138	0.0059
Ciclohexano	0.0049	0.0019
n-heptano	0.0017	0.0005

* V/F es la relación entre la masa de vapor y la masa alimentada y es comúnmente denominada fracción vaporizada.

Por lo tanto, suponiendo que la presión se mantiene en la requerida para realizar la alimentación al reactor, al mezclar las corrientes de gasolina desulfurizada de destilación directa y el hidrógeno requerido en la reacción de isomerización, la temperatura resultante podría estar entre la del punto de rocío y la del punto de burbuja y con ello se estaría manejando una mezcla líquido-vapor a la entrada del calentador. El cuadro 6 mues-

tra un cálculo de equilibrio de fases a una temperatura intermedia entre la de burbuja y la de rocío para mostrar la porción de la mezcla que iría como líquido y la de vapor, así como sus composiciones en ambas fases; este cálculo fue realizado empleando también la ecuación de estado de Peng Robinson (1976).

El cuadro 5 también muestra la composición que tendría la primera gota de líquido que se obtiene en el punto de rocío de la mezcla gaseosa a las condiciones de presión de 37.8 *bar*. Como puede observarse la composición de los compuestos isopentano y n-pentano es parecida en las fases vapor y líquida. Si se continuaran los cálculos del equilibrio líquido-vapor, a presión constante, se observaría que esta pequeña diferencia se mantiene hasta alcanzar la temperatura de burbuja de la mezcla. La composición de la mezcla que se toma en el equilibrio líquido-vapor descrito en el cuadro 6 es la que se indica en el cuadro 5.

ANÁLISIS TERMODINÁMICO DE PROCESOS DE REFINACIÓN

Los principios básicos de los procesos de refinación se pueden expresar en forma sencilla; sin embargo, su aplicación a situaciones prácticas es en ocasiones bastante difícil. En este capítulo desarrollamos y aplicamos los balances de masa, energía y entropía. También hacemos observaciones acerca de dónde y cómo puede haber aprovechamiento y recuperación de energía en la refinación del petróleo.

Balance de materia

La ley de la conservación-reacciones atómicas

Para un sistema abierto como el que se muestra en la figura 1.1, la masa y la energía deben conservarse. En la figura R_e y R_s son, en el caso más general, las entradas y salidas de materiales totales al y del sistema, respectivamente y R_a son las acumulaciones en el sistema de las masas de las especies nucleares elementales o sus equivalentes de masa o de energía.

Para un sistema abierto a un cierto intervalo de tiempo, el balance de masa es:

$$R_e - R_s = R_a \quad (1.1)$$

Cuando existen flujos de masa de entrada y de salida en el sistema abierto, el volumen que se encuentra dentro de la línea punteada, en la figura 1.1, se le llama *volumen de control* y a la superficie que denota la línea punteada se le llama superficie de control.

Sistemas con reacción química

Como se ha visto hasta ahora, varias fracciones de la destilación fraccionada del crudo necesitan de una modificación química para obtener produc-

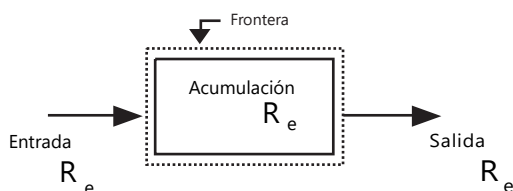


FIGURA 1.1. Conservación de masa en un sistema cerrado.

tos útiles. Cuatro son los procesos de una refinería básica y que principalmente contribuyen con productos útiles para la elaboración de combustibles: el *cracking* catalítico, la reformación catalítica, el hidrocraqueo, la isomerización y la alquilación.

En términos generales, la situación en una reacción química es que no se obtienen 100% de productos a partir de los reactantes, ya sea porque las reacciones son incompletas o porque hay otras reacciones que compiten con la que se quiere. Sin embargo, el balance de materia debe tomar en cuenta toda la masa de entrada y toda la de la salida y no solamente las cantidades que reaccionan, así como también los reactantes que entran en exceso y aquellas sustancias que no reaccionan, los que son consideradas inertes y las que pueden llegar a estar presentes.

Así para realizar un balance de materia en presencia de reacciones químicas, los sistemas, que intervienen en estos procesos, además de obedecer la ley de conservación de masa debe seguir las leyes de las proporciones definidas, de las proporciones múltiples y de las proporciones recíprocas.

La ley de las proporciones definidas dice así: *un compuesto químico en particular siempre contiene los mismos elementos y en las mismas proporciones en peso.*

La ley de las proporciones múltiples dice así: *si dos o más elementos se combinan para formar más de un compuesto, ellos se combinarán en pesos múltiples que están en la relación de pequeños números enteros.*

La ley de las proporciones recíprocas dice así: *los pesos de dos o más sustancias que reaccionan en forma separada con pesos idénticos de un tercero son múltiplos simples de los pesos que reaccionan entre cada uno.*

Estas leyes fueron establecidas en el año de 1800 y llevaron al investigador Dalton a establecer su hipótesis de que los elementos se conservan

en una reacción química. Así, se pueden hacer balances de masa elemental así como total.

Sistema sin reacción química

En una refinería de petróleo en la mayoría de los procesos se tienen operaciones de separación y/o mezclado en donde no se lleva a cabo una reacción química y así los compuestos químicos, la masa total y los elementos individuales son conservados.

La conservación de la masa

Aunque comúnmente se tiene una idea global de los procesos, siempre surge la pregunta acerca de ¿cuánto producto puede elaborarse a partir de la cantidad disponible de materia prima? o ¿cuánta materia prima se requiere para surtir cierta demanda de producto? Lo que realmente se pregunta es ¿cuáles serán los flujos de materia prima, de producto y de desperdicio? Responder a estas preguntas es considerar lo que es llamado un balance de materiales el cual toma en cuenta cuidadosamente este flujo de materiales utilizando el concepto de volumen de control.

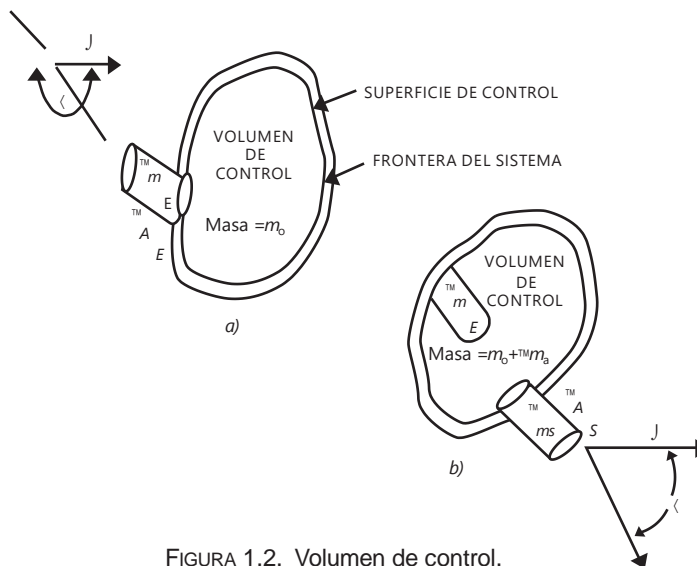


FIGURA 1.2. Volumen de control.

La figura 1.2, representa un sistema abierto en el cual se observa el volumen de control que está aislado de los alrededores por una superficie de control A, la cual se encuentra estacionaria.

La masa entra (véase la figura 1.2a) y sale (véase la figura 1.2b) del volumen de control pero ésta no cruza las fronteras del sistema. Para un cierto intervalo de tiempo de $t_0 = 0$ a $t = t_0 + \Delta t$, una cierta cantidad finita de masa m_{ME} entra al volumen de control y una cierta masa m_{MS} sale de él. Puesto que m_{MS} no es necesariamente igual a m_{ME} la cantidad de masa en el volumen de control es m_0 a tiempo $t = 0$ y $m_0 + \Delta m$ a tiempo $t + \Delta t$. La cantidad Δm representa el término llamado acumulación, que en realidad representaría una pérdida más que una acumulación para cuando $m_{MS} > m_{ME}$.

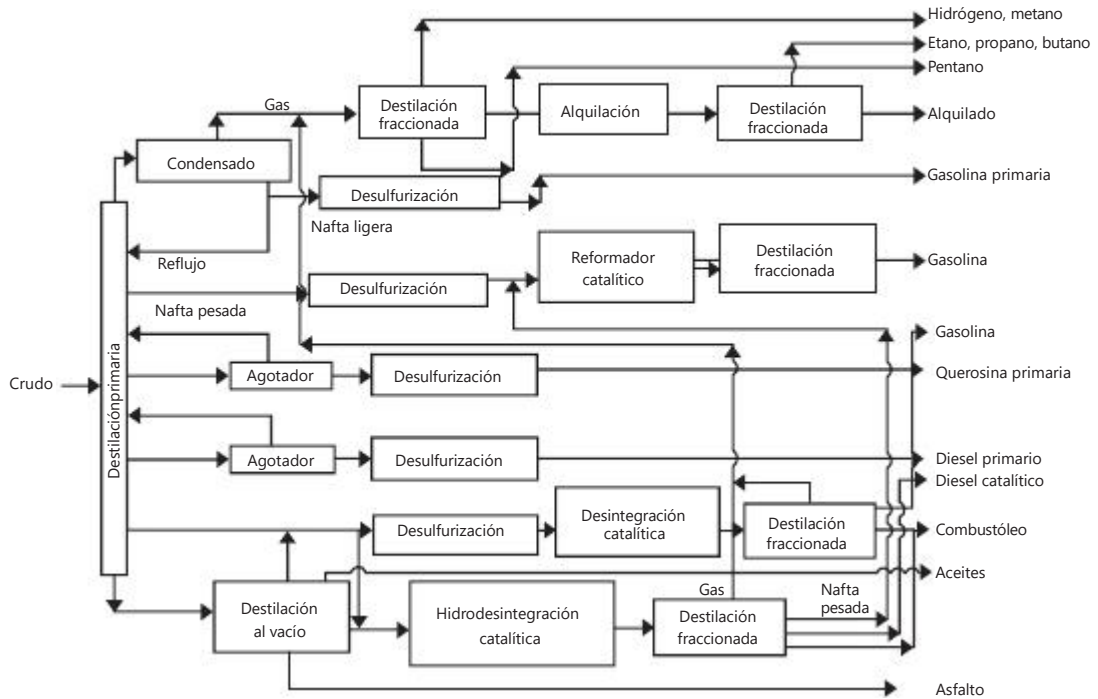


FIGURA 1.3. Diagrama esquemático de una refinería de petróleo.

La masa se conserva por lo que la acumulación es igual a la diferencia entre la masa de entrada y la masa de salida. Para una refinería de petróleo con una distribución de procesos, como la que se muestra en la figura 1.3, el balance total de masa que se presenta cuando se alimentan 100 unidades

de masa, de petróleo crudo, se obtendría una distribución de productos como se muestra en la figura 1.4. Es decir, se obtendrían rendimientos hacia: gases (13/100), gasolina (41/100), combustibles (24/100), combustóleo (13/100) y residuos (9/100). Este rendimiento es de un crudo que presenta un rendimiento de productos rentables (gases + gasolina + combustibles + combustóleo) de 91% el cual es considerado alto.

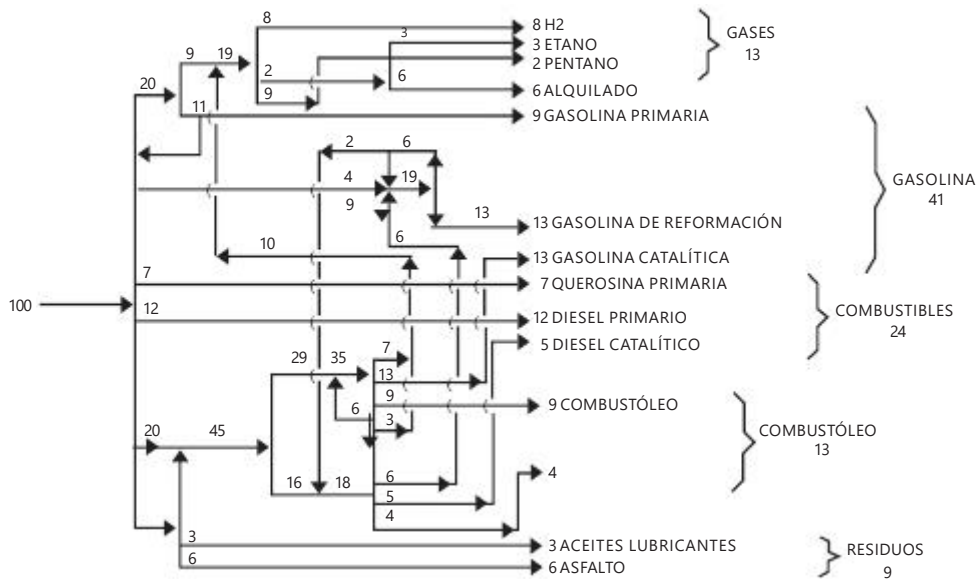


FIGURA 1.4. Balance total de materia en una refinación de petróleo.

Se debe notar que este balance corresponde a la operación en estado estacionario (sin variación con la variable tiempo) de la refinación. Para un cierto intervalo de tiempo el balance de masa tomará la forma siguiente:

$$(M_0 + \sum M_A) - M_0 = \sum M_E - \sum M_S \quad (1.2)$$

dividiendo esta ecuación entre $\sum t$ y tomando el límite cuando $\sum t \rightarrow 0$, se tiene:

$$\frac{dM_A}{dt} = \frac{dM_E}{dt} - \frac{dM_S}{dt} \quad (1.3)$$

En muchas aplicaciones se desean expresar estas ecuaciones en términos de la velocidad del fluido J ; puesto que la velocidad del flujo de masa a través de la superficie de control es el producto $(\rho) J dA$, se tiene que:

1. Las operaciones se llevan a cabo por cargas (*batch*).
2. Hay un arranque o una parada de una operación continua.
3. La operación es semicontinua debido a que uno de los reactivos se agota durante la operación o se presenta un disturbio en el proceso.

Para el caso de coordenadas rectangulares la ecuación de continuidad, en estado no estacionario, vendría expresada de la manera siguiente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial (\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial (\rho v_z)}{\partial z} = 0$$

La cual es la ecuación (3.32) y que es conocida como *la ecuación de continuidad* en su forma diferencial.

Balance de Energía y Entropía

Una ecuación matemática que expresa la conservación de energía es un caso especial de la que se le ha llamado *la primera ley de la termodinámica*; como ya se mencionó en la derivación de la ecuación (1.1), para la conservación de masa y por comparación, el balance de energía incorpora también los términos de:

- a) Adición de energía al sistema
- b) Remoción de energía del sistema
- c) Acumulación de energía del sistema

A continuación se examinarán brevemente los términos que se deben incluir para establecer la ecuación del balance de energía.

Trabajo

En el análisis termodinámico, el tipo de trabajo importante es aquel que se deriva de un cambio de volumen de un fluido (compresión o expansión) y está dado por la expresión:

$$W = \int P dV \quad (1.9)$$

en donde W es el trabajo suministrado al o por el sistema, V es el volumen y P la presión. Otro tipo de trabajo útil, es el trabajo de flecha y en termodinámica se expresa según la ecuación:

$$W_{flecha} = \int VdP \tag{1.10}$$

El *trabajo de flecha* es la máxima cantidad de trabajo que puede ser obtenido del flujo de un fluido a través de un equipo de proceso. Dos términos adicionales que se usan en el desarrollo del balance de energía, son la *energía cinética* y la *energía potencial*, de tal manera que el trabajo suministrado a un cuerpo o a un sistema de masa m con una velocidad inicial v_1 es igual al cambio en energía cinética del cuerpo o bien:

$$W = \Delta E_{cin} = \int_{z_1}^{z_2} \frac{\gamma m J^2}{2g_c} \tag{1.11}$$

y el trabajo requerido para elevar un cuerpo o sistema de masa m es igual al cambio de la cantidad mzg/g_c o bien al cambio en su energía potencial:

$$W = \Delta E_{pot} = \int_{z_1}^{z_2} \frac{\gamma m z g}{g_c} \tag{1.12}$$

en las ecuaciones anteriores, g_c es un factor de proporcionalidad:

$$g_c = 32.174 \frac{\text{lbm} \cdot \text{ft} \cdot \text{kg}}{\text{lb}_f \cdot \text{seg}^2} = 9.8 \frac{\text{m}}{\text{kg} \cdot \text{seg}^2}$$

donde g es el valor de la aceleración local de la gravedad y z es el cambio en elevación o altura con respecto a un punto de referencia.

Calor

Calor se define como la transferencia de energía que ocurre entre el sistema y los alrededores en virtud de una diferencia o gradiente de temperatura;

un proceso en donde no exista calor transferido entre el sistema y los alrededores, es llamado *adiabático*.

Por convención, el término de *calor* es positivo cuando se transfiere calor hacia el sistema, pero si el sistema suministra calor a los alrededores, el término de calor deberá ser negativo; de la misma forma, el término de *trabajo* será positivo cuando el sistema suministra trabajo a los alrededores y negativo cuando se suministra trabajo sobre el sistema.

Balance de energía

La ley de la conservación de la energía, se establece como: *la energía nunca puede ser creada o destruida, solamente cambiada de forma; esta declaración no es válida para procesos atómicos o en los cuales la masa es convertida a energía de acuerdo con la ecuación de Einstein ($E = mc^2$).*

Para un sistema abierto como el de la figura (1.5), el balance total de energía se puede expresar como:

$$\text{Energía de entrada } (E_{\text{entra}}) - \text{Energía de salida } (E_{\text{sale}}) = \text{Energía acumulada} \quad (1.13)$$

Si en la figura 1.5 también se considera que una cantidad de calor (Q), fluye hacia o del sistema a los alrededores, y que el sistema realiza o se realiza sobre él una cantidad de trabajo (W), entonces combinando el balance de masa con el balance de energía, la ecuación (1.13), expresada en forma diferencial, quedará de la siguiente forma:

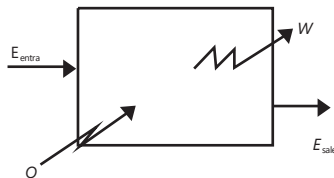


FIGURA 1.5. Sistema abierto (E = energía asociada con flujo de masa, Q y W son el calor y el trabajo que se tiene en o por el sistema, respectivamente).

$$\dot{h} + \frac{J^2}{2g_c} + \frac{gz}{g} \Big|_{entra} - \dot{h} + \frac{J^2}{2g_c} + \frac{gz}{g} \Big|_{sale} + \dot{M} W = \dot{M} \left\{ u + \frac{J^2}{2g_c} + \frac{gz}{g} \right\}_{sistema} \quad (1.14)$$

en donde h y u son la entalpía molar y la energía interna molar, respectivamente; \dot{M} y d representan términos diferenciales inexactos y exactos, respectivamente. El trabajo W que se puede realizar en o por el sistema y puede ser de varios tipos: PV (llamado de flecha), eléctrico o de tensión superficial.

