

**ELABORACIÓN DE UNA HERRAMIENTA COMPUTACIONAL PARA EL
DISEÑO DE ADSORBEDORES DE LECHO FIJO Y CRISTALIZADORES**

**DANIEL ALEXANDER RODRIGUEZ LAITÓN
CARLOS JULIO ROMERO BECERRA**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERIAS FISICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA
2017**

**ELABORACIÓN DE UNA HERRAMIENTA COMPUTACIONAL PARA EL
DISEÑO DE ADSORBEDORES DE LECHO FIJO Y CRISTALIZADORES**

**DANIEL ALEXANDER RODRIGUEZ LAITÓN
CARLOS JULIO ROMERO BECERRA**

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar el título de
Ingeniero Químico**

Director

FREDY AUGUSTO AVELLANEDA VARGAS
Ph. D. Ingeniero Químico

Codirector

IVÁN DARÍO ORDOÑEZ SEPÚLVEDA
Ingeniero Químico

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERIAS FISICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA
2017**

A Dios, por brindarme sabiduría, compañía y ayuda en mi trayectoria por la universidad.

A mi abuelita LOLA por su amor incondicional, por sus enseñanzas y buenos valores. Sos el motivo de mi felicidad

A mi mamá por su apoyo y sus buenos consejos que me mantuvieron siempre con la frente en alto. A mi papá por su apoyo incondicional mil gracias por ayudarme a cumplir este sueño.

A los profesores que aportaron sus conocimientos y anécdotas para mi formación personal y profesional.

A mis compañeros de la universidad por los buenos momentos vividos

...A todos ellos debo lo que soy y tengo hoy!

Daniel

*A mis padres y hermanos por su amor y apoyo incondicional en cada etapa de mi vida, por su ejemplo de constancia y dedicación.
Ustedes son mi mayor inspiración y motivo para salir adelante*

A mi compañero Daniel por su entrega y dedicación, por la pasión que le inyecta a cada una de las cosas que realiza para que salgan de la mejor manera.

A mi familia por apoyarme desinteresadamente y ayudarme a cumplir mis sueños.

A mis amigos Estelmar, Laura, Guty, Soto, Cami, Kata, Julio, Juancho y Ceballos por contribuir en mi formación integral y hacer más interesante y divertida esta etapa de mi vida.

*A la TUNA UIS y a todos sus integrantes por brindarme su amistad.
Gracias por hacer de este espacio un lugar donde me salía de la monotonía y donde me reinvente encontrando de nuevo la pasión por la música.*

Carlos

AGRADEMIENTOS

En reconocimiento a sus aportes para la buena ejecución de este proyecto, los autores expresan sus más sinceros agradamientos:

A nuestro apreciado director, el profe Fredy Avellaneda, por la oportunidad de acogernos en su equipo de trabajo, por sus excelentes consejos y paciencia a lo largo del desarrollo de este proyecto.

A nuestro co-director, el profe Iván Ordoñez, quien con sus conocimientos y recomendaciones fue posible lograr los objetivos de esta tesis de grado. Mil gracias por hacer que la realización de este proyecto estuviera rodeada de confianza y compañerismo.

A la escuela de Ingeniería Química de la Universidad Industrial de Santander y a todos los profesores que hicieron parte de nuestra formación profesional.

TABLA DE CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	15
1. GENERALIDADES DE LA ADSORCIÓN EN LECHO FIJO Y CRISTALIZACIÓN	18
1.1 OPERACIÓN UNITARIA ADSORCIÓN EN LECHO FIJO	18
1.1.1 Transferencia de masa en el proceso de adsorción	18
1.1.2 Equilibrio de adsorción	19
1.1.3 Caída de presión	20
1.1.4 Modelado matemático	21
1.2 OPERACIÓN UNITARIA CRISTALIZACIÓN	23
1.2.1 Modelado y diseño de cristalizadores	23
2. DESARROLLO DE LA HERRAMIENTA	25
2.1 PLANTEAMIENTO DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS Y RECOPIACIÓN DE INFORMACIÓN	25
2.2 ESTRUCTURACIÓN DEL CONTENIDO	26
2.3 DISEÑO Y MONTAJE DE LA INTERFAZ	30
2.4 PRUEBAS DE FUNCIONAMIENTO	30
2.4.1 Pruebas de satisfacción al usuario	31
2.5 VALIDACIÓN DE LA HERRAMIENTA	31
2.5.1 Validación del modelo Michaels (Adsorción)	31
2.5.2 Validación del modelo LUB (Adsorción)	32
2.5.3 Validación del modelo MSMR (Cristalización)	32
3. RESULTADOS Y ANÁLISIS	34
3.1 RESULTADOS DE LA VALIDACIÓN	34
3.2 EFECTO DE LAS VARIABLES DE ENTRADA EN LOS PARÁMETROS DE DISEÑO	36
3.3 ANÁLISIS DE LA EVALUACIÓN DE LA HERRAMIENTA	38
4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	40
REFERENCIAS	41
BIBLIOGRAFÍA	47

INDICE DE TABLAS

Tabla 1. Isotermas de adsorción favorables.....	20
Tabla 2. Datos de entrada requeridos para el diseño del cristizador.	27
Tabla 3. Datos de entrada requeridos para el diseño del adsorbedor (LUB).....	28
Tabla 4. Datos de entrada requeridos para el diseño del adsorbedor (Método de Michaels).....	28
Tabla 5. Características de los sistemas de adsorción para validar el modelo de Michaels.....	32
Tabla 6. Características del sistema de adsorción para validar el modelo LUB. ...	33
Tabla 7. Características del sistema de cristalización para validar el modelo MSMPR.....	33
Tabla 8. Comparación entre las variables de diseño obtenidos por CRYSD por el modelo de Michaels y los reportados en la literatura.	34
Tabla 9. Comparación entre la altura obtenida por CRYSD y la reportada en la literatura para adsorción.	36
Tabla 10. Comparación entre los resultados obtenidos por CRYSD y los reportados en la literatura para cristalización.....	36
Tabla 11. Descripción de las variables y unidades dimensionales del balance de población.....	64
Tabla 12. Revisión bibliográfica sobre los adsorbentes disponibles en CRYSD .	67

