

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA
DIVISION DE CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA
DEPARTAMENTO DE INGENIERIA DE PROCESOS E HIDRAULICA

LIC. INGENIERIA QUIMICA

LABORATORIO DE DISEÑO Y PROCESOS III

PROYECTOS:

“ RECUPERACION DE ESTIRENO
A PARTIR DE BASURA DE POLIESTIRENO “

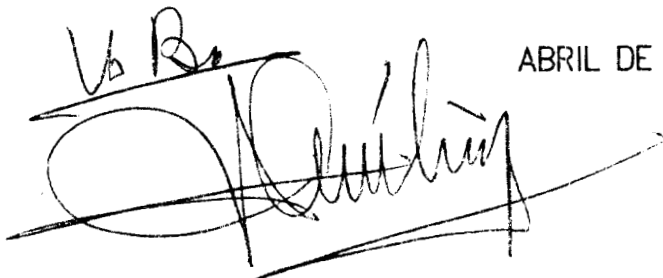
PERFILES DE CONCENTRACION EN COLUMNAS EMPACADAS
UTILIZANDO ADAPTACION DE MALLA

ESTUDIANTE : OMAR GALAN DOMINGO

ASESORES : M. EN C. JOSE ALVAREZ RAMIREZ
M. EN C. CARLOS MARTINEZ VERA

PROFESOR : ING. URIEL ARECHIGA VIRAMONTES

ABRIL DE 1992.

Vs B


148145

U. A. M. CENTRO DE INVESTIGACIONES

RECUPERACION DE ESTIRENO

A PARTIR DE BASURA DE POLIESTIRENO.

148145

CONTENIDO

1.- INTRODUCCION.

1.1.- USOS PRINCIPALES.

1.2.- CONSUMIDORES PRINCIPALES.

1.3.- VOLUMEN ACTUAL Y POTENCIAL DE MERCADO.

1.4.- MATERIAS PRIMAS Y SUB-PRODUCTOS.

1.5.- REACCIONES IMPORTANTES Y CAPACIDAD A INSTALAR.

1.6.- MONTO DE LA INVERSION, INVERSION FIJA, CAPITAL.

1.7.- OBREROS, EMPLEADOS Y TECNICOS.

1.8.- COSTO DE PRODUCCION.

1.9.- GANANCIA POR AÑO.

2.- EL PRODUCTO Y SUS CARACTERISTICAS.

2.1.- PROPIEDADES FISICAS Y QUIMICAS.

2.2.- PROCESOS DE OBTENCIÓN.

2.3.- DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO.

3.- ESTUDIO DE MERCADO.

3.1.- ANTECEDENTES Y PROYECCIONES.

3.2.- USOS Y USUARIOS.

3.3.- SUSTITUTOS.

3.4.- CAPACIDAD DE LA PLANTA, UBICACION.

4.- TRABAJOS DE INVESTIGACIÓN.

4.1.- OBJETIVOS.

4.2.- RESULTADOS.

5.- RESULTADOS DEL DISEÑO.

5.1.- DIAGRAMA DE FLUJO.

5.2.- DISEÑO DE EQUIPOS.

5.3.- EQUIPO AUXILIAR.

5.4.- LISTA DE ACCESORIOS.

5.5.- ESPACIO NECESARIO, UBICACIÓN Y COSTO DEL TERRENO.

6.- PERSONAL NECESARIO.

6.1.- NUMERO, POSICIÓN Y SUELDO ANUAL.

7.- INVERSIÓN TOTAL.

7.1.- INVERSIÓN FIJA.

7.2.- CAPITAL DE TRABAJO.

7.3.- BALANCES DE PROFORMA.

7.4.- TASA DE RETORNO.

8.- REFERENCIAS.

APENDICES.

A.- CRITERIOS Y CALCULOS DE DISEÑO DE EQUIPOS.

B.- BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA.

C.- RESULTADOS DE INVESTIGACIÓN.

PERFILES DE CONCENTRACION EN COLUMNAS EMPACADAS

UTILIZANDO ADAPTACION DE MALLA.

INTRODUCCION

Los materiales conocidos como plásticos son indispensables para el mundo moderno. Gran cantidad de artículos elaborados con éstos materiales son desechados, provocando contaminación del medio ambiente. En general, se puede decir que las materias plásticas no son biodegradables, es decir, no pueden ser asimiladas por microorganismos [10].

Al tratar de procesar las grandes cantidades de basura en forma de artículos plásticos por medios convencionales, como la incineración, se generan contaminantes del aire sumamente tóxicos [11]. Por ejemplo, el ácido cianhídrico puede ser formado cuando plásticos del tipo acrílico son térmicamente descompuestos, el ácido bromhídrico puede ser formado a partir de compuestos bromados que son adicionados como retardantes de la flama, el ácido clorhídrico es generado al incinerar cloruro de polivinilo.

Daños ecológicos muy graves son ocasionados por el manejo inadecuado de los distintos tipos de desperdicios plásticos [10]. Por ello, muchos esfuerzos se han centrado en la reutilización o reciclaje de tales desperdicios. Se mencionarán algunas características de los distintos tipos de reciclaje [5], [12], [13], [17].

El **reciclaje primario** implica la utilización de desperdicios plásticos uniformes, no contaminados. Únicamente los desperdicios termoplásticos pueden ser directamente reprocesados. El reciclaje puede ser llevado a cabo por el procesador en una planta o a través de reprocesadores externos. Sus problemas técnicos principales son: degradación del material debida a

procesamientos repetidos, lo que resulta en pérdida de propiedades como la apariencia, resistencia química, procesabilidad y características mecánicas.

El **reciclaje secundario** utiliza desperdicios plásticos inadecuados para el reprocesamiento directo usando equipo de procesamiento plástico estándar. El método ha tenido un desarrollo muy lento debido a lo siguiente : los desperdicios plásticos tienden a estar altamente contaminados con sustancias no plásticas (metales, arena), lo que puede dañar el equipo y el producto debe ser producido en masa para que sea económicamente viable.

El **reciclaje terciario** (recuperación de químicos a partir de desperdicios plásticos) consiste en la pirólisis de los desperdicios plásticos; el proceso de pirólisis es capaz de producir compuestos químicos sencillos a partir de mezclas de materiales de desperdicios, los productos pueden ser usados comercialmente como químicos útiles o combustibles.

El **reciclaje cuaternario** (recuperación de energía a partir de desperdicios plásticos) puede ser definido como la reducción de desperdicios combustibles a residuos inertes mediante combustión controlada a alta temperatura. La razón principal para la incineración es la reducción del volumen de desperdicios: es capaz de reducir el peso de la basura en un 80% y el volumen en un 90% .

Este trabajo centra su atención en la recuperación de estireno a partir de la descomposición térmica (pirólisis) del poliestireno. Se escogió poliestireno por ser una materia plástica ampliamente utilizada (tenedores, cuchillos, tazas de plásticos, juguetes, aislantes térmicos, etc) y es un componente mayoritario en los desperdicios plásticos.

RESUMEN Y CONCLUSIONES.

Antes de mencionar los motivos que justifican la elaboración del presente proyecto, quisiera señalar que esta sección sintetiza el contenido de las secciones posteriores, por lo que la continuidad entre los puntos tratados se ve afectada.

Las razones fundamentales que justifican el reciclado del poliestireno son de tipo: ecológico, energético y económico.

La pirólisis del poliestireno tiene la siguientes ventajas:

- 1) La mayoría del desperdicio sólido municipal puede ser convertido en una forma económicamente viable a productos de degradación.
- 2) El volumen del desperdicio puede ser reducido en un 90% o más.
- 3) El proceso de pirólisis es hermético y por lo tanto no provoca contaminación del aire.
- 4) Como el proceso no contamina y requiere poco espacio la plantas pueden estar en ciudades, lo que disminuye los costos de transporte.
- 5) El proceso es un productor de energía neta.
- 6) La energía producida esta en forma conveniente, esto es, gas, aceite y carbón.
- 7) El proceso puede diseñarse de modo que se recuperen sustancias químicas valiosas.

1.1.- USOS PRINCIPALES DEL ESTIRENO.

El *estireno* es un monómero capaz de polimerizarse rápidamente, lo que permite sintetizar a partir de él una amplia variedad de polímeros valiosos que cubren campos de fibras, plásticos, hules, coberturas y adhesivos. La versatilidad del estireno se ha aprovechado para la manufactura de diversos tipos de poliestirenos, como el poliestireno ligero-estable, el poliestireno SAN y el ABS. La aplicación incluye partes automotrices, difusores de luz, aislantes, etc. Además, es utilizado como agente "cross-linking" para la producción de poliésteres. La gran variedad de aplicaciones de los polímeros de estireno le da gran valor comercial, por lo que su importancia en la fabricación de materias sintéticas es evidente.

1.2.- CONSUMIDORES PRINCIPALES DE ESTIRENO.

La distribución porcentual de la demanda, se estima de: 70% poliestireno, 14% hule SBR, 5% latex SBR, 11% otros.

Las principales consumidores de estireno son: Aislantes y Acústicos de Monterrey, S.A., Industrial Ebroquimex, S.A., Industrias Resistol, S.A., Monquímica, S.A., Nacional de Resinas, S.A., Poliestireno y Derivados, S.A. de C.V., Polioles, S.A. de C.V., Productos de Estireno, S.A. de C.V., Industrias Kryolit, S.A., etc.

1.3.- VOLUMEN ACTUAL Y POTENCIAL DEL MERCADO.

El consumo aparente en México (1989) fue de 180,768 toneladas. La tasa de incremento de consumo es del 8% . Las proyecciones son de 196,000 toneladas para 1990, y se calcula que incrementarán a 423,000 toneladas para el 2000.

1.4.- MATERIA PRIMA (DESECHOS DE POLIESTIRENO).

El poliestireno es generalmente considerado el termoplástico con el que se inicio la industria moderna de los plásticos. En la industria actual "plásticos de poliestireno" incluye los estirenos polimerizados más sencillos y también los complejos modificados con hules, aditivos tales como agentes estabilizantes y con otros monómeros, para desarrollar propiedades especiales que cubran necesidades industriales específicas. En este respecto, los poliestirenos están entre los productos más versátiles conocidos en la industria de los plásticos.

Los plásticos de poliestireno tienen generalmente excelente resistencia en ambientes interiores. La exposición a ambientes exteriores los decolora y provoca que se vuelvan quebradizos.

El poliestireno de uso general es la forma sencilla polimerizada del monómero estireno. Se caracteriza por su dureza, rigidez, claridad, estabilidad al calor, excelente resistencia eléctrica, facilidad de fabricación mediante todas las técnicas termoplásticas de moldeo comunes, excelente colorabilidad y, por supuesto, bajo costo.

Sin embargo, todo el poliestireno de uso general no es idéntico. Los homopolímeros con distintas características tales como la resistencia al calor son producidos a través de cambios moleculares y la adición de aditivos (lubricantes), rellenos y estabilizadores.

La mayoría de las aplicaciones no requieren un poliestireno con una alta resistencia al calor. Por lo general es usado en artículos domésticos, juguetes, empaques, etc. Al tener una gran aplicación en la manufactura de productos desechables, se encuentra en grandes cantidades en la basura municipal, por lo que resulta atractivo su reciclaje.

PRODUCTOS SECUNDARIOS.

La pirólisis del poliestireno tiene como producto mayoritario el estireno y como productos secundarios benceno, etileno y trazas de otras sustancias orgánicas.

El mayor uso para el benceno está en el estireno, intermediarios clorinados, fenol, insecticidas, nylon, anilina, detergentes sintéticos y anhídrido maleico.

El etileno es el hidrocarburo más importante en la producción química. Aunque está presente en los gases obtenidos durante las operaciones de cracking, la mayor cantidad se obtiene de la pirólisis del etano, propano y butano derivados del gas natural. Es la materia prima para muchos químicos que incluyen alcohol etílico, óxido de etileno, etilbenceno, cloruro de etilo, dicloruro de etileno y plásticos de polietileno.

Estos productos secundarios son básicos para otros productos importantes, tales como acetaldehído, etilenglicol, etanolaminas,

acrilonitrilo, tetra etil plomo y cloruro de vinilo.

1.5.- REACCIONES IMPORTANTES EN LA DESPOLIMERIZACION DEL POLIESTIRENO.

La degradación térmica del poliestireno (PS) se realiza por un mecanismo de radicales libres en cadena. En ausencia de oxígeno, el PS por lo general empieza a tener una pérdida de peso significativa alrededor de los 300°C, pero las reducciones en peso molecular por escisiones de cadenas al azar se observa a temperaturas más bajas. Las velocidades de degradación dependen de la técnica que se usó para sintetizar el polímero. El PS iniciado aniónicamente es apreciablemente más estable que el producido térmicamente a partir de iniciadores de radicales libres tales como el peróxido de benzoilo o el azoisobutironitrilo (AIBN). Después de una pérdida de peso de un 10%, todos los PS se degradan en aproximadamente la misma velocidad.

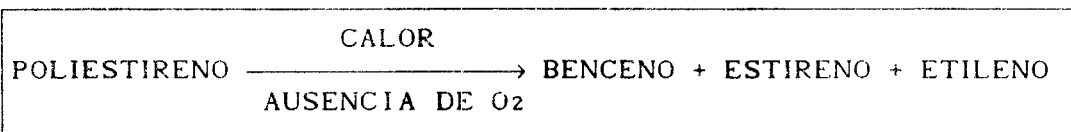
El PS iniciado por radicales libres sufre un ligero decremento en el peso molecular promedio cuando es calentado a temperaturas tan bajas como 220°C, en ausencia de oxígeno. Después de las escisiones iniciales de la cadena no ocurre degradación posterior a temperaturas por debajo de 250°C. Estas escisiones al azar han sido generalmente atribuidas a "enlaces débiles" en el polímero y se ha sugerido que no existen en el PS iniciado aniónicamente. Sin embargo, se han obtenido evidencias de enlaces débiles para peróxidos en tres PS aniónicos estándar. El número promedio de peso molecular disminuye ligeramente entre 180 y 220°C. Arriba de los 290°C, el efecto de la degradación térmica sobre el peso molecular es evidente. La

distribución de los datos de los pesos moleculares indica que, por debajo de los 250°C, ocurren escisiones al azar en aproximadamente un enlace en cada 10,000 unidades estructurales para las muestras iniciadas con AIBN y menos de un tercio de ese número en las muestras aniónicas.

Entre los 280 y 300°C, donde la pérdida de peso es todavía despreciable se pueden generar radicales libres por escisión al azar de la cadena. Estos radicales, con su movilidad muy dificultada se recombinan (no ocurre reducción del peso molecular) o sufren una abstracción intermolecular de hidrógeno (desproporción) para producir un doble enlace en un extremo de cadena.

El grado en el que el PS puede despolimerizarse para dar estireno a temperaturas menores a 300°C, donde ocurre poca volatilización, es limitado debido a la competencia de reacción de polimerización. A cualquier temperatura hay una concentración definida de estireno que puede existir en el polímero al equilibrio, donde la velocidad de polimerización es equivalente a la de despolimerización. A temperaturas por arriba de los 330°C, surgen especies volátiles de todas las muestras de PS. Análisis de éstas especies revelan que los componentes principales son: estireno, 2,4,6-trifenil-1-hexeno (trímero) y 2,4-difenil-1-buteno (dímero). Cantidades mucho más pequeñas de tolueno, α -metilestireno y 1,3-difenilpropano también son encontradas.

Entre los 330 y 450°C se observa un rendimiento de tolueno y α -metilestireno.



Debido a la complejidad de las reacciones involucradas no ha sido posible establecer un mecanismo de reacción adecuado para situaciones prácticas, por lo que se estudia la relación temperatura-productos. En este trabajo se estudió el efecto de la temperatura sobre los productos de la reacción, en donde se tomó como reacción principal la descomposición del PS en estireno, benceno y etileno.

1.6.- MONTO DE LA INVERSION, INVERSION FIJA Y CAPITAL DE TRABAJO.

A continuación se muestra un estimado de la inversión requerida para iniciar el proceso. Esta comprende gastos de compra de terreno, instalación, equipo, materia prima; y pago de servicios y sueldos. Las cantidades se calcularon como se indica en la sección 7.

Inversión total	8989,970.00 USD.
Inversión fija	434,170.00 USD.
Capital de trabajo	464,800.00 USD.

1.7.- OBREROS, EMPLEADOS Y TECNICOS NECESARIOS.

El personal total se estableció de acuerdo con el número de equipos y de actividades a realizarse. El número de empleados determinado (17) fue escogido de manera intuitiva. Para más detalles véase la sección 6.

Personal	Cantidad
Obreros	12
Empleados	4
Técnicos	1

1.8.- COSTO DE PRODUCCION.

Los costos de producción basados en la producción de estireno anual, de 2.25 mil ton, con un monto de 900,000.00 USD., y un costo aproximado de fabricación de 824,800.00 USD., nos da un costo de producción de 0.36 USD./Kg.

1.9.- GANANCIA POR AÑO.

Basados en la producción anual de estireno de 2.25 mil ton, con un precio medio de venta de 0.40 USD/kg, se estima tener una ganancia anual de 900 mil USD/año.

2.- EL PRODUCTO Y SUS CARACTERISTICAS.