Sistemas cerrados

Para sistemas cerrados, la ecuación (1.14) toma la forma:

$$\dot{M} W = M d \left\{ u + \frac{J^2}{2g_c} + \frac{gz}{g} \right\}_{sistema} \quad (1.15)$$

y para sistemas cerrados que no se aceleran y no cambian su altura en forma considerable:

$$\dot{M} W = M du = dU_{sistema} \quad (1.16)$$

La ecuación (1.16) es la *ecuación de la primera ley de la termodinámica* que es un caso especial de la ecuación general (1.14).

Compresores y expansores operando en régimen permanente

Para procesos operando en régimen permanente, el término de la derecha del signo de igualdad de la ecuación (1.14) desaparece y para estos equipos en forma integrada queda como:

$$\dot{h} + \frac{J^2}{2g_c} + \frac{gz}{g} = q - w \quad (1.17)$$

Si los equipos son adiabáticos y se desprecian los términos de energía cinética y potencial:

$$\otimes h = w \tag{1.18}$$

La conservación de la energía en la refinación del petróleo ha sido un tema que ha interesado siempre pues es un tópico en donde incide la economía de todos los procesos involucrados en ella (*IFP publications, 1988*).

Balance de entropía

El balance de energía es insuficiente para analizar muchos sistemas y muchos procesos termodinámicos ya que la naturaleza ha impuesto ciertas restricciones sobre la transferencia y conversión de energía. El tratamiento cuantitativo de estas restricciones se ha facilitado con la introducción del concepto de *entropía*. De esta manera cualquier *proceso real* deberá cumplir con los principios de conservación de masa, conservación de energía y balance de entropía.

Un sistema puede sufrir un cambio en entropía como resultado de un proceso en donde su energía, masa o volumen pueden cambiar. El procedimiento seguido para obtener la expresión del balance de entropía es similar al del balance de energía; entonces, si se considera un sistema abierto, como el de la figura 1.6, el balance de entropía se puede escribir como:

$$\begin{aligned} & \text{Entropía de entrada } (S_{\text{entra}}) \quad \text{Entropía de salida } (S_{\text{sale}}) \\ & + \text{Entropía generada } (S_{\text{generada}}) + \text{Flujo de entropía} \\ & = \text{Entropía acumulada} \end{aligned} \tag{1.19}$$

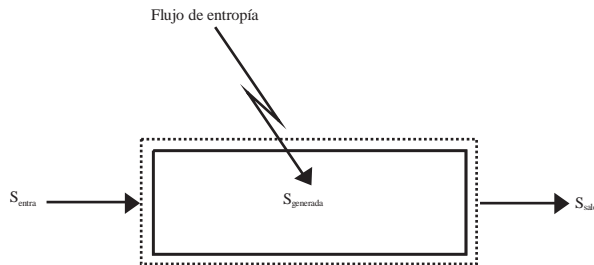


FIGURA 1.6. Sistema abierto ($S =$ entropía asociada con flujo de masa).

Como en el caso del balance de energía, se tienen los términos de entrada y salida como flujo de entropía asociada con el flujo de masa (debido al flujo de calor); puesto que la entropía no es una propiedad conservativa, se debe tomar en cuenta, en el balance de entropía, la producción de entropía que se debe a irreversibilidades del sistema; la ecuación (1.19) quedará:

$$(S^{TM}M)_{entra} - (S^{TM}M)_{sale} + {}^{TM}(\text{Flujo de entropía}) + {}^{TM}(\text{entropía generada}) = {}^{TM}(MS)_{sistema} \quad (1.20)$$

Flujo de entropía

Es el flujo de calor que produce un flujo de entropía y se usa para sistemas reversibles:

$${}^{TM}(\text{Flujo de entropía}) = \frac{{}^{TM}Q}{T} \quad (1.21)$$

en dónde T es la temperatura absoluta del sistema en el punto en donde el flujo existe. Si la temperatura del sistema en las fronteras no es constante sobre el área donde la transferencia de calor ocurre, la ecuación (1.21), se deberá escribir como:

$${}^{TM}(\text{Flujo de entropía}) = \iint_A \frac{{}^{TM}q}{T} dA \quad (1.22)$$

en donde:

q = calor finito transferido por unidad de área de la frontera

${}^{TM}q$ = calor diferencial transferido por unidad de área de la frontera

A = área de la frontera

El flujo total de entropía debido al flujo de calor será:

$$(\text{Flujo de entropía}) = \iint_{\text{proceso}} \frac{{}^{TM}q}{T} dA \quad (1.23)$$

Generación de entropía (trabajo perdido)

El cambio de entropía asociado con una irreversibilidad interna (pérdidas por fricción por ejemplo), o generación de entropía, está dado para un proceso diferencial por:

$${}^{\text{TM}}(\text{entropía})_{\text{generada}} = \frac{{}^{\text{TM}}LW}{T_{\text{sistema}}} \quad (1.24)$$

en donde LW es el trabajo perdido por irreversibilidades en el sistema. Si las irreversibilidades se distribuyen en todo el volumen del sistema y la temperatura varía dentro del sistema, el término de generación de entropía debe ser evaluado integrando la diferencial, $(d LW/T) dV$, sobre todo el volumen del sistema, a lo largo del proceso total entre los estados inicial y final:

$$\{\text{Generación de entropía entre los estados 1 y 2}\} = \int_{\text{proceso}} \frac{{}^{\text{TM}}LW}{T} dV \quad (1.25)$$

en donde:

LW = trabajo perdido finito por unidad de volumen del sistema

${}^{\text{TM}}LW$ = trabajo perdido diferencial por unidad de volumen del sistema

La evaluación del trabajo perdido y producción de entropía no se puede efectuar con precisión debido a la naturaleza extremadamente compleja de los fenómenos disipativos causados por pérdidas por fricción. Aunque se puedan medir cambios en otras propiedades con las cuales se puedan calcular cambios en entropía provenientes de irreversibilidades, una predicción a priori de LW es extremadamente difícil y generalmente impráctica.

La evaluación directa de los efectos del trabajo perdido en equipos de proceso tales como turbinas y compresores está lejos de las capacidades actuales; por lo tanto, cuando se requiere analizar procesos que involucren operaciones de esta naturaleza, a menudo, es necesario aproximar la situación real con una reversible en la cual $LW = 0$. Experiencias pasadas con muchos equipos, tales como compresores y turbinas, permiten al ingeniero relacionar operaciones reversibles con condiciones reales. La relación se

expresa por medio de un factor de eficiencia. Para equipos tales como una bomba y un compresor, los cuales utilizan trabajo de los alrededores, la eficiencia está definida como:

$$\text{eficiencia} = \frac{W_{\text{rev}}}{W_{\text{real}}} - 100\% \quad (1.26)$$

Para una turbina y otros equipos de expansión que suministran trabajo a los alrededores, la definición se invierte para darnos:

$$\text{eficiencia} = \frac{W_{\text{real}}}{W_{\text{rev}}} - 100\% \quad (1.27)$$

en donde W_{rev} es el trabajo producido si el proceso es operado reversiblemente y W_{real} es el trabajo real involucrado. Conociendo la eficiencia de un equipo en particular, acoplado con un análisis basado sobre un proceso reversible, se facilita la estimación de los requerimientos actuales de energía para un equipo específico, con razonable aproximación.

Acoplando las ecuaciones (1.24) y (1.19), se tendrá la ecuación del balance de entropía en forma diferencial:

$$(S^{\text{TM}}M)_{\text{entra}} - (S^{\text{TM}}M)_{\text{sale}} + \int_A \frac{\text{TM}}{T} dA + \int_V \frac{\text{TM}LW}{T} dV = d(MS)_{\text{sistema}} \quad (1.28)$$

Si la temperatura del sistema es uniforme, la ecuación (1.28) se reduce a:

$$(S^{\text{TM}}M)_{\text{entra}} - (S^{\text{TM}}M)_{\text{sale}} + \frac{\text{TM}Q}{T} + \frac{\text{TM}W}{T} = d(MS)_{\text{sistema}} \quad (1.27)$$

Sistemas cerrados

Para un sistema cerrado, los términos $(S^{\text{TM}}M)_{\text{entra}}$ y $(S^{\text{TM}}M)_{\text{sale}}$ desaparecen, así como el término $d(MS)_{\text{sistema}}$; si además, la temperatura es constante, el balance de entropía se reduce a:

$$[MdS]_{\text{sistema}} = \frac{{}^{\text{TM}}Q}{T} + \frac{{}^{\text{TM}}LW}{T} \quad (1.30)$$

Para un proceso reversible ${}^{\text{TM}}LW = 0$ y (1.28) quedará:

$$dS_{\text{sistema}} = [MdS]_{\text{sistema}} = \frac{{}^{\text{TM}}Q}{T} \quad (1.31)$$

Sistemas abiertos

Cuando un sistema abierto opera en estado estacionario $d(MS)_{\text{sistema}} = 0$ y ${}^{\text{TM}}M_{\text{entra}} = {}^{\text{TM}}M_{\text{sale}}$ el balance se reduce a:

$$(S_{\text{entra}} - S_{\text{sale}}) {}^{\text{TM}}M + \frac{{}^{\text{TM}}Q}{T} + \frac{{}^{\text{TM}}LW}{T} = 0 \quad (1.32)$$

Para un proceso adiabático ${}^{\text{TM}}Q = 0$, mientras que para un proceso reversible ${}^{\text{TM}}LW = 0$. Estos factores se pueden usar para modificar también las ecuaciones (1.30) y (1.31).

Aprovechamiento y recuperación de energía

El propósito de esta sección es mostrar cómo están relacionados el balance de materia y el balance de energía y la ingeniería de reactores en uno de los procesos de la refinación del petróleo que es la *desintegración catalítica*. Esta relación tan estrecha sirve para que a través de modelos matemáticos que describen el proceso se pueda pensar en un aprovechamiento y en una recuperación de la energía que se maneja en el proceso.

Una representación simplificada del proceso se observa en la figura 1.7, el catalizador circula entre el reactor tubular y el regenerador y la corriente de gasóleo y el aire en forma separada fluidizan las partículas de catalizador en el reactor y en el generador. El análisis de la operación de la desintegración catalítica en lecho fluidizado (FCC) requiere del desarrollo de modelos para el reactor tubular y para el regenerador y tomar en cuenta su

operación en serie; particularmente el balance entre el calor producido en el regenerador con el calor consumido en el reactor catalítico.

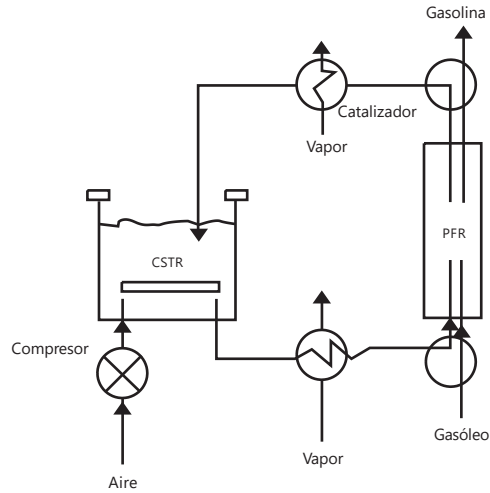


FIGURA 1.7. Diagrama simplificado del proceso de desintegración catalítica.

El reactor tubular catalítico

La figura 1.8 describe esquemáticamente el transporte de movimiento que prevalece en el reactor tubular. El gasóleo y el vapor de agua dispersante acarrear, por así decirlo, al catalizador regenerado hacia arriba en un flujo de dos fases (gas-sólido).

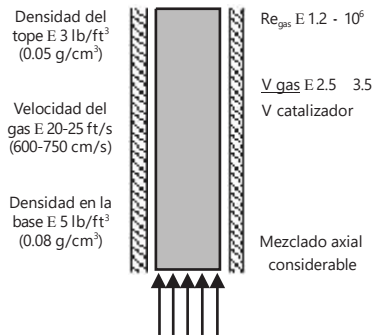


FIGURA 1.8. Características del flujo en el reactor tubular.

Las partículas de gas y catalizador se mueven hacia arriba con diferente velocidad; las partículas sólidas van siempre detrás del gas. Así, la relación entre sólidos a gas en la mezcla que fluye a lo largo del reactor es mayor que la relación sólido a gas en la alimentación y el tiempo de residencia de los sólidos es mayor que la del gas. En este reactor se presentan las reacciones de desintegración y de formación de coque; desde el punto de vista de la ingeniería de reactores, la pérdida de actividad catalítica en el catalizador causada por la formación del coque puede representarse por una ecuación simple y empírica que fue desarrollada por Voorhies (1947). Este autor encontró que para muchos catalizadores que se desactivan, la fracción remanente de la actividad inicial puede expresarse como:

$$\lambda_b = \exp(-\langle t) \quad (1.33)$$

donde:

- λ_b = fracción remanente de la actividad inicial
- \langle = parámetro empírico de formación de coque
- t = tiempo al que están expuestos los sólidos al gasóleo

La ecuación (1.33) se puede escribir para tomar en cuenta el coque remanente en el catalizador regenerado alimentado al reactor, tomando la forma:

$$\lambda = \lambda_b \exp(-\langle t) \quad (1.34)$$

Generalmente este coque no se quema en la regeneración, se asume que la fracción de actividad remanente es linealmente dependiente del contenido de coque en el catalizador, al menos cuando la fracción peso de coque en el catalizador es baja; así, la actividad inicial λ_b es dada como (Voltz, *et al.*, 1971):

$$\lambda_b = 1 - \textcircled{R} W_c \quad (1.35)$$

en donde \textcircled{R} es un parámetro de desactivación empírica y W_c es la fracción peso de coque en el catalizador.

Si se asume que la mayoría del coque es producido en reacciones laterales, durante la desintegración, el nivel de coque y la actividad catalítica remanente deberán ser correlacionados con el tiempo. Froment (1977) ha sostenido que la actividad catalítica debería estar relacionada con la con-

centración de coque en el catalizador, lo cual es un argumento similar al anterior y ha dado la cinética detallada de la formación de coque; esto permite predecir la concentración de coque en el catalizador en cualquier punto dentro del reactor. Por otro lado, la experiencia de planta industrial sugiere una independencia aparente de la actividad catalítica y la velocidad de formación de coque y por lo tanto la ecuación convencional (1.34) es utilizada para la simulación de la planta; en forma correspondiente, el tiempo de residencia del catalizador en el reactor tubular de lecho fluidizado (típicamente de 5 a 7 segundos), es un parámetro importante en la operación de una planta de desintegración catalítica.

Aunque la modelación y simulación del proceso FCC (Theologos, *et al.*, 1997) es un tópico que está siempre en revisión, actualización y mejora, a continuación se describe el modelo más simple de ingeniería de reactores para la desintegración catalítica y que fue desarrollado por Weekman (1968) y Nace (*et al.*, 1971); Nace (1970) y Weekman, y Nace (1970).

A pesar de que el número de componentes, que se manejan en las mezclas del proceso FCC agrupados como saturados y aromáticos, es de dieciocho (Green, *et al.*, 1997) se ha considerado que los vapores en el reactor tubular consisten de tres componentes: gasóleo, gasolina y gases ligeros. Aunque los estudios con compuestos puros han mostrado que la desintegración catalítica es una reacción de primer orden con respecto a la concentración del hidrocarburo (al menos para parafinas de bajo peso molecular) la reacción con gasóleo como pseudocomponente indica una cinética de segundo orden con respecto al hidrocarburo.

Ya que es complicado describir el patrón de flujo del gas en el reactor de lecho fluidizado, la situación se puede aproximar con el flujo de gas idealizado como un flujo pistón o tapón. Con esta simplificación se puede describir el balance de masa en el reactor, incorporando la consideración de la cinética del gasóleo como de segundo orden, como sigue:

$$\frac{dW_o}{dZ} = \frac{k_o}{LHSV} W_o^2 \quad (1.36)$$

en donde:

W_o = fracción masa de gasóleo en la corriente vapor

Z = z/L fracción distancia hacia abajo de la entrada al reactor

\backslash = ecuación (1.34)

LHSV (liquid hourly space velocity) = espacio velocidad = volumen de líquido alimentado al reactor por unidad de volumen de reactor y por hora:

$$k_o = k_o^1 \frac{\gamma_o^2 \gamma_F}{\gamma_L \gamma_C}$$

es la constante de velocidad de reacción del pseudocomponente de primer orden por hora. La definición de k_o dada por Weekman incluye la densidad del catalizador en el reactor. Para convertir el reactor con lecho de catalizador movible usado por Weekman y Nace al reactor con lecho fluidizado, k_o deberá ajustarse por la relación de las densidades de los reactores, como sigue:

$$k_o = k^{WN} \frac{\gamma_F}{\gamma_F^{WN}} \tag{1.37}$$

en donde:

k_{oWN} = valor reportado para el parámetro de desintegración por Weekman y Nace (1970).

γ_{FWN} = densidad del catalizador en el reactor con cama movible = 50 lb/ft³ o 0.8 g/cm³.

k_{ol} = constante de velocidad de reacción de segundo orden por unidad de volumen de catalizador por hora. No se han reportado valores de esta constante en la literatura.