INDICE DE FIGURAS

Figura 1. La onda de adsorción y la curva de ruptura	19
Figura 2. Representación de las fases de la metodología.....	25
Figura 3. Algoritmo de diseño del cristalizador.....	27
Figura 4. Algoritmo de diseño para determinar la altura de la torre de adsorción.	29
Figura 5. Algoritmo para estimar la curva de ruptura de una torre de adsorción...	30
Figura 6. Comparación entre la curva de ruptura generada por CRY SAD y los datos experimentales del caso de estudio C.....	35
Figura 7. Efecto del flujo de entrada en la curva de ruptura para la columna de adsorción. (a) Variación del tiempo ruptura, (b) Influencia en la curva de ruptura .	37
Figura 8. Efecto del diámetro de partícula en la altura de la torre de adsorción. ..	38
Figura 9. Efecto del tamaño del cristal en el volumen del cristalizador.	38
Figura 10. Evaluación de la herramienta CRY SAD.	39
Figura 11. Dificultades reportadas por los encuestados.	39
Figura 12. Curva de ruptura.	56
Figura 13. Zona de adsorción en una torre de adsorción en contracorriente.....	57
Figura 14. Curva de ruptura idealizada.	59
Figura 15. Mecanismos de nucleación presentes en la cristalización.	62
Figura 16. Subrutina para diseñar una columna de adsorción (Método de Michaels).....	68
Figura 17. Subrutina para diseñar una columna de adsorción (Método LUB).....	68
Figura 18. Subrutina para diseñar un cristalizador.....	69
Figura 19. Ingreso de las condiciones de operación de una torre de adsorción. ..	72
Figura 20. Ingreso de las características del adsorbente.....	72
Figura 21. Ingreso de las características de la solución.....	73
Figura 22. Ingreso de los parámetros de la isoterma de adsorción.....	73
Figura 23. Resultados (Parámetros de diseño).....	74
Figura 24. Resultados (Curva de ruptura).....	74

INDICE DE ANEXOS

ANEXO A. BALANCE DE MASA DE ADSORBATO Y SU SOLUCIÓN	51
ANEXO B. CORRELACIONES PARA EL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA Y DIFUSIVIDADES PARA LA OPERACIÓN DE ADSORCIÓN	53
ANEXO C. MODELO DE MICHAELS	56
ANEXO D. MODELO LUB	59
ANEXO E. ETAPAS DEL PROCESO DE CRISTALIZACIÓN	61
ANEXO F. BALANCE DE POBLACIÓN DE CRISTALES	64
ANEXO G. MODELAMIENTO PARA UN CRISTALIZADOR MSMPR	65
ANEXO H. ADSORBENTES DISPONIBLES EN CRY SAD	67
ANEXO I. SUBRUTINAS PARA EL DISEÑO DE ADSORBEDORES Y CRISTALIZADORES	68
ANEXO J. ENCUESTA DE SATISFACIÓN DEL PROGRAMA CRY SAD	70
ANEXO K. INTERFAZ E INGRESO DE LOS DATOS DE ENTRADA PARA EL DISEÑO DE UN ADSORBEDOR	72

RESUMEN

TÍTULO: ELABORACIÓN DE UNA HERRAMIENTA COMPUTACIONAL PARA EL DISEÑO DE ADSORBEDORES DE LECHO FIJO Y CRISTALIZADORES^{1*}

**AUTORES: DANIEL ALEXANDER RODRIGUEZ LAITÓN
CARLOS JULIO ROMERO BECERRA^{**}**

PALABRAS CLAVES: Adsorbedores de lecho fijo, Cristalizadores, Diseño, Modelado Matemático.

Existe poca disponibilidad y acceso a herramientas para el diseño de equipos donde intervienen sustancias sólidas, por ello este trabajo de grado se realizó con el objetivo principal de crear un software en la plataforma de Excel para el diseño de adsorbedores de lecho fijo y cristalizadores.

Para adsorción, se eligió el modelado de Michaels para determinar la altura de torre y se resolvió el balance de masa de adsorbato dentro de la columna por diferencias finitas para predecir la curva de ruptura. Adicionalmente, se escogió el modelo de LUB (Longitud de Lecho sin Utilizar) como un método de diseño alternativo en el que la curva de ruptura es uno de los datos de entrada que se utiliza para identificar el tiempo en el cual se logra una transferencia de masa rápida y así obtener la altura de la columna y la longitud de lecho no utilizado.

Por otro lado, para el diseño del cristizador, el modelo se basó en la ecuación de balance de población, balances de masa y energía en el interior del cristizador. Se implementó el modelo MSMPR (mezcla-suspensión mezcla-producto-mezclado) que permite simplificar el balance de población. Este balance se resolvió por la técnica de momentos de distribución de tamaño de cristal y junto con las cinéticas de nucleación y crecimiento de los cristales se calculó el volumen del cristizador.

Se realizaron validaciones del software usando casos de estudio tomados de la literatura y pruebas de satisfacción a los estudiantes de noveno semestre de Ingeniería Química de la UIS (SEM-2 2016), obteniéndose resultados satisfactorios.

* Trabajo de Grado

** Facultad de Ingenierías Físico-Químicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Fredy Augusto Avellaneda. Codirector: Iván Darío Ordoñez.

ABSTRACT

TITLE: DEVELOPMENT OF A COMPUTATIONAL TOOL FOR FIXED BED ADSORBERS AND CRYSTALLIZERS DESIGN^{2*}

**AUTHORS: DANIEL ALEXANDER RODRIGUEZ LAITÓN
CARLOS JULIO ROMERO BECERRA^{**}**

KEY WORDS: fixed bed adsorbers, Crystallizers, Design parameters, Mathematical Modeling.

There is limited availability and access to tools for equipment design where involved solid substances, for this reason this degree work was carried out with the main objective of creating a software in the program Microsoft Excel for fixed bed adsorbers and crystallizers design.

For adsorption, Michaels modeling was chosen to determine the tower height and the mass balance of adsorbate inside the column was solved by finite-difference method to predict the rupture curve. In addition, the LUB model was chosen (length of unused bed) as an alternative design method in which rupture curve is one of the input data that is used to identify the time at which rapid mass transfer is achieved and thus get the column height and the length of unused bed.

On the other hand, for crystallizer design, the model was based on the population balance equation, mass and energy balance inside of the crystallizer. MSMR model (mixed-suspension mixed-product-removal) was implemented because it allows to simplify the population balance. This balance was resolved by crystal size distribution moments and together with nucleation kinetics and crystals growth the crystallizer volume was calculated.

Software validations were carried out using case studies from literature and satisfaction tests applied to 9th semester students of Chemical Engineering of the Industrial University of Santander (UIS), obtaining satisfactory results.

* Undergraduate thesis

** Faculty of Physicochemical Engineering. Chemical Engineering School. Director: Fredy Augusto Avellaneda. Codirector: Iván Darío Ordoñez.

INTRODUCCIÓN

El diseño de procesos es uno de los campos más complejos dentro de la ingeniería química, es el corazón del desarrollo de proyectos relacionados con la construcción y mejoramiento de plantas de procesos. En general, realizar un diseño básico para equipos de ingeniería es algo complejo, pero a la hora de hablar de equipos en los que intervienen sustancias sólidas, la complejidad aumenta debido a que se involucran nuevas propiedades que en la mayoría de los casos son específicas para cada uno de los compuestos involucrados.