2.1.- PROPIEDADES FISICAS Y QUIMICAS.

Producto : Estireno.

Nombre químico : Vinil benceno.

Nombres comerciales : Inglés : styrene, phenyllethylene.

Fórmula condensada : $C_6H_5CHCH_2$.

Peso Molecular : 104.16.

Líquido aceitoso, olor aromático, incoloro o amarillento, temperatura de fusión: $-30.63^{\circ}C$; temperatura de ebullición: $145.20^{\circ}C$; densidad: 0.9045 ($25^{\circ}C$); temperatura de inflamación: $31^{\circ}C$; temperatura de ignición: $490^{\circ}C$; insoluble en agua , soluble en alcohol y éter. Se polimeriza lentamente en almacenamiento, y rápidamente cuando se calienta o se expone a la luz o peróxidos.

Su toxicidad es moderada. Puede causar incapacidades temporales o posibles lesiones permanentes a menos que se dé atención médica inmediata [2], [3].

2.2.- PROCESOS DE OBTENCION DE ESTIRENO.

En algunas ocasiones las plantas de etilbenceno y las de estireno están integradas en una sola planta para estireno a partir de etileno y benceno. El etilbenceno se transforma en estireno mediante una deshidrogenación catalítica en presencia de vapor. El rendimiento de estireno basado en etilbenceno es 90% .

Es importante mencionar que no se intenta implementar o mejorar alguno de los procesos existentes, el objetivo perseguido es tratar de reciclar basura en forma de artículos de poliestireno.

2.3.- DIAGRAMA DE BLOQUES DEL PROCESO DE RECUPERACION.

El proceso de pirólisis están dividido en seis grandes bloques: a) reducción del tamaño del poliestireno, b) eliminación de agua y productos orgánicos ligeros, c) pirólisis (cracking), d) condensación de los productos de la descomposición, e) almacenamiento de condensados y f) destilación de la mezcla condensada. Los bloques se muestran más adelante.

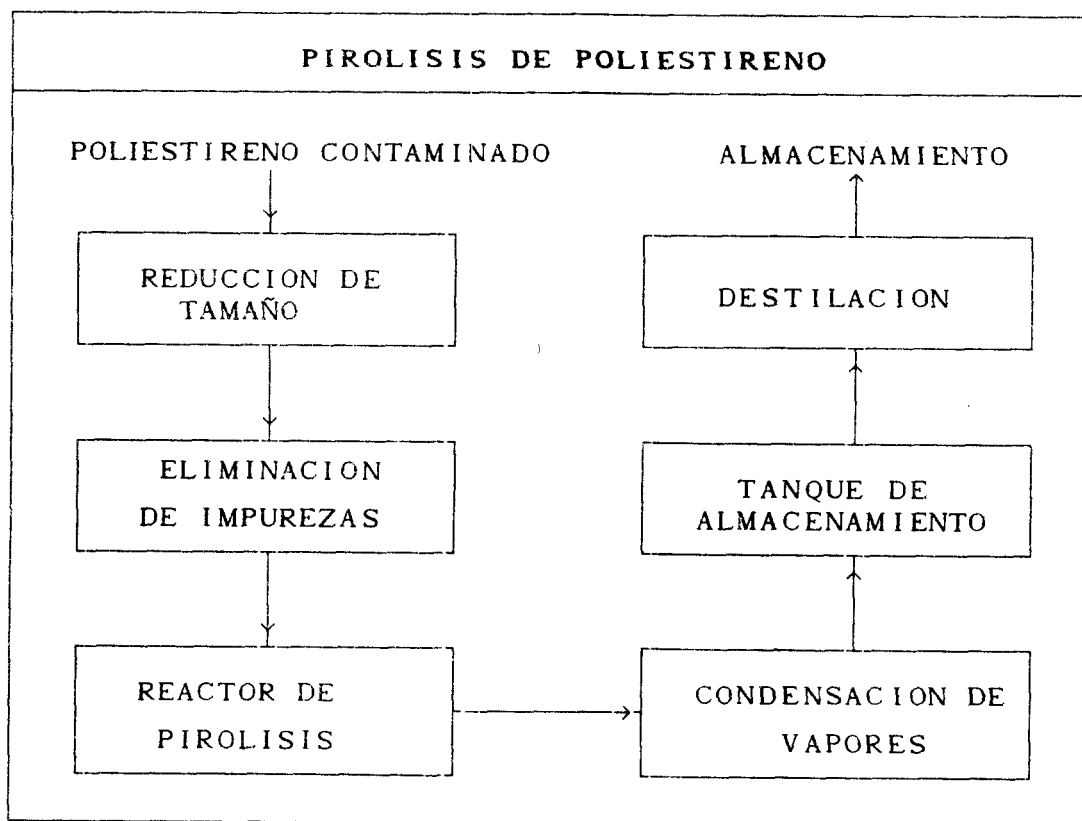


DIAGRAMA DE BLOQUES

3.- ESTUDIO DE MERCADO.

3.1.- ANTECEDENTES Y PROYECCIONES.

En México, la producción de estireno ha resultado insuficiente para atender el mercado interno, las cifras de importación (tabla 1) así lo demuestran. Todos los datos fueron tomados de la Secretaría de Comercio y Fomento Industrial [18].

DATOS ESTADISTICOS DEL ESTIRENO

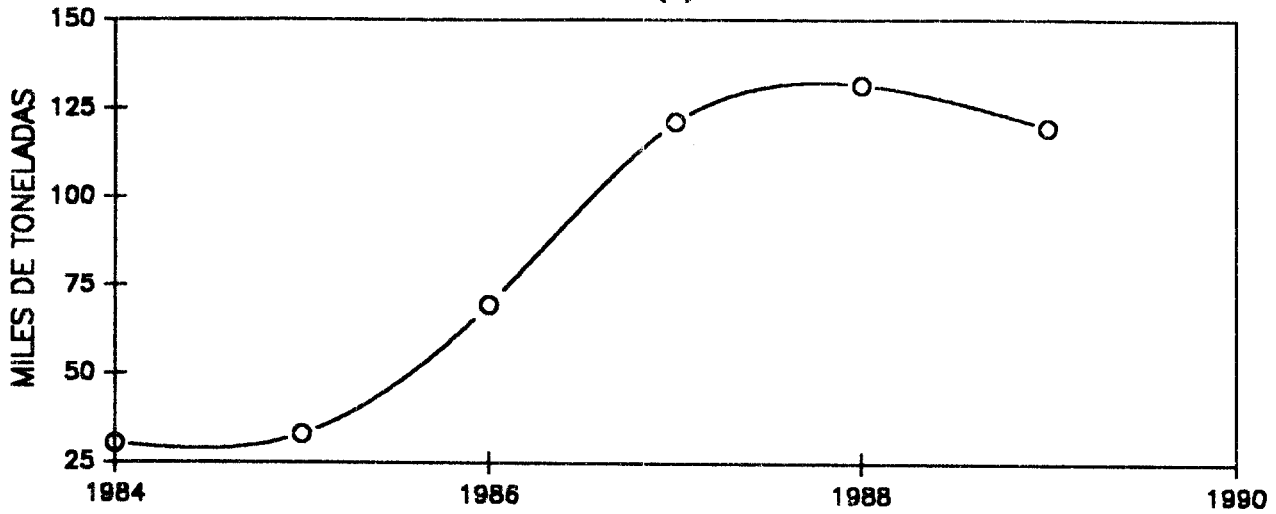
Toneladas	1984	1985	1986	1987	1988	1989
Producción	30,248	33,029	69,448	121,129	131,643	119,625
Importación	93,272	111,991	82,000	54,187	39,270	64,292
Exportación	0	0	0	0	0	3,149
C. Aparente	123,520	145,020	151,448	175,316	170,913	180,768

tabla 1

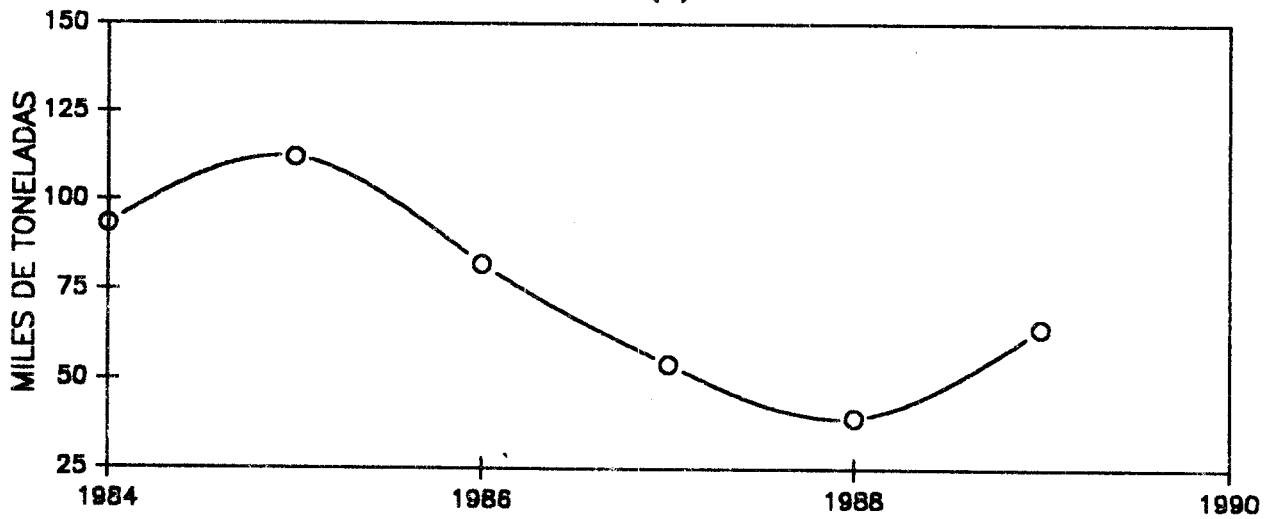
En la figura 1.A se observa el aumento en la producción de estireno desde 1984 hasta alrededor de 1988. En 1984 la producción era de 131,643 toneladas y en 1988 era de 119,625 toneladas, por lo que se tuvo un decremento del 9.12%, que corresponde a 12,018 toneladas. Al comparar la producción de estireno (figura 1.A) con su consumo (figura 1.C), resalta el déficit, cuya magnitud asciende a 61,143 toneladas/año; esto concuerda con la cantidad importada (figura 1.B), que fue de 64,292 toneladas.

FIGURA 1

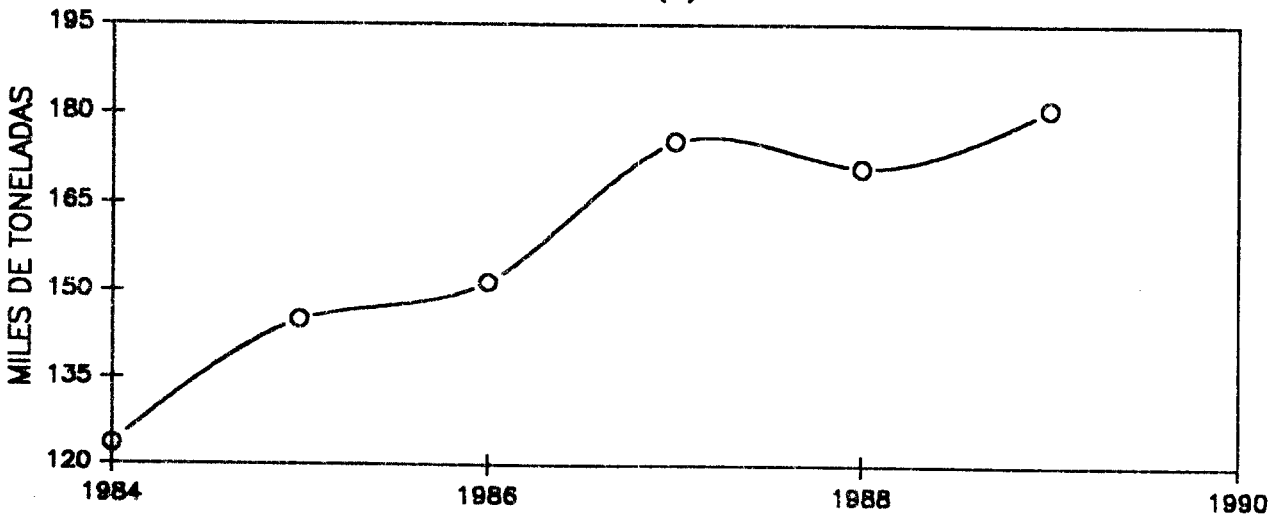
(A)



(B)



(C)



DATOS ESTADISTICOS DEL POLIESTIRENO

Toneladas	1984	1985	1986	1987	1988	1989
Producción	88,524	96,350	110,521	126,152	125,528	124,703
Importación	1,437	3,708	5,849	4,357	9,282	14,653
Exportación	11,040	9,554	18,132	38,753	47,395	36,059
C. Aparente	78,921	90,504	98,238	91,756	87,415	103,297

tabla 2

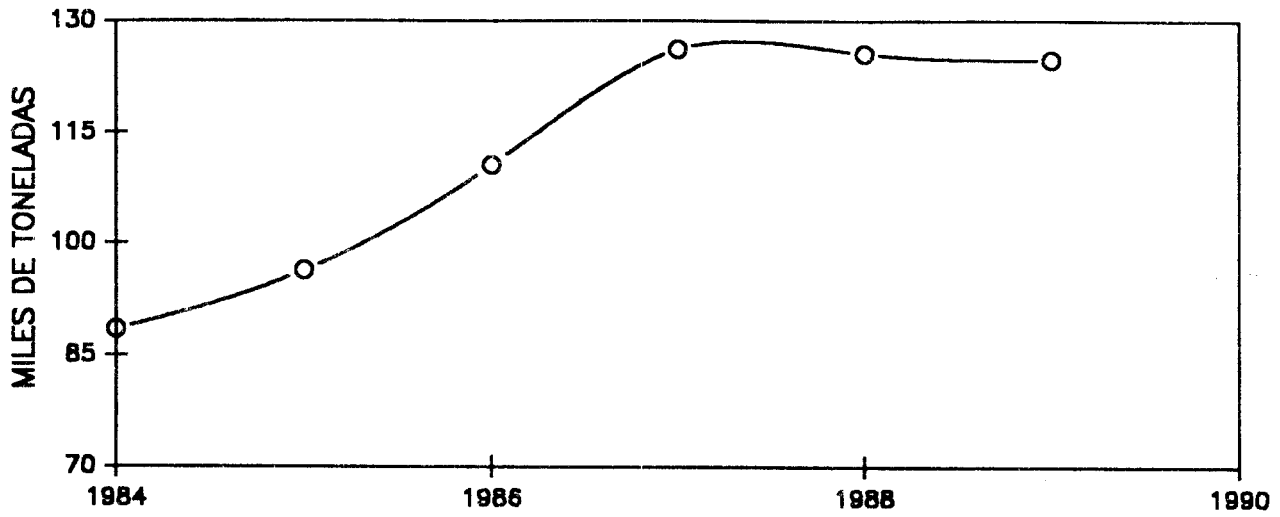
La producción de poliestireno (figura 2.A) ha aumentado de 1984 a 1989, tuvo un incremento del 140.86%, lo que equivale a 36,179 toneladas/año. En la figura 2B. se observa un incremento en las importaciones de poliestireno a partir de 1984, lo que implica un déficit de materia prima (estireno) para su producción. Estos hechos son indicativos de la gran demanda de éste polímero en sus diversas aplicaciones.

El consumo de poliestireno en México alcanzó un máximo en 1989, con 103,297 toneladas, de las cuales 39,872.64 corresponden sólo a envases desechables, cuyo porcentaje representa el 38.6% del consumo total (ver lista de Distribución de los usos del poliestireno más adelante).

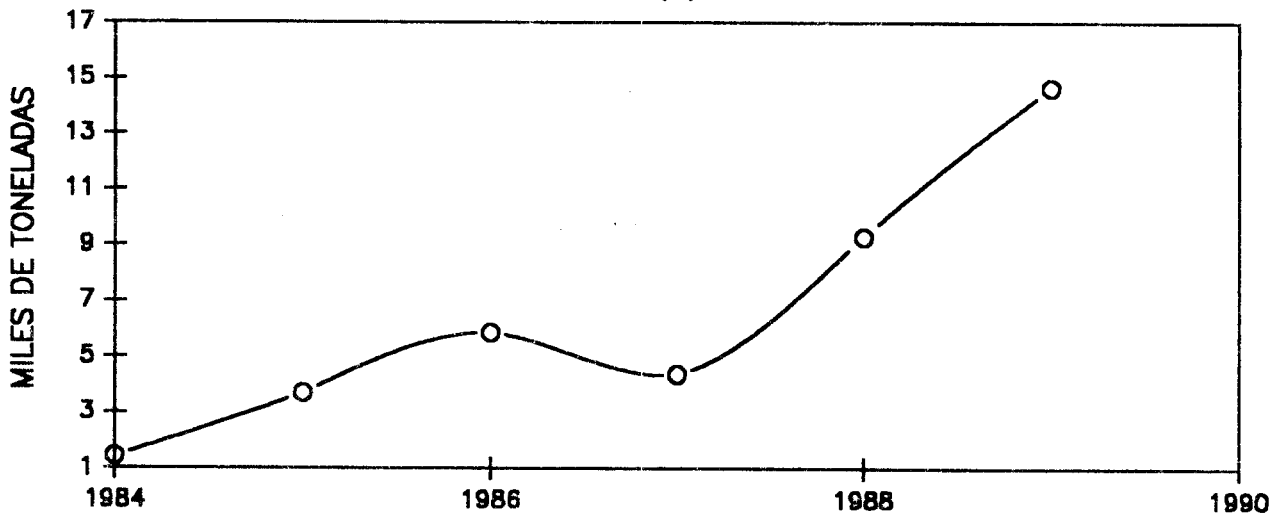
Existe una relación directamente proporcional entre la producción de estireno y la producción de poliestireno, dado que el poliestireno es la materia plástica que consume la mayor parte de la producción de estireno. Debido a que el principal uso del poliestireno está en la elaboración de artículos desechables, resulta económicamente atractivo buscar la manera de recuperar la materia prima que lo originó. Una opción factible es el reciclado de los artículos desechados en el basurero municipal.