γ_o = densidad del gasóleo a la entrada del reactor

γ_L = densidad del líquido usada para definir *LHSV*

γ_F = densidad del catalizador fluidizado en el reactor

γ_c = densidad del catalizador como sólido

Si el reactor se opera isotérmicamente, la fracción de gasóleo remanente en el producto puede encontrarse mediante:

$$W_o = \frac{1}{1 + (k_o / LHSV) U} \tag{1.38}$$

en donde:

$u = \int_0^1 dZ$ = parámetro distancia modificado para tomar en cuenta la desactivación del catalizador

$$= \sqrt{0} \frac{1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right)}{\tau_c}$$

cuando la relación entre la velocidad del gas y la velocidad del catalizador a lo largo del reactor tubular es constante y en donde t_c es el tiempo de contacto del reactante con el catalizador en el reactor tubular. Las ecuaciones anteriores toman en cuenta la conversión del gasóleo; las expresiones para la producción de gasolina son más complejas debido a que la gasolina puede del gasóleo y perdida por una sobre-desintegración catalítica; el balance de masa para la producción de gasolina quedaría entonces como:

$$\frac{dW_G}{dZ} = \frac{k_1 k_2}{LHSV} W_o - k_2 W_G \quad (1.39)$$

El primer término del segundo miembro de la ecuación (1.39) representa la producción de gasolina a partir del gasóleo. Voltz y sus colaboradores (1971) encontraron que k_1 es una fracción de k_o la cual a su vez depende básicamente de la relación aromático-nafténico en el gasóleo. El segundo término representa la sobre desintegración catalítica de la gasolina que produce gases ligeros; aquí k_2 es la constante de velocidad de desintegración catalítica de la gasolina. La ecuación (1.39) puede integrarse, considerando la operación isotérmica y se obtiene que:

$$W_G = \frac{k_1 \exp(-k_2 W_o)}{k_2} \left[1 - \exp(-k_2 W_o) \right]$$

/

$$\exp(\lambda W) = E(\lambda) + E^{\square} \lambda_2 \lambda_{000}$$

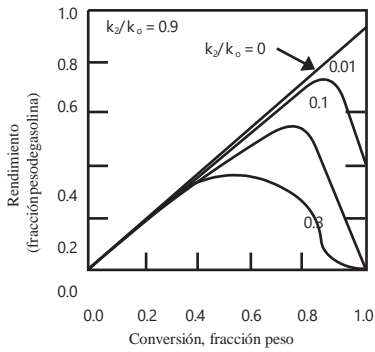
en donde:

$$k_1 = k_1 / k_o$$

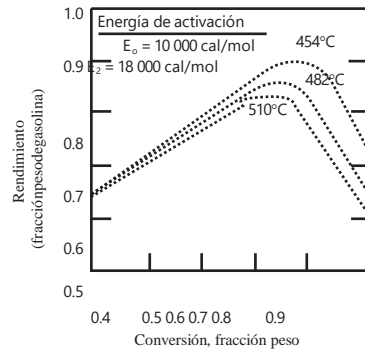
$$k_2 = k_2 / k_o$$

$$E(x) = \int_0^x \frac{e^{-u}}{u} du = \text{integral de una exponencial cuyos valores se pueden encontrar en cuadros de esta función en un manual de matemáticas.}$$

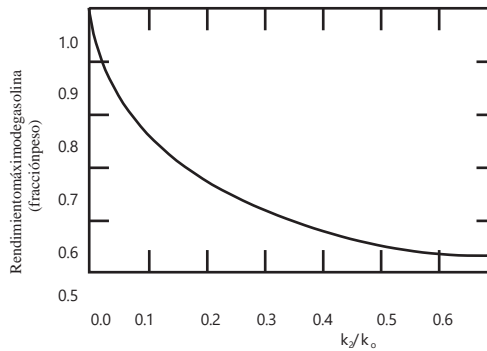
Algunos resultados que se pueden obtener a partir de estas ecuaciones son mostrados en la figura 1.9.



a) Efecto sobre la selectividad al variar la relación gasolina/gasóleo desintegrado a una cierta selectividad inicial constante (Weekman y Nace, 1970).



c) Efecto de la temperatura sobre la selectividad para formar gasolina en la desintegración catalítica (Weekman y Nace, 1970).



b) Máximo rendimiento de obtención de gasolina como una función de la relación gasolina/gasóleo desintegrado (Weekman y Nace, 1970).

FIGURA 1.9. Resultados de la simulación del reactor de lecho fluidizado de desintegración catalítica.

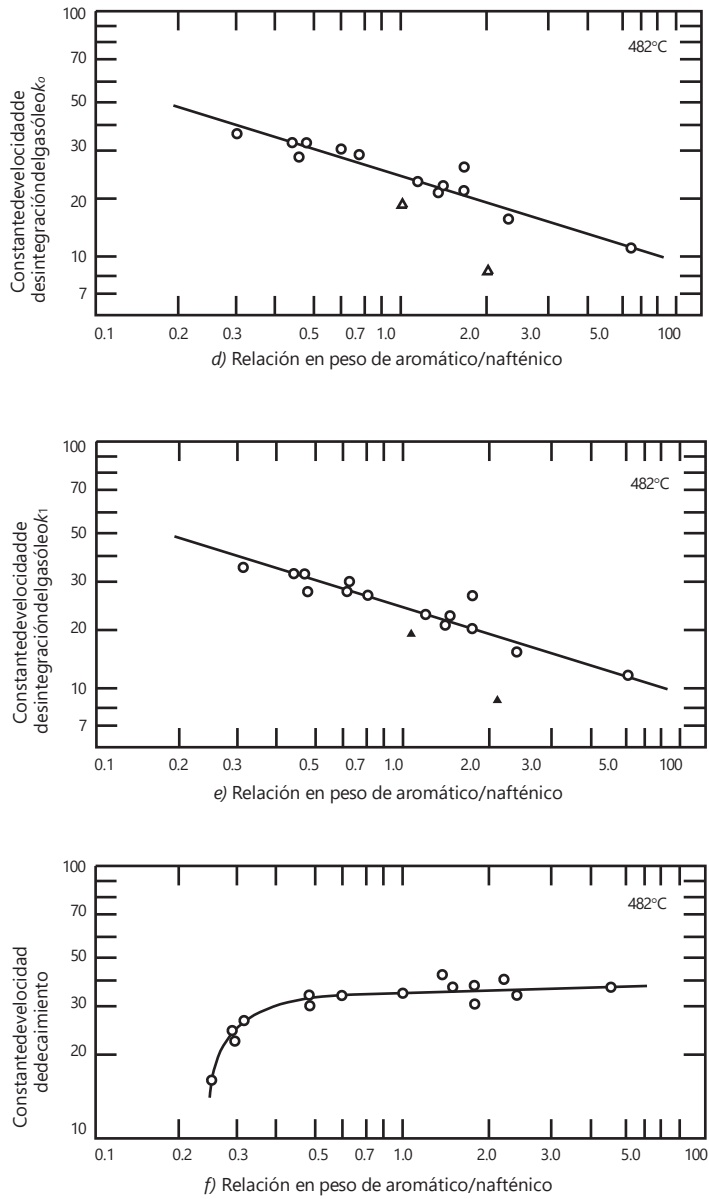


FIGURA 1.9. (Conclusión). Resultados de la simulación del reactor de lecho fluidizado de desintegración catalítica, (Voltz, *et al.*, 1971).

Un análisis más detallado de la desintegración toma en cuenta la transferencia de actividad catalítica que da el hidrógeno en catalizadores de zeolita. En éste análisis la gasolina se representa como dos fracciones: una fracción inestable olefínica y una fracción estable la cual puede ser formada a partir de la fracción inestable. En éstos términos se pueden asumir los puntos con los que se puede mejorar el funcionamiento de los catalizadores de desintegración catalítica:

- 1) Aumentando la relación entre k_1/k_0
- 2) Disminuyendo el parámetro de sobre desintegración k_2
- 3) Incrementando el parámetro de estabilización de la gasolina

Estos parámetros pueden ser relacionados en forma global a la estructura de las zeolitas y de la matriz de sílice-alúmina; sin embargo, estas correlaciones no están disponibles en la literatura.

La ingeniería del reactor tubular es mucho más compleja de lo que se ha representado, más la experiencia industrial dice que los resultados obtenidos no son aproximaciones malas. Las complicaciones que se deben considerar son en dos direcciones: 1) el reactor no es isotérmico sino más bien adiabático y 2) la dispersión axial de la fase gaseosa afecta la conversión (el mezclado en la dirección del flujo representa una desviación del flujo tipo pistón o tapón que se ha asumido) y el rendimiento en forma significativa, especialmente a altos niveles de conversión.

Con respecto al inyector se pueden hacer los comentarios siguientes: un inyector bien diseñado debe lograr un equilibrio térmico en forma rápida entre el gasóleo y el catalizador regenerado con el que se mezcla. Se asume que el equilibrio se logra antes de que ocurra conversión alguna; la temperatura de la mezcla a la entrada del reactor puede calcularse a través de un balance de calor en esa parte resultando que:

$$T_o = \frac{C_p T_{o,o} + \bar{R}^c C_{pc} T_{c,o} + \bar{R}^w C_{pw} T_{w,o}}{C_{po} + \bar{R}^c C_{pc} + \bar{R}^w C_{pw}} \quad (1.41)$$

en donde:

C_p^o = capacidad calorífica del gasóleo por unidad de masa

C_p^c = capacidad calorífica del catalizador

C_p^w = capacidad calorífica del vapor dispersante

- \bar{R}^c = relación entre catalizador/gasóleo en sus flujos de circulación.
 \bar{R}^w = relación vapor/gasóleo en sus flujos de circulación e igual a cero si no se usa vapor.
 $T_{o,o}$ = temperatura absoluta del gasóleo a la entrada.
 T_o = temperatura del gasóleo a la entrada, resultado del mezclado.
 $T_{c,o}$ = temperatura absoluta del catalizador que regresa del regenerador.
 $T_{w,o}$ = temperatura absoluta de entrada del vapor dispersante.

El reactor tubular puede ser considerado como un reactor adiabático y así, realizando un balance de energía en el reactor se llega a la expresión siguiente para la temperatura de la mezcla gas-sólido en el reactor:

$$T - T_o = \frac{(h_g - h_o)(1 - W_o) + (h_g - h_G) W_G}{C_p + \bar{R}^c C_p + \bar{R}^w C_p} \quad (1.42)$$

en donde:

- h_o = calor de formación del gasóleo por unidad de masa y evaluado a las condiciones de entrada
 h_g = calor de formación de los gases ligeros por unidad de masa
 h_G = calor de formación de la gasolina por unidad de masa

En el segundo miembro de la ecuación (1.42) el primer término del numerador representa la energía que se requiere para convertir todo el gasóleo el cual reacciona para producir gases ligeros. El segundo término representa la energía que podría ser recuperada si los gases ligeros fueran convertidos a gasolina. Esta ecuación no toma en cuenta el pequeño calor de reacción asociado a la formación de coque. Los valores de los calores de formación dependen en forma significativa de la composición del gasóleo, gasolina o gases ligeros; por comparación, el error que resulta de despreciar las variaciones con la temperatura y la composición en las capacidades caloríficas es pequeño: T_o es comúnmente el punto de control en la operación industrial.

El regenerador

El regenerador es un reactor de lecho fluidizado en el cual el coque depositado sobre el catalizador se quema regenerándose con ello su actividad catalítica. La energía que se necesita para la reacción endotérmica de desintegración catalítica es suministrada por la combustión exotérmica del coque para dar monóxido y bióxido de carbono. La operación del regenerador es limitada por la temperatura a la que se pueden someter los materiales de construcción del regenerador y por la capacidad del compresor de aire; ya que los compresores grandes son costosos, las unidades de regeneración se diseñan para operar cerca de la capacidad máxima. La cinética de combustión del coque de un catalizador de desintegración catalítica se ha determinado por los investigadores Veisz y Goodwin (1963) y viene expresada como:

$$\frac{dC_{O_2}}{dt} = k C_{O_2} C_c \quad (1.43)$$

en donde C_c es la concentración del coque (porcentaje en peso) en el catalizador. La rapidez con que se quema un cierto coque en particular es una función de la alimentación a partir de la cual se formó; por ejemplo, si se tienen concentraciones bajas de compuestos organometálicos en el gasóleo, ellos se descomponen dejando depósitos metálicos sobre el catalizador y esos depósitos pueden acelerar la combustión del coque. De aquí que, los parámetros cinéticos para el quemado deben ser determinados para cada tipo de carga alimentada al reactor de desintegración. Sin embargo, la experiencia ha mostrado que aparentemente la cinética del quemado es la misma para el coque depositado en sílica-alúmina densa y sobre catalizadores comerciales de desintegración de tipo zeolita.

El reactor de lecho fluidizado del regenerador en apariencia maneja dos fases, una *fase burbuja* que consiste de burbujas que van desde aproximadamente 0.1 a 1 metro de diámetro y la fase llamada *emulsión* la cual es realmente una mezcla de gas y partícula fluidizadas. Las burbujas se elevan rápidamente a través de la fase emulsión y se lleva a cabo una transferencia rápida de gas entre las dos fases (véase figura 1.10).

El gas fluye a través de la fase emulsión a una velocidad cercana a la velocidad mínima que se requiere para la fluidización de las partículas;

la velocidad de fluidización mínima es baja (H 5cm/seg) y un lecho fluidizado operando con esta velocidad no producirá resultados económicamente satisfactorios. Sin embargo, afortunadamente las burbujas fluyen a través del lecho a una velocidad mucho mayor la cual depende del diámetro de la burbuja.

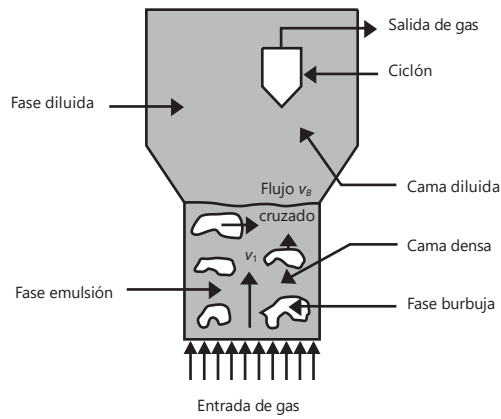


FIGURA 1.10. Regenerador en el proceso FCC.

En esta operación el gas y las partículas sólidas en la fase emulsión se mezclan bien debido al paso de las burbujas a través de la fase. Así, no hay variación en la composición de la fase emulsión con la posición. En contraste, hay poco mezclado en la fase burbuja y ésta puede representarse como si fuera un flujo pistón.

La velocidad de intercambio del gas entre las fases emulsión y burbuja es grande y así no hay diferencias substanciales entre las composiciones de salida de las dos fases.

El tratamiento cuantitativo de estas observaciones se realiza practicando balances de materia por componente sobre el carbón y el oxígeno y así se pueden conocer las composiciones de las fases burbuja y emulsión.

El balance de materia para el carbón en la fase emulsión da una tercera ecuación. Estas tres ecuaciones pueden entonces resolverse para determinar el consumo de oxígeno en el regenerador. Los parámetros externos necesarios son los de la cinética de quemado, la fracción hueca de las burbujas en el reactor y la velocidad mínima de fluidización. La operación en el regenerador es estable y directa.

El balance de energía en el regenerador puede realizarse en forma sencilla si algunos de los detalles de la sección o zona de desatracción y de los ciclones en el regenerador se desprecian. La sección de desatracción del regenerador es la sección que está por arriba de la cama densa en donde las partículas, que son sacadas de la cama densa por las burbujas, se frenan y eventualmente regresan a la cama densa. Los ciclones son necesarios para controlar la rapidez con la cual los *finos* escapan en el gas de chimenea y que serán posteriormente recolectados en equipos de precipitación de polvo. Las partículas en la zona de desatracción todavía contienen carbón y si el gas que sale de la cama densa es demasiado rico en oxígeno es posible lograr una combustión extra de carbón o monóxido de carbono a bióxido de carbono. De esta manera, la diferencia de temperatura entre la cama densa y la zona de desatracción se utiliza como una medida de la concentración de oxígeno en la zona de destracción. La temperatura en esta zona es utilizada para controlar el flujo de aire al regenerador. Asumiendo que la cama densa esté bien mezclada, se puede escribir la ecuación del balance de energía en estado estacionario para la cama densa y de ahí puede ser resuelta para determinar (para cierto nivel de coque, cierta temperatura del catalizador y un gasto del mismo) la temperatura de salida y el nivel de coque como función del flujo o gasto de aire que dan los compresores (los cuales entregan convenientemente un gasto cercano al de la capacidad máxima) y de la temperatura del aire a la entrada. Las otras variables en el regenerador son de menor importancia.

En algunas plantas de desintegración catalítica se pueden acoplar el reactor de lecho fluidizado y el regenerador a través de un balance de energía global. La concentración de coque en el catalizador alcanza, en estas condiciones, un valor bajo debido a que la mayoría del oxígeno en el aire se consume y el catalizador se mantiene a temperaturas por debajo de los límites del regenerador. Para evitar este problema Lee y Weekman (1971) patentaron un método que desacopla la operación del reactor y el regenerador con catalizadores de zeolitas el cual opera en forma más efectiva a bajos niveles o contenidos de coque. El método de control desacoplado fue desarrollado para dar mejores rendimientos de gasolina en plantas de desintegración catalítica. El desacoplamiento del reactor y el regenerador fue logrado colocando intercambiadores de calor separados en la entrada de la corriente de aire y en la entrada de la corriente de gasóleo, permitiendo con ello que la temperatura del regenerador sea controlada independientemente de la temperatura del reactor.

Durante la operación de una planta de desintegración catalítica el flujo de circulación de catalizador y el flujo o gasto de gasóleo son mantenidos constantes; la velocidad de circulación de catalizador está limitada por el tamaño de las líneas de transferencia y por la caída de presión. La temperatura del reactor también se fija a un nivel óptimo que va de acuerdo con la alimentación en particular que se tenga en ese momento. Como la temperatura del regenerador se incrementa para reducir el nivel de coque, la temperatura de alimentación de gasóleo se tiene que disminuir para mantener operando el reactor en las condiciones deseadas. El control independiente de la temperatura del gasóleo permite que se pueda variar la temperatura del catalizador que proviene del regenerador sobre un intervalo de 42°C. El mantener un nivel más bajo en la concentración de coque en el catalizador, requiere de oxígeno adicional, y así, conforme se reduzca la concentración de coque el flujo del aire se deberá incrementar.

La tecnología de la desintegración catalítica en lecho fluidizado es un tópico que está siendo continuamente actualizado y mejorado. Para observar su evolución así como sus cambios tecnológicos durante los años noventa se recomienda revisar la siguiente bibliografía para tener un panorama más amplio de lo que representa este proceso en la refinación del petróleo:

MURPHY (1992), Cambios en la evolución de diseño son marcados en el proceso FCC.

AVIDAN (1992), FCC esta lejos de ser una tecnología madura.

MURCIA (1992), Numerosos cambios marcan el avance de la tecnología FCC.

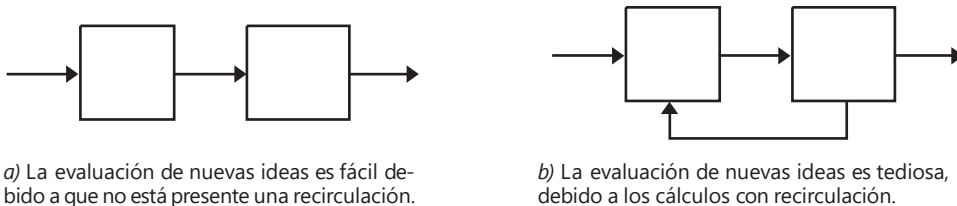
REICHLE (1992), Fluid Catalytic Cracking cumple su 50 aniversario en la carrera.

MCCARTHY, et al. (1997), Se mejora el rendimiento de la FCC utilizando lo último en tecnologías de proceso.

SIMULACIÓN DE PROCESOS DE REFINACIÓN

La innovación ha sido siempre una parte de la ingeniería excitante y presenta desafíos. El ingeniero innovador crea nuevos procesos y encuentra diferentes condiciones de procesamiento incrementando la utilidad de los mismos.