Efectuar el dimensionamiento de diferentes equipos de procesos requiere la consulta de una gran variedad de propiedades de las sustancias involucradas y soluciones numéricas iterativas [1]. Existen varios software comerciales de simulación y/o diseño (Aspen One, SuperPro Designer, Chemcad, etc.) que se basan en los modelos matemáticos de un buen número de operaciones unitarias para interpretar un sistema real sin tener que realizar costosos montajes. Sin embargo, algunas de estas herramientas no poseen un módulo de cálculo sencillo de usar y no incluyen operaciones unitarias importantes a nivel industrial como lo son la adsorción de lecho fijo y la cristalización.

SuperPRO Designer, por ejemplo, permite diseñar columnas de adsorción para gases y líquidos usando como adsorbente carbón activado. En el caso de gases se determina la capacidad de adsorción y el volumen del equipo mediante las isotermas e ingresando el tiempo de ruptura, flujo y densidad del adsorbente. Finalmente, el usuario define un diámetro máximo y de este se deduce la altura de la torre. Para los compuestos líquidos, los cálculos son más sencillos, solo basta con ingresar las composiciones y flujo de entrada. De acuerdo a lo anterior, se evidencia que este programa no tiene en cuenta los coeficientes de transferencia de masa ni el cálculo de la curva de ruptura, solo está disponible para el uso de un solo adsorbente y además, las isotermas solo se describen en operaciones con

gases. El diseño de un cristalizador en esta herramienta se realiza de forma básica: ingresando el flujo, el tiempo de residencia y escogiendo la sustancia que se cristaliza, el programa calcula el volumen y la cantidad de cristales formados. Sin embargo, para el diseño no se tiene en cuenta balances por cristales, otros métodos de cristalización (solo dispone de evaporación), y ningún parámetro cinético, los cuales como se explicara posteriormente son variables importantes en el diseño de este equipo. La información anterior se puede corroborar en el menú de ayuda que ofrece el software en el cual se encuentran descritas cada una de las operaciones que este incluye. Aparte de esto la adquisición de SuperPro Designer tiene un costo elevado que para el 2016 es de USD\$ 6380 por 1 año [2].

Por su parte Aspen One® posee un módulo llamado *Aspen Adsorption* [3]. Este programa no realiza ningún dimensionamiento del equipo; su propósito es encontrar las condiciones finales de la corriente de proceso y en algunos casos estima la curva de ruptura de la operación. El funcionamiento e interfaz son difíciles de entender y manejar. Además, para ejecutar el programa se deben ingresar los coeficientes de transferencia de masa en la fase fluida y sólida.

Por otro lado, un antecedente importante lo reportan Costa Caliane [4] y Carrillo et al [5] quienes desarrollaron en la Universidad de Campinas (Sao Paulo, Brasil) un programa llamado *SimCris* y en el Instituto Tecnológico de Orizaba (Venezuela) el software *MoVac 1.0* respectivamente. El objetivo de la primera herramienta es simular el proceso batch dinámico de la cristalización del ácido adípico operado por enfriamiento mientras que la segunda busca simular un proceso de cristalización dinámico por lotes a vacío. En ambos casos, los datos de entrada son numerosos y específicos de la sustancia a trabajar y todos ellos deben ser ingresados por el usuario. Los datos de salida de estos software son principalmente la cantidad formada de cristales y el tamaño de partícula, por lo tanto no pueden ser consideradas como herramientas de diseño sino de simulación.

Serrano [6] en su tesis de pregrado propuso el programa *SimaCrom*, el cual es una herramienta para el diseño y simulación de torres de adsorción por intercambio iónico, específicamente para el proceso de remover cromo de aguas tratadas. Para correr el programa el usuario debe especificar todos los datos de entrada que este exige. Las limitaciones presentes en este software son: no tiene disponible una base de datos de adsorbentes, solo trabaja soluciones líquidas electrolíticas, únicamente tienen en cuenta la isoterma de Langmuir y no dispone de un método alternativo en caso tal de no contar con los coeficientes de transferencia de masa.

Con el fin de aportar una solución a este problema, este trabajo plantea elaborar una herramienta que sea fácil de utilizar, amigable con el usuario, que cuente con una base de datos de compuestos y sus propiedades físicas con las cuales se puedan llevar a cabo de forma sencilla los diseños básicos de columnas de adsorción de lecho fijo y cristalizadores usando métodos de cálculo más rigurosos con aplicación tanto para la academia como para la industria. Se tomarán casos de estudio reportados en la literatura para validar el software y se realizara una encuesta de satisfacción a los estudiantes de noveno semestre de la Escuela de Ingeniería Química de la UIS.

1. GENERALIDADES DE LA ADSORCIÓN EN LECHO FIJO Y CRISTALIZACIÓN

1.1 OPERACIÓN UNITARIA ADSORCIÓN EN LECHO FIJO

El proceso de adsorción se fundamenta en la transferencia de masa entre una fase sólida y una fase fluida (líquida o gaseosa), que permite separar selectivamente de una solución uno o varios compuestos de interés aprovechando la porosidad que presentan algunos sólidos para hacer que estas sustancias se concentren en su interior y sobre su superficie [7, 8]. El compuesto que se concentra se define como adsorbato y el material sobre el cual éste se acumula se conoce como adsorbente [7]. Además, el funcionamiento de este proceso depende del equilibrio fluido-sólido y/o de las velocidades de transferencia de masa del componente transferible desde la fase fluida a la fase sólida [9].

1.1.1 Transferencia de masa en el proceso de adsorción

- Coeficientes de transferencia de masa

Para los sistemas de adsorción suele establecerse una relación entre los coeficientes individuales y el coeficiente global de transferencia de masa, suponiendo que la interfase de separación se encuentra en condiciones de equilibrio. Esto equivale a asumir que la resistencia a la transferencia a través de la interfase puede despreciarse, de aquí se deduce que la resistencia total resultará de la suma de las resistencias individuales de cada fase como se expresa a continuación [10, 11]:

$$\frac{1}{K_f a_p} = \frac{1}{k_f a_p} + \frac{m}{k_s a_p} \quad (1)$$

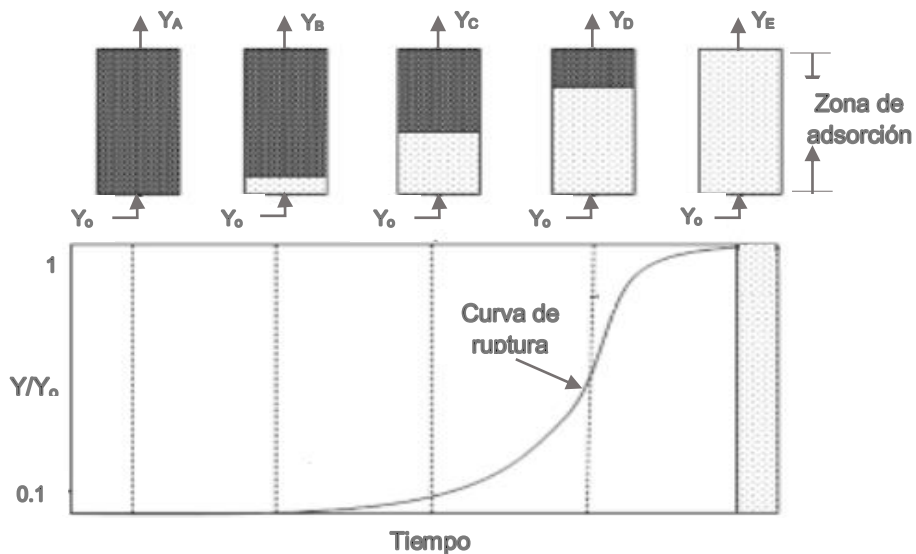
Donde, K_f es el coeficiente global de transferencia de masa en [tiempo⁻¹], k_f y k_s son los coeficientes de transferencia para la fase fluida y sólida respectivamente

en $[\text{tiempo}^{-1}]$ y m es la pendiente promedio de la línea de equilibrio [masa adsorbente/volumen solución].

- Onda de adsorción y curva de ruptura

La onda de adsorción permite predecir cómo se lleva a cabo el proceso en un lecho fijo. El tramo donde se presenta la saturación del adsorbente es llamado *zona de adsorción* (Z_A). Si toda esta región es pequeña quiere decir que la adsorción es casi instantánea generándose una curva de ruptura bien definida [7] (*Figura 1*). La curva de ruptura representa el perfil de concentración de adsorbato (Y/Y_0) frente al tiempo que tarda el fluido en abandonar el lecho. Esta curva generalmente tiene forma de S, pero pueden tener una gran pendiente o ser relativamente plana [7].

Figura 1. La onda de adsorción y la curva de ruptura



Fuente: Tomado y adaptado de [12].

1.1.2 Equilibrio de adsorción

La manera más común de representar el equilibrio en la operación de adsorción es mediante las isothermas de equilibrio, estas son la relación entre la concentración

de la fase fluida y la concentración de las partículas de adsorbente a una temperatura determinada para el caso de los gases, o el pH cuando son soluciones acuosas. Estas isothermas se clasifican según su concavidad en favorables y desfavorables; las primeras son cóncavas hacia abajo y las más representativas de este grupo son las isothermas de Langmuir y Freundlich (ver *Tabla 1*).

Tabla 1. Isothermas de adsorción favorables.

ISOTERMA DE FREUNDLICH	ISOTERMA DE LANGMUIR
Conocida como la ecuación clásica y está limitada para soluciones diluidas [13].	Considerada como el modelo que mejor ajusta los datos de equilibrio con el supuesto de que el adsorbato se adsorbe formando una capa sobre la superficie del adsorbente [13].
$X = B * Y^{1/n} \quad (2)$	$X = \frac{K * Q * Y}{1 + K * Y} \quad (3)$
<p>B y n constantes para el sistema adsorbato-adsorbente.</p> <p>X= masa de adsorbato adsorbida por masa de adsorbente.</p> <p>Y= concentración de adsorbato en el equilibrio [masa adsorbato/volumen de fluido].</p>	<p>Q= masa de adsorbato máxima retenida por masa de adsorbente.</p> <p>K= constante de adsorción [volumen de fluido/masa de adsorbato].</p>

1.1.3 Caída de presión

La caída de presión, ΔP , es un factor importante en el diseño de columnas de lecho fijo y puede ser calculada basándose en la correlación de Leva (4) utilizada para todo régimen de flujo de líquidos incompresibles mientras que para sistemas gaseosos, se recurre a la correlación de Ergun (5) [14].

$$\Delta P = \frac{2 * f m * F^2 * \rho * Z * (1 - \varepsilon)^{3-n}}{Dp * At^2 * \phi_s^{(3-n)} * \varepsilon^3} \quad (4)$$

$$\frac{\Delta P * \rho}{(\rho * V)^2} * \frac{Dp}{Z} * \frac{\varepsilon^3}{1 - \varepsilon} = \frac{150}{Re} + 1,75 \quad (5)$$

En estas ecuaciones, ΔP es la caída de presión en la columna de adsorción, f_m y n parámetros propios de la correlación, F flujo volumétrico, ρ densidad de la solución, Z altura de la torre, ε fracción de vacío, Dp diámetro de partícula, A_t área transversal de la columna, ϕ_s factor de forma, Re número de Reynolds y V es la velocidad del fluido.

1.1.4 Modelado matemático

Para modelar la operación de adsorción de lechos empacados se plantea inicialmente el balance de masa de adsorbato, (Ecuación 6). La solución y descripción de la ecuación (6) se describe en el Anexo A junto con las suposiciones realizadas.

$$\varepsilon A_T \left(-D_{Aa} \frac{dY}{dZ} + YU_L \right)_Z - \varepsilon A_T \left(-D_{Aa} \frac{dY}{dZ} + YU_L \right)_{z+\Delta z} = \varepsilon A_T \left(\Delta z \frac{dY}{dt} \right) + A_T \left(\rho_a \frac{dX}{dt} \right) \quad (6)$$

D_{Aa} es el coeficiente de dispersión axial efectivo de A , Z es la longitud del lecho, ρ_a es la densidad del adsorbente, U_L es la velocidad media del fluido, Y es la concentración de adsorbato en el efluente, A_T es el área transversal del lecho y ε es la fracción de vacío [13].

La variación en el contenido de adsorbato en el adsorbente se puede expresar en términos de la velocidad de adsorción. La ecuación cinética para este caso es [14]:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{K_f a_p}{\rho_a} (Y - Y^*) \quad (7)$$

Donde $K_f a_p$ es el coeficiente de transferencia de masa global determinado por la ecuación (1). De acuerdo a lo anterior, el modelo completo de un adsorbedor está

definido por: el balance de adsorbato (Ecuación 6), la cinética del proceso (Ecuación 7) y las Isotermas de Freundlich o Langmuir, que se determinan con las ecuaciones (2) y (3) respectivamente. Mediante el modelado anterior es posible obtener la curva de ruptura siempre y cuando se conozca la altura de la torre. Esta altura se determina con modelos matemáticos empíricos y entre los métodos más conocidos se encuentra el modelo de Michaels y el método de longitud de lecho sin utilizar (LUB).

- **Modelo de Michaels**

El modelo de Michaels es uno de los métodos que más se ajusta al diseño real del adsorbedor por tener en cuenta los coeficientes de transferencia de masa tanto de la fase fluida como el de la fase sólida. En este modelo se considera la formación de la *zona de adsorción*, Z_A , limitado a los casos en los cuales la *isoterma de adsorción* es favorable y la operación es aproximadamente isotérmica [9, 12].