FIGURA 2

(A)



(B)



(C)



Distribución de los usos del poliestireno.

Usos	%
Envases desechables	38.6
Construcción	9.6
Industrial	0.8
Distribución	8.5
Empaque	4.3
Escolares y hogar	4.3
Juguetes	3.0
Oficina	2.7
Automotriz	2.8
Electrodomésticos	18.7
Otros	6.7

El consumo promedio durante el período 1974 - 1984 (en miles de ton/año) fue: 45.1, 61.6, 61.2, 72.3, 74.3, 103.9, 108.0, 120.7, 89.9, 89.6 y 123.5 . La tasa de incremento en el consumo fue del 8% . La proyección se estima de 423 mil toneladas para el año 2000.

3.2.- USOS Y USUARIOS DE ESTIRENO.

El estireno es una materia prima ampliamente utilizada en la fabricación de artículos sintéticos, su distribución se ha estimado de la siguiente manera: poliestireno 70%, hule SBR 14%, látex SRB 5%, otros 11% .

Las compañías que importan estireno en grandes volúmenes se listan en la tabla 3.

Compañía	Volumen (kg)	Valor Comercial (USD)
IND.RESISTOL, S.A.	1559210.0	1'618,971
HULES MEX, S.A.	316781.0	414,894
NAL. RESINAS	525650.0	409,255
IND. NEGROMEX, S.A., C.V.	645025.0	562,792
POLIOLES, S.A., C.V.	1000887.0	1'235,141
POLIESTIRENO Y DERIVADOS, S.A.	2275320.0	2'837,217

tabla 3

3.3.- SUSTITUTOS DEL ESTIRENO.

El estireno juega un papel importante en la elaboración de una gran cantidad de materias plásticas de uso específico, de las cuales el poliestireno ha resultado tener propiedades valiosas, difíciles de encontrar en un mismo material. Entre éstas están: el hecho de que sea fácil de fabricar térmicamente en una amplia variedad de formas sin que se descomponga significativamente, su estabilidad, no toxicidad, baja conductividad térmica aunada a su resistencia al calor. Estas cualidades resultan especialmente útiles en el transporte, envasado y manipulación de

alimentos. Además, su bajo costo de producción y la flexibilidad en sus aplicaciones tienen particular interés en la sociedad de consumo actual.

Por lo anterior, se puede decir que actualmente no existe una materia plástica cuyas propiedades sean tan aprovechables como las del poliestireno, lo que hace no reemplazable al estireno, que es la materia prima para su elaboración.

3.4.- CAPACIDAD DE LA PLANTA Y UBICACION.

Existe una gran cantidad de desperdicios plásticos en la basura municipal, lo que apoya el establecimiento de un proceso que maneje grandes volúmenes de desechos de poliestireno, esto es, un proceso de reciclado que se adecúe a las necesidades económico-ambientales del lugar donde se establezca la planta. El proceso de reciclado escogido es el denominado terciario, que involucra la pirólisis, cuyas ventajas son importantes. Por un lado, resuelve el problema de contaminación, frecuente en los tratamientos convencionales de desperdicios plásticos, ya que es un proceso hermético. Además, requiere poco espacio y las plantas pueden estar en las ciudades, lo que disminuye los costos de transporte.

Según John Brown (Plastics News, 1991) para la implementación de un proceso de ésta naturaleza se pueden reciclar de 1,000 a 5,000 lbs (455.0 a 2273.0 Kg) de poliestireno por hora y un equipo adquirido puede ser montado en menos de seis meses. En éste trabajo se escogió una cantidad intermedia de 1000 Kg para iniciar el proceso, lo cual representa un reciclaje (en una jornada de 8 horas) del 7.32% del poliestireno producido diariamente en artículos desechables, equivalente a 109,240.11 Kg.

En el caso de la pirólisis, no se atiende la sugerencia de la descentralización de la industria, ya que no contamina y la materia prima, que es la basura en forma de artículos de poliestireno, se produce en la ciudad; además, el proceso no se ve afectado por los costos de transporte, que serían elevados debido a la baja densidad de este tipo de basura.

4.- TRABAJO DE INVESTIGACION.

4.1.- OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

El objetivo de éste proyecto es implementar un proceso para recuperar estireno y otros productos orgánicos de interés comercial a partir de desperdicios de poliestireno. Este proceso se llevará a cabo mediante degradación térmica (pirólisis) de dicha materia plástica. El fin último de este trabajo no es implementar un posible proyecto de inversión, sino tratar de dar solución a uno de los grandes problemas ecológicos, la basura plástica.

OBJETIVO PARTICULAR

El objetivo particular de la investigación es determinar las condiciones bajo las cuales se puede romper la macromolécula poliestireno en su monómero estireno por medio de pirólisis.

4.2.- METODOLOGIA

1. Análisis Termogravimétrico (TGA)

La instrumentación del TGA consiste en una *termobalanza* y un *panel de control*, la primera permite medir las variaciones de masa de la muestra en función de una temperatura, que es regulada por el controlador (figura 4.1 y 4.3). La termogravimetría que se llevó a cabo fue de tipo

isotérmica o estática. Se escogió un rango de temperaturas de 700 a 973 K a fin de poder comparar los resultados con la literatura [5].

La muestra se colocó en el platillo de aluminio suspendido de una barra de cuarzo, que es uno de los brazos de la termobalanza (ver figura 4.1). Un termopar movable se colocó muy cerca de la muestra para medir su temperatura. El tubo de cuarzo que encierra el platillo, al brazo de la balanza y al termopar sirve a su vez como conducto para el flujo de gases que se hacen circular alrededor de la muestra. El mecanismo de la balanza se puede deslizar sobre guías horizontales, de manera que la muestra pueda colocarse en el centro del horno (cilindro blanco que se aprecia en las figuras 4.1 y 4.2). A medida que cambia la masa de la muestra, las variaciones se registraban en un *registrador de plumilla*, que se observa en la figura 4.4.

2. Cromatografía de gases

Para analizar los productos de descomposición de la muestra de poliestireno, la termobalanza fue conectada en serie a un cromatógrafo de gases Perkin Elmer (figura 4.5). Los resultados se registraron en un *integrador computarizado*, que se observa en la figura 4.6.

3. Determinación de la cinética de degradación

Para distintas temperaturas y cierto tiempo de residencia en la termobalanza, se determinó la conversión de poliestireno a estireno. Los resultados se graficaron y se obtuvo una relación cinética de la pirólisis del poliestireno.

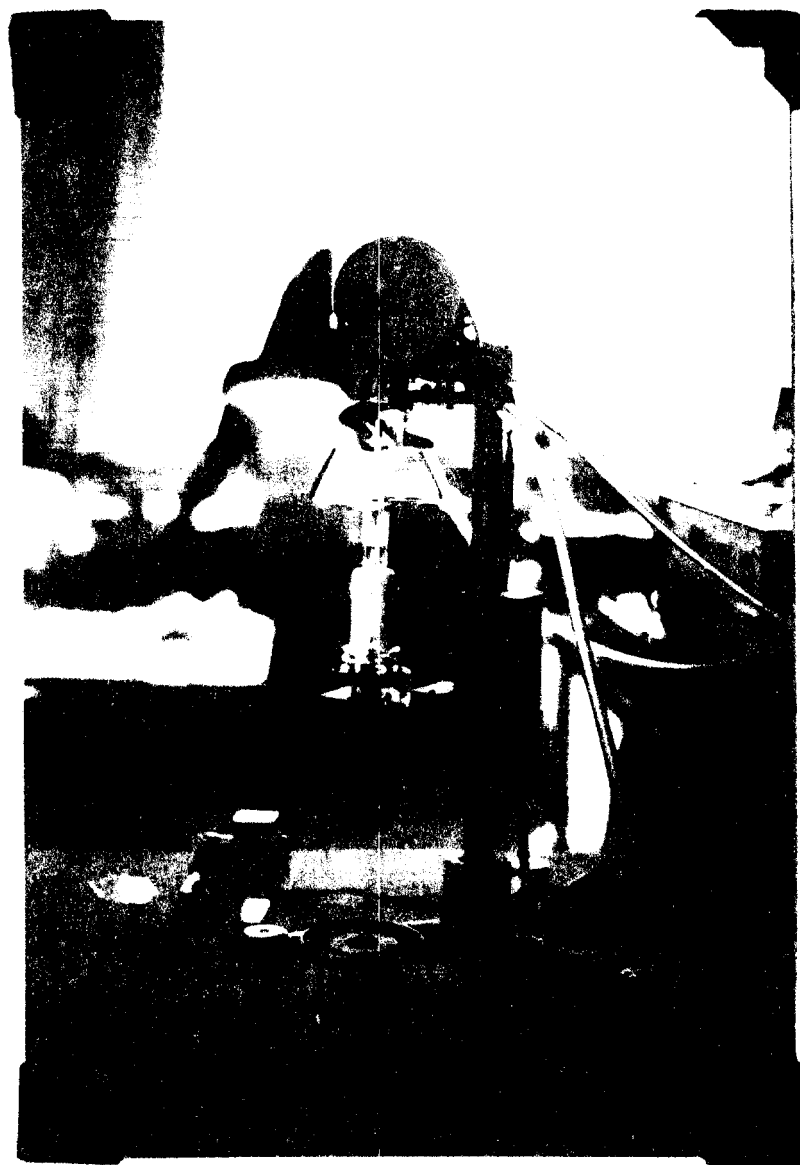


Figura 4.1. Sistema termogravimétrico Shimadzu TGA-30.

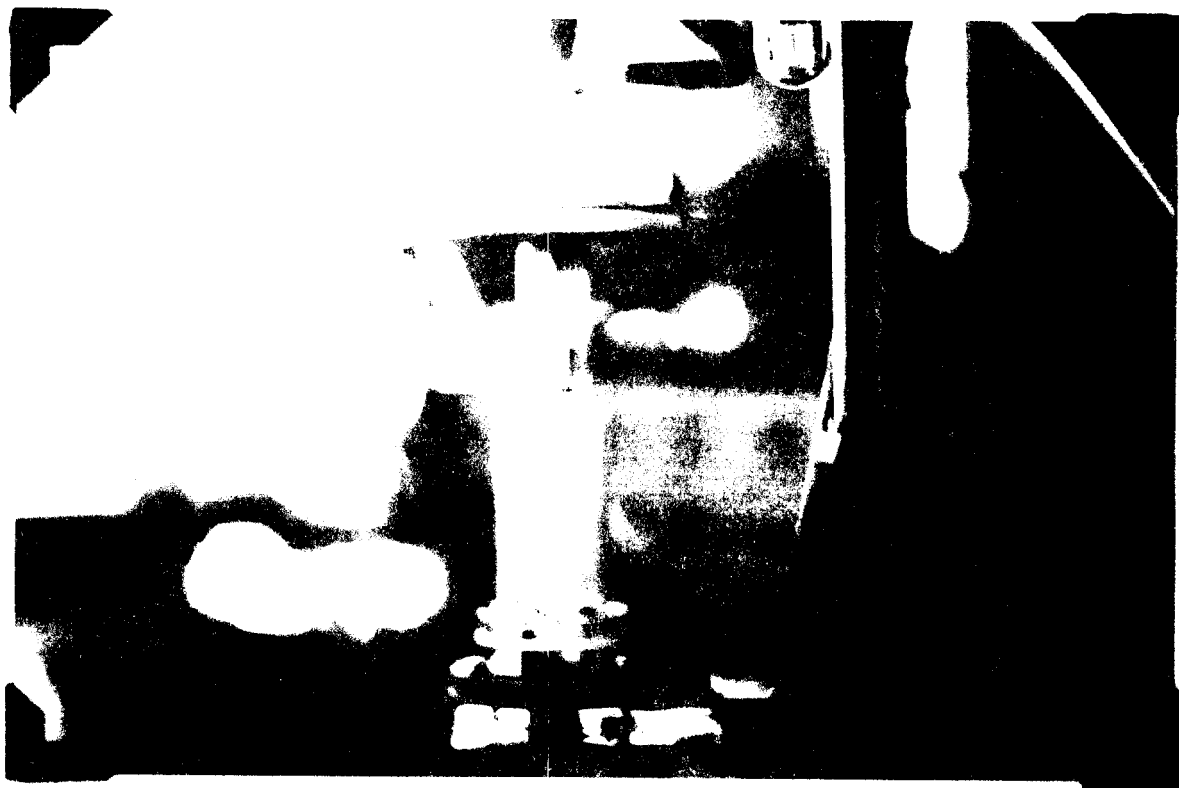


Figura 4.2. Acercamiento del horno del sistema termogravimétrico. La termobalanza se localiza en la parte interior.

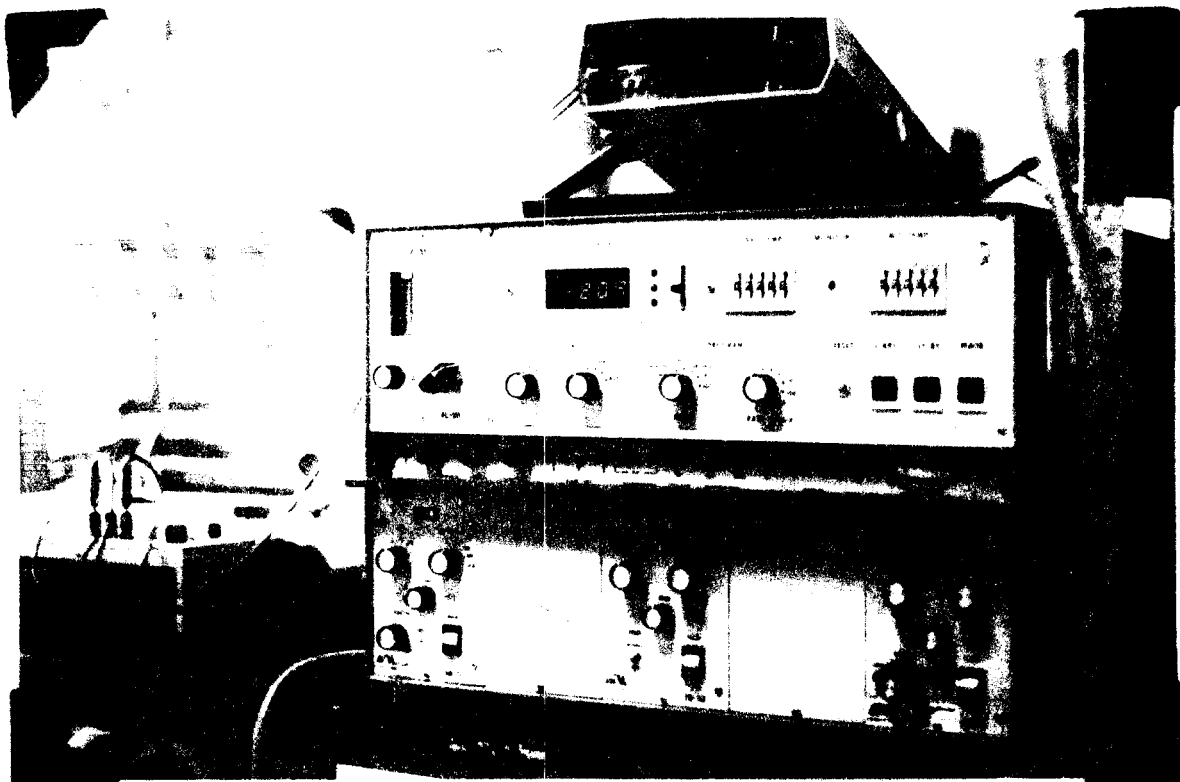


Figura 4.3. Controlador del sistema termogravimétrico.