A menudo la evaluación de las ideas y del mejoramiento de un proceso se llevan a cabo sin problemas y directamente. Sin embargo, la evaluación puede ser difícil cuando involucra la tediosa tarea de cálculos largos y repetitivos causados por la recirculación de masa y/o energía (véase la figura 2.1).



a) La evaluación de nuevas ideas es fácil debido a que no está presente una recirculación.

b) La evaluación de nuevas ideas es tediosa, debido a los cálculos con recirculación.

FIGURA 2.1. Representación de un cálculo en una simulación sin y con recirculación.

Las recirculaciones ocurren frecuentemente en plantas químicas y en procesos de refinación del petróleo, en algunos casos, porque así se requiere para la conservación de la masa o bien para mejorar la eficiencia total pero las recirculaciones dificultan los cálculos y el ingeniero necesita una técnica que lo auxilie y le de libertad para el trabajo creativo, por lo que se deben combinar la velocidad de las computadoras digitales con métodos de manejo de información.

Para analizar procesos, buscando mejorarlos, el ingeniero requiere de una descripción matemática, es decir; *realizar una simulación*, de las innovaciones propuestas. Tradicionalmente, cuando se simula cualquier proceso, el ingeniero inicia con algunas condiciones de entrada y usa los principios fundamentales de las operaciones de transformación (conservación de la masa, *momentum* y energía) para calcular las salidas del primer equipo, unidad o etapa lo cual se debe repetir para cada unidad subsecuente to-

mando en cuenta que la salida de una unidad será la entrada para la siguiente.

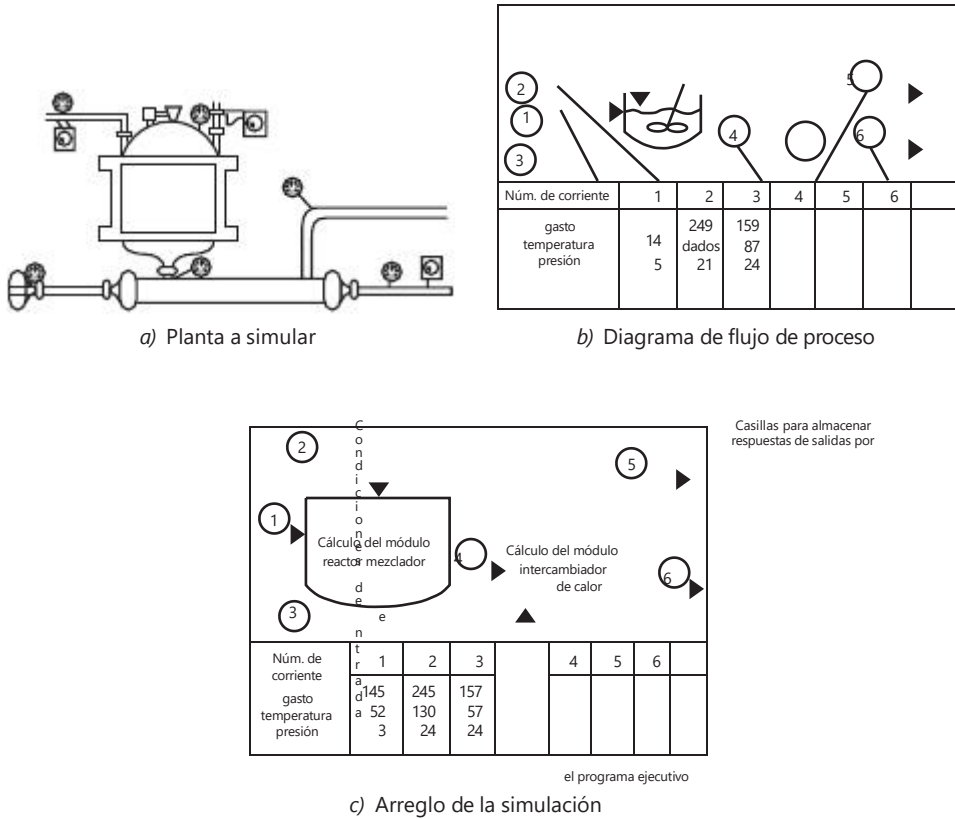


FIGURA 2.2. Ideando la simulación de un proceso.

Por ejemplo, el diagrama de flujo de ingeniería mostrado en la figura 2.2b. podrá usarse para hacer los balances de masa y energía para el proceso mostrado en la figura 2.2a, para no perder la secuencia de los cálculos y para resumir los resultados. Cuando lo que quiera realizar es el cálculo de los flujos de masa y energía creará una simulación del proceso como se muestra en la figura 2.2a; el arreglo para la simulación se muestra en la figura 2.2c. Para cada conjunto de condiciones de entrada en las corrientes 1, 2 y 3 de la figura 2.2c habrá un conjunto de corrientes correspondientes que están calculadas en 4, 5 y 6. Las características de esta aproximación son:

1. Las entradas a cada unidad son usadas para calcular sus salidas, basándose en los principios de conservación de las operaciones de transformación que describen el fenómeno que ocurre en la unidad.
2. La secuencia de procesamiento y los arreglos entre las unidades debe conocerse de antemano.
3. Las salidas calculadas de una unidad serán las entradas a otras unidades.
4. El ingeniero deberá saber cuando tiene un problema de prueba y error o de recirculación.
5. Para los problemas de prueba y error o recirculación, el ingeniero tratará de especificar la secuencia en la que los cálculos deben efectuarse con el mínimo de trabajo requerido.

De las características anteriores, únicamente el equipo (1), el arreglo del equipo (2) y la entrada a la planta, varía de problema a problema. Los cálculos restantes; es decir, el manejo de números y la transferencia de información de cálculo a cálculo (3), la identificación de la recirculación (4) y la especificación de la secuencia en la cual se deben desarrollar los cálculos, son comunes para todos los problemas y pueden manejarse en forma sencilla por un programa de cómputo que se le puede dar el nombre de *ejecutivo*. Así, si se tiene un programa ejecutivo, el ingeniero alimentará las condiciones de entrada especificadas, indicando el arreglo del equipo y suministrando el modelo matemático, el cual describe la operación que se realiza en cada equipo (véase el cuadro 2.3).

El programa de cómputo ejecutivo es comparable al de un director de proyecto que obtiene resultados reales para el proceso completo, requiriendo que cada ingeniero a su mando le suministre los cálculos efectuados de un equipo o módulo en particular.

La combinación de una computadora digital y el manejo de información del programa ejecutivo presenta una técnica conveniente para todo ingeniero químico. Una simulación por computadora, puede ser usada para: 1) predecir el efecto de cambiar condiciones de operación, de la disposición y la capacidad física; 2) efectuar balances de masa y energía en forma rápida y segura; 3) tener conocimiento del comportamiento del sistema completo, 4) mejorar el control e investigar la factibilidad de un control por computadora; 5) facilitar cálculos costosos; 6) controlar el presupuesto, planeando las operaciones y 7) finalmente guiar y adiestrar a los operadores e ingenieros de proceso.

CUADRO 2.2. Relación entre el ingeniero y el programa ejecutivo en una simulación.

<i>Lo que el ingeniero debe suministrar</i>	<i>Lo que el programa ejecutivo hace</i>
Condiciones de entrada	Lee los datos de entrada y los almacena apropiadamente
Descripción del arreglo del equipo	Transmite información a través de corrientes, conectando las unidades de cómputo.
Secuencia de cálculos (si se desea), información de corrientes y equipo.	Determina la secuencia, si ésta no se indicó.
<i>Unidades de cómputo</i>	
Modelos matemáticos de todos los equipos	Ejecuta cálculos con unidades de cómputo o módulos en un orden adecuado.
Control de información para instruir al programa ejecutivo la forma de imprimir y otras decisiones	<input type="checkbox"/> Imprime y almacena los resultados de los cálculos <input type="checkbox"/>
Interpretación ingenieril de los resultados calculados.	<input type="checkbox"/> RESPUESTA

La simulación consta de tres partes: *a)* el conjunto de datos, *b)* el programa ejecutivo y *c)* el conjunto de modelos matemáticos llamados unidades de cómputo o módulos. La relación entre éstos se da en el cuadro 2.3. El conjunto de datos incluye las condiciones de entrada, la secuencia de procesamiento, el orden de los cálculos y la información perteneciente a los cálculos en las unidades de cómputo. Cuando se ha suministrado el conjunto de datos, el programa ejecutivo llama a las diferentes unidades de cómputo, de acuerdo con la secuencia de cálculos y calcula los valores de las variables de operación de todas las corrientes en el sistema; el programa ejecutivo transmite información a las corrientes, almacena los resultados calculados y puede planear la secuencia de los cálculos requeridos si así se desea.

Se le llama unidad de cómputo al conjunto de cálculos que predice lo que ocurre dentro de un equipo, partiendo de una serie de modelos matemáticos que han sido probados previamente en su funcionamiento o desempeño.

Cómo realizar una simulación

En el momento de crear una simulación, el ingeniero deberá escribir unidades de cómputo consistentes con el programa ejecutivo seleccionado. La tarea es complicada por la gran cantidad de detalles complejos lo cual requiere del uso de una computadora. El manejo de estos detalles requiere de una planeación cuidadosa y de un adecuado uso de las horas-hombre.

La figura 2.3 presenta la estrategia sugerida para resolver el problema y la figura 2.4 muestra la organización posible del personal.

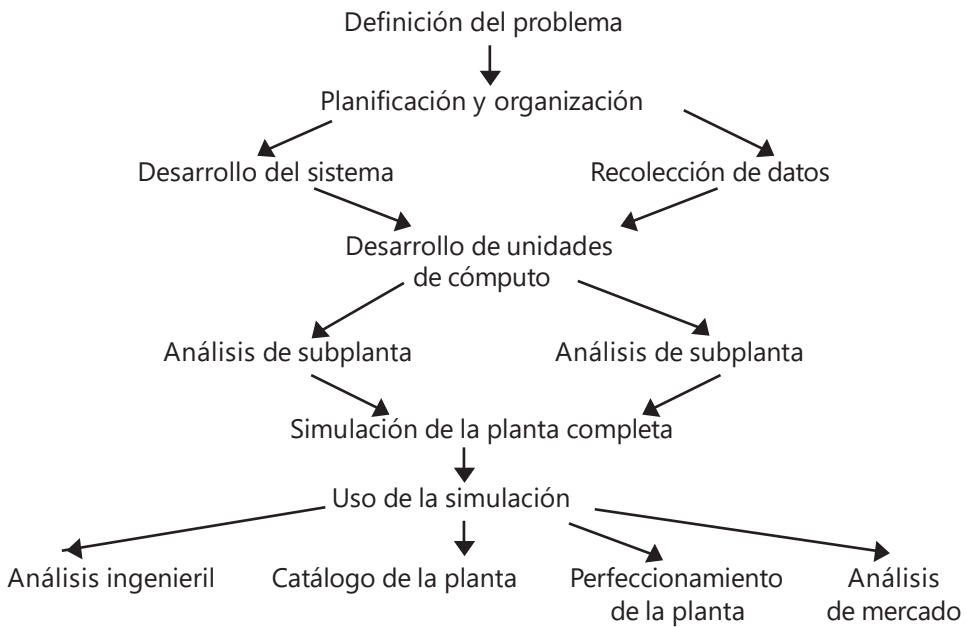


FIGURA 2.3. Estrategia total sugerida en la creación de una simulación.

La etapa de planeación incluye la organización de personal, adiestramiento en el uso del sistema ejecutivo elegido basado en la computadora, la concordancia sobre las líneas de comunicación, la forma de reporte, la nomenclatura, la responsabilidad en el trabajo, la construcción de un catálogo de ruta crítica y la recolección de la información adicional conocida; es decir, los datos termodinámicos, físicos y de transporte adecuados y los datos de plantas en operación si existen, usados para comprobar los modelos propuestos.

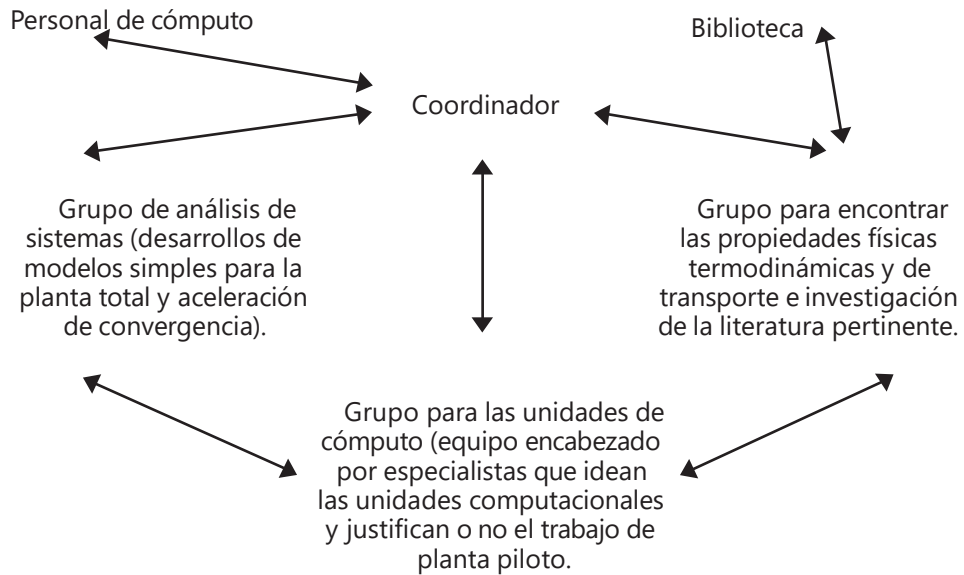


FIGURA 2.4. Organización de las principales líneas de comunicación.

Quizá la etapa de organización de personal, sea la más importante. La figura 2.4 ilustra la forma de organización; un grupo se encarga de mantener el enlace con el centro de cómputo escribiendo modelos simples para todas las unidades computacionales y simular la planta completa; de lo anterior, el grupo adquiere experiencia sobre cómo se comporta el sistema y en la importancia de sus interacciones y también sobre la sensibilidad del sistema con la exactitud de unidades de cómputo individuales.

Otro grupo puede dedicarse al manejo adecuado de propiedades físicas, termodinámicas y de transporte, incorporando los datos consistentes y adecuados. Los modelos deberán ser desarrollados y examinados sobre una variedad de condiciones. Todas estas actividades, deberán supervisarse por un coordinador de grupo.

Los modelos son combinados para simular porciones de la planta y finalmente para simular la planta completa. Esta actividad se acompaña con la corroboración o validación de los resultados calculados con los medidos, utilizando técnicas para reducir el tiempo total de cómputo, acelerando la convergencia de cálculos de recirculación o haciendo simplificaciones a las unidades de cómputo individuales.

Las técnicas de simulación digital

Como ya se ha hecho mención para la simulación de una planta existen tres requisitos: el primero, es un programa ejecutivo, el cual maneja y guarda la información numérica, transmite información entre las unidades de cómputo y determina la secuencia de los cálculos, si ésta no se especificó por el usuario; el segundo, es un conjunto de unidades de cómputo las cuales describen los tipos de equipos encontrados en la planta y, el tercero, es el conjunto de datos que describen las corrientes iniciales y los parámetros de los equipos que se usan en las unidades de cómputo. Se considera como factor común de los programas ejecutivos a la serie de programas que tienen las siguientes características:

1. *Modularidad* con la cual se permite hacer cambios sobre la conexión de las unidades, independientemente de la función que realicen, logrando que la información sea transmitida entre las unidades en un formato estándar.
2. *Habilidad* para determinar una *secuencia de cálculo* de las unidades de cómputo.
3. *Facilidad de cambio* de los parámetros entre las unidades de cómputo y de la conexión entre las mismas.
4. *Eficiencia en la solución* que proporciona una respuesta significativa para cualquier caso dado.
5. *Facilidad de la interpretación* de los resultados de la simulación.

Cada programa ejecutivo, deberá tener sus propias reglas sobre cómo son preparados y alimentados los datos, cómo son establecidas las conexiones entre las unidades y cómo deben ser descritas las unidades de cómputo pudiendo, si se requiere, encontrar la secuencia entre ellas automáticamente.

Diagramas de proceso

Cuando se requiere una simulación se deberá hacer uso de un programa ejecutivo, junto con las unidades de cómputo; sin embargo, existen diversos problemas comunes en una simulación que se deben principalmente a

la existencia de recirculaciones, al análisis de la información del flujo y encontrar el camino adecuado para realizar los cálculos.

La información requerida en una simulación es un conjunto de valores para las variables de un proceso, necesarias para describir totalmente el estado de las corrientes en cualquier punto del proceso; por ejemplo, la velocidad de flujo, temperatura y presión de un fluido. El estudio de la información de flujo en un proceso es necesario cuando existen reflujos. Cuando no existen reflujos, los cálculos en las unidades de cómputo se hacen consecutivamente, sin repetirlos; sin embargo, el reflujo es discutido antes de examinar la información de flujo.

El problema de reflujos en plantas petroquímicas

Muchos procesos químicos tienen reflujos de masa o energía. El reflujo significa que la corriente que sale de una unidad de proceso, afecta una corriente que entra a esa unidad, por ejemplo en la figura 2.5, la corriente de salida del mezclador afecta su corriente de entrada que proviene de la segunda torre porque hay una conexión entre varios equipos. Por lo tanto la salida de una unidad, se puede calcular *únicamente* si sus corrientes de entrada son conocidas. Sin embargo, para un proceso con reflujo, sus corrientes de entrada son conocidas una vez que sus corrientes de salida han sido calculadas. Para la solución de estos problemas, en ingeniería química, es común suponer valores de las corrientes necesarias para calcular las unidades y así obtener los valores de las variables de las corrientes; la solución se logrará cuando los valores calculados sean igual que los supuestos.

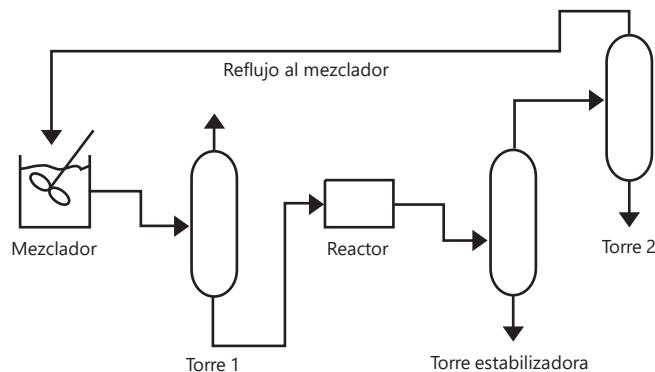


FIGURA 2.5. Diagrama de flujo de un proceso.

La unidad de cómputo

Las unidades de un proceso pueden ser simuladas por unidades de cómputo; por ejemplo, si se requiere modelar un mezclador de gasolina de una refinería con una unidad de cómputo escrita para este fin, entonces las corrientes de alimentación en el mezclador contienen información sobre el flujo y composición de cada una de ellas; el mezclador modifica esta información y la transmite en la corriente de salida como se observa en la figura 2.6, es importante señalar que si los flujos y composiciones de entrada son conocidos y si la proporción del flujo total de las corrientes de salida se especifican, entonces los flujos totales de salida son calculados por un simple balance de masa. De tal manera, que las corrientes pueden ser manejadas como transmisoras de información y un equipo; por ejemplo, un modificador de información.