En la *zona de adsorción* las condiciones permanecen estables con el tiempo, excepto en el periodo de tiempo inicial hasta llegar al punto de ruptura. En esta zona la concentración de adsorbato en el efluente, Y , casi siempre, aumenta del 5 al 95% de la concentración inicial [9]. En el Anexo C se explica con más detalle el modelo y la secuencia de cálculo para estimar la altura de la torre.

- **Modelo LUB- Equilibrio**

El método LUB es ampliamente utilizado para el diseño de lechos adsorbentes, principalmente cuando no se tiene información disponible sobre los coeficientes de transferencia de masa. En este caso se considera que la transferencia de masa es infinitamente rápida y el adsorbedor de lecho empacado se visualiza en dos secciones: la sección de equilibrio o saturada, Z_s , y la sección LUB (longitud del

lecho no usada) [9]. En el Anexo D se da con más detalle la descripción de este modelo.

1.2 OPERACIÓN UNITARIA CRISTALIZACIÓN

La cristalización es una técnica de separación usada para producir, purificar y recuperar material sólido a partir de soluciones líquidas o fase gaseosas en operación batch o continua donde esta última es la más frecuente a nivel industrial [15,16].

La cristalización consiste en la formación de núcleos y su posterior crecimiento a cristales; y esto ocurre en el momento que la fase líquida se encuentra por encima del punto de saturación (sobresaturada de soluto). El punto de saturación se conoce también como solubilidad [7] y se encuentra reportada en tablas estándar en función de la temperatura para diferentes sustancias [17].

En general, la formación de una fase cristalina sólida se describe en tres etapas básicas y fundamentales: La etapa de sobresaturación de la solución, el periodo de nucleación y por último el crecimiento de los cristales [18, 19]. Las tres etapas anteriores se describen en el Anexo E.

1.2.1 Modelado y diseño de cristalizadores

Para el modelado y diseño de este equipo es necesario plantear: a) un balance de población para describir la distribución de tamaños de cristal (DTC), b) los balances de masa y energía en el sistema para calcular la producción de cristales y el calor que es necesario extraer o introducir en el proceso y c) las cinéticas de nucleación y crecimiento de la fase sólida para definir las dimensiones del cristalizador [5].

El modelo completo de un cristalizador, considerando todos los tipos de nucleación además de la aglomeración, rompimiento de los cristales, entrada y salida de cristales, y operación en estado transitorio se describe como [4, 5, 15]:

$$\frac{dn}{dt} + \frac{d(Gn)}{dL} + \frac{n}{V} \frac{dV}{dt} + D(L) - B(L) + \sum_i \frac{F_i n_i}{V} = 0 \quad (8)$$

$$\frac{d(V_c C)}{dt} = - \sum_i \epsilon_i F_i C_i - R_p \quad (9)$$

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = - \sum_i \rho_k F_k H_k - Q_{ext} \quad (10)$$

La ecuación (8) representa el balance de población, donde, n es la densidad de población de cristales de un tamaño determinado por volumen de mezcla, G es la velocidad de crecimiento, V , F , L y t representan el volumen, flujo volumétrico, tamaño del cristal y tiempo respectivamente en unidades consistentes para cumplir el balance. En el Anexo F se describe apropiadamente el balance de población con sus respectivas unidades dimensionales. Las ecuaciones (9) y (10) representan el balance de masa y energía respectivamente, donde, ρ es la densidad de la solución, ρ_k es la densidad del cristal, C_p la capacidad calorífica del licor, H_k entalpía del cristal, H_{ext} calor neto removido o introducido al sistema, T es la temperatura de la solución, V_c y ϵ corresponden al volumen y fracción libre de sólidos, C es la concentración del soluto [masa soluto/masa solvente] y R_p es la velocidad global de transferencia de masa de soluto desde la solución hacia los cristales.

Con el objetivo de simplificar el modelado anterior, se puede representar el cristalizador mediante un modelo idealizado, llamado *modelo de separación mezcla-suspensión mezclada-producto mezclado (MSMPR)* el cual ha servido de base para identificar los fenómenos involucrados en esta operación unitaria [7]. En el Anexo G se describe y se desarrolla el modelado para un cristalizador MSMPR.

2. DESARROLLO DE LA HERRAMIENTA

En la *Figura 2* se esquematiza la metodología utilizada para realizar la herramienta de cálculo para el diseño de adsorbedores y cristalizadores.

Figura 2. Representación de las fases de la metodología.



2.1 PLANTEAMIENTO DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS Y RECOPIACIÓN DE INFORMACIÓN

Se determinaron las ecuaciones matemáticas y los métodos de cálculo necesarios para modelar el comportamiento de los equipos a trabajar. Para adsorción se escogió el modelo de Michaels y el modelo de LUB. El primero se seleccionó dado que muchas aplicaciones industriales están sometidas a las restricciones propias de este método [9], por lo tanto los resultados obtenidos son una buena aproximación para el diseño final del equipo. Sin embargo, se necesitan los coeficientes de transferencia de masa en la fase fluida y la fase sólida. En particular,

el coeficiente de la fase sólida es difícil de obtener, por lo cual se decidió implementar el modelo de LUB. Este último es un modelo más simplificado pero que también permite realizar un diseño aproximado de la columna con un requerimiento de datos de entrada menos exigente.

Después de definir el modelado, se realizó una extensa búsqueda en la que se investigó una numerosa cantidad de libros, artículos científicos y tesis de pregrado sobre los adsorbentes más utilizados industrialmente con sus propiedades físicas (ver Anexo H). Adicionalmente, se buscaron los parámetros de las isotermas de Langmuir y Freundlich para muchos casos de aplicación industrial. Esta información se encuentra muy dispersa, y con el fin de generar una ayuda al usuario al momento de usar la herramienta, se organizó en una base de datos. Asimismo, se establecieron las correlaciones para el cálculo de los coeficientes de transferencia de masa de los compuestos incluidos en el programa (Anexo B).

Para cristalización, el modelado se basó en el modelo de un equipo MSMR como se explicó anteriormente. Además, se recopiló toda la información necesaria para llevar a cabo esta operación: solubilidades a diferentes temperaturas, propiedades físicas (capacidad calorífica, calor de disolución, densidad del cristal, hábito de los cristales, etc.) para un gran número de compuestos disponibles en la literatura [17].

2.2 ESTRUCTURACIÓN DEL CONTENIDO

Se especificaron los parámetros de entrada y los datos que deberían ser suministrados por el usuario en cada uno de los equipos, definiendo así los datos de entrada que la herramienta necesitaba y la secuencia de cálculo que iba a realizar para obtener los resultados propios de cada diseño.