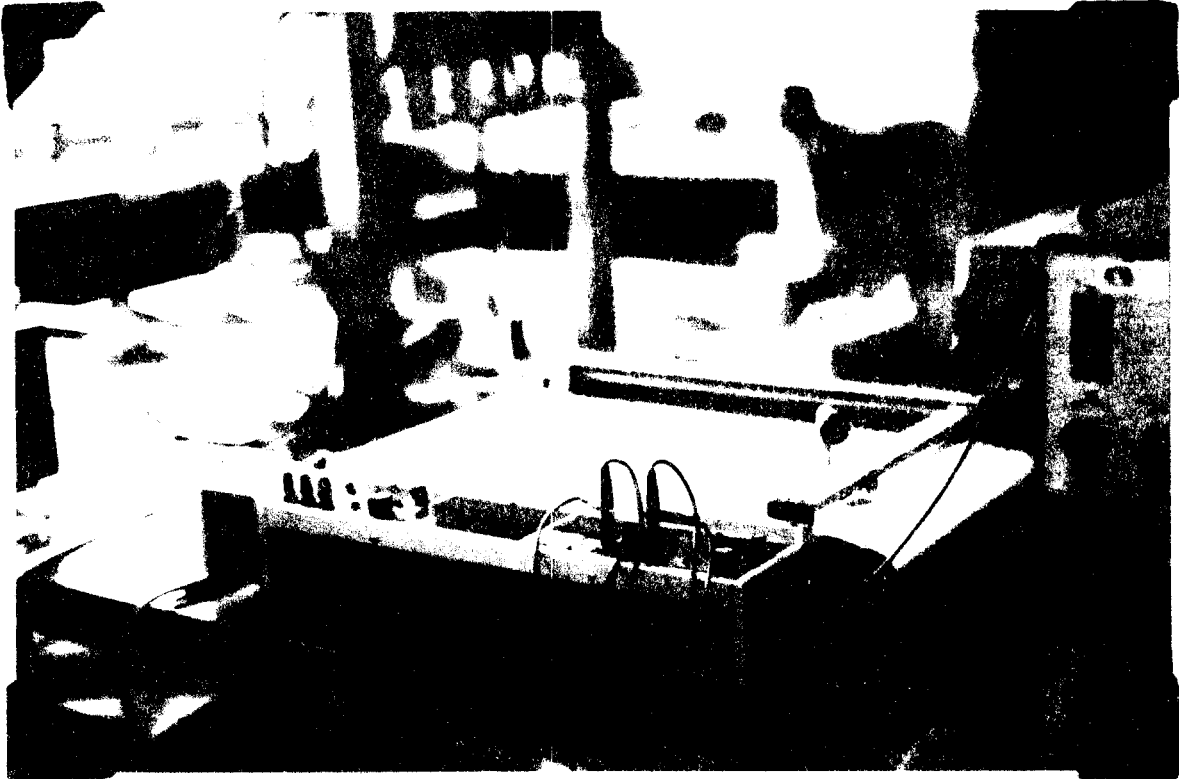


Figura 4.4. Registrador de plumilla del sistema termogravimétrico.

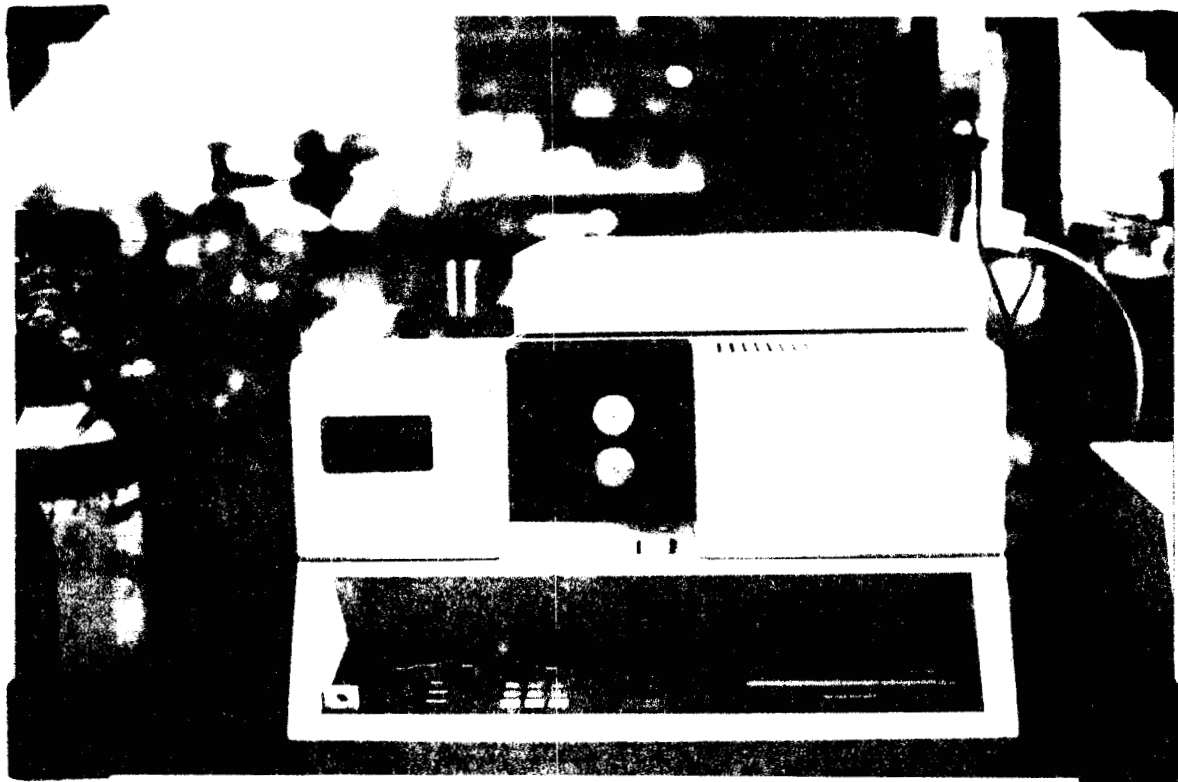


Figura 4.5. Cromatógrafo de gases Perkin Elmer.



Figura 4.6. Integrador computarizado del cromatógrafo de gases.

4.2.- RESULTADOS.

Los experimentos realizados tuvieron resultados similares entre sí (repetitividad) y los puntos obtenidos coinciden con los reportados en la literatura [5]. Las pruebas se llevaron a cabo para tiempos de residencia del sólido en los que Leidner (1981) obtiene mayor conversión. Cabe mencionar que los experimentos se realizaron solo para un punto (un solo tiempo de residencia), para cada temperatura.

Dado que no se obtuvieron el resto de los puntos, no fue posible construir una gráfica; sin embargo, para efectos de diseño, se consideraron válidas las curvas reportadas (ver apéndice C), ya que los puntos obtenidos concordaban.

Durante la descomposición térmica del poliestireno (PS), en un rango de temperaturas de 700 a 973 K, se obtuvieron los siguientes productos: benceno, estireno y etileno. Siendo el estireno el producto encontrado en mayor cantidad.

La tabla 4 muestra los resultados obtenidos para la conversión del PS a estireno en función del tiempo de residencia del sólido en el horno (reactor de pirólisis).

RESULTADOS EXPERIMENTALES

temperatura (K)	tiempo de residencia del sólido (s)	$\frac{\text{gramos de estireno}}{\text{gramos de PS}}$
973	200	0.86
873	4,000	0.83
823	10,000	0.80
773	10,000	0.25
723	10,000	0.20

tabla 4

De los resultados experimentales se escogió para el desarrollo del proceso la temperatura de 973 K, por ser la que ofrece menor tiempo de residencia y mayor conversión.

5.- RESULTADOS DEL DISEÑO.

El proceso para la obtención de estireno y otros compuestos químicos valiosos, a partir de la degradación térmica del poliestireno, requiere de las siguientes etapas:

1.- El poliestireno contaminado (hasta un 5%), con materia orgánica y agua, es pasado a través de un molino de aspas para reducir su tamaño y facilitar la operación de eliminación de impurezas.

2.- Después del cortado del poliestireno contaminado, éste es sometido a calentamiento en un horno (de eliminación de impurezas), a una temperatura de aproximadamente 373 K, para eliminar por oxidación los compuestos orgánicos y por evaporación el agua presente.

3.- El poliestireno libre de gran parte de sus contaminantes es llevado al reactor del pirólisis, donde la reacción de descomposición se efectúa a 973 K y 5.0 atm, en ausencia de oxígeno; en ésta etapa se produce estireno, benceno y etileno.

4.- Los vapores producto de la descomposición, son condensados hasta 313 K y 3.0 atm (existen dos fases).

5.- Se lleva el líquido (rico en benceno y estireno) a un tanque de condensados y el vapor, rico en etileno, es removido.

6.- Los condensados son llevados a una columna de destilación donde se separa el benceno del estireno. El producto del domo de la columna es más rico en benceno.

7.- Los productos destilados son almacenados para su distribución.

DISEÑO DEL REACTOR DE PIROLISIS

Para proyectar los reactores en que se verifican los procesos con la participación de gases y sustancias sólidas sirven de base: a) las leyes cinéticas, en particular, la ecuación de velocidad de reacción en la superficie de la partícula sólida; b) el régimen hidrodinámico de ambas fases en el reactor; c) los datos acerca de la distribución de las dimensiones de las partículas en la capa del material; d) los datos acerca de distribución de temperatura, etc [4].

La mayoría de los procesos no catalíticos en el sistema G-S se basan en reacciones químicas y transcurren a altas temperaturas. Los reactores químicos destinados para llevar a cabo tales procesos tienen particularidades características comunes y se llaman **hornos**.

El **horno industrial** es un aparato en que se produce el calor utilizado para el tratamiento térmico de los materiales sólidos directamente en el horno. El calor se desprende en el horno a costa de transformar la **energía eléctrica** en **térmica**. La peculiaridad de los hornos industriales consiste en que en un solo grupo se combinan el aparato de reacción (realización de proceso de producción determinado) y el dispositivo energético (desprendimiento y utilización del calor). De acuerdo con ello a los hornos industriales se plantean simultáneamente los requerimientos tecnológicos y energéticos. Al construir los hornos industriales modernos, se procura satisfacer los requisitos siguientes: 1) alta productividad; 2) transmisión

más intensiva del calor desde la fuente de energía hacia el materia a calentar, el producto o la mezcla de reacción; 3) coeficiente más alto de utilización de calor, reduciendo al mínimo las pérdidas de calor y empleando diferentes procedimientos de regeneración del calor; 4) rendimiento máximo de los productos con alta calidad de los mismos; 5) estructura sencilla y resistente; 6) funcionamiento estable; 7) mecanización y automatización del trabajo del horno.

Los hornos eléctricos se emplean en los procesos electrotérmicos en que altas temperaturas (hasta 3500°C) se obtienen transformando la energía eléctrica en térmica. En los hornos eléctricos se usa principalmente la corriente eléctrica alterna de 50 a 130 V. La cantidad de calor desprendido (J), se calcula por la ley de Joule:

$$Q = I\nu\tau,$$

donde I es la intensidad de corriente, A; τ , el tiempo, h y ν , la tensión, V.

Si es necesario calcular la resistencia R del conductor que emplea o la longitud l del mismo se usa la ley de Ohm:

$$\nu = IR$$

y por consiguiente,

$$Q = I^2R\tau,$$

donde

$$R = \rho \frac{l}{S};$$

ρ es la resistencia específica del conductor, $\Omega \cdot \text{mm}^2/\text{m}$, y S, el área de sección transversal del conductor, mm^2 .

ALGUNAS DIFICULTADES TECNICAS A CONSIDERAR.

Debido a que los desperdicios que consisten principalmente de plásticos tienen diferentes propiedades de manejo, la pirólisis de plásticos requiere equipo especializado. Los siguientes problemas son encontrados en la pirólisis de plásticos:

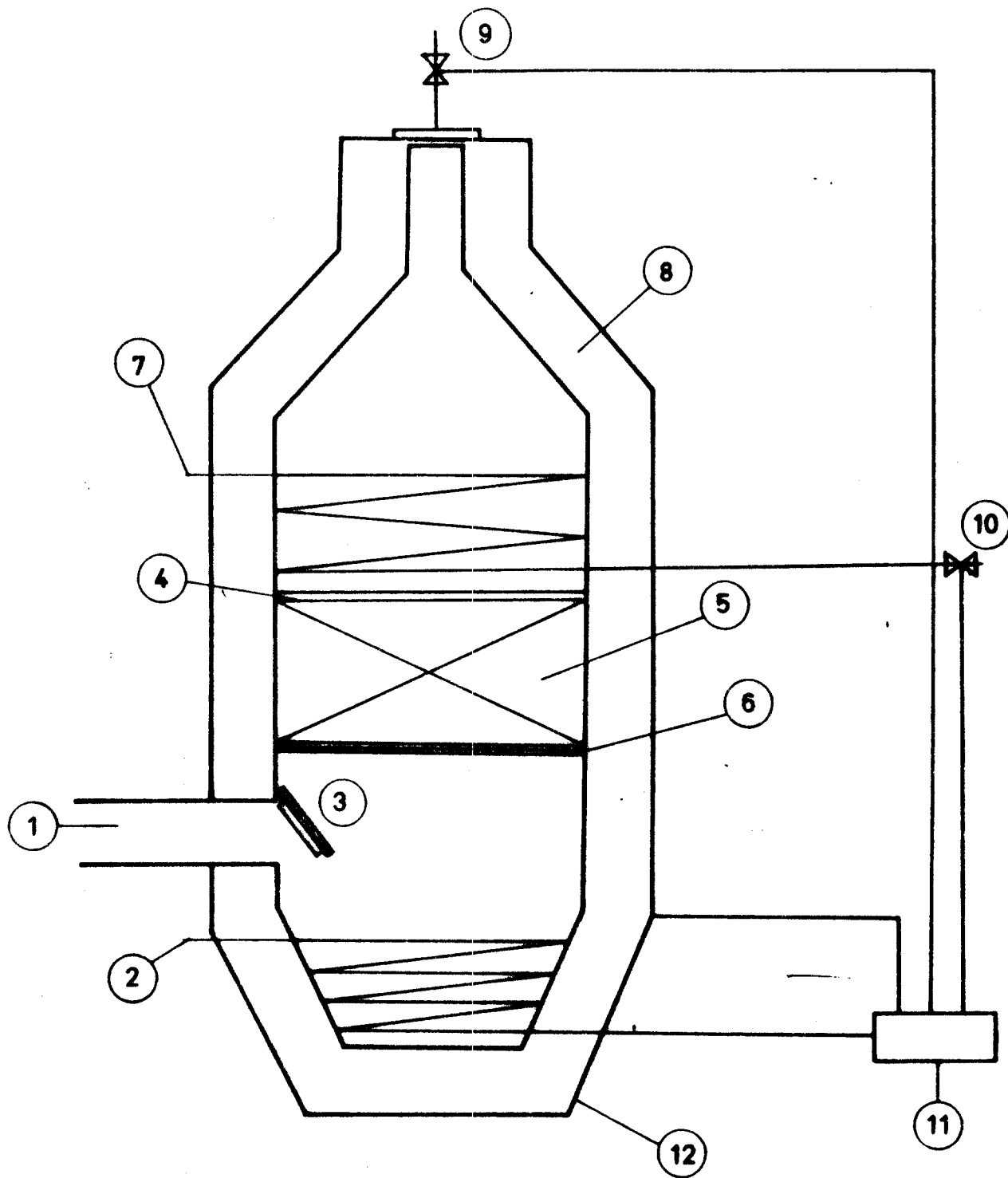
1) Como los plásticos tienen una conductividad térmica pobre, se requiere un largo tiempo antes de que se alcance la descomposición térmica, lo que resulta en una capacidad de procesamiento pequeña comparada con las dimensiones del aparato de pirólisis.

2) Los residuos de carbón tienen tendencia a adherirse a las paredes del reactor de pirólisis y usualmente es difícil descargarlo continuamente.

3) Muchos tipos de plásticos al fundirse producen material altamente viscoso que es difícil de transportar.

REACTOR DE PIROLISIS DE POLIESTIRENO

Para la pirólisis de poliestireno se propone un reactor electrotérmico, cuyos elementos fundamentales se muestran en el diagrama adjunto. La descripción del reactor es cualitativa, pues el diseño mecánico está fuera del alcance de éste trabajo. A continuación se enumeran las partes señaladas en el diagrama.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA.

LABORATORIO DE DISEÑO Y PROCESOS

REACTOR DE PIROLISIS DE POLIESTIRENO

DIBUJO:

OMAR GALAN DOMINGO

ESCALA:

SIN ESCALA

- 1.- Entrada de poliestireno al reactor.
- 2.- Resistencia eléctrica de calentamiento.
- 3.- Compuerta que sella el reactor después de que es cargado.
- 4.- Distribuidor de condensados pesados.
- 5.- Sección empacada de anillos de porcelana.
- 6.- Malla de retención de empaque.
- 7.- Condensador de volátiles más pesados.
- 8.- Relleno aislante.
- 9.- Válvula de control de salida de productos gaseosos ligeros.
- 10.- Válvula de control de agua de enfriamiento.
- 11.- Panel de control.
- 12.- Coraza de acero.

La operación del reactor es semi-continua con respecto a la carga de poliestireno, pero la salida de los productos es continua. En la descomposición del poliestireno, como se mencionó en la sección 1.5, se forman dímeros y trímeros de estireno, que son productos no deseados; por lo que son condensados y puestos en contacto con los gases provenientes del fondo del reactor (análogo a una columna de destilación) para que los componentes más pesados, ya empobrecidos de compuestos más volátiles, se pongan en contacto otra vez con la resistencia eléctrica.

Se dispone de un sistema de control para la temperatura, presión (por medio de un diafragma), corriente eléctrica, flujos de agua de enfriamiento y salida de productos. Las dimensiones propuestas para el reactor ver apéndice B.