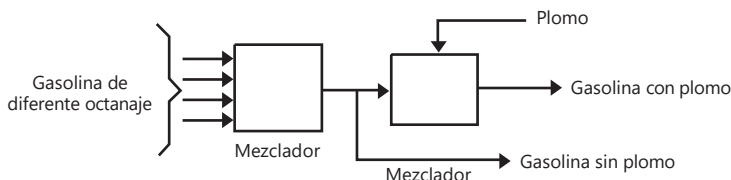


FIGURA 2.6. Mezclado de gasolina.

Existe asociado con cada equipo o unidad de cómputo un conjunto de parámetros de equipo; por ejemplo, en un mezclador será la proporción del flujo total en cada corriente de salida de éste; en los cambiadores de calor serán los coeficientes de transferencia de calor y en un reactor catalítico será la altura del lecho catalítico.

Una unidad de cómputo es, en general, cualquier conjunto de modelos matemáticos para calcular la información de salida a partir de la información de alimentación dada; es decir, una unidad de cómputo es un modificador de información que recibe información de las corrientes de entrada, las modifica y las transmite a las corrientes de salida. Para simplificar el manejo de unidades de proceso adaptamos diversos tipos de unidades de cómputo, como se muestra en la figura 2.7.

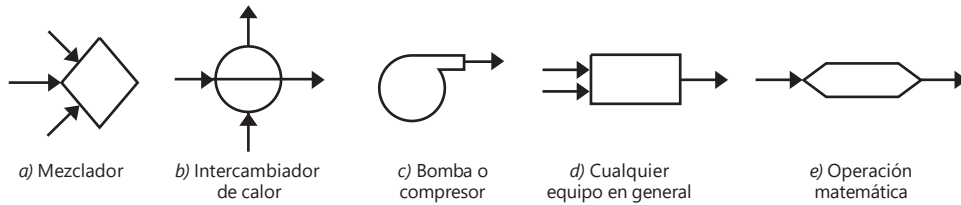


FIGURA 2.7. Tipos de unidades de cómputo y sus símbolos.

Diagramas de información de flujo a partir de información del proceso

Un diagrama de flujo de proceso describe el equipo y las conexiones que componen una planta. Sin la información de un diagrama de flujo no se podrá efectuar ninguna simulación, de tal forma que al hacer un buen diagrama de flujo se asegura la representación adecuada del proceso y la obtención de resultados confiables.

Las corrientes de un proceso son dibujados como flechas en los diagramas de flujo, las cuales apuntan en la dirección del flujo de masa. Una vez construido el diagrama de flujo éste puede ser codificado en forma numérica para usarse en la computadora, de tal manera que se requiere información del flujo la cual se obtiene del diagrama de flujo del proceso real para manejarla en forma numérica.

Algunas unidades de cómputo no existen en la planta pero son útiles en la simulación ya que garantizan un balance de masa total. En otros casos algunos equipos como los reactores con múltiples lechos catalíticos pueden componerse de diversas unidades de cómputo, una por cada lecho. Los equipos en donde no existe ningún cambio de estado pueden ser ignorados. La información del diagrama de flujo representa la información de flujo vía las corrientes entre las unidades de cómputo, la cual se construye como sigue:

1. Cada unidad de cómputo, se representa por un símbolo adecuado.
2. A cada símbolo se le da el nombre de una unidad de cómputo.
3. La información de flujo entre unidades se trazan como líneas directas (corrientes) entre símbolos, con flechas, indicando la dirección de la información del flujo.
4. Las corrientes y símbolos son numerados separadamente, usual-

mente en forma ascendente en la dirección del flujo; la numeración es arbitraria, pero no se le puede dar el mismo número a dos símbolos o a dos corrientes.

Por ejemplo el diagrama de información de flujo de la figura 2.5 se representa en la figura 2.8.

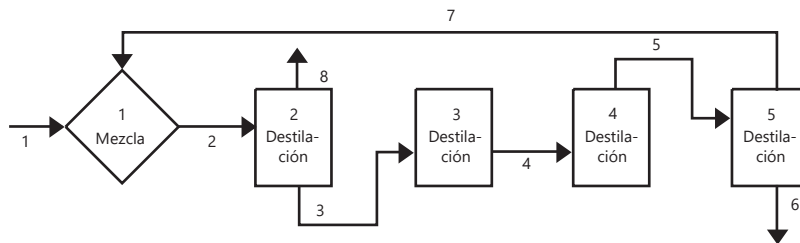


FIGURA 2.8. Diagrama de información de flujo.

Información numérica a partir de diagramas de información de flujo

Los diagramas de información de flujo son codificados normalmente en forma numérica, por facilidad de cálculo; en este caso, se trata únicamente de un método de codificación de información denominado *la matriz de proceso*, ya que ésta contiene toda la información del diagrama de información de flujo.

En el método de la matriz de proceso, a cada unidad del diagrama de información de flujo se le asigna una fila de la matriz; cada fila contendrá el número de la unidad particular, el nombre de la unidad de cómputo que representa a dicha unidad y los números de las corrientes de entrada (como números positivos), seguidos por los números de las corrientes de salida (como números negativos). Por ejemplo, la matriz de proceso para la figura 2.5, se muestra en el cuadro 2.2.

El orden de los números de las corrientes de entrada y salida en una fila de matriz de proceso es importante para la transferencia de información a través de las unidades de cómputo; así por ejemplo, en el cálculo de la columna de destilación de la figura 2.8, la primera salida es el domo y la segunda es el fondo, de tal manera que la matriz de proceso codifica la estructura entera del diagrama de información del flujo, de acuerdo con:

1. Cuales corrientes eslabonan cada unidad.
2. El nombre de las unidades de cómputo que representan a cada unidad.
3. El orden de las corrientes de entrada y salida de una unidad.

CUADRO 2.3. Matriz de proceso para la figura 2.5.

<i>Número de la unidad</i>	<i>Nombre de la unidad de cómputo</i>	<i>Números de las corrientes asociadas</i>		
1	Mezcla	1	7	2
2	Destilación	2	8	3
3	Reactor	3	4	
4	Destilación	4	5	9
5	Destilación	5	7	6

De hecho, dada únicamente la matriz de proceso, el diagrama de información de flujo, puede ser reestructurado completamente. Otra ventaja de la matriz de proceso es que el ingeniero pueda entenderla y leerla fácilmente. Aquí se supone que se conoce cual es la secuencia de los cálculos a seguir para hacer una simulación; sin embargo, la planeación de los cálculos a seguir, cuando existen recirculaciones, no es trivial y se tendrá que consultar literatura especializada o tomar un curso que trate sobre ese tema.

Base de datos

Las propiedades físicas, termodinámicas, cinéticas y de transporte, los parámetros de equipo (tales como, eficiencias, tamaños y configuraciones de equipo) y la información de costos son necesarios para todos los problemas de simulación. Si no se tienen datos precisos los resultados obtenidos serán erróneos, a pesar de tener el mejor programa de cómputo para realizar cualquier simulación.

Propiedades físicas

Las propiedades físicas, termodinámicas y de transporte de componentes puros o mezclas se pueden obtener a partir de mediciones en laboratorio,

se pueden encontrar en la literatura abierta; o bien, pueden estimarse partiendo de datos conocidos con algún método de predicción o correlación generalizada adecuado. El método elegido, dependerá del tiempo disponible y de la exactitud requerida en la respuesta final.

Lo primero que se hace es realizar una investigación bibliográfica para recopilar la información necesaria. Si no existe información publicada se recurre al método de predicción para estimar las propiedades requeridas por la simulación; sin embargo, si con los medios anteriores no se logra obtener información se deberá recurrir a la experimentación en laboratorio o en planta piloto. La capacidad para medir los datos, depende primordialmente del tipo de equipo disponible, de la disponibilidad de personal capacitado y de las peculiaridades del sistema con que se trabaja; por ejemplo, la acetona es un sustancia difícil de manejar. Los datos que se encuentran en la literatura no necesariamente son adecuados puesto que su exactitud e interpretación dependen generalmente del método experimental utilizado. Además, en muchas ocasiones junto con los datos no se reportan las condiciones de interés, por tal motivo, se deberá recurrir a alguna extrapolación, así como también es posible encontrar con frecuencia muchos errores tipográficos.

Todos los datos usados en cualquier simulación deberán ser consistentes termodinámicamente hablando. Si la consistencia no puede ser probada se recomienda que únicamente los datos de una sola fuente sean usados; por ejemplo, en una simulación de una columna de destilación por el método de etapa por etapa se usaron datos de equilibrio líquido-vapor de dos fuentes diferentes para poder cubrir el intervalo completo de composición. Al hacer la simulación se encontró un comportamiento coincidente en la región de composición en donde los datos de las dos fuentes diferentes se traslapan.

En algunas ocasiones, los datos que no pueden ser medidos o localizados en literatura pueden ser estimados. Para una mezcla es normal hacer la estimación en un proceso de dos pasos: primero, las propiedades de los compuestos puros son estimadas y posteriormente las propiedades de la mezcla se calculan con la ayuda de reglas empíricas (Reid, Prausnitz y Sherwood, 1977). Para incorporar fórmulas de estimación en un simulador, se deben elegir las que requieren un mínimo de almacenaje y tiempo de cómputo y, además, que tengan la aproximación deseada. Existen en general tres métodos para representar datos técnicos: gráficos, cuadros y ecuaciones. Hasta ahora, muchas computadoras digitales no aceptan infor-

mación en forma gráfica, así que éstas deberán ser transformadas en cuadros o en ecuaciones. Los cuadros no son muy adecuadas debido a que se requieren datos en una región en donde se necesitan interpolar valores discretos de las variables independientes. Por tal motivo, los datos deberán ser correlacionados con una ecuación, lo cual involucra la elección de la ecuación, la determinación de las constantes y la comprobación del ajuste.

Información sobre el equipo

Existen dos tipos de información sobre el equipo, éstas son: las características físicas mensurables y la información derivada. La única precaución es que los datos recopilados sean correctos.

Las características mensurables pueden incluir: tamaño de los tubos, espaciamiento de las mamparas y tipo de cambiadores de calor, tipo y altura de columnas empacadas, número de platos, potencia y revoluciones por minuto de motores, tipo y características del catalizador, configuración geométrica y altura de interfaces entre líquidos no miscibles. La información derivada del equipo incluye eficiencias, capacidad de las bombas, porosidad del empaque, factores de ensuciamiento, seguridad y confiabilidad.

Una cantidad limitada de información para el equipo, puede ser disponible de correlaciones; sin embargo, es necesario corroborar la información de los datos de operación cubiertos en la correlación.

Información sobre costos

Puesto que las simulaciones son a menudo utilizadas para sugerir alternativas que incrementen las utilidades se necesitan datos confiables sobre costos. Aunque muchos se obtienen de la misma compañía, algunos valores deberán ser obtenidos de referencias especializadas.

Estrategia en la simulación

La estrategia para resolver cualquier problema para mejorar una planta es similar a la usada para resolver cualquier tipo del problema de diseño.

Polya (1965) sugiere que los pasos usados para resolver cualquier problema sean:

1. Definir el problema
2. Proponer un plan para resolver el problema
3. Llevar a cabo el plan
4. Analizar la respuesta, sus implicaciones y su validez

El cuadro 2.4 resume los detalles de éstos cuatro pasos cuando se aplican para simular o mejorar una planta. Se entiende por mejoramiento a la operación de una planta como:

CUADRO 2.4. Estrategia para mejorar la operación de una planta.

<i>Estrategia</i>	<i>Detalles del plan de la estrategia de mejoramiento</i>
Definición del problema	<ol style="list-style-type: none"> 1. Identificar la necesidad 2. Especificar el criterio. 3. Identificar los parámetros del sistema. 4. Recolectar información para describir la condición presente de la planta: diagrama de flujo, masa, energía, temperaturas, presiones, concentraciones, describir la operación presente a través de análisis funcionales con modelos matemáticos para cada equipo. Obtener una descripción completa de la operación presente.
Plan para resolver el problema	<ol style="list-style-type: none"> 5. Tener la concepción de alternativas en condiciones de operación, causas de pérdidas, o acciones para mejorar operaciones.
Llevar a cabo el plan	<ol style="list-style-type: none"> 6. Desarrollar propuestas más atractivas.
Análisis de respuestas, sus implicaciones y validez	<ol style="list-style-type: none"> 7. Iterar: repetir la estrategia cuando el costo de la estructura cambie o el proceso cambie.

1. Dar a los ingenieros un mejor entendimiento de la operación de una planta y en particular de la interacción de los equipos; la

interacción afecta la factibilidad técnica, económica y la pureza del producto. Aunque las unidades individuales del proceso se pueden simular separadamente, una de las grandes ventajas de las técnicas de la simulación, es que se pueden estudiar las interacciones entre diferentes equipos.

2. Proporcionar a los operadores un criterio para la sensibilidad de las variables e indicar los potenciales de conflicto sobre un amplio intervalo de condiciones de operación, diferentes a las que se usan normalmente.
3. Mejorar el rendimiento y reducir los costos de operación para cualquier conjunto de condiciones económicas y ambientales.

La decisión de modelar

Una simulación de un proceso consiste de un conjunto de unidades de cómputo que representan un proceso. Las características (tal como exactitud, generalidad y capacidad para extrapolar), de la simulación del proceso completo se pueden distinguir de las características de las unidades de cómputo individuales que forman parte de la simulación. La decisión de modelar el proceso completo, puede diferir de las unidades de cómputo individuales; por ejemplo, se puede requerir la simulación exacta de un proceso para minimizar costos para lo cual se usa una unidad de cómputo individual inexacta que representa un equipo que no tiene efecto significativo en el costo total; es decir, la unidad tiene una contribución pequeña al costo directo y no causa grandes cambios en el costo de las otras unidades o corrientes a través de cambios en cualquiera de sus parámetros de equipo o variables de salida de las corrientes. De tal manera que cuando se discute sobre exactitud se deberá hacer una distinción entre la exactitud de la simulación total y la de una unidad de cómputo que representa a un equipo.

Las principales decisiones para definir criterios para la construcción de las unidades de cómputo, son:

1. La exactitud total de la simulación completa
2. La exactitud de las unidades de cómputo para cada equipo
3. La generalidad de las unidades de cómputo individuales
4. La capacidad para extrapolar las unidades de cómputo

Ejemplos

La simulación de una planta completa es un problema complejo en donde se requiere el diagrama de información de flujo. Sin embargo, se puede reducir a una serie de problemas de modelación de equipos individuales. Razón por la cual trataremos de manera general los principios básicos para modelar equipos individuales.

Para desarrollar una unidad de cómputo que simule un equipo de una planta, el programador deberá:

1. Decidir que tipo de modelos es requerido considerando el fenómeno que va a ser incluido en el modelo y seleccionar las suposiciones necesarias.
2. Formular las ecuaciones del modelo tomando en cuenta las suposiciones hechas, las ecuaciones deberán ser matemáticamente consistentes, de tal manera que el número de variables de salida sea igual al número de ecuaciones independientes.
3. Obtener los datos requeridos para resolver las ecuaciones, es decir; las propiedades físicas, termodinámicas y de transporte, las curvas de operación, datos cinéticos, datos de operación, costos, etcétera.
4. Elegir el método para resolver las ecuaciones, preparar el programa y tratar de minimizar el tiempo de cómputo. Se debe tener cuidado con las corrientes que entran y salen en el equipo ya que el orden en el cual se colocan en la matriz de proceso determina el orden en que el programa ejecutivo las usará; por supuesto, esto depende de cómo fue diseñado el programa ejecutivo. El programador deberá incluir todos los comentarios posibles en donde se especifique el significado de las variables y los pasos seguidos en el cálculo; por ejemplo, que el programa debe imprimir también comentarios de errores cuando las condiciones del proceso estén fuera del intervalo del modelo propuesto.
5. Determinar los valores de algunos parámetros desconocidos para adecuar el modelo a la planta y examinar la concordancia entre datos predichos y datos medidos de la planta. El programador deberá también comprobar los balances de masa en cada unidad de cómputo y cada unidad deberá proporcionar valores de salida razonables.

Desarrollo de un programa para modelar un mezclador de gases

Los fenómenos físicos y los cálculos considerados para el modelo de un mezclador de gases se muestran en el cuadro 2.5. En este modelo, además de efectuar un balance de masa, se requiere de un balance de calor y que las capacidades caloríficas de los gases estén en función de la temperatura. A continuación se muestran los cinco pasos para desarrollar el modelo de un mezclador de gases.

CUADRO 2.5. Características del modelo en estudio.

<i>Nombre del modelo</i>	<i>Fenómeno físico</i>	<i>Cálculo efectuado</i>
Mezclado	Mezcla corriente y/o separa una mezcla uniforme en diferentes corrientes, todas de la misma composición y temperatura. No controla el flujo total en ninguna línea, pero especifica la fracción separada. No calcula la energía requerida para el mezclado, el tiempo de residencia en cualquier recipiente, la caída de presión o los costos.	Flujos no conocidos, concentraciones y temperaturas en todas las corrientes; considerando la presión constante.

1. *Elección de las suposiciones y del modelo físico:* para desarrollar el modelo, se supone que:
 - a) El número total de corrientes de entrada y salida sea menor que seis; es decir, $N_{ENT} + N_{SAL} \leq 6$.
 - b) Se deberá saber el número exacto de los componentes que intervienen en este equipo.
 - c) La capacidad calorífica molar de la mezcla es la suma de la de los compuestos puros afectadas por sus fracciones mol. Esto implica que no se considera el calor de mezclado.
 - d) Existe mezclado completo.
 - e) No se requiere ni se produce trabajo en el equipo.
 - f) No hay pérdidas de calor.
 - g) No hay vaporización o condensación, es decir, los componentes permanecerán en estado gas.

2. *Formulación de ecuaciones:*

Mezclado: combinación de corrientes de entrada.