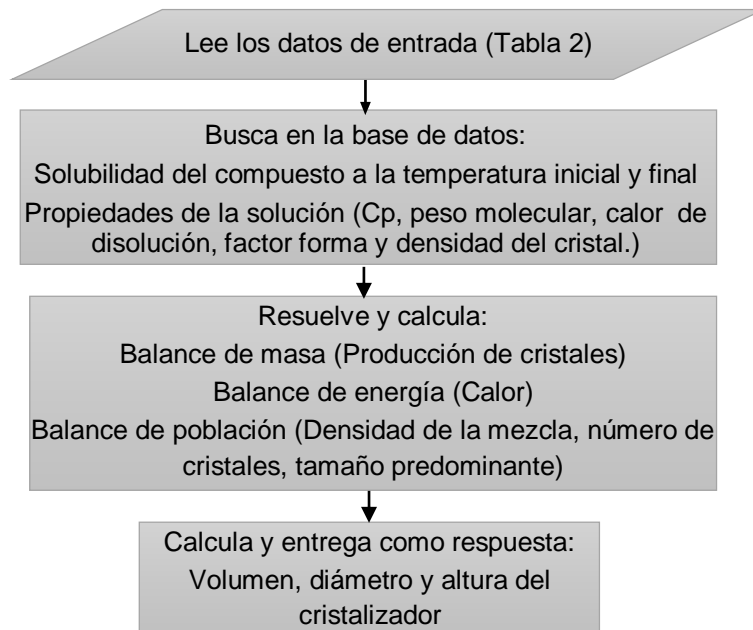
Para el diseño del cristizador se definió primero que todos los métodos de cristalización que va a permitir desarrollar la herramienta. Por lo tanto, enfriamiento,

evaporación y un método combinado enfriamiento-evaporación son los escogidos principalmente por su gran uso en la industria. Los datos de entrada requeridos y el algoritmo de solución se presentan en la *Tabla 2* y la *Figura 3* respectivamente.

Tabla 2. Datos de entrada requeridos para el diseño del cristalizador.

Parámetros (Se cuenta con una amplia base de datos de compuestos o el usuario puede cargar una nueva sustancia)	<ul style="list-style-type: none"> • Compuesto-Hidrato • Temperatura final o producción de cristales • Flujo másico, composición, masa evaporada (%) y temperatura inicial • Entalpía de alimento, cristal y licor madre (<i>opcional</i>)
Cinética (se ingresan o se importan datos por defecto)	<ul style="list-style-type: none"> • Parámetros cinéticos del compuesto
DTC	<ul style="list-style-type: none"> • Tabla de datos experimentales o tamaño deseado

Figura 3. Algoritmo de diseño del cristalizador.



Para el método de LUB y el método de Michaels, los datos de entrada requeridos se muestran en la *Tablas 3* y *4* respectivamente.

Tabla 3. Datos de entrada requeridos para el diseño del adsorbedor (LUB).

Condiciones de operación	<ul style="list-style-type: none"> • Flujo másico • Espesor y densidad del lecho • Densidad y concentración solución • Concentración inicial de adsorbato
Datos de equilibrio	<ul style="list-style-type: none"> • Constantes de las isothermas
Curva de ruptura	<ul style="list-style-type: none"> • Tabla de datos de la curva de ruptura • Tiempo de ruptura • Porcentaje de cambio de la curva

Tabla 4. Datos de entrada requeridos para el diseño del adsorbedor (Método de Michaels).

Condiciones de operación	<ul style="list-style-type: none"> • Flujo volumétrico • Concentración inicial • Temperatura, Presión (para gases) • Diámetro de la columna (supuesto) • Tiempo de ruptura (supuesto)
Adsorbente (se cuenta con una base de datos y una ayuda para escoger el adsorbente según su aplicación o el usuario puede ingresar un nuevo adsorbente)	<ul style="list-style-type: none"> • Diámetro de partícula y del lecho • Fracción de vacío del lecho • Forma del lecho
Parámetros (se ingresan o se importan)	<ul style="list-style-type: none"> • Nombre del soluto y solvente • Seleccionar la fase (gas o líquido) • Viscosidad y densidad de la solución • Coeficientes de transferencia de masa • Datos de equilibrio

(Los datos de equilibrio se pueden ingresar en tabla de datos o por medio de las isothermas de Langmuir o Frenlich para los cuales se dispone de varios valores de sus constantes que el usuario puede usar).

El método de cálculo del modelo de LUB consiste en encontrar el tiempo estequiométrico (tiempo en el que se alcanza la saturación media del lecho) y luego determinar la altura de la columna. Por otro lado, el algoritmo de cálculo para el modelo de Michaels se divide en tres partes: la primera parte calcula la altura de la torre junto con la zona de adsorción (*Figura 4*), la segunda simula la curva de ruptura propia de la operación (*Figura 5*) y finalmente la última parte del código determina la caída de presión en la torre.

Figura 4. Algoritmo de diseño para determinar la altura de la torre de adsorción.