5.1.- DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO.

Ver diagrama adjunto.

Balances de materia y energía, ver apéndice B.

5.2.- LISTA DE EQUIPO.

El cálculo de las dimensiones de las áreas de intercambiadores de calor, del diámetro y la altura de la columna aparecen en el apéndice A. Además se dan las razones heurísticas que llevaron a la selección de las bombas [1], [3], [7], [8], [9], [16].

✓MOLINO DE CORTADORAS ROTATORIAS, C-408.

Flujo, 0.277 Kg/s.

Costo, 11250.00 USD.

HORNO DE ELIMINACION DE IMPUREZAS, B-410.

Volumen, 3.0 m³.

Temperatura máxima de operación, 773 K.

Costo, 7500.00 USD.

REACTOR DE PIROLISIS, B-510.

Volumen, 5.0 m³.

Radio, 0.5 m.

Altura, 6.36 m.

Temperatura máxima de operación, 1273 K.

EQUIPO DE TRANSFERENCIA DE CALOR, E-512, E-711,E-709.

CONDENSADOR, E-512.

Area, 69.41 m².

Costo, 22500.00 USD.

CONDENSADOR, E-711.

Area, 10.0 m².

Costo, 16500.00 USD.

REHERVIDOR, E-709.

Area, 8.0 m².

Costo, 18000.00 USD.

COLUMNA DE DESTILACION, D-710.

COLUMNA SIN EMPAQUE.

Altura, 13.0 m.

Diámetro, 2.0 m.

Costo, 16950.00 USD.

EMPAQUE.

Costo, 10000.00 USD, (Porcelana).

5.3.- LISTA DE EQUIPO AUXILIAR.

✓ **TRANSPORTADOR DE BANDA ARTICULADA, J-407.**

Distancia de traslación, 10.0 m.

Ancho de banda, 2.0 m.

Costo, 10200.00 USD.

TRANSPORTADORES DE TORNILLO, J-409, J-412.

Distancia de traslación, 10.0 m.

Diámetro, 0.46 m.

Costo, 14700.00 USD, c/u.

RECIPIENTES DE ALMACENAMIENTO, F-513, F-712, F-716, OTROS.

RECIPIENTES PARA ALMACENAR LIQUIDOS.

Volumen, 5.0 m³.

Costo, 16500.00 USD, c/u.

Cantidad, 3.

RECIPIENTE PARA ALMACENAR GAS.

Volumen, 10.0 m³.

Costo, 15000.00 USD.

5.4.- LISTA DE BOMBAS Y VALVULAS.

BOMBAS CENTRIFUGAS, L-514, L-714, L-718.

BOMBAS CENTRIFUGAS DE ALEACION DE NIQUEL.

Potencia de eje, 1.0 KW.

Costo, 3000.00 USD, c/u.

Cantidad, 5. (2 son para los condensadores).

VALVULAS, K-511, K-514, K-515, K-516, K-719, K-713, K-715, K-717 Y

ACCESORIOS.

Costo unitario (válvula), 37.50 USD.

Cantidad, 8.

Costo unitario (accesorio), 10.00 USD.

Cantidad, 12.

5.5.- ESPACIO NECESARIO, UBICACION Y COSTO.

La planta tiene una superficie total de 10,000 m², que es demasiado para el tamaño del proceso, pero se proyecta que para años posteriores debido a la escasez de hidrocarburos, se aumente la capacidad de reciclaje y con esto el espacio físico necesario. El espacio de manera inicial se distribuirá de la siguiente forma:

- 1.- Patio para acumular poliestireno, (40.0m x 25.0m), 1000.0 m².
- 2.-Espacio ocupado por el equipo, (72.0m x 40.0m), 2880.0 m².
- 3.- Oficinas, (23.1m x 20.0m), 462.0 m².
- 4.- Taller (torneria, mecánico), (26.4m x 20.0m), 528.0 m².
- 5.- Cambiadores y comedor, (29.7m x 13.2m), 392.04 m².
- 6.- Areas de tránsito, 1895.18 m².
- 7.- Areas verdes, 2842.776 m².

La ubicación se plantea en la delegación Iztapalapa, donde el costo de un terreno de esta superficie tiene un monto de 166,000.00 USD, aproximadamente 16.6 USD/m² (~ \$50,000.00 M.N./m²).

6.- PERSONAL NECESARIO: NUMERO Y SUELDO ANUAL.

La distribución del personal de planta (ver recuadro más abajo) se escogió empíricamente, considerando las partes esenciales del proceso; como se trata de una planta experimental, se requiere supervisión constante por parte de todo el personal.

AREA - EQUIPO	PERSONAS ASIGNADAS
BANDA TRANSPORTADORA Y CARGA DE POLIESTIRENO	2
MOLINO DE ASPAS CORTADORAS	1
HORNO DE ELIMINACION DE AGUA Y COMPUESTOS ORGANICOS	1
REACTOR DE PIROLISIS	2
BOMBAS CENTRIFUGAS, TORNILLOS TRANSPORTADORES, VALVULAS Y PANEL DE CONTROL	2
COLUMNA DE DESTILACION	2

✓ Los sueldos se asignarían según la capacitación técnica y la labor desempeñada, teniendo como límite mínimo el establecido por la ley. En la siguiente tabla aparecen los sueldos que se consideraron adecuados, en base a la oferta de mano de obra existente en el país.

OCUPACION	NUMERO	SUELDO (USD/AÑO)
GERENTE	1	18,000.00
CONTADOR	1	9,000.00
ING. QUIMICO	1	12,000.00
VENDEDOR	1	9,000.00
SECRETARIA	1	5,400.00
OPERADORES	10	5,400.00 c/u
MANTENIMIENTO	2	5,400.00 c/u
TOTAL	17	112,800.00

✓ 7.- INVERSION TOTAL.

7.1.- INVERSION FIJA.

En este punto solo se incluirán el costo del equipo y del terreno en donde se ubicará la planta.

	INVERSION (USD)
EQUIPOS	228,700.00
TERRENO	166,000.00
SUB-TOTAL	394,700.00
TOTAL	434,170.00

✓ 7.2.- CAPITAL DE TRABAJO.

GASTOS	CANTIDAD (USD)
SUELDOS A EMPLEADOS	112,800.00
COMPRA DE MATERIA PRIMA	292,000.00
SERVICIOS EXTERNOS	60,000.00
CAPITAL DE TRABAJO	464,800.00

CAPITAL DE TRABAJO PARA UN AÑO.

✓ 7.3.- BALANCES PROFORMA.

Los gastos por servicios incluyen: mantenimiento y reparaciones, y suministros de operación; el de impuesto incluye: impuestos locales y derechos de patentes.

GASTOS	CANTIDAD (USD/AÑO)
MATERIA PRIMA	- 292,000.00
SERVICIOS	- 60,000.00
SUELDOS	- 112,800.00
GANANCIA ANUAL	+ 900,000.00
IMPUESTOS	- 360,000.00
GANANCIA NETA	+ 75,200.00

La ganancia está basada en la producción anual de estireno, sin incluir las ventas de los subproductos (etileno y benceno).

✓ 7.4.- TASA DE RETORNO.

	CANTIDAD (USD)
CAPITAL TOTAL INVERTIDO	434,170.00
GANANCIA NETA ANUAL	39,200.00
TASA DE RETORNO	11.075 AÑOS

La inversión total se recupera aproximadamente en once años, pero las posibles ventas de etileno y benceno pueden disminuir este plazo.

✓ REFERENCIAS

- ✓ [1] Ulrich, G.D., *Procesos de Ingeniería Química*, Ed. Interamericana (1988).
- ✓ [2] Meyer, L., Tegeder, F., *Métodos de la Industria Química*, Vol. I y II, Ed. Reverté, S.A. (1987).
- ✓ [3] Perry, H.R., Chilton, C.H., *Manual del Ingeniero Químico*, Vol. I y II, Quinta Ed. McGraw-Hill (1987).
- ✓ [4] Mujlionov, I.P., Averbuj, A.YA., *Tecnología Química General*, Vol. I y II, Ed. Mir Moscú (1985).
- ✓ [5] Leidner, J. *Plastic Waste*, Marcel Dekker Inc., (1981).
- [6] Rudin, A. *The Elements of Polymer Science and Engineering*, Ed. Academic Press (1982).
- [7] Incropera, F. *Introduction to Heat Transfer*, Ed. Wiley & Sons (1985).
- [8] Judson, K.C., *Procesos de Separación*, Ed. Repla (1988).
- ✓ [9] Henley, E.J., Seader, J.D., *Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química*, Ed. Repla (1990).
- ✓ [10] Potts J., E., Clendinning R., A., *Polymers and Ecological Problems*, Plenum Press, New York (1973), pp. 61-81.

- [11] Seinfeld H., J., *Air Pollution*, McGraw-Hill (1972), pp. 52-94.
- [12] Dennison, M., *Plastics: A Reusable Resource*, Shell Co., September 1990.
- [13] Center for Plastics Recycling Research, *Market Research on Plastics Recycling*, Technical Report #31, 1990.
- [14] Brown, J., *Plastics News* (1991).
- ✓[15] White, J.A., et al. *Principles of Engineering Economic Analysis*. John Wiley & Sons. N.Y. (1976).
- [17] Yen, T.F. *Recycling and Disposal of Solid Wastes*. Ann Arbor Science. (1974).
- ✓[18] Secretaría de Comercio y Fomento Industrial de Estadística e Informática. *reporte de Importaciones y Exportaciones*. Agosto, 1989.

CRITERIOS Y CALCULOS DE DISEÑO DE EQUIPOS

DISEÑO DE INTERCAMBIADORES DE CALOR

(CONDENSADORES Y REHERVIDORES)

El procedimiento para el diseño preliminar de intercambiadores de calor requiere los siguientes pasos: a) selección del tipo de intercambiador, b) especificaciones de carga, c) determinación de la fuerza impulsora de la temperatura, d) coeficientes globales de transferencia de calor, e) cálculo del área de transferencia de calor.

Selección del tipo de intercambiador. Existen criterios heurísticos [], para determinar el tipo de intercambiador a escoger, y la información requerida para dicha selección es: a) fluidos corrosivos, b) presión de operación, c) fluidos incrustantes, d) fluidos muy viscosos.

Especificaciones de Carga. Con el balance de energía en estado estacionario se determina de manera sencilla la carga térmica con la siguiente relación:

$$\dot{Q} = \dot{m}(h_2 - h_1),$$

en donde \dot{Q} es el calor transferido a través de la pared del intercambiador por unidad de tiempo, o su carga, y h_1 , h_2 son las entalpías específicas de entrada y salida.

Determinación de la fuerza impulsora de la temperatura. A menudo se emplea la relación:

$$\dot{Q} = UA(\Delta T)_m,$$

donde U es el coeficiente global de transferencia de calor, A es el área de intercambio de calor y $(\Delta T)_m$ es la diferencia media logarítmica de temperaturas, que se define de la siguiente manera:

$$(\Delta T)_m = \frac{(\Delta T)_1 - (\Delta T)_2}{\ln \left[\frac{(\Delta T)_1}{(\Delta T)_2} \right]},$$

ésta relación es válida bajo las siguientes condiciones: a) el sistema debe encontrarse en estado estacionario, b) el coeficiente global de transferencia de calor debe ser constante a través de todo el intercambiador y c) No debe haber cambio de fase.

La restricción (c) que limita el uso de esta relación para el caso de condensadores ha llevado a una expresión análoga para el caso en que existen cambios de fase, la relación es:

$$(\Delta T)_m' = \frac{(\Delta T)'_1 - (\Delta T)'_2}{\ln \left[\frac{(\Delta T)'_1}{(\Delta T)'_2} \right]}$$

donde $(\Delta T)'_1$ es la diferencia de los puntos de rocío y $(\Delta T)'_2$ es la diferencia de los puntos de burbuja de las corrientes de entrada (1) y salida (2).

Coefficientes globales de transferencia de calor. El coeficiente global de transferencia de calor se calcula con la relación:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_{o,f}} + \frac{D_o \ln(D_o/D_i)}{2*k} + \frac{D_o}{D_i h_i} + \frac{D_o}{D_i h_{i,f}}$$

El coeficiente global de transferencia de calor U es un término compuesto, incluye los coeficientes de película interno y externo (h_i y h_o), la resistencia de la pared de separación (generalmente metal) y los coeficientes de incrustaciones ($h_{i,f}$ y $h_{o,f}$).

Es importante mencionar que para fines de brevedad en cálculos preliminares es posible utilizar valores de U, determinados para algunos sistemas [].

Cálculo del área de transferencia de calor. El área de intercambio de calor necesario se obtiene de manera sencilla por un simple despeje de la relación mostrada en (c), la cual es:

$$A = \frac{\dot{Q}}{U (\Delta T)_m}$$

COLUMNAS DE DESTILACION EMPACADAS

Para el diseño de columnas de destilación nos enfocaremos en calcular el diámetro y la altura de ésta.

ALTURA DE LA COLUMNA

Para columnas empacadas la altura se calcula por medio de la relación:

CALCULO DE POTENCIA DE BOMBAS

De la ecuación de la conservación de la energía mecánica se deduce una relación que permite calcular la potencia de una bomba, la cual es:

$$\dot{w}_s = \frac{\dot{q} \Delta p}{\epsilon_1}$$

donde \dot{q} es el flujo volumétrico, Δp la caída de presión y ϵ_1 la eficiencia de la bomba.

CALCULOS DE LAS DIMENSIONES DEL EQUIPO

Los cálculos de cambios de entalpía, temperaturas de salida, burbuja y rocío, además de la potencia de las bombas fueron determinados en el programa de cómputo de (****, UNAM).

(Ejemplo). AREA DEL CONDENSADOR E-512.

Calor a eliminar: 468805.55 J/s (1687.70 x 10⁶ J/h)

Coefficiente U: 85.0 W/m²·K

Las diferencias de temperaturas en la entrada, $\Delta T_1' = 74.53$ K y la de salida $\Delta T_2' = 83.35$ K, que son utilizadas para calcular el $\Delta T_m'$ cuando hay cambio de fase en el intercambiador de calor.

$$\Delta T_m' = \frac{74.53 - 83.35}{\ln \left[\frac{74.53}{83.35} \right]} = 79.45 \text{ K,}$$

$$A = \frac{468805.55}{85.0(79.45)} = 69.41 \text{ m}^2$$

DIAMETRO Y ALTURA DE LA COLUMNA DE DESTILACION.

El número de de etapas teóricas (N), se determinó en un diagrama de McCabe-Thiele con una volatilidad relativa de $\alpha = 2.0$, cuyo resultado fue de $N = 15$. Como se mencionó anteriormente se requiere el cálculo de la velocidad superficial, para obtener el diámetro de la columna.

Para utilizar las correlaciones mencionadas, se requiere el cálculo de las siguientes cantidades: densidad promedio del gas y el líquido, masa molecular promedio.

Cálculo de la densidad promedio.

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\rho_i}$$

donde x_i es la fracción másica de componente i , y ρ_i su densidad.

$$\frac{1}{\bar{\rho}_L} = \frac{0.5}{0.903} + \frac{0.5}{0.879} = 1.121 \Rightarrow \bar{\rho}_L = 0.892 \text{ g/cm}^3$$

para la faese gaseosa la densidad se calcula bajo suposición de que la fase

vapor se comporta como gas ideal.

$$\bar{\rho}_g = \frac{\bar{M} \cdot P}{R \cdot T} = \frac{(89.26)(1.0)(1.0)}{(384.76)(0.0821)(1000.0)} \Rightarrow \bar{\rho}_g = 2.825 \times 10^{-3} \text{ g/cm}^3$$

Cálculo de masa molecular promedio.

$$\frac{1}{\bar{M}} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{M_i}$$

donde x_i es la fracción másica del componente i , y M_i su masa molecular.

$$\frac{1}{\bar{M}} = \frac{0.5}{104.14} + \frac{0.5}{78.11} \Rightarrow \bar{M} = 89.26 \text{ g/mol}$$

Cálculo de la velocidad superficial

$$u_{s,g} = 0.08 \left[\frac{0.892 - 2.825 \cdot 10^{-3}}{2.825 \cdot 10^{-3}} \right]^{-1/2} \Rightarrow u_{s,g} = 0.70 \text{ m/s}$$

Cálculo del diámetro de la columna.

$$D = \left[\frac{4.0(1.749)(89.26)}{(3.1416)(2.825)(0.70)} \right]^{1/2} \Rightarrow D = 7.03 \text{ m !}$$

El diámetro obtenido con la correlación es extremadamente grande para una separación de esta naturaleza, pero lo tomaremos como un margen de seguridad o sobre-diseño.

Cálculo de HETP.

$$\text{HETP} = 0.5 \cdot D^{0.3} = 0.5(7.03)^{0.3} = 0.89 \text{ m.}$$

Cálculo de la altura.

$$H_a = N \times \text{HETP} = (15)(0.89) \approx 13 \text{ m.}$$

Para el diseño de la columna de destilación se tomará un diámetro de 2.0 m (diferente al estimado), pero la altura parece razonable $h = 13 \text{ m}$.