Flujo total molar:

$$TOT = \sum_{i=1}^{NENT} F_i \quad (2.1)$$

Flujo total por componente:

$$TOTAL_j = \sum_{i=1}^{NENT} F_{ij} \quad (2.2)$$

donde:

F_i = flujo molar del componente i en lb mol / hr

F_{ij} = flujo molar del componente j en cada corriente i

i = corriente de entrada

j = componentes en las corrientes de entrada

Las corrientes de salida se podrán calcular si se conocen los parámetros del equipo; como en éste caso que se conoce la fracción del flujo total en cada corriente de salida, las corrientes de salida son:

$$F_K = TOT \langle_K \quad (2.3)$$

$$F_{K,j} = TOTAL_j \langle_K \quad (2.4)$$

en donde:

\langle_K = fracción del flujo total en la corriente de salida K

K = corriente de salida

El balance de entalpía se establece en este caso para la temperatura de salida (T_2) como una función de las capacidades caloríficas promedio de los componentes gaseosos:

$$\begin{aligned}
 BAENT = \sum_{i=1}^{NENT} F_i C_{p_{prom_i}} (T_i - 298) &= TOT \cdot C_{p_{prom}} (T_2 - 298) \\
 \text{Entalpía que entra, relativa} & \quad \text{Entalpía que sale, relativa} \\
 \text{a } 298^\circ\text{K} & \quad \text{a } 298^\circ\text{K}
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

donde:

F_i = lb mol/hr de la corriente i de entrada

$C_{p_{prom_i}}$ = capacidad calorífica molar promedio de la corriente i de entrada relativa a 298°K .

T_i = temperatura de la corriente de entrada i , en $^\circ\text{K}$

Y_i = fracción mol de componente j

$C_{p_{prom}}$ = capacidad calorífica molar para una mezcla de gases relativa a 298°K .

$$\frac{\sum_{i=1}^{NENT} F_i \cdot C_{p_{prom_i}} (T_i - 298)}{TOT \cdot (T_2 - 298)} \tag{2.6}$$

3. *Obtención de los datos:* los datos necesarios son concentraciones, flujos, temperaturas de las corrientes de entradas y propiedades físicas y termodinámicas. Muchos datos se deben obtener de planta y puesto que se requiere que este modelo sea lo más exacto posible, las expresiones para calcular las propiedades caloríficas promedio, fueron calculadas como función de la temperatura y las fracciones separadas en las corrientes de salida se determinan estrictamente de datos de planta.
4. *Preparación del modelo:* el algoritmo de cálculo para desarrollar posteriormente la unidad de cómputo correspondiente, debe:
 - a) Calcular el flujo total y por componente a la entrada del mezclador con las ecuaciones (2.1) y (2.2).
 - b) Calcular y almacenar los flujos totales y por componente por las ecuaciones (2.3) y (2.4).
 - c) Calcular la entalpía total a la entrada usando las fracciones mol y las capacidades caloríficas promedio de las corrientes de entrada.
 - d) Calcular las fracciones mol de las corrientes de salida.

- e) Suponer una temperatura de salida y calcular las capacidades caloríficas promedio de la mezcla gaseosa.
- f) Calcular la temperatura de salida a partir de un balance de entalpía.
- g) Comparar la temperatura calculada con la supuesta; si son iguales o están dentro de una tolerancia, la solución se ha logrado; si no es así, repetir desde el inicio del inciso e.

5. *Comparación con el mezclador operando en la planta.*

ANÁLISIS MACROSCÓPICO DE LOS FENÓMENOS DE TRANSPORTE EN PROCESOS DE REFINACIÓN

Tradicionalmente se han estudiado en forma separada la mecánica de fluidos, la transferencia de calor o energía y la transferencia de masa. La descripción cualitativa y cuantitativa de estos tópicos es muy similar por lo que se ha llegado a una aproximación unificada denominada *procesos de transferencia*. Adicional al estudio de los tres tópicos en forma conjunta existe cada vez más el creciente interés por estudiar situaciones en donde se presentan los tres fenómenos simultáneamente en un proceso químico, razón por la cual incluimos una descripción fundamental y sistemática de los fenómenos encontrados en los procesos de transferencia o conocidos como *fenómenos de transporte*.

Transporte de momentum

La transferencia de *momentum* en un fluido involucra el estudio del movimiento de los fluidos y las fuerzas que producen. De la segunda ley de movimiento de Newton se conoce que la fuerza está directamente relacionada con la rapidez con la que cambia el *momentum* en un sistema con respecto al tiempo.

Excluyendo las fuerzas de tipo acción-distancia como la gravedad; las fuerzas que actúan sobre un fluido como las convectivas y las que resulta de la presión, a las fuerzas del esfuerzo de corte, pueden ser vistas como el resultado de una transferencia microscópica (molecular) de *momentum*. Así, lo que tradicional e históricamente se ha llamado mecánica de fluido puede verse como transporte o transferencia de *momentum*.

Al *fluido* se le define como la sustancia que se deforma continuamente cuando se somete a un esfuerzo de corte. Como consecuencia, cuando un fluido está en reposo no pueden existir esfuerzos de corte. Los gases y los líquidos son fluidos. La mayoría de los trabajos de ingeniería se relacionan

con la conducta macroscópica o de bulto en un fluido en lugar de la conducta microscópica o molecular. En la mayoría de los casos es conveniente pensar en un fluido como una distribución continua de materia o lo que se conoce como *continuum* cuyas propiedades macroscópicas varían en forma continua de un punto a otro en un fluido.

Algunos fluidos, particularmente líquidos, tienen densidades que permanecen constantes sobre intervalos amplios de presión y temperatura. Los fluidos que presentan esta calidad se denominan *incompresibles*. Sin embargo, los efectos de compresibilidad son más una propiedad de la situación de flujo que la del fluido.

Las fuerzas que actúan sobre un fluido se dividen en dos grupos generales: las *fuerzas de cuerpo* y las de superficie. Las de cuerpo o volumétricas son las que actúan sin tener contacto físico con el sistema; por ejemplo la fuerza de gravedad, las fuerzas electrostáticas, las fuerzas magnéticas, etc. Por otro lado la presión, las fuerzas de fricción o el esfuerzo de corte requieren de un contacto físico para lograr transmitirse; puesto que se requiere de una superficie de contacto para lograr la acción de la fuerza conocidas como *fuerzas de superficie*.

Fluidos en reposo

La aplicación de la segunda ley del movimiento de Newton a una masa fija de un fluido se reduce a la expresión que dice que la suma de fuerzas externas es igual al producto de la masa por su aceleración. Cuando se desprecie la aceleración absoluta del sistema de coordenadas se tendrá una posición fija con referencia al movimiento que se desprecie; cuando éste sea el de la Tierra se estará en una posición fija con respecto a la misma y entonces se dice que el sistema está con una *referencia inercial*.

Si por otro lado, cuando un fluido se encuentra estacionario con respecto a un sistema de coordenadas que tienen una aceleración absoluta apreciable, el sistema se dice que está en referencia *no-inercial*; por ejemplo, un tanque con un fluido y que esté siendo transportado en un carro de un ferrocarril.

En el caso de la referencia inercial se tendrá la relación:

$$F = 0$$

mientras que el caso más general de:

$$F = ma$$

deberá de utilizarse para el caso no-inercial.

Las únicas fuerzas que actúan sobre el fluido en reposo son las debidas a la gravedad y a la presión; así, al aplicar la segunda Ley de Newton a este caso se encontrará que:

$$\rho \mathbf{g} = -\frac{\partial P}{\partial x} \mathbf{e}_x - \frac{\partial P}{\partial y} \mathbf{e}_y - \frac{\partial P}{\partial z} \mathbf{e}_z \quad (3.1)$$

la cual por la definición del gradiente se puede simplificar como:

$$\rho \mathbf{g} = -\nabla P \quad (3.2)$$

La ecuación (3.2), es la ecuación básica del fluido en reposo y establece que la máxima rapidez de cambio de presión ocurre en la dirección del vector gravitacional.

Fluidos en movimiento

Son tres las leyes físicas fundamentales las que se aplican a todos los fluidos independientemente de su naturaleza. Estas leyes son mostradas en el cuadro 3.1 junto con la ecuación que la representa.

CUADRO 3.1. Leyes de conservación de masa, *momentum* y energía y sus ecuaciones.

<i>Ley</i>	<i>Ecuación</i>
1. Conservación de la masa.	Continuidad.
2. Segunda ley de Newton del movimiento.	Teorema del <i>momentum</i> .
3. Primera ley de la termodinámica.	De la energía.

Hasta ahora se han tratado la ley de conservación de masa y la primera ley de la termodinámica por lo que sólo resta describir la segunda ley de las presentadas en el cuadro 3.1. Un concepto útil para la descripción del flujo de un fluido es el de la línea de corriente. Una *línea de corriente* se define como la línea que se traza tangente al vector velocidad en cada punto del campo del flujo. En flujo estable; es decir, que no varía con el tiempo, el camino que sigue una partícula del fluido es el de una línea de corriente y en este caso la línea de corriente es la trayectoria que sigue un elemento del fluido al moverse. En un flujo inestable los patrones o formas de las líneas de corriente cambian con el tiempo y por lo tanto la trayectoria que sigue un elemento del fluido será diferente del de una línea de corriente a cualquier tiempo. La línea de corriente es útil porque relaciona los componentes de la velocidad del fluido a la geometría del campo en donde se lleva a cabo el flujo.

Segunda ley de Newton del movimiento

La segunda ley de Newton del movimiento, puede establecerse en la forma siguiente: *la rapidez con que cambia el momentum de un sistema es igual a la fuerza neta que actúa sobre el sistema y esa rapidez se lleva a cabo en la dirección de la fuerza neta*. Escribiendo la segunda ley de Newton para ésta situación tenemos:

$$F + \frac{d(mJ)}{dt} = \frac{dM_o}{dt} \quad (3.3)$$

donde:

M_o representa el momento lineal del sistema.

El significado físico de cada uno de los términos de la ecuación (3.3), se puede interpretar si la ecuación es aplicada a un volumen de control (VC) y así se puede escribir:

$$\begin{array}{ccccccc}
 \text{Suma de fuerzas} & & \text{Rapidez con la que} & & \text{Rapidez con la que} & & \text{Rapidez con la que se} \\
 \text{actuando sobre} & + & \text{entra } \textit{momentum} & & \text{sale } \textit{momentum} & = & \text{acumula } \textit{momentum} \\
 \text{el VC} & & \text{al VC} & & \text{al VC} & & \text{dentro de vc} \\
 & & \underbrace{\hspace{10em}} & & & & \\
 & & \square & & & & \\
 & & \text{Rapidez con la que sale } \textit{momentum de VC} & & & &
 \end{array} \tag{3.4}$$

Las fuerzas que están actuando sobre el volumen de control consisten en fuerzas de superficie debidas a la interacción entre el fluido que se manejan en el volumen de control y sus alrededores a través de un contacto directo y las fuerzas de cuerpo que son el resultado de situar al volumen de control en un campo de fuerzas (comúnmente el campo gravitacional y la fuerza que resulta de éste). Recordando del balance de materia del primer tema en donde se observó que la rapidez con la que sale masa de un volumen de control a través de una superficie diferencial es:

$$\int J \cdot dA \cos \theta$$

la rapidez neta con la que sale *momentum* del VC será:

$$\int (J \cdot n) dA \tag{3.5}$$

en donde \square es el vector normal a la superficie dA y el punto representa el producto punto.

Integrando la ecuación (3.5) sobre toda la superficie de control (SC) se tendrá:

$$\begin{array}{ccccccc}
 \text{Rapidez neta con que} & & \text{Rapidez con que} & & \text{Rapidez con que} & & \\
 \text{sale } \textit{momentum} & = & \text{sale } \textit{momentum} & & \text{entra } \textit{momentum} & = & \iint_A J \cdot (J \cdot n) dA \\
 \text{de VC} & & \text{de VC} & & \text{al VC} & &
 \end{array} \tag{3.6}$$

La rapidez con que se acumula el *momentum* lineal dentro del VC puede expresarse como integral de volumen como sigue:

$$-\frac{d}{dt} \iiint_V J \cdot dV \tag{3.7}$$

Así el balance total de *momentum* lineal sobre el VC será:

$$F = \iint_{SC} \rho \mathbf{J} \cdot (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) dA + \frac{d}{dt} \iiint_{VC} \rho \mathbf{J} dV \quad (3.8)$$

Esta ecuación es conocida en mecánica de fluidos como el *teorema del momentum*. Se puede observar una gran similitud dicha ecuación y la de continuidad del balance de materia; sin embargo, la ecuación (3.8) es una expresión vectorial en contraste con la ecuación de continuidad que es una expresión escalar. En coordenadas rectangulares la ecuación (3.8) puede ser escrita para cada coordenada como:

$$\begin{aligned} F_x &= \iint_{SC} \rho J_x \cdot (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) dA + \frac{d}{dt} \iiint_{VC} \rho J_x dV \\ F_y &= \iint_{SC} \rho J_y \cdot (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) dA + \frac{d}{dt} \iiint_{VC} \rho J_y dV \\ F_z &= \iint_{SC} \rho J_z \cdot (\mathbf{J} \cdot \mathbf{n}) dA + \frac{d}{dt} \iiint_{VC} \rho J_z dV \end{aligned} \quad (3.9)$$

Cuando se apliquen cualesquiera de las ecuaciones (3.9) se deberá tomar en cuenta que el término de la superficie de control posee signo pues tanto los componentes x o y o z y el producto escalar $(\mathbf{J} \cdot \mathbf{n})$ tiene signos.

La ecuación de Bernoulli

Con ciertas condiciones de flujo la expresión de la primera ley de la termodinámica aplicada a un volumen de control se reduce a una relación muy útil para un ingeniero de proceso y que se conoce como la *ecuación de Bernoulli* la cual puede también obtenerse a partir de la ecuación de Euler que a su vez es un caso particular de las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido con viscosidad constante y despreciable. La ecuación de Euler se integra tomando el flujo a lo largo de una línea de corriente. Las ecuaciones de Navier-Stokes son la forma diferencial de la segunda ley de Newton del movimiento (Welty, *et al.*, 1969). A partir del balance de energía aplicada a un volumen de control con un flujo estable de un fluido incomprensible y

con energía interna constante se encuentra la ecuación de Bernoulli la cual se expresa de la manera siguiente:

$$Y_1 + \frac{J_1^2}{2g} + \frac{p_1}{\rho g} = Y_2 + \frac{J_2^2}{2g} + \frac{p_2}{\rho g} \quad (3.10)$$

Cada término tiene unidades de longitud o:

$$\frac{J^2}{2g} + \frac{p}{\rho g} = \text{constante} \quad (3.11)$$

Cada una de éstas cantidades en ocasiones son designadas como *heads* debido a que son partes finales de una elevación, una velocidad y una presión, respectivamente. Estos términos, en forma individual y en conjunto, indican las cantidades que podrían ser convertidas directamente para producir energía mecánica.

Flujo en conductos cerrados

En esta parte se aplicarán algunos de los conceptos hasta ahora tratados en una situación de considerable importancia en la ingeniería de proceso: el flujo de fluidos en régimen laminar o viscoso o en régimen turbulento en conductos cerrados. En esta parte se encuentran conceptos como el grupo adimensional *número de Reynolds (Re)* y el factor de fricción de *fanning (f)*. El número adimensional *Re* aparece al manejar las ecuaciones de continuidad y de movimiento en forma diferencial, las cuales se obtienen más adelante con variables adimensionales tal y como lo sugiere Bird (*et al.*, 1960):

$$Re = \frac{Dv}{\nu} \quad (3.12)$$

Flujo laminar (Welty, et al., 1969):

$$f = 16 \frac{\nu}{Dv} = \frac{16}{Re} \quad (3.13)$$

El factor de fricción no es una función de la rugosidad, o de la tubería para valores de $Re < 2300$, pero éste varía sólo con el número de Reynolds.

Flujo turbulento (Welty, et al., 1969):

Para flujo turbulento en tubería no rugosas la relación funcional entre f y Re es:

$$\frac{1}{\sqrt{f_f}} = 4.06 \log \{ Re \sqrt{f_f} \} - 0.60 \quad (3.14)$$

El desarrollo anterior fue realizado por primera vez por von Karman, Nikuradse, quien a partir de datos experimentales obtuvo la ecuación:

$$\frac{1}{\sqrt{f_f}} = 4.0 \log \{ Re \sqrt{f_f} \} - 0.40 \quad (3.15)$$

Para tubos rugosos la ecuación obtenida de la teoría toma la forma:

$$\frac{1}{\sqrt{f_r}} = 4.06 \log \left\{ \frac{D}{e} + 2.16 \right\} \quad (3.16)$$

y la experimental:

$$\frac{1}{\sqrt{f_r}} = 4.0 \log \left\{ \frac{D}{e} + 2.28 \right\} \quad (3.17)$$

La región en donde varía con el Re y el $\frac{e}{D}$ es llamada la región de transición; para ésta región se ha propuesto la ecuación siguiente:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -4.28 + 4 \log \left[4.67 \frac{D}{e} \frac{1}{\sqrt{f}} + 1 \right] + \frac{1}{Re \sqrt{f}} \quad (3.18)$$

(3.18)

Lo cual permite conocer las pérdidas por fricción (PPF) que se tienen por el transporte de momentum del fluido en una tubería de longitud L y que tiene en diámetro D_e con:

$$PPF = 2 f_f \frac{L}{D} J^2 \quad (3.19)$$

Las pérdidas por fricción que se tienen en las tuberías por conexiones (PPF_c), pueden ser evaluadas a través de dos conceptos: el coeficiente de fricción k y la longitud equivalente Le .

$$PPF_c = \frac{\otimes P}{\rangle} = K \frac{J^2}{2g_c} \quad \text{o} \quad PPF_c = 2 f_f \frac{Le}{D} \frac{J^2}{g} \quad (3.20)$$

Las ecuaciones anteriores se basan en que es un flujo a través de un conducto circular y en que pueden seguir funcionando para el flujo a través de conductos no circulares si se hace uso del concepto de diámetro equivalente:

$$Deq = 4 \frac{\text{Sección transversal del área de flujo}}{\text{Perímetro mojado}} = 4 R_H \quad (3.21)$$

en donde: R_H es el radio hidráulico.

Transporte de calor

El resultado que se obtiene del análisis de un sistema con la primera ley de la termodinámica es sólo una parte de la información que se requiere para una evaluación completa de un proceso o una situación en donde se lleva a efecto una transferencia de energía.

La pregunta por resolver es ¿a qué velocidad se lleva a efecto esa transferencia de energía? Para un ingeniero de proceso es importante conocer el tamaño del equipo de transferencia de energía, los materiales de que está o va a ser construido el equipo y el equipo auxiliar que se requiere

para su uso; todo debe ser acompañado de un análisis económico y de un estudio de uso eficiente de la energía disponible.

El objetivo que se persigue en esta parte es examinar los mecanismos fundamentales de la transferencia de energía y encontrar las ecuaciones fundamentales para evaluar la rapidez con que se transfiere la energía.

Conducción de energía

La transferencia de energía por conducción se lleva a cabo en dos formas. El primer mecanismo es el de la interacción molecular en el cual el mayor movimiento de una molécula a un nivel superior de energía (temperatura) transfiere energía a las moléculas adyacentes de menores niveles energéticos. Este tipo de transferencia está presente, hasta cierto punto, en todos los sistemas en los que existe un gradiente de temperatura y en los cuales están las moléculas sólidas, líquidas y gaseosas.