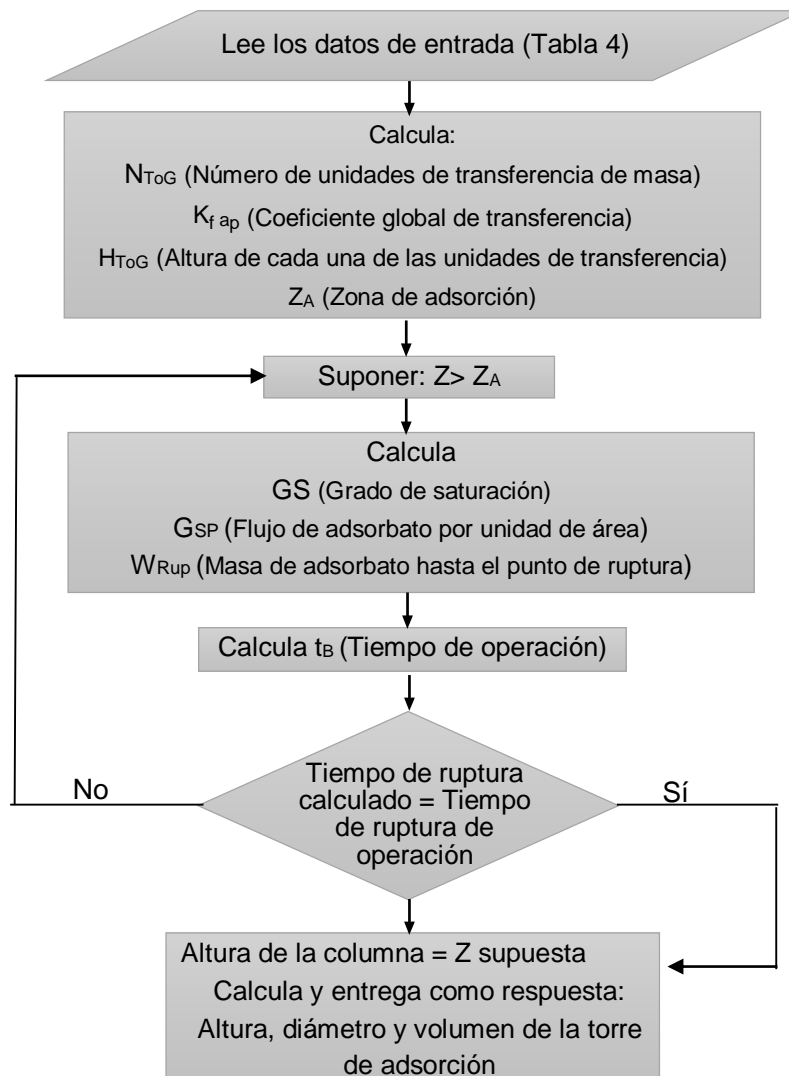
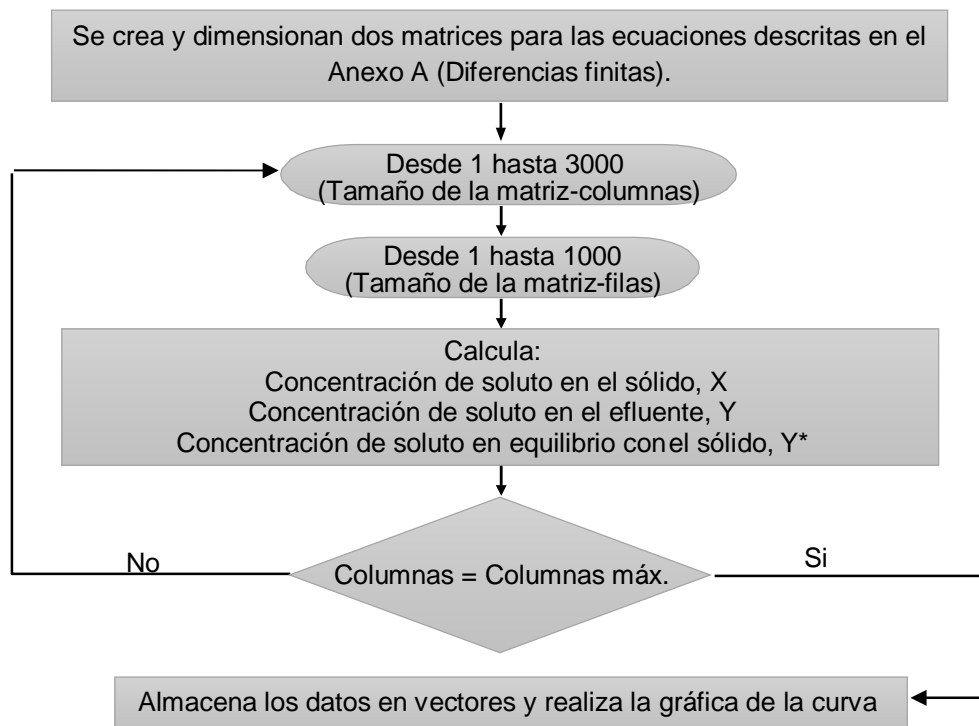


Figura 5. Algoritmo para estimar la curva de ruptura de una torre de adsorción.



2.3 DISEÑO Y MONTAJE DE LA INTERFAZ

El éxito de todo software, aparte de verse calificado por su funcionamiento, también depende de tener una interfaz agradable y de fácil uso. Se diseñó y se realizó el montaje de la interfaz utilizando el programa Microsoft Excel y el desarrollador de programación Visual Basic. Primero que todo se elaboró la base de datos con la información recopilada y en seguida se estructuró el código junto con la interfaz gráfica hasta conseguir los resultados de diseño para cada equipo (Anexo I), brindando ayudas en los formularios del programa para guiar al usuario hacia el diseño del equipo.

2.4 PRUEBAS DE FUNCIONAMIENTO

Se realizaron diferentes pruebas con el fin de detectar errores de cálculo para así hacer las correcciones necesarias al algoritmo y/o a la interfaz siempre con el

objetivo de obtener resultados lógicos y eficaces para cada diseño. Además, se tomaron las medidas necesarias para que la herramienta no se depure ante los errores en los que podría incurrir el usuario (falta de datos, en algunos casos valores numéricos negativos y/o ceros, etc.).

2.4.1 Pruebas de satisfacción al usuario

Se efectuaron pruebas con los estudiantes de IX semestre de Ingeniería Química de la UIS. Primero, se les dio a conocer la herramienta de diseño, su manejo y aplicación; en seguida se les pidió manipularlo mediante una guía en la que se consideran dos casos de estudio. Lo anterior se realizó con la intención de encontrar errores de depuración y además, contar con varias opiniones acerca de la interfaz gráfica y utilidad de la herramienta. Terminando el ejercicio práctico se hizo una encuesta de satisfacción la cual se puede apreciar en el Anexo J.

2.5 VALIDACIÓN DE LA HERRAMIENTA

2.5.1 Validación del modelo Michaels (Adsorción)

La herramienta de diseño para adsorbedores se validó usando tres casos de estudio (A, B y C). El caso A consiste en la remoción de iones de Cr^{+3} de disoluciones acuosas a escala laboratorio usando como adsorbente gel de sílice modificado [20, 21]. El caso B se basa en la adsorción de iones de Ni^{+2} sobre carbón activado [22] y el Caso C comprende el secado de estireno empleando alúmina comercial como adsorbente [23]. Las características de la solución y del adsorbente para los sistemas anteriores se detallan en la *Tabla 5*.

Para todos los casos se introducen en su totalidad los datos de la *Tabla 5* haciendo uso de la opción que ofrece la herramienta para ingresar un nuevo adsorbente (*ver* Anexo K). Para el caso A, como no se reporta el coeficiente de masa, éste se calcula

manualmente mediante las correlaciones descritas en el Anexo B usando las ecuaciones para soluciones electrolíticas. En todos los escenarios se tomó como principal suposición que la transferencia de masa predominante es la de la fase fluida.

Tabla 5. Características de los sistemas de adsorción para validar el modelo de Michaels.