DIMENSIONES DEL REACTOR DE PIROLISIS

El diseño del reactor de pirólisis involucra tanto ideas de destilación como de reactores tubulares y hornos. El diámetro se escoge de tal manera que se eviten gradientes de temperatura radialmente como en el caso de los reactores tubulares(***). Se posee una sección de contacto gas-líquido análogo a una columna de destilación empacada para enriquecimiento de la fase gas en volátiles ligeros (***). La altura se determina de tal manera que permita colocar el intercambiador de calor, la sección empacada y en el fondo la resistencia eléctrica de calentamiento. Se estima que las siguientes cantidades escogidas heurísticamente son adecuadas para un cálculo preliminar del costo del reactor. Las dimensiones son: radio 0.5 m, altura 6.36 m, para el cual el reactor (cilíndrico) tendría un volumen de 5.0 m^3 .

$$H_a = N \times \text{HETP}$$

donde H_a es la altura de la columna, N el número de etapas teóricas requeridas y HETP la altura equivalente de un plato teórico. Los valores de HETP de las torres comerciales caen dentro de un intervalo estrecho, por lo que se recomiendan [1] valores aproximadamente iguales a la altura de los platos, dados por la expresión:

$$\text{HETP} = 0.5 D^{0.3}$$

donde D es el diámetro de la columna. Esta es una buena regla para destilación.

DIAMETRO DE LA COLUMNA

El diámetro de la columna empacada puede determinarse por medio de la siguiente fórmula, si se dispone de la velocidad superficial del gas.

$$D = \left[\frac{4 V M_g}{\pi \rho_g u_{s,g}} \right]^{1/2}$$

donde

$$u_{s,g} = K_{SB} \left[\frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_g} \right]$$

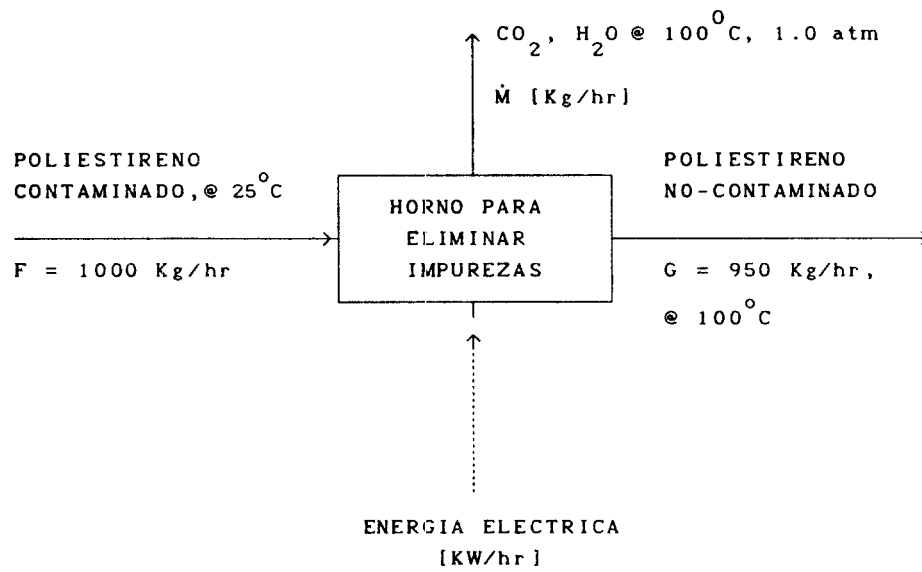
donde V es el flujo de gas (mol/s), M_g peso molecular del gas (kg-mol), ρ_g la densidad del gas, ρ_l la densidad del líquido, $u_{s,g}$ es la velocidad de operación superficial. El valor recomendado para K_{SB} está en el rango de 0.04 a 0.08 m/s.

APENDICE B.

BALANCES DE MATERIA Y ENERGIA EN LOS EQUIPOS

HORNO DE ELIMINACION DE IMPUREZAS

DESCRIPCION ESQUEMATICA:



ENTRADA.

Temperatura, T = 25°C.

Presión, P = 1.0 atm.

F = 1000 Kg Poliestireno Contaminado/hr.

E = Energía Eléctrica, KW/hr.

SALIDA.

Temperatura, $T = 100^{\circ}\text{C}$.

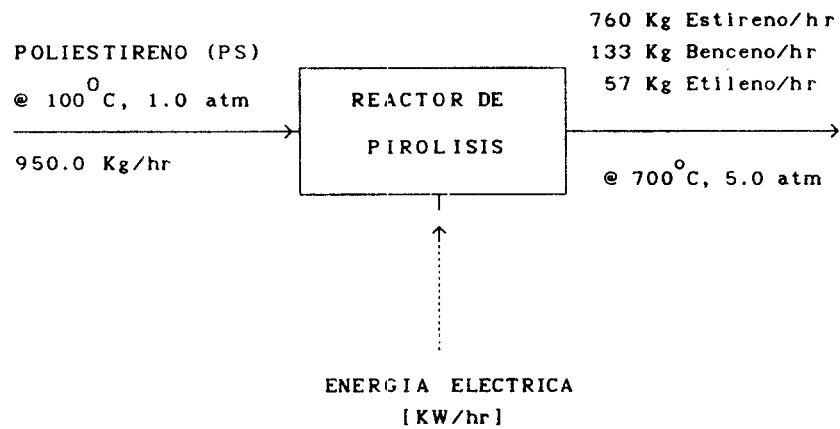
Presión, $P = 1.0 \text{ atm}$.

$G = 950 \text{ Kg Poliestireno/hr}$.

$M = 50 \text{ Kg CO}_2, \text{ H}_2\text{O/hr}$.

REACTOR DE PIROLISIS

DESCRIPCION ESQUEMATICA:



ENTRADA.

950.0 Kg de Poliestireno/hr.

Energía Eléctrica, KW/hr.

SALIDA.

760.0 Kg de Estireno/hr.

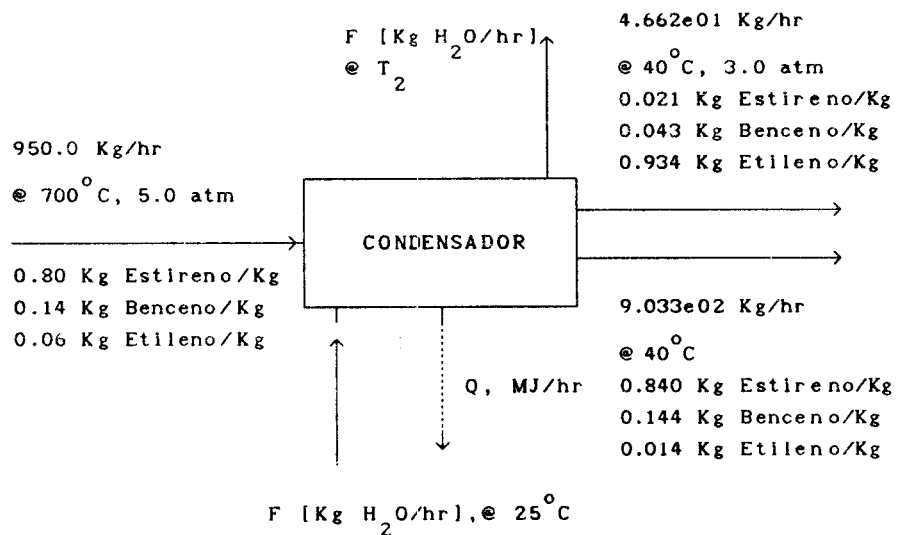
133.0 Kg de Benceno/hr.

57.0 Kg de Etileno/hr.

Entalpia, $\dot{H} = 3.05e03$ MJ/hr.

CONDENSADOR

DESCRIPCION ESQUEMATICA:



CONDICIONES DE ENTRADA.

Estado = Vapor Sobrecalentado.

Temperatura, T = 700°C.

Presión, P = 5.0 atm.

Flujo, M = 950 Kg/hr.

Composición:

X_s = 0.8 Kg Estireno/Kg.

X_B = 0.14 Kg Benceno/Kg.

$$X_E = 0.06 \text{ Kg Etileno/Kg.}$$

$$\text{Entalpia, } H = 3.05e03 \text{ MJ/hr.}$$

CONDICIONES DE SALIDA.

Estado = Líquido - Vapor.

Temperatura, $T = 40^\circ\text{C.}$

Presión, $P = 3.0 \text{ atm.}$

Flujo, $M = 950 \text{ Kg/hr.}$

VAPOR:

Composición:

$$Y_s = 0.021 \text{ Kg Estireno/Kg.}$$

$$Y_B = 0.043 \text{ Kg Benceno/Kg.}$$

$$Y_E = 0.934 \text{ Kg Etileno/Kg.}$$

$$\text{Flujo, } V = 4.662E01 \text{ Kg/hr.}$$

$$\text{Entalpia, } H_v = 3.842e02 \text{ MJ/hr.}$$

LIQUIDO.

Composición.

$$X_s = 0.840 \text{ Kg Estireno/Kg.}$$

$$X_B = 0.144 \text{ Kg Benceno/Kg.}$$

$$X_E = 0.014 \text{ Kg Etileno/Kg.}$$

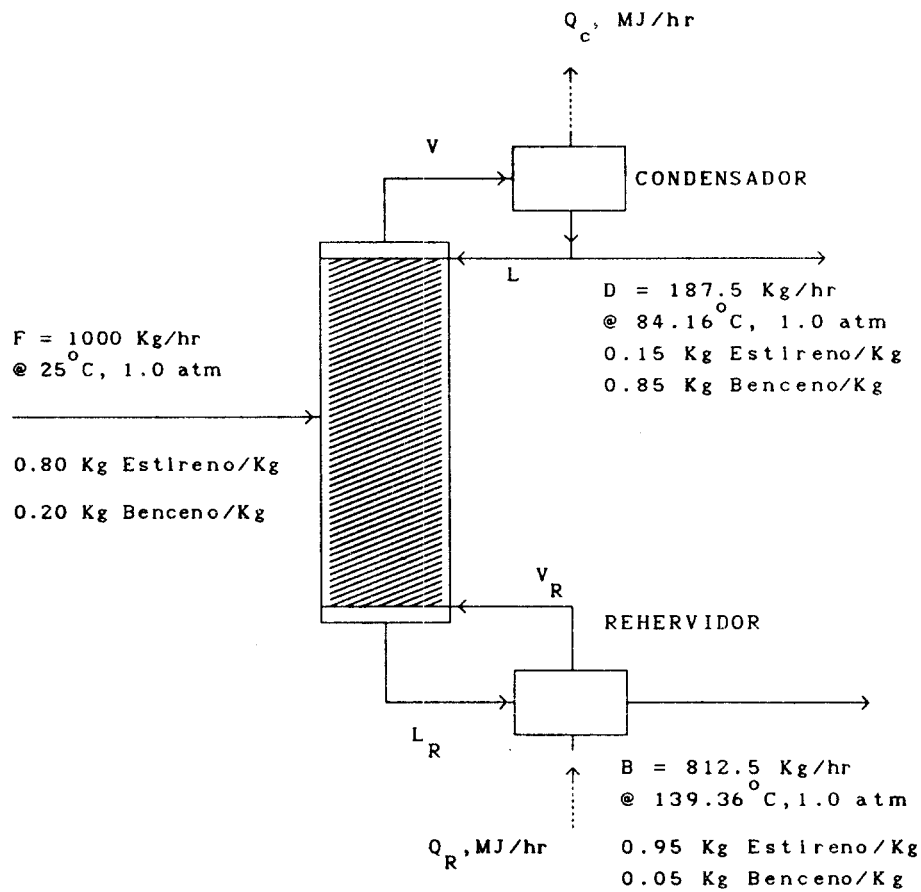
$$\text{Flujo, } L = 9.033e02 \text{ Kg/hr.}$$

$$\text{Entalpia, } H_L = 9.801e02 \text{ MJ/hr.}$$

$$\text{CALOR A ELIMINAR, } Q = -1687.7011 \text{ MJ/hr.}$$

COLUMNA DE DESTILACION

DESCRIPCION ESQUEMATICA:



CONDICIONES DE ENTRADA.

Estado, Líquido Subenfriado

Temperatura, $T = 25^\circ\text{C}$.

Presión, $P = 1.0 \text{ atm}$.

Flujo, $F = 1000 \text{ Kg/hr.}$

Entalpia, $H = 9.32e02 \text{ MJ/hr.}$

CONDICIONES DE SALIDA.

CONDICIONES EN EL DOMO.

ENTRADA EN EL CONDENSADOR.

Estado, Vapor Saturado

Temperatura, $T = 99.07^\circ\text{C.}$

Presión, $P = 1.0 \text{ atm.}$

Flujo de Vapor, $V = 562.2 \text{ Kg/hr.}$

Composición:

0.15 Kg Estireno/Kg.

0.85 Kg Benceno/Kg.

Entalpia, $H = 6.76e02 \text{ MJ/hr.}$

SALIDA DEL CONDENSADOR.

DESTILADO.

Estado, Líquido Saturado.

Temperatura, $T = 84.16^\circ\text{C.}$

Presión, $P = 1.0 \text{ atm.}$

Flujo, $D = 187.5 \text{ Kg/hr.}$

Composición:

0.15 Kg Estireno/Kg.

0.85 Kg Benceno/Kg.

Entalpia, $H = 1.48e02 \text{ MJ/hr.}$

LIQUIDO REFLUJADO.

Estado, Líquido Saturado.

Temperatura, $T = 84.16^{\circ}\text{C}$.

Presión, $P = 1.0 \text{ atm}$.

Flujo, $L = 375.0 \text{ Kg/hr}$.

Composición:

0.15 Kg Estireno/Kg.

0.85 Kg Benceno/Kg.

Entalpia, $2.96e02 \text{ MJ/hr}$.

CONDICIONES EN EL FONDO.

ENTRADA AL REHERVIDOR.

Estado, Líquido Saturado.

Temperatura, $T = 129.8^{\circ}\text{C}$.

Presión, $P = 1.0 \text{ atm}$.

Flujo, $L_R = 1187.0 \text{ Kg/hr}$.

Composición:

0.9 Kg Estireno/Kg.

0.1 Kg Benceno/Kg.

Entalpia, $1.37e03 \text{ MJ/hr}$.

SALIDA DEL REHERVIDOR.

RETORNO A LA SECCION DE AGOTAMIENTO.

Estado, Vapor Saturado.

Temperatura, 139.36°C .

Presión, $P = 1.0 \text{ atm}$.

Flujo, $V_R = 374.5 \text{ Kg/hr.}$

Composición:

0.82 Kg Estireno/Kg.

0.18 Kg Benceno/Kg.

Entalpia, $1.58e03 \text{ MJ/hr.}$

FONDO.

Estado, Líquido Saturado.

Temperatura, $T = 139.36^\circ\text{C.}$

Presión, $P = 1.0 \text{ atm.}$

Flujo, $B = 812.5 \text{ Kg/hr.}$

Composición:

0.95 Kg Estireno/Kg.

0.05 Kg Benceno/Kg.

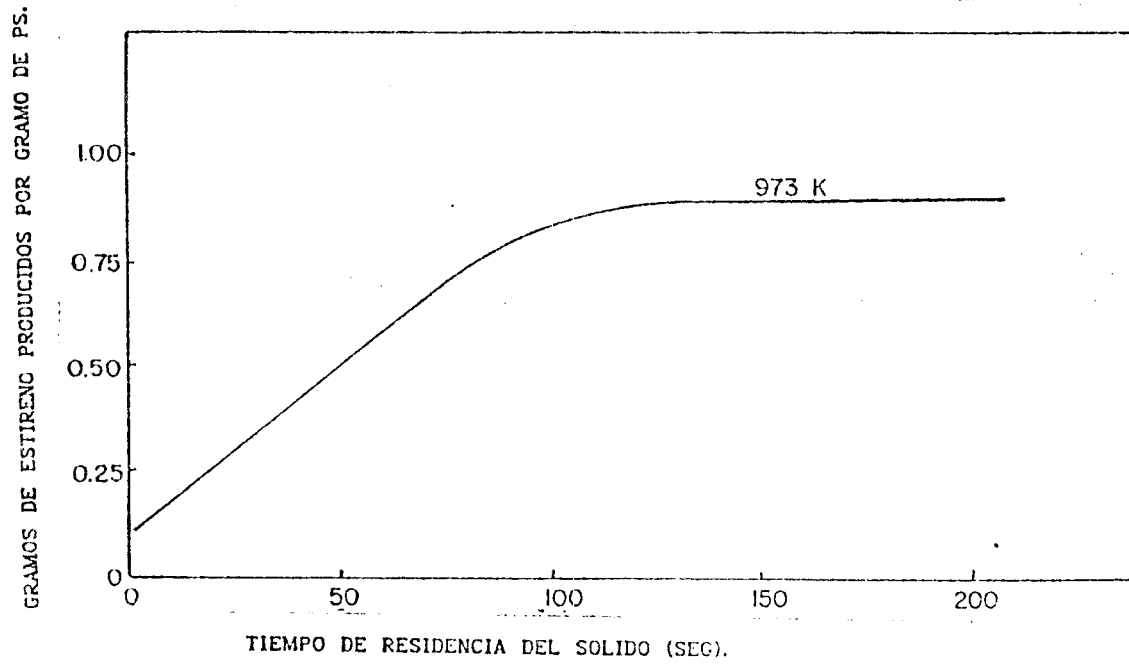
Entalpia, $8.0e02 \text{ MJ/hr.}$

REQUERIMIENTOS ENERGETICOS.