El segundo mecanismo de transferencia de calor por conducción se realiza vía electrones libres el que es de importancia fundamental en sólidos puros metálicos; la concentración de electrones libres varía considerablemente en aleaciones y llega a ser muy baja para sólidos no-metálicos. La habilidad de los sólidos para conducir el calor varía directamente con la concentración de electrones libres; los metales puros son los mejores conductores del calor.

Puesto que la conducción de calor es un fenómeno molecular se debe esperar que la ecuación que describa este proceso sea similar a la expresión utilizada en la transferencia molecular de *momentum* que es la de la ley de la viscosidad de Newton.

$$\tau_{xz} = \mu \frac{dv_z}{dx} \quad (3.22)$$

donde:

μ es la viscosidad
 τ_{xz} es el esfuerzo de corte

Para calor, la ecuación de Fourier es la ecuación básica:

$$\frac{q_x}{A} = k \frac{dT}{dx} \quad (3.23)$$

en donde

q_x es la rapidez con que transfiere el calor en la dirección x , en BTU/hr
 A es el área normal a la dirección del flujo de calor, en ft^2

$\frac{dT}{dx}$ es el gradiente de temperatura en la dirección x , en $^{\circ}F/ft$

k es la conductividad térmica, en $BTU/(hr^{\circ}F ft)$

La relación q_x/A es conocida como el *flux* de calor en la dirección x . Una expresión general para el *flux* de calor en las direcciones x , y y z que se muestran en la figura 3.1 es:

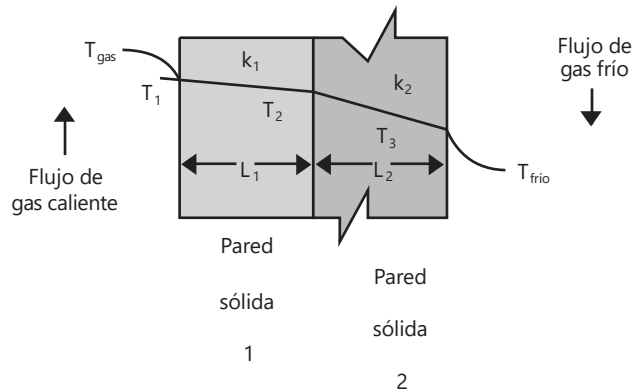


Figura 3.1. Transferencia de calor en estado estacionario a través de una pared compuesta

$$\frac{q}{A} = k T \quad (3.24)$$

la cual expresa que el *flux* de calor es proporcional al gradiente de temperatura. Esta última ecuación es conocida como la *primera ley Fourier* de la conducción de calor.

Convección de energía

La transferencia de calor debido a convección involucra el intercambio de

energía entre una superficie y un fluido adyacente. Se distinguen dos tipos

de convección: la convección forzada en donde se hace pasar un fluido a través de una superficie sólida por un agente externo tal como una bomba o un ventilador y la convección libre o natural en donde el fluido más caliente (o más frío), que está cerca de la frontera sólida, circula debido a la diferencia de densidad que resulta de la variación de temperatura que se tiene en una región del fluido, además, a la transición entre ellas se conoce como convección mezclada.

La ecuación que describe la velocidad o rapidez con que se transfiere energía por convección fue obtenida por primera vez por Newton en 1701 y se conoce como la *ley de Newton del enfriamiento* y es:

$$q/A = h \otimes T \quad (3.25)$$

donde:

q es la velocidad de transferencia de calor, en BTU/hr

A es el área normal a la dirección del flujo de calor, en ft^2

$\otimes T$ es la diferencia de temperatura entre la superficie y el fluido, en $^{\circ}\text{F}$

h es el coeficiente convectivo para la transferencia de calor, en $\text{BTU}/(\text{hr ft}^2 \text{ } ^{\circ}\text{F})$.

La ecuación (3.25), no es propiamente una ley sino la definición del coeficiente h ; este coeficiente, en general, es una función de la geometría del sistema, las propiedades del flujo y del fluido y la magnitud de DT .

Aun cuando el fluido que está fluyendo en régimen turbulento, existe una capa o película en ocasiones extremadamente delgada, cercana a la superficie en donde el flujo es laminar; también se sabe por experiencia, que las partículas de fluido que se encuentran pegadas a la superficie sólida se encuentran en reposo. Así, el mecanismo real de transferencia de calor entre una superficie sólida y un fluido incluye a la conducción a través de las capas de fluido que se encuentran cercanas a la pared y por otro lado la película de fluido en ocasiones presenta la resistencia que controla la transferencia de calor por convección y el coeficiente h es en esas ocasiones llamado el coeficiente de película. Existen dos tipos de transferencia de calor que difieren algo de lo que se ha descrito como convección libre y forzada pero que se tratan cuantitativamente por la ecuación (3.25) que son los fenómenos de ebullición y condensación; los coeficientes de película asociados a estos dos tipos de transferencia son muy altos; por ejemplo, para

el agua en ebullición de 500 a 5 000 BTU/(hr ft² °F) y para la condensación de vapor de agua de 1 000 a 20 000 BTU/(hr ft² °F).

Un punto importante que debemos resaltar es la distinción que se debe hacer entre el coeficiente local y el coeficiente global de transferencia de calor. El local es aquel que se aplica a un sólo punto de la superficie y el total o promedio el cual es válido para toda la superficie. El coeficiente local se define como:

$$dq = h_x \otimes T dA \quad (3.26)$$

y el global o promedio como:

$$q = \int_A h_x \otimes T dA = h A \otimes T \quad (3.27)$$

Radiación de energía

La transferencia de calor por radiación se distingue de la conducción y la convección en que ésta no requiere de un fluido o de un medio para su propagación; la experiencia indica que la transferencia de calor por radiación se hace máxima cuando entre las dos superficies que están intercambiando calor existe un vacío perfecto. El mecanismo exacto de la transferencia de calor por radiación no está completamente entendido; sin embargo, un hecho completamente sobresaliente es el de que un proceso tan complejo como la radiación puede ser descrito por una expresión analítica relativamente simple. La rapidez con la que se emite energía de un irradiador perfecto (llamado cuerpo negro), es dada por la expresión:

$$\frac{q}{A} = \int T^4 \quad (3.28)$$

en donde:

q es la rapidez de emisión de energía radiante en BTU/hr

A es el área de la superficie que está emitiendo la energía, en ft²

T^4 es la temperatura absoluta en °R

σ es la constante de Stefan Boltzmann, la cual es igual a $0.1714 \cdot 10^{-8}$ BTU/(hr ft² °R⁴).

Esta ecuación es más conocida como la *ley de Stefan-Boltzmann de la radiación térmica*.

Mecanismos combinados de transferencia de energía

En situaciones reales es raro el caso en el que se observe un solo mecanismo en la transferencia de energía. Por ejemplo, para el caso ilustrado en la figura 3.1 se tendrá que al aplicar tanto la ecuación (3.23), como la ecuación (3.25) se obtendrá que el flujo de calor en dirección x viene dado por la ecuación (3.29):

$$q_x = h_{cal} A (T_{cal} - T_1) = \frac{k_1 A}{L} (T_1 - T_2) = \frac{\sigma}{\epsilon} (T_2^4 - T_3^4) = \dots$$

$$T_{cal} - T_{frío} = q_x \left[\frac{1}{h_{cal} A} + \frac{L_1}{k_1 A} + \frac{L_2}{k_2 A} + \frac{1}{h_{frío} A} \right]$$

Al expresar cada diferencia de temperatura en función de q_x y sumando todas las ecuaciones resultantes se obtiene:

$$q_x = \frac{T_{cal} - T_{frío}}{\frac{1}{h_{cal} A} + \frac{L_1}{k_1 A} + \frac{L_2}{k_2 A} + \frac{1}{h_{frío} A}}$$

la cual toma la forma de la ecuación (3.30).

$$\frac{T_{cal} - T_{frío}}{\frac{1}{h_{cal} A} + \frac{L_1}{k_1 A} + \frac{L_2}{k_2 A} + \frac{1}{h_{frío} A}} = \Delta T \otimes R_{t\u00e9rmicas} \quad (3.30)$$

Las resistencias térmicas ($R_{\text{térmicas}}$), cambian de forma de acuerdo con la geometría del sistema; por ejemplo, la resistencia para un conductor de calor de forma cilíndrica es:

$$\frac{\ln(r_e/r_i)}{2 \leq KL}$$

Otra forma común de expresar la transferencia de calor para una situación de mecanismos combinados es con el coeficiente total de transferencia de calor U definido como:

$$U = \frac{q_k}{A \otimes T} = \frac{\otimes T / \odot R_t}{A \otimes T A \odot R_t} \quad (3.31)$$

en donde:

U tiene las mismas unidades de h , BTU/(hr ft² °F)

El coeficiente U puede tener diferentes valores numéricos dependiendo en el valor del área en que se base su cálculo. Si se trata de la transferencia de calor en un tubo el área puede ser la exterior o la interior.

Equipo industrial de transferencia de energía

Un dispositivo cuyo objetivo primordial es la transferencia de energía entre dos fluidos es conocido como un intercambiador de calor. Los intercambiadores de calor son clasificados en tres categorías:

1. Regeneradores
2. Intercambiadores de tipo abierto
3. Intercambiadores de tipo cerrado o recuperadores

Estos últimos son los que presentan un mayor interés para una refinería de petróleo. Un recuperador se clasifica de acuerdo con su configuración y al número de pasos que realiza cada corriente de fluido conforme atraviesa el intercambiador de calor. Paso sencillo, flujo paralelo o flujo concurrente, flujo a contracorriente, flujo cruzado.

Análisis de intercambiadores de paso sencillo

Cuando se analiza un intercambiador de calor de paso sencillo en paralelo o a contracorriente es útil graficar la variación de temperatura experimentada por cada corriente de fluido. Los perfiles de temperatura se pueden observar en las figuras 3.2a a la d, cada uno de ellos se pueden encontrar en un arreglo de doble tubería.

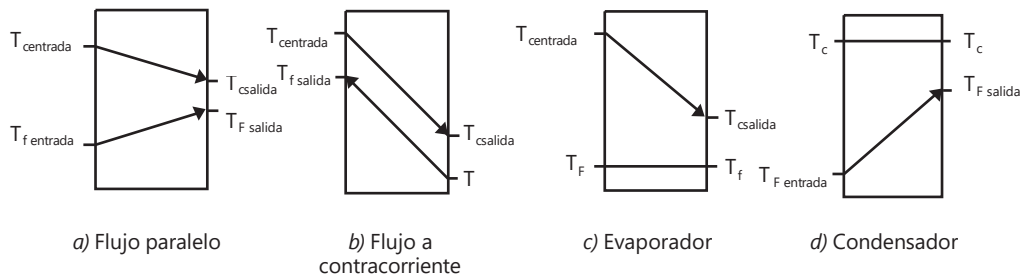


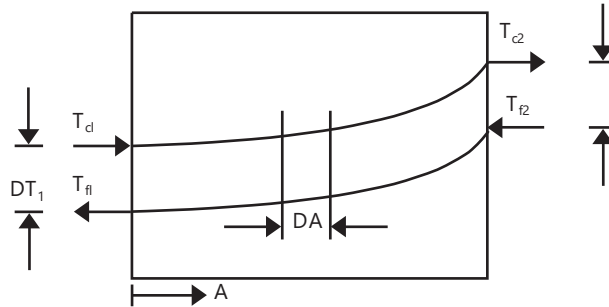
FIGURA 3.2. Perfiles de temperatura para un intercambiador de calor de paso sencillo y doble tubería.

En el arreglo a contracorriente es posible que el fluido caliente salga del intercambiador a una temperatura menor de la temperatura a la que sale el fluido frío. Esta situación obviamente corresponde a un caso de una mayor cantidad de energía total transferida por unidad de área de superficie del intercambiador que la que sería obtenida si los mismos fluidos se manejaran en una configuración en flujo paralelo. Así, la configuración a contracorriente es el arreglo más favorable y deseable en intercambiadores de un solo paso.

Una ecuación que es válida para todos los casos expuestos en la figura 3.2, es la que define la diferencia de temperatura media logarítmica:

$$q = U_A \frac{\otimes T_2 - \square \otimes T_1}{1n \frac{\otimes T_2}{\otimes T_1}} \quad (3.32)$$

donde:



La ecuación (3.32) esta basada en la consideración de un valor constante de U . Sin embargo, este coeficiente no se mantiene en general constante; más los valores de U calculados a la mitad del intercambiador son lo

CUADRO 3.2. Valores aproximados para el coeficiente global de transferencia de calor U .

Combinación de fluidos	U , BTU/(hr ft ² °F)	
Agua-aire comprimido	10	30
Agua-agua (enfriadores de chaqueta)	150	275
Agua-salmuera	100	200
Agua-gasolina	60	90
Agua-gasóleo o destilado	35	60
Agua-solventes orgánicos (alcohol)	50	150
Agua-alcohol condensado	45	120
Agua-aceite lubricante	20	60
Agua-vapores de aceite condensado	40	100
Agua-freón 12-vaporizando o condensando	50	150
Agua-amoniaco condensado	150	250
Vapor de agua-agua (calentador instantáneo)	400	600
Vapor de agua-agua (calentador de tanque)	175	300
Vapor de agua-combustóleo pesado	10	30
Vapor de agua-combustóleo ligero	30	60
Vapor de agua-destilado ligero de petróleo	50	200
Vapor de agua-soluciones acuosas	100	600
Vapor de agua-gases	5	50
Orgánicos ligeros-orgánicos ligeros	40	75
Orgánicos medios-orgánicos medios	20	60
Orgánicos pesados-orgánicos pesados	10	40
Orgánicos pesados-orgánicos ligeros	10	60
Crudo-gasóleo	30	55

suficientemente exactos como para confiar en su uso como una constante. Si existiese una variación muy pronunciada entre los valores de U , en los extremos, se hace necesario realizar una integración numérica.

La cantidad más difícil de estimar en un intercambiador de calor es el coeficiente global U . En el cuadro 3.2 indica valores aproximados para U con diferentes combinaciones.

Transporte de masa

Cuando un sistema contiene dos o más componentes, cuyas concentraciones varían de punto a punto, existe una tendencia natural de la materia a ser transferida o transportada llevando un mínimo las diferencias de concentración dentro del sistema. Al transporte de un componente de una región de alta concentración a una de baja concentración se le llama *transferencia de masa*. Como ya se ha observado en la transferencia de calor, los mecanismos con que se realiza la transferencia de masa dependen de la dinámica del sistema en el cual ocurren.

La masa se puede transferir por movimiento molecular al azar en fluidos en reposo o puede transferirse de una superficie a un fluido en movimiento ayudado por las características dinámicas del flujo.

Estos dos modos distintos de transporte de masa son conocidos como el transporte de masa molecular y el transporte de masa convectivo, respectivamente y son análogos a los mismos casos en transferencia de energía y *momentum*.

El transporte de masa molecular en ocasiones es llamado o definido como difusión molecular o simplemente difusión. El transporte de masa por convección es una transferencia entre un fluido en movimiento y una superficie o entre dos fluidos en movimiento que son inmiscibles parcialmente; esta forma de transferencia de masa depende de las propiedades de transporte y de las características del flujo de los fluidos.

La difusión en casos reales involucra mezclas multicomponentes; sin embargo, por simplicidad se presentarán las ecuaciones que representan la difusión molecular en una mezcla binaria compuesta por las moléculas A y las moléculas B ; este fenómeno fue estudiado por Fick, quien postula que en un sistema con diferentes concentraciones, siempre la transferencia de masa se efectuará de un punto de mayor concentración a uno de menor concentración, siendo proporcional a su difusividad. La ecuación de velo-

idad de transferencia molecular de masa para A en la mezcla binaria expresada con el *flux* másico o *flux* de masa relativo a la velocidad de flujo másico promedio es la ecuación (3.33a):

$$j_A = \rho D_{AB} w_A \quad (3.33a)$$

Mientras que el *flux* molar de A, relativo a la velocidad de flujo molar promedio, viene expresado por la ecuación (3.33b):

$$J_A^* = c D_{AB} X_A \quad (3.33b)$$

El *flux* de masa relativo a la velocidad de flujo de masa promedio en coordenadas fijas es expresado por la ecuación (3.33c):

$$n_A = \rho D_{AB} w_A + w_A (n_A + n_B) \quad (3.33c)$$

El *flux* molar relativo a la velocidad de flujo molar promedio en coordenadas fijas es expresado por la ecuación (3.33d):

$$N_A = c D_{AB} X_A + X_A (N_A + N_B) \quad (3.33d)$$

Las ecuaciones anteriores son diferentes expresiones de la primera ley de Fick.

En donde:

- c es la concentración molar total.
- D_{AB} es la difusividad o coeficiente de difusión del componente A difundiendo a través del componente B.
- X_A es la fracción mol de A en la mezcla
- w_A es la fracción masa de A en la mezcla
- ρ es la densidad total de la mezcla

La ecuación de rapidez de transferencia de masa por convección ha sido generalizada de una manera análoga a la ley de Newton del enfriamiento. Esta rapidez se expresa en la ecuación (3.34).

$$N_A = k_c \otimes C_A \quad (3.34)$$

donde:

N_A es la transferencia molar de A relativa a coordenadas fijas (*mol de A / (hr ft²)*)

$\otimes C_A$ es la diferencia de concentración molar entre la concentración en la superficie de la frontera y la concentración promedio de la corriente del fluido de la especie A que se está transfiriendo (en *mol de A / ft³*)

k_c es el coeficiente convectivo de transferencia de masa (*mol de A / (hr ft² moles de A / ft³)*)

Como en el caso de transporte de masa molecular, la transferencia de masa convectiva se lleva a cabo en la dirección de disminución de concentración; el coeficiente está definido en forma tal que incluye las características de las regiones de los flujos laminar y turbulento del fluido. Como en el caso de la transferencia de energía se tienen moléculas que están cercanas a la superficie de la pared y en reposo; también se tiene una pequeña película de fluido cercano a la superficie en donde el flujo es laminar.

La resistencia que controla la transferencia de masa convectiva es, en la mayoría de las ocasiones debida a esta película de fluido y así, k_c es referido como un coeficiente de película. Las semejanzas existentes entre las transferencias convectivas de calor y de masa han llevado a que las correlaciones y términos que se han desarrollado para estimar el coeficiente convectivo de calor h se hayan adaptado para estimar k_c .

Transferencia de masa de interfaz

Muchos problemas prácticos importantes tienen que ver con la transferencia de masa entre dos fases que se ponen en contacto. Estas fases pueden ser dos líquidos inmiscibles, una corriente gaseosa en contacto con un líquido o un fluido pasando a través de un sólido.