CALOR A ELIMINAR, $Q_c = - 232.0 \text{ MJ/hr.}$

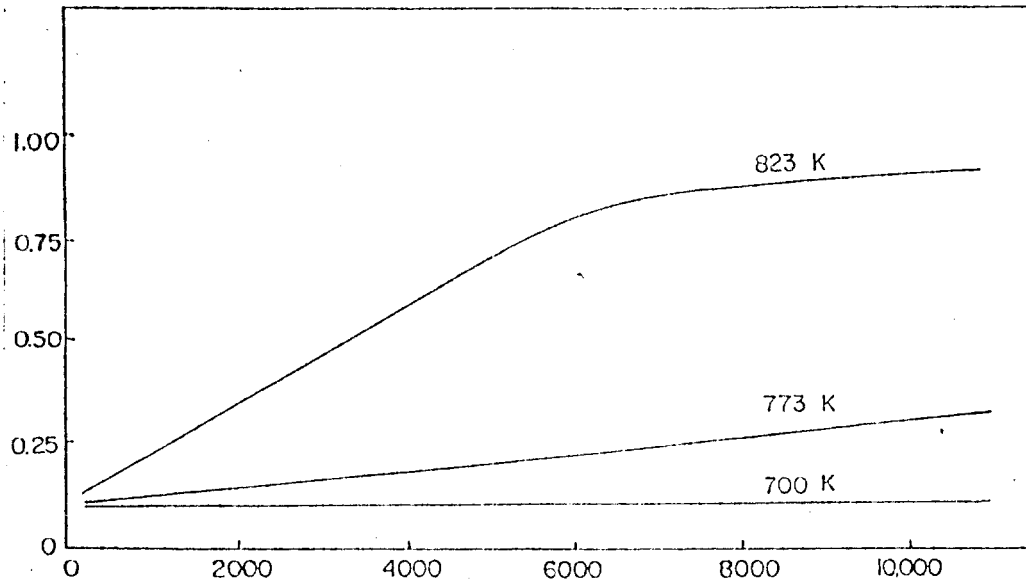
CALOR A SUMINISTRAR, $Q_R = + 1005.0 \text{ MJ/hr.}$

CINETICA DE FORMACION DE ESTIRENO A 973 K.



CINETICA DE FORMACION DE ESTIRENO A 700, 773 Y 823 K.

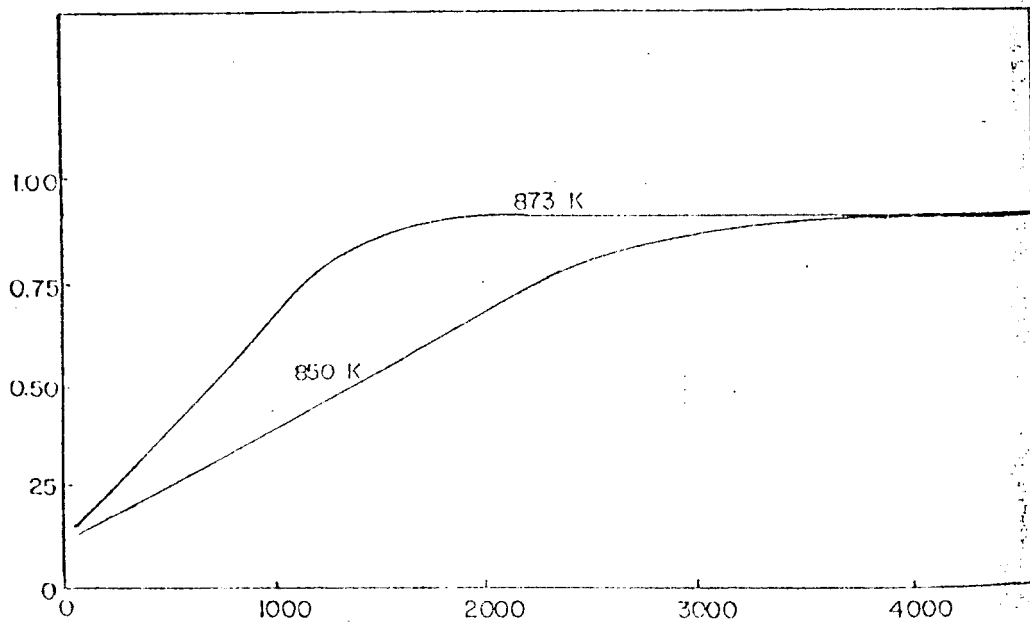
GRAMOS DE ESTIRENO PRODUCIDOS POR GRAMO DE PS.



TIEMPO DE RESIDENCIA DEL SOLIDO (SEG.)

CINETICA DE FORMACION DE ESTIRENO A 850 Y 873 K.

GRAMOS DE ESTIRENO PRODUCIDOS POR GRAMO DE PS.



TIEMPO DE RESIDENCIA DEL SOLIDO (SEG.)

PERFILES DE CONCENTRACION EN COLUMNAS EMPACADAS

UTILIZANDO ADAPTACION DE MALLA*.

*** PUBLICADO EN EL TALLER DE MATEMATICAS EN INGENIERIA QUIMICA. VI COLOQUIO
DEL DEPARTAMENTO DE MATEMATICAS. CENTRO DE INVESTIGACION Y DE ESTUDIOS
AVANZADOS DEL IPN.**

**PERFILES DE CONCENTRACION EN COLUMNAS EMPACADAS
UTILIZANDO ADAPTACION DE MALLA**

Galán, D.O., Alvarez, J.J., Martinez, V.C.

Depto. de Ingeniería de Procesos e Hidráulica

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Apartado Postal 55-534. México, D.F. 09340

RESUMEN

En este trabajo se presenta un procedimiento para la simulación dinámica de columnas empacadas. Se utiliza la teoría de la doble película de transferencia de masa, y se introduce el efecto del retromezclado. Simultáneamente se desarrolla una manera de establecer automáticamente las Alturas de las Unidades de Transferencia. Se estudia el caso de una destilación binaria batch.

INTRODUCCION

Las columnas de separación empacadas han sido ampliamente utilizadas como un sistema de contacto líquido-gas principalmente en absorción y destilación. En comparación con los modelos hechos en sistemas por etapas, los sistemas empacados han recibido mucho menor atención. A pesar de que se

ha realizado un considerable esfuerzo orientado a la solución de problemas de columnas de destilación y absorbedores con platos, se ha dado poca atención a mejorar los procedimientos de cálculo para columnas empacadas. El diseño de columnas empacadas tradicionalmente se ha basado en el desarrollo de modelos de entrada-salida. Con esto se busca aprovechar los avances que se tienen para las columnas mencionadas. Esto implica ciertas suposiciones como el hecho de que la columna se puede subdividir en secciones en cada una de las cuales hay un mezclado perfecto. Esto lleva a introducir los conceptos de la Altura de la Unidad de Transferencia (HTU) y el Número de Unidades de transferencia (NTU), [1]. Debido a las simplificaciones involucradas en el desarrollo de éstas cantidades, la precisión es limitada.

Otro posible enfoque para diseñar estas columnas consiste en plantear las ecuaciones de transferencia de masa y energía en un elemento diferencial de la columna e integrarlas a lo largo de ella [2]. Las ecuaciones resultantes son ecuaciones en derivadas parciales no lineales. Este enfoque requiere conocer los coeficientes de transporte pero evita el introducir el concepto de eficiencia de etapa o de la Unidad de Transferencia.

En ambos enfoques muchas veces no se toma en cuenta el hecho de que el patrón de flujo es de considerable importancia y puede llegar a determinar la capacidad de separación de la columna. En el caso de columnas empacadas el retromezclado del líquido tiene un efecto importante sobre la eficiencia de la separación.

En este trabajo se presenta un método que permite tomar en cuenta como varían las Alturas de Unidad de Transferencia con el cambio en las condiciones de la columna, en particular con el retromezclado en ella. La

COLUMNA EMAPACADA CON RETROMEZCLADO

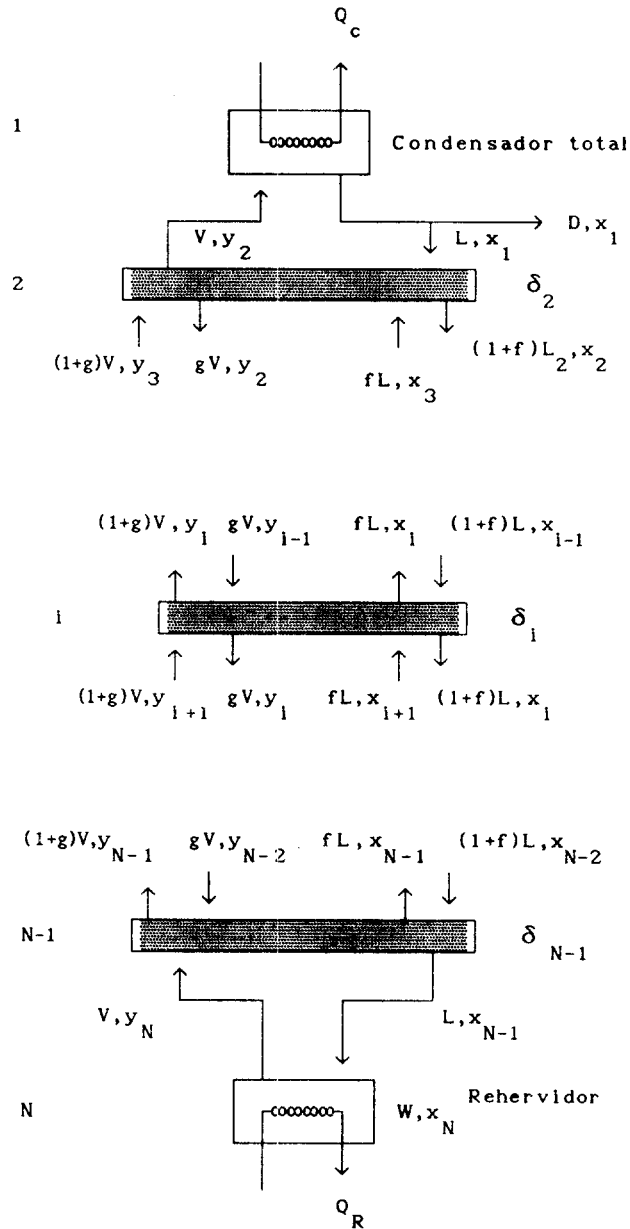


fig. 1

longitud de cada Unidad de Transferencia se actualiza por medio de un procedimiento de adaptación de malla [3].

DESARROLLO DE LAS ECUACIONES

En una columna empacada, el contacto entre las fases líquida y gas, se da en forma continua, y las composiciones y temperaturas varían continuamente a lo largo de ella. Generalmente, en el modelo de las columnas empacadas se supone que la columna se puede subdividir en elementos en cada uno de los cuales se asume que existe un mezclado perfecto, esto es, la composición, y temperatura son uniformes en cada uno de dichos elementos y a su vez iguales a los de las corrientes que salen de cada uno de ellos. También se asume que los coeficientes de transporte permanecen constantes en cada elemento. Si se supone que el líquido y vapor que salen de cada elemento se encuentran en equilibrio físico y térmico cada elemento resulta ser el análogo de una etapa de equilibrio. Así, la columna empacada se modela de forma análoga a una columna por etapas en base a balances entrada-salida. Esta forma de modelar lleva al concepto de Unidad de Transferencia. La expresión básica para calcular la altura de empaque, para la fase vapor es:

$$\int_{y_1}^{y_2} \frac{V}{K_G a A} \frac{dy}{y - y_e} = \int_{z_1}^{z_2} dz$$

donde el término $\frac{V}{K_G a A}$ se denomina la altura de la Unidad de Transferencia (HTU) y $\int_{y_1}^{y_2} \frac{dy}{y - y_e}$, denota el Número de Unidades de Transferencia (NTU) de manera que: Altura del Empaque = (HTU)(NTU).

En el procedimiento que se presenta en este trabajo la longitud de cada elemento, δ , se ajusta conforme se modifican las condiciones en la columna. Además se considera la posibilidad de que haya retromezclado de las corrientes que salen de cada elemento. Se definen coeficientes de retromezclado [4] f y g , como las fracciones de la masa actual o flujos molares que se mueven en contra de las corrientes principales y dan lugar al retromezclado.

Al formular el modelo deben aplicarse balances de materia y energía en la etapa con volumen ($A\delta$). Al aplicar los balances en la etapa, se obtendrá un modelo en diferencias finitas y así N de estas pseudo-etapas representan la columna.

Este modelo considera la existencia de una película que separa a la fase gas de la fase líquida y que en dicha película se presentan condiciones de equilibrio termodinámico. Se supone que los calores de vaporización de ambos componentes son aproximadamente iguales, lo que lleva a despreciar los efectos térmicos en la sección empacada. Además la columna se considera adiabática. Simultáneamente a los balances de materia se tendrá la relación de transferencia de masa dada por la ley de Fick.

Por tratarse de una destilación batch, se establece un modelo cuasi-estacionario que solo considera la dinámica en el rehervidor por ser la más lenta.

Modelo Matemático.

El modelo matemático de la sección empacada de una columna de destilación batch se desarrolla a continuación. La fig. 1 representa la columna empacada.

Existen secciones bien definidas: el condensador (total), la pseudo-etapa abajo del condensador, una sección empacada intermedia, el rehervidor y la pseudo-etapa arriba del rehervidor.

Balances de materia en el condensador.

Balance total.

$$y_2 - x_1 = 0$$

Por ser condensador total se tiene:

$$y_1 = 0$$

Balance de materia sección abajo del condensador.

Balance total por componente.

$$(1 + g)y_3 - (1 + g)y_2 = L/V \left[(1 + f)x_2 - x_1 - x_3 \right]$$

Balance en la fase líquida.

$$L \left[x_1 + fx_3 - (1 + f)x_2 \right] - K_G a (y_{2,e} - y_2) A \delta_2 = 0$$

Balance de materia en secciones intermedias.

Balance total por componente.

$$(1 + g)y_{i+1} + gy_{i-1} - (1 + 2g)y_i = L/V \left[(1 + f)(x_i - x_{i-1}) + f(x_i - x_{i+1}) \right]$$

Balance en el líquido.

$$L \left[(1 + f)(x_i - x_{i-1}) + f(x_i - x_{i+1}) \right] - K_G a (y_{1,e} - y_i) A \delta_i = 0$$

Balance de materia arriba del rehervidor.

Balance total.

$$gy_{N-2} - (1 + g)y_{N-1} = L/V (1 + f)(x_{N-1} - x_{N-2}) - y_N$$

Balance en el líquido.

$$L (1 + f)(x_{N-2} - x_{N-1}) - K_G a(y_{N-1,e} - y_{N-1})A\delta_{N-1} = 0$$

Balance de materia y energía en el rehervidor.

Balance de materia total.

$$\frac{dW}{dt} = L - V$$

Balance por componente.

$$\frac{d}{dt} [Wx_N] = Lx_{N-1} - Vy_N$$

Balance de energía.

$$\frac{d}{dt} [Wh_w] = Lh_{N-1} - VH_w + Q_R$$

Balances de materia en el tanque de destilados.

Balance total.

$$\frac{dB}{dt} = V - L$$

Balance por componente.

$$\frac{d}{dt} [x_B] = \frac{(V - L)}{B} [x_1 - x_B]$$

La solución de estas ecuaciones se menciona a continuación.

Solución del modelo.

Dado que se tiene un conjunto de ecuaciones lineales y no-lineales que requiere solución simultánea la estrategia seguida fue la siguiente:

a.- Se agrupan todas las ecuaciones de los balances globales que forman un sistema de ecuaciones lineales. Las ecuaciones son:

$$y_1 = 0$$

$$(1 + g)y_3 - (1 + g)y_2 = L/V \left[(1 + f)x_2 - x_1 - x_3 \right]$$

Para $i = 3, \dots, N - 2$

$$(1 + g)y_{i+1} + gy_{i-1} - (1 + 2g)y_i = L/V \left[(1 + f)(x_i - x_{i-1}) + f(x_i - x_{i+1}) \right]$$

$$gy_{N-2} - (1 + g)y_{N-1} = L/V(1 + f)(x_{N-1} - x_{N-2}) - y_N$$

Se puede observar que este sistema de ecuaciones es $Ay = b$, donde la solución de este [5], esta dada por $y = A^{-1}b$, para el cual la A^{-1} permanece constante, dada una primera aproximación para la composición en el líquido. Ya encontradas las composiciones en el vapor, se utilizan para encontrar las composiciones del líquido resolviendo el sistema no-lineal, que se muestra a continuación.

b.- Se agrupan las ecuaciones no-lineales.

$$y_2 - x_1 = 0$$

$$L \left[x_1 + fx_3 - (1 + f)x_2 \right] - K_G a(y_{2,e} - y_2) A \delta_2 = 0$$

Para $i = 3, \dots, N - 2$

$$L \left[(1 + f)(x_i - x_{i-1}) + f(x_i - x_{i+1}) \right] - K_G a(y_{i,e} - y_i) A \delta_i = 0$$

$$L(1 + f)(x_{N-2} - x_{N-1}) - K_G a(y_{N-1,e} - y_{N-1}) A \delta_{N-1} = 0$$

La no linealidad de estas ecuaciones esta dada por el término de la composición del vapor en equilibrio, dada por la expresión:

$$y_{1,e} = \frac{\alpha x_1}{1 + (1 - \alpha)x_1} .$$

El valor de la composición y_N se evalúan por medio de un cálculo de punto de burbuja en el rehervidor en un instante dado; el flujo de vapor esta dado por:

$$V = \frac{\left\{ Lh_{N-1} + Q_R - \frac{d}{dt} [Wh_w] \right\}}{H_w}$$

y el de líquido por:

$$L = \frac{RV}{R + 1}$$

Para la solución del sistema se utiliza el método de Newton [6].

Adaptación de malla.

Una técnica de adaptación de malla puede definirse como aquella que cambia la malla en el curso de los cálculos con objeto de mejorar la precisión de la solución. Esto significa que la malla se concentra en regiones del dominio que presentan gradientes pronunciados de la función y sus derivadas.

El algoritmo [7], que se sigue para la adaptación de malla es el siguiente:

1. Defina una malla inicial de elemento finito.
2. Resuelva el problema, con la malla definida.
3. Estime los errores locales de aproximación [8] en cada uno de los elementos.

4. Si la magnitud de todos los errores locales de aproximación es la misma, termine, sino continúe en 5.
5. Adapte la malla. Utilice algún algoritmo que permita mover los nodos de la malla a regiones del dominio donde sean más necesarias.
6. Regrese a 2.

RELACION ENTRE EL MODELO DISCRETIZADO Y EL CONTINUO.

La ecuación obtenida para la fase líquida en una etapa cualquiera es:

$$L \left[(1 + f)(x_i - x_{i-1}) + f(x_i - x_{i+1}) \right] + K_G a(y_{1,e} - y_i) A \delta_i = 0$$

se puede expresar como:

$$(x_{i-1} - x_i) + f(x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}) + K_G a(y_{1,e} - y_i) A \delta_i / L = 0$$

Manipulando algebraicamente esta ecuación se obtiene:

$$\delta_i \left(f + \frac{1}{2} \right) \left[\frac{x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}}{\delta_i^2} \right] - \left[\frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2\delta_i} \right] + \frac{K_G a(y_{1,e} - y_i)}{L} = 0$$

donde se tienen términos de primera y segunda derivadas en diferencias finitas.

$$\frac{d^2 x}{dz^2} = \left[\frac{x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}}{\delta_i^2} \right]$$

$$\frac{dx}{dz} = \left[\frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{\delta_i} \right]$$

substituyendo los términos para las derivadas en diferencias finitas por sus análogos continuos se obtiene la ecuación que representa al modelo continuo de la columna.

$$\left[f + \frac{1}{2} \right] \delta_1 \frac{d^2 x}{dz^2} - \frac{dx}{dz} + \frac{r_1 A}{L} = 0$$

donde $r_1 = K_G a(y_{1,e} - y_1)$.

El modelo continuo esta dado por la ecuación:

$$\frac{De}{u} \frac{d^2 x}{dz^2} - \frac{dx}{dz} - \frac{r}{uC} = 0$$

por comparación de los terminos de la ecuación anterior con la correspondiente para un modelo continuo, se tiene:

$$f = \frac{De}{u\delta_1} - \frac{1}{2},$$

esta comparación es de utilidad para calcular los coeficientes de retromezclado, conociendo otras propiedades físicas tales como: el coeficiente de dispersión axial, velocidad del fluido y el espesor de la pseudo-etapa.

DISCUSION DE RESULTADOS

Las composiciones tanto en el vapor como en el líquido pueden o no corresponder a las de equilibrio (máxima separación), es decir, si la altura de la etapa hipotética δ , equivale a un volumen que proporcione un contacto adecuado. Esto nos permite manipular las alturas, adaptandolas de tal manera que la distribución sea más fina en las regiones donde los gradientes de

ADAPTACION DE MALLA

DESTILACION BINARIA BATCH. SISTEMA ETANOL-AGUA

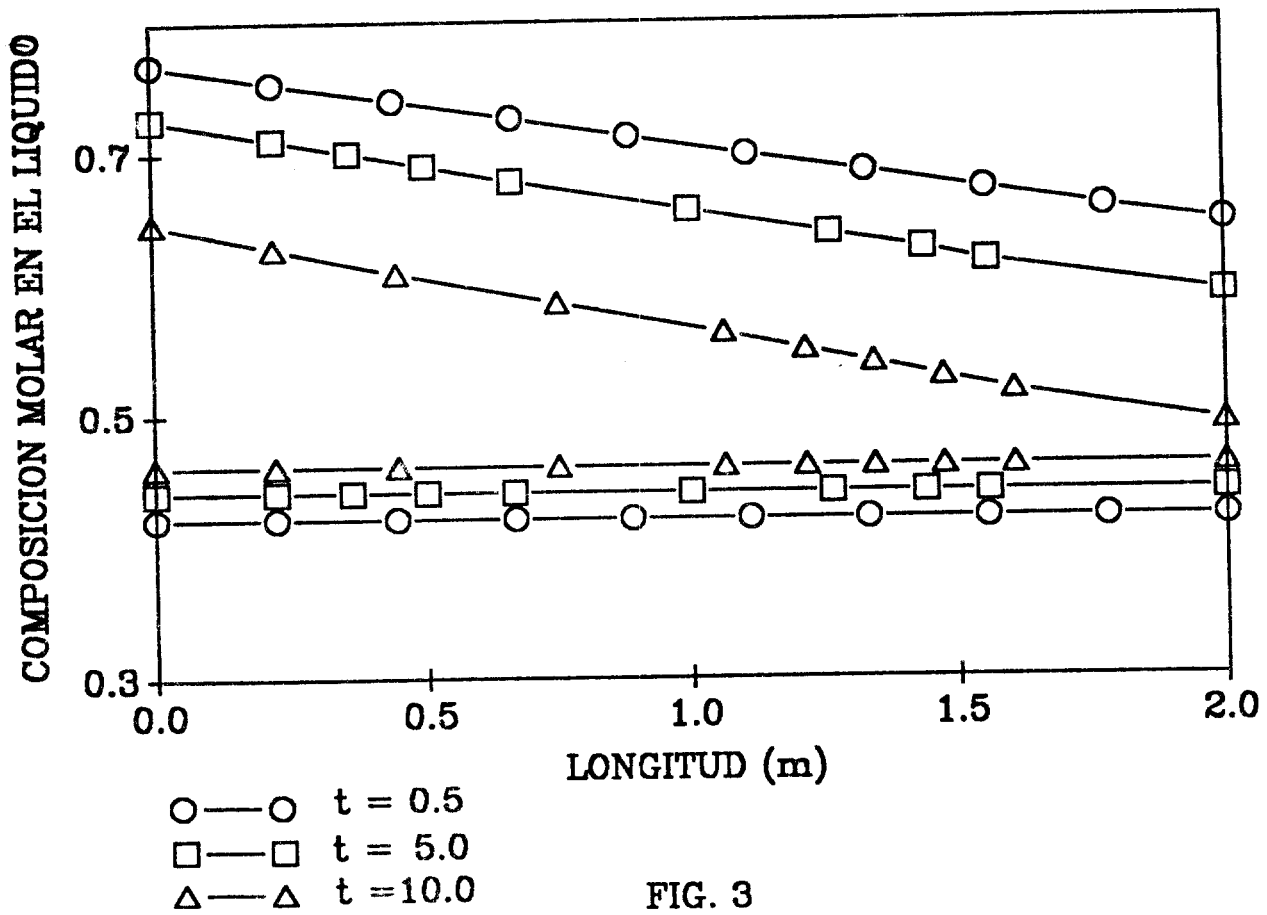


FIG. 3

VARIACION DEL PERFIL DE CONCENTRACION
CON EL FACTOR DE RETROMEZCLADO.

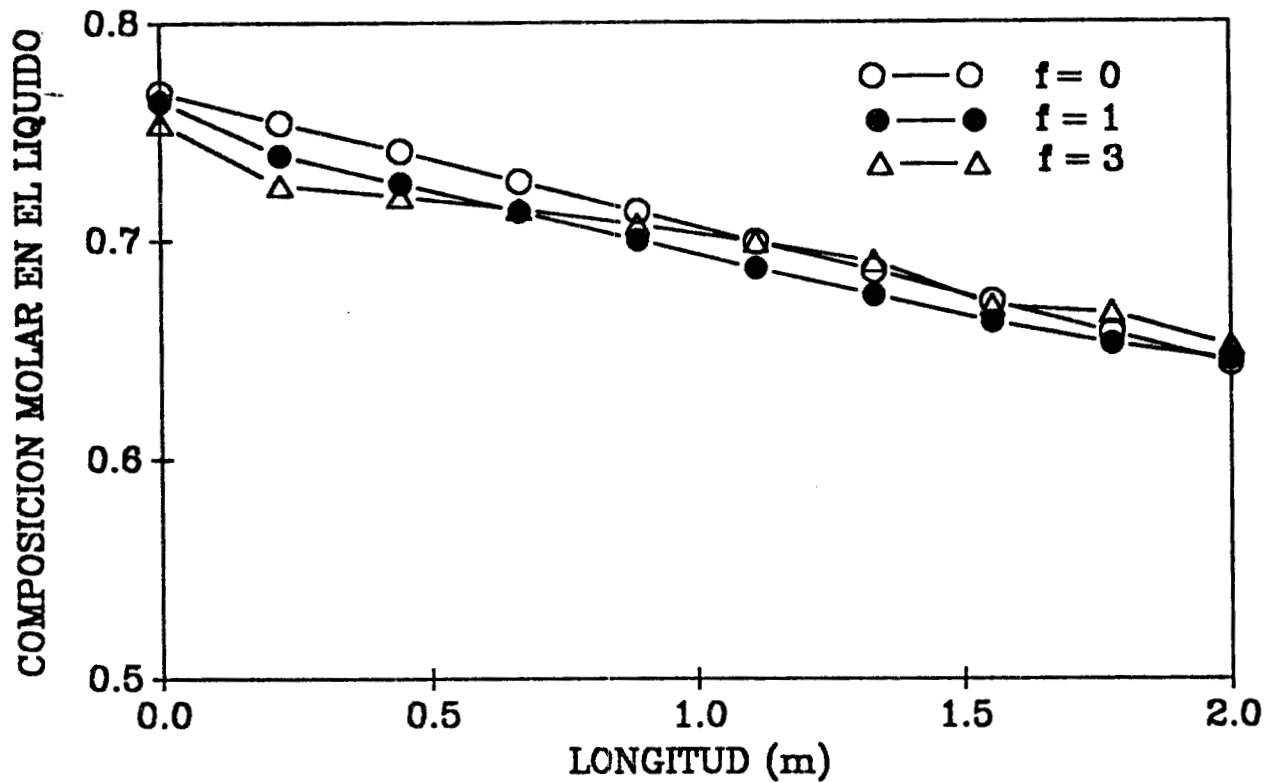


FIG. 2

COMPOSICION EN EL TANQUE DE DESTILADOS

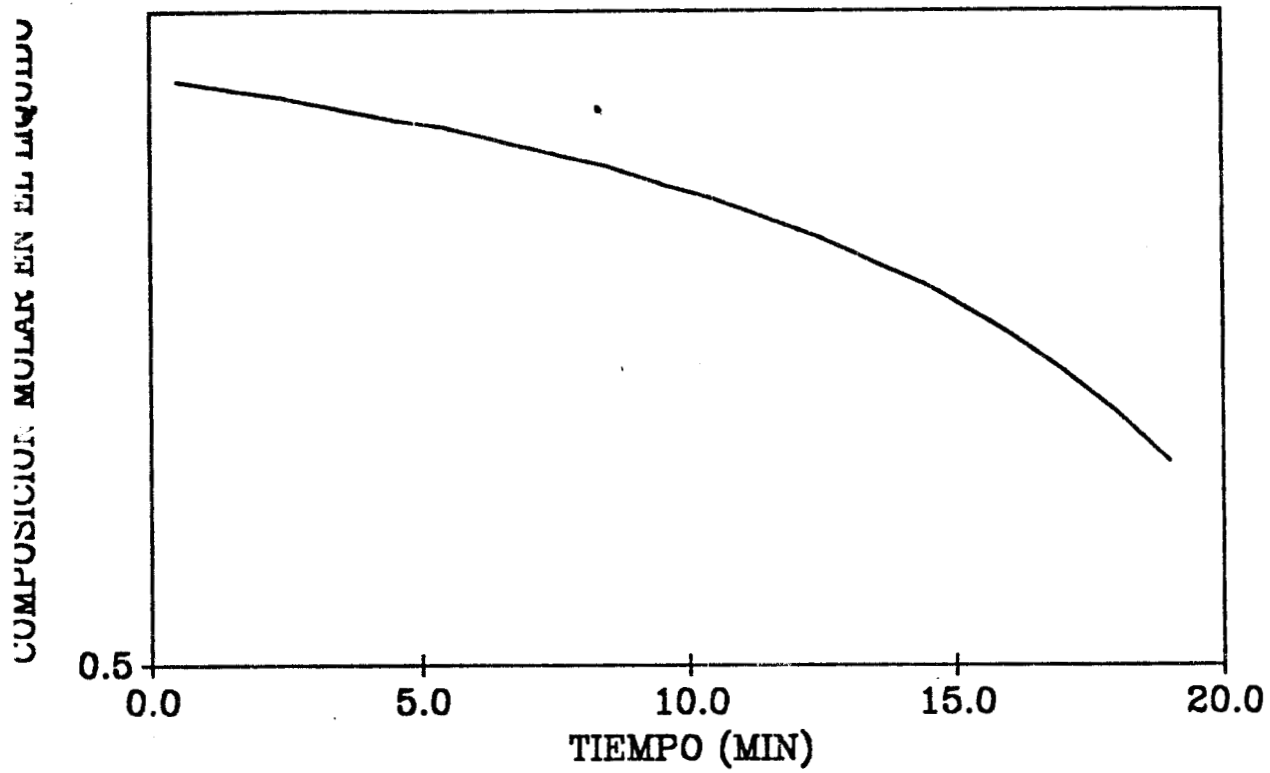


FIG. 4

composición son más pronunciados. En la figura 3, se puede observar como se modifican las longitudes de las pseudo-etapas, al variar el perfil de concentraciones con el tiempo. La malla se concentra donde la composición cambia de manera significativa.

Los coeficientes de retromezclado incluidos en este modelo están relacionados con la altura de la etapa, pero en este trabajo se consideran constante con el fin de manipularlos de manera independiente y establecer la relación con el modelo continuo. La figura 2, muestra como varía el perfil de concentración en la columna cuando el coeficiente de retromezclado aumenta.

Los coeficientes de retromezclado pueden ajustarse utilizando perfiles experimentales con el fin de representar los perfiles reales continuos, interpolando las composiciones obtenidas.

En la figura 4, puede notarse la variación de la composición en el tanque de destilados al transcurrir el tiempo. Se tiene una disminución progresiva de la concentración debido a que la razón de reflujo, se mantiene constante a lo largo del proceso.

REFERENCIAS

1. C. D. Holland, *Fundamentals and Modeling of Separation Processes*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey (1975).
2. R. K. Srivastava & J. Babu, *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 8, No. 1, pp. 43-50, 1984.

3. E. Saldivar, *Elemento Finito con Malla Adaptable en el Modelado de Sistemas de Polimerización*, Tesis de Maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F., 1986.
4. Mecklenburg and Hartland, *The Theory of Backmixing*. John Wiley & Sons, Ltd. (1975).
5. S. D. Conte y C. de Boor, *Análisis Numérico Elemental*. McGraw-Hill, México (1974).
6. P. Rabinowitz, *Numerical Methods for Non-Linear Algebraic Equations*. Gordon and Breach, London (1970).
7. G. F. Carey and J. T. Oden, *Finite Elements, Computational Aspects*, Vol. III, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey (1984).
8. C. de Boor *A Practical Guide to Splines*, Applied Mathematical Sciences, No. 27, Springer-Verlag, New York (1978).

NOMENCLATURA

- a área específica de empaque, l^2/l^3 .
- A área de la sección transversal de la columna, l^2 .
- B moles totales en el tanque de destilados, mol.
- D flujo molar de destilado, mol/t.
- D_e coeficiente de dispersión axial, l^2/t .
- f coeficiente de retromezclado en el líquido.
- g coeficiente de retromezclado en el vapor.
- h entalpía en el líquido.

H entalpía en el vapor.

K_G coeficiente de transferencia de masa global,
basado en la diferencia de concentraciones
en la fase vapor, mol/l²/t.

l longitud.

L flujo molar de líquido, mol/t.

Q_R calor que entra al rehervidor, energía/t.

R razón de reflujo, = L/D.

t tiempo.

u velocidad del líquido, l/t.

V flujo molar de vapor, mol/t.

x fracción mol en el líquido.

y fracción mol en el vapor.

$y_{i,e}$ fracción mol en el vapor en equilibrio.
con el líquido, en la etapa i-ésima.

z distancia a lo largo de la columna, l.

α volatilidad relativa.

δ altura de la etapa hipotética en el modelo
de retromezclado.