La transferencia de masa en estas condiciones se lleva a cabo hasta una condición terminal, la cual es denominada de equilibrio termodinámico entre fases. Una discusión del equilibrio entre fases y las relaciones que lo describen no pueden cubrirse en un libro como este y se deja para que sea revisado en forma autodidáctica revisando textos especializados en la materia. A pesar de lo anterior se pueden describir tres conceptos básicos co-

munen a todos los sistemas en donde se lleva a cabo la distribución de uno o varios componentes entre dos fases:

1. A ciertas condiciones de temperatura y presión, la regla de las fases de Gibbs indica que existe un juego de relaciones de equilibrio que señalan la distribución que se tiene de los componentes en las fases.
2. Cuando un sistema está en equilibrio no hay transferencia *net*a de masa entre las fases.
3. Cuando un sistema no está en equilibrio los componentes de una cierta fase son transferidos en forma tal que la composición del sistema tiende hacia la composición de equilibrio. Si se da al sistema el tiempo suficiente, este eventualmente alcanza el equilibrio termodinámico.

Teoría de la doble resistencia

La transferencia de masa en la interfaz se realiza en tres etapas: *a*) la transferencia de masa del grueso o bulto de la primera fase a la superficie interfacial, *b*) la transferencia a través de la interfaz hacia la segunda fase y *c*) finalmente la transferencia de masa a la parte gruesa o de bulto de la segunda fase.

La figura 3.3 ilustra la transferencia del componente *A* de la fase gaseosa a la fase líquida. Se tiene un gradiente de presión entre la presión P_{AG} que tiene el gas en el grueso de la corriente gaseosa y la presión P_{Ai} que se tiene en la interfaz; también se presenta una gradiente de concentración en la fase líquida entre C_{Ai} la concentración de *A* en la interfaz y C_{AL} la concentración de *A* en el grueso de la corriente líquida.

Asumiendo que la velocidad de transferencia de masa entre las dos fases se controla por las velocidades de difusión de cada especie en cada lado de la interfaz y que la interfaz no presenta resistencia a la transferencia del componente que se transfiere, la discusión se concreta a la transferencia en régimen estacionario de *A* en la dirección *Z*. Las velocidades de transferencia de cada lado de la interfaz vienen dadas por:

$$N_{Az} = k_G (P_{AG} - P_{Ai}) \quad (3.35)$$

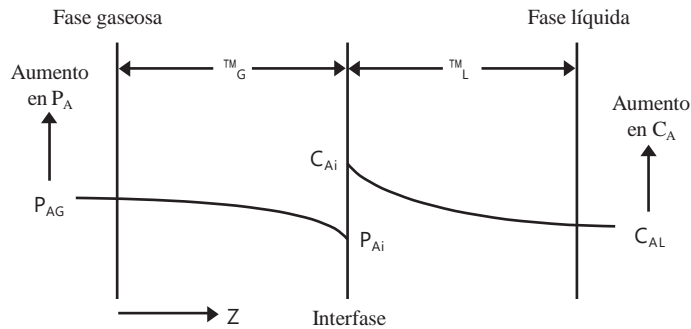


FIGURA 3.3. Gradientes de concentración entre dos fases en contacto.

$$N_{Az} = k_L (C_{Ai} - P_{AL}) \quad (3.36)$$

donde:

k_G es el coeficiente convectivo de transferencia de masa en la fase gaseosa (moles de A transferidos / tiempo por área interfacial por $\otimes P$ unidades de presión).

k_L es el coeficiente convectivo de transferencia de masa en la fase líquida (moles de A transferidos/ tiempo por área interfacial por $\otimes C$ unidades de concentración).

El *flux* de masa hacia una fase debe ser igual al *flux* de masa en la segunda fase y así las ecuaciones (3.35) y (3.36) son iguales.

$$N_{Az} = k_G (P_{AG} - P_{Ai}) = k_L (C_{AL} - C_{Ai}) \quad (3.37)$$

y

$$\frac{k_L}{k_G} = \frac{P_{AG} - P_{Ai}}{C_{AL} - C_{Ai}} \quad (3.38)$$

Normalmente no es posible medir físicamente la presión parcial y la concentración en la interfaz. Por lo tanto se ha hecho necesario emplear un coeficiente global basado en una fuerza directriz total entre las composiciones de bulk P_{AG} y C_{AL} . Se puede definir un coeficiente global de transferencia de masa en función de una fuerza directriz de presión; este coeficiente

es K_G y toma en cuenta la resistencia completa a la difusión entre las dos fases y esta definido como

$$N_A = K_G (P_{AG} - P_A^*) \quad (3.39)$$

en donde:

P_{AG} es la presión que tiene el gas en el grueso de la corriente gaseosa proporcional a la composición global de la fase gaseosa.

P_A^* es la presión parcial de A en equilibrio con la composición global en la fase líquida, C_{AL} .

También el coeficiente global puede ser definido incluyendo la resistencia a la difusión en ambas fases en función de una fuerza directriz basada en la concentración en la fase líquida el cual es K_L y esta definido como:

$$N_{Az} = K_L (C_A^* - C_{AL}) \quad (3.40)$$

en donde:

C_A^* es la concentración de A en equilibrio con P_{AG} .

Existen relaciones funcionales entre los coeficientes globales K_G y K_L con sus respectivos coeficientes en la interfaz; estos son:

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k} + \frac{m}{k} \quad (3.41)$$

y

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{mk} + \frac{1}{k} \quad (3.42)$$

en donde:

m representa en cierta manera la solubilidad del gas (es una relación de equilibrio como en la ecuación de Henry).

Para un sistema con un gas soluble, m es muy pequeña; al tomar la ecuación (3.41), se observa que:

$$\frac{1}{k_g} = \frac{1}{k} \quad (3.43)$$

y se puede concluir que la resistencia del gas es esencialmente la resistencia total y a esto se le llama un sistema controlado por la fase gaseosa en su transferencia de masa.

Los sistemas que tengan una solubilidad baja del gas en el líquido, m es muy grande y el análisis de la ecuación (3.65), indica que:

$$\frac{1}{k} = \frac{1}{k_l} \quad (3.44)$$

A este tipo de sistema se le llama controlado por la fase líquida en su transferencia de masa. En algunos sistemas ambas resistencias son importantes y deben considerarse cuando se evalúa la resistencia total.

Equipo de transferencia de masa

Las industrias de refinación del petróleo y petroquímica presentan una amplia gama de operaciones en donde se observa el fenómeno de cambiar la composición de una mezcla utilizando la transferencia de masa en una interfaz. Los casos típicos son:

- a) La transferencia de un soluto de una fase gaseosa a una fase líquida como en absorción, deshumidificación y destilación.
- b) La transferencia de un soluto de una fase líquida a una fase gaseosa como en desorción y humidificación.
- c) La transferencia de un soluto de una fase líquida I a otra fase líquida II, inmiscibles una en la otra como en extracción líquido-líquido.
- d) La transferencia de un soluto de una fase sólida a una fase fluida como en secado y lavado.
- e) La transferencia de un soluto de una fase fluida a una superficie de un sólido como en adsorción.

La transferencia de masa comúnmente se lleva a cabo en torres que se diseñan en forma tal que se tenga un contacto íntimo entre las dos fases.

Este equipo puede clasificarse en cuatro grupos o tipos generales y la clasificación obedece al método que se emplea para producir el contacto entre las mismas y son: torres de *spray* las cuales son utilizadas cuando se transfiere masa de gases muy solubles en la fase líquida y en donde normalmente controla la rapidez de la transferencia de masa la resistencia de la fase gaseosa; torres de burbujeo las cuales son completamente opuestas en principio a las de *spray* y en donde la resistencia de la fase líquida controla la velocidad a la que se transfiere la masa (por ejemplo la absorción de gases relativamente insolubles); torres de platos con burbujeo y con platos de charola los cuales representan una combinación de los mecanismos observados en las torres de *spray* y de burbujeo que no pueden diseñarse utilizando ecuaciones que han sido obtenidas integrando sobre una área continua de contacto en la interfaz. En su lugar las torres son diseñadas por cálculos de etapas las cuales no se discuten aquí pues son otro tema y la discusión en este libro se limita al equipo de contacto continuo; torres empacadas las cuales se utilizan para poner en contacto continuo dos fases que son inmiscibles a contracorriente. Este tipo de equipo puede ser usado para sistemas gas-líquido en donde cualquier resistencia de las fases controla o en donde ambas resistencias son importantes.

Los fundamentos que constituyen las bases para el diseño o análisis de un equipo de contacto continuo son cuatro:

1. Los balances de materia y entalpía que hacen intervenir las ecuaciones de conservación de masa y de energía.
2. El equilibrio termodinámico entre fases.
3. Las ecuaciones de la transferencia de masa.
4. Las ecuaciones de transferencia de *momentum*.

Ecuaciones diferenciales para las transferencias de masa, *momentum* y de energía

Las leyes fundamentales de la transferencia de masa, *momentum* y energía han sido expresadas en forma matemática en las secciones anteriores para el caso especial del volumen de control macroscópico. Estas leyes pueden también ser expresadas matemáticamente para otro tipo especial de volumen de control que es el elemento diferencial; las expresiones resultantes son del tipo diferencial o microscópicas.

Un tratamiento riguroso de las ecuaciones diferenciales para el transporte de masa, *momentum* y el de energía esta fuera del contexto de este libro; por lo que solo se realizará una descripción del volumen de control de tipo elemento diferencial y se darán las ecuaciones resultantes para la conservación de la masa, la segunda ley del movimiento de Newton y la primera ley de la termodinámica.

El volumen de control de tipo diferencial es el elemento de volumen Δx , Δy y Δz que se muestra en la figura (3.4). Cada flujo de masa lleva su propio *momentum* y su propia energía al tomar el límite cuando Δx , Δy y Δz , tienden a cero se obtiene lo siguiente para el balance de masa la llamada ecuación de continuidad:

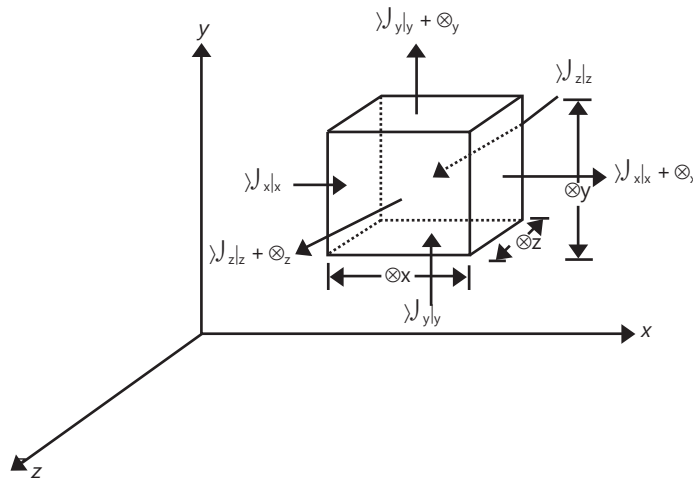


FIGURA 3.4. Volumen de control de tipo diferencial.

$$-\frac{\partial(\rho J_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho J_y)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho J_z)}{\partial z} - \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (3.45)$$

la cual en forma más compacta queda:

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right) = 0 \quad (3.46)$$

Para el caso en que se aplique a un fluido incompresible que se encuentra en estado estacionario, la ecuación (3.45) toma la forma:

$$\rho \mathbf{J} = 0 \quad (3.47)$$

Si se lleva a cabo la diferenciación que se encuentra en el término $\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \right)$ la ecuación de continuidad toma la forma:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} + J_x \frac{\partial}{\partial x} + J_y \frac{\partial}{\partial y} + J_z \frac{\partial}{\partial z}}_{\text{Derivada sustancial}} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} = 0$$

$$\frac{D}{Dt} + \rho \mathbf{J} = 0 \quad (3.48)$$

Para la segunda ley de Newton del movimiento se obtienen las llamadas *ecuaciones de Navier-Stokes*; se utiliza el plural *ecuaciones* puesto que las fuerzas se expresan por componentes (componente en dirección x en dirección y en dirección z). Así, cuando los *momentum* se expresan como componentes se obtienen tres ecuaciones diferenciales:

$$\rho \left(\frac{\partial J_x}{\partial t} + J_x \frac{\partial J_x}{\partial x} + J_y \frac{\partial J_x}{\partial y} + J_z \frac{\partial J_x}{\partial z} \right) = \rho g_x + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \quad (3.49a)$$

$$\rho \left(\frac{Dv_x}{Dt} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = \rho g_x + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) \quad (3.49b)$$

$$\rho \left(\frac{Dv_y}{Dt} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = \rho g_y + \mu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) \quad (3.49c)$$

Las ecuaciones (3.49), son válidas para cualquier tipo de fluido; es decir, no se ha tomado en cuenta la naturaleza de los esfuerzos que se generan al hacer fluir el fluido (la relación de cambio en tensión). Para un fluido que sigue las relaciones de viscosidad de Stokes las ecuaciones (3.49) toman la forma:

$$\rho \frac{Dv_x}{Dt} = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) \quad (3.50a)$$

$$\rho \frac{Dv_y}{Dt} = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) \quad (3.50b)$$

$$\rho \frac{Dv_z}{Dt} = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) \quad (3.50c)$$

Las expresiones (3.50) son las llamadas ecuaciones de Navier-Stokes. En la mayoría de los casos en que se estudia la transferencia de *momentum* en un proceso químico, el flujo puede ser considerado incompresible y con viscosidad constante, ($\rho = \text{constante}$) así se obtiene:

$$\rho \frac{Dv_x}{Dt} = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) \quad (3.51a)$$

$$\rho \frac{Dv_y}{Dt} = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) \quad (3.51b)$$

$$\left\langle \frac{DJ_z}{Dt} \right\rangle = g_z \left[\frac{p}{z} + \frac{2J_z}{y^2} + \frac{J_z}{z^2} \right] \quad (3.51c)$$

Los cuales se pueden expresar en forma más compacta en notación vectorial:

$$\left\langle \frac{DJ}{Dt} \right\rangle = g \left[\frac{p}{z} + \frac{2J}{y^2} \right] \quad (3.52)$$

Cuando ρ es despreciable el término $\rho \frac{2J}{y^2}$ desaparece y se tiene la llamada *ecuación de Euler*. Para la primera ley de la termodinámica, la ecuación diferencial toma la forma siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{1}{x} \frac{K}{\gamma} + \frac{1}{y} \frac{K}{\gamma} + \frac{1}{z} \frac{K}{\gamma} + q + \alpha = \frac{1}{\rho} \left[\frac{J_x}{x} + \frac{J_y}{y} + \frac{J_z}{z} \right] + gy + u + \frac{p}{\rho} \quad (3.53) \end{aligned}$$

La cual tomando en cuenta la derivada sustancial y escribiendo los términos de conducción como $\theta = (kT)$, da como resultado:

$$\begin{aligned} \theta (KT) + q + \alpha = \theta (pJ) + u + gy + \theta J + \frac{p}{\rho} \quad (3.54) \end{aligned}$$

en la cual el segundo término del segundo miembro es cero por la ecuación de continuidad (ecuación 3.46). Para un flujo con las características dadas

de la ecuación (3.54) toma la

forma:

$$\frac{Dv^2}{2Dt} = J \left(P + J \frac{Dg}{Dt} + J \frac{D^2 J}{Dt^2} \right) \quad (3.55)$$

También para flujo incompresible el término $\frac{D(pJ)}{Dt}$ de la ecuación (3.54) es:

$$\frac{D(pJ)}{Dt} = J \frac{DP}{Dt} \quad (3.56)$$

Substituyendo las ecuaciones (3.56) y (3.55) en la ecuación (3.54) se tiene:

$$\frac{D(kT) + q + \alpha}{Dt} = J \left(\frac{Du}{Dt} + \frac{D(gy)}{Dt} + J \frac{Dg}{Dt} + J \frac{D^2 J}{Dt^2} \right) \quad (3.57)$$

La ecuación (3.57) puede reducirse todavía más si los tres primeros términos de su segundo miembro se expresan en términos de temperatura:

$$\frac{D(kT) + q + \alpha}{Dt} = J C_v \frac{DT}{Dt} + J \left(\frac{D^2 J}{Dt^2} \right) \quad (3.58)$$

Para el caso de flujo incompresible la función α puede expresarse en términos de la porción viscosa de los términos del esfuerzo de corte y del esfuerzo normal:

$$\alpha = J \left(\frac{D^2 J}{Dt^2} + \nu \right) \quad (3.59)$$

en donde la función de disipación es dada por:

esta ecuación se aplica en general a la conducción de calor. Si la conductividad térmica k no es función de la temperatura:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T + \frac{q}{\rho C_p} \quad (3.64)$$

en dónde:

$\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$ y es conocida como la difusividad térmica $\left[\frac{ft^2}{hr} \right]$. Si el medio no tiene fuentes de calor, la ecuación (3.64) se reduce a la conocida *segunda ley de Fourier*:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T \quad (3.65)$$

Para un sistema con fuentes de energía pero sin variación de T con respecto al tiempo, la ecuación (3.64) se reduce a la *ecuación de Poisson*:

$$\nabla^2 T + \frac{q}{k} = 0 \quad (3.66)$$

La situación de estado estacionario sin fuentes de energía conlleva a la conocida *ecuación de Laplace*:

$$\nabla^2 T = 0 \quad (3.67)$$

BIBLIOGRAFÍA

- Crowe, C.M.; Hamielec, A.E.; Hoffman, T.W.; Johnson, A.I.; Shannon, P.T. y Woods, D.R., *Chemical Plant Simulation*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1971.
- Daubert, T.E., 1980, *Hydrocarbon Processing*, March, 107.
- Froment, G.F., 1977, The Chemical Society, proc. 6th. Int. Cong. Catal., p. 10, Londres.
- Lee, W. y Weekman, Jr., 1971, U.S. Patent 3,769,203.
- Mikolaj, P.G. y Dev, L., 1971, *AIChE Journal*, 17(2), 343.
- Nace, D.M., 1970, *IEC proc Des Dev*, 9, 203.
- Nace, D.M., Voltz, S.E. y Weekman, V.W. Jr., 1971, *IEC proc Des Dev*, 10, 530.
- Polya, G., 1965. "How to Solve It", 2da. ed., en Anchor Books, *Double Day*, Garden City, Nueva York.
- Reid, R.C.; Preusnitz, J.M. y Sherwood, T.K., 1977, *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill Book Co., Nueva York.
- Voltz, S.E.; Nace, D.M. y Weekman, V.W. Jr., 1971, *IEC proc Des Dev*, 10, 538.
- Woorhies, A., 1947. *Ind Engs Chem*, 327, 318.
- Weekman, V.W. Jr., 1968. *IEC Proc Des Dev*, 7, 90.
- Weekman, V.W. Jr. y Nace, D.F., 1970. *AIChE Journal*, 16, 397
- Weiz, P.B. y Goodwin, R.D., 1963, *Journal of Catalysis*, 2, 397.
- Welty, J.R.; Wicks, G.E. y Wilson, R.E., 1969. *Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer*, Wiley International Ed, Nueva York, p. 119.