Parámetro		Caso A	Caso B	Caso C
Isoterma de Langmuir	K [L/mg]	K=0,0023	K=0,4526	K=0,021
	Q [mg/g]	Q=10,679	Q=7,6297	Q=84,034
Densidad de la solución [g/mL]		0,997	1,045	0,904
Concentración [ppm]		1563	19,96	3000
Flujo [L/min]		0,03	0,0035	30
Temperatura [K]		298,15	301	293,15
Tiempo de ruptura [min]		70	No reporta	15000
Coeficiente de masa [1/s]		No reporta	0,0125	6,38E-5
Adsorbente		Aminopropilgel	Carbón activado	Alúmina
Densidad del lecho [g/mL]		0,67	0,23	0,85
Diámetro de partícula [mm]		4,4	10	1
Diámetro del lecho [cm]		4	2	120
Fracción de vacío		0,36	0,78	0,3

2.5.2 Validación del modelo LUB (Adsorción)

Este modelo se verificó basándose en el proceso de adsorción de iones de Cr^{+3} en un lecho fijo reportado por Espitia William [24]. En la *Tabla 6* se muestran los datos que se ingresaron al programa en el que se verificó que los datos de la curva de ruptura encontrados en la literatura describieran un comportamiento similar a la presentada en la *Figura 1* antes de realizar el diseño.

2.5.3 Validación del modelo MSMR (Cristalización)

Para comprobar el programa de cristalización se empezó validando los balances de masa y energía con un ejercicio práctico basado en la cristalización de $MgSO_4$

tomado de [25] y se terminó verificando los parámetros de diseño mediante un ejemplo de aplicación obtenido de [26] en el que se cristaliza $KAl(SO_4)_2$. Esto se realizó debido a que no se encontró un problema completo con todos los datos requeridos por la herramienta. Cabe resaltar que para el segundo caso, la temperatura final e inicial, la composición, el flujo de entrada y el porcentaje de masa evaporada se ajustaron manualmente hasta obtener una producción de cristales de 1000 kg/h dado que estas variables no se especifican en el texto citado. Los parámetros requeridos para las respectivas validaciones se indican en la *Tabla 7*.

Tabla 6. Características del sistema de adsorción para validar el modelo LUB.

Parámetro		Literatura
Isoterma	K [L/mg]	K=0,36
Langmuir	Q [mg/g]	Q=4,16
Densidad de la solución [g/mL]		0,904
Concentración [Fracción peso]		$3,16 \times 10^{-6}$
Rapidez de flujo [kg/hm ²]		8463
Tiempo de ruptura [h]		6,33
Densidad del lecho [g/mL]		0,953
Espesor del lecho [m]		0,075
Referencia		[23]

Tabla 7. Características del sistema de cristalización para validar el modelo MSMPR.

	Parámetro	Literatura
Datos para validar el balance de masa y energía	Método de cristalización	Enfriamiento
	Compuesto / Hidrato	MgSO ₄ / 7H ₂ O
	Temperatura inicial y final [°C]	54,4 y 20
	Concentración inicial [kg/100 kg agua]	48,2
	Flujo [kg/h]	2268
Datos para validar los parámetros de diseño	Producción de cristales [kg/h]	1000
	Compuesto / Hidrato	KAl(SO ₄) ₂ / anhidro
	Tamaño de cristal [μm]	600
	Factor de forma volumétrico	0,47
	Densidad del cristal [kg/m ³]	1770
	Cinética	$B = 1,23 \times 10^{28} \cdot M_T \cdot G^{3,2}$
	Velocidad de crecimiento [m/s]	$1,86 \times 10^{-8}$

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

3.1 RESULTADOS DE LA VALIDACIÓN

Los resultados que arroja el programa para la validación del modelo de Michaels, se muestran en la *Tabla 8* con su respectiva comparación.

Tabla 8. Comparación entre las variables de diseño obtenidos por CRYSDAD por el modelo de Michaels y los reportados en la literatura.

	Parámetro	Literatura	Calculado	Desviación
Caso A	Altura	70 cm	66,6 cm	4,8 %
	Tiempo de ruptura	70 min	66,14 min	5,51 %
Caso B	Altura	6 cm	8,03 cm	33,8 %
Caso C	Altura	30,12 m	30,73 m	2,04 %
	Tiempo de ruptura	15000 min	13752,51 min	8,31 %

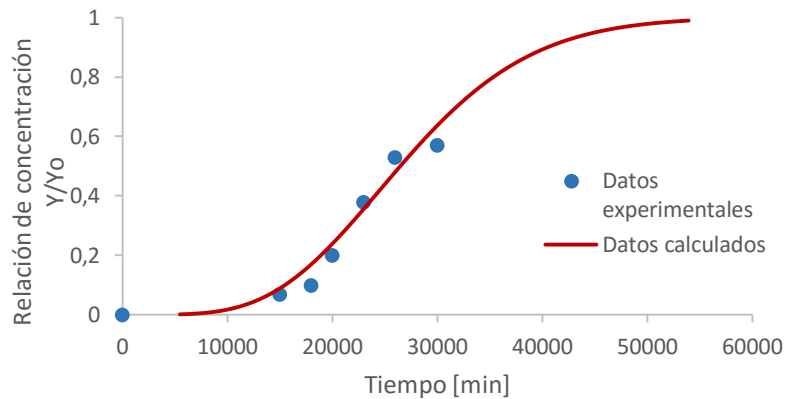
Analizando la Tabla 8 se evidencia que los resultados calculados presentan poca desviación respecto a los casos de estudio utilizados exceptuando al caso B. Sin embargo, teniendo en cuenta que el caso B es una prueba experimental a escala laboratorio, la diferencia de alturas no es muy grande (2 cm) y por lo tanto los resultados obtenidos se consideran tolerables a pesar de un porcentaje de error significativo. No es posible conocer con exactitud las posibles fuentes de error, pero en general se cree que pueden corresponder a: despreciar el termino de dispersión axial en la solución del balance de masa por considerar regímenes de flujo altos-moderados y al cálculo del coeficiente global de transferencia de masa debido a que solo se tuvo en cuenta la resistencia por parte de la fase fluida por ausencia de información acerca del coeficiente de masa de la fase sólida.

Adicionalmente, haciendo énfasis en el caso A, una causa de error se puede atribuir al tipo de correlación utilizada para el cálculo del coeficiente de masa que asume únicamente la presencia de dos iones en solución siendo que pueden existir más

(por ejemplo Ca^{+2} y Mg^{+2}). La presencia de iones adicionales provocan una disminución en el coeficiente de transferencia de masa, por ende, la altura de la torre aumenta y de esta manera también se amplía el área superficial del adsorbente haciendo más rápida la operación [27].

Además, en la *Figura 6* se observa la curva de ruptura simulada, y a modo demostrativo, se hace el paralelo tomando el caso C de ejemplo. De esta figura se puede concluir que los valores simulados predicen con una desviación aceptable los reportados en la literatura.

Figura 6. Comparación entre la curva de ruptura generada por CRYSDAD y los datos experimentales del caso de estudio C



En el caso del método LUB, la altura de la torre calculada se muestra en la *Tabla 9* junto con la indicada en la literatura. En la misma tabla se detallan los resultados obtenidos por el método de Michaels, gracias a que se cuenta con los coeficientes de masa de la fase sólida y la fase fluida ($1,2 \times 10^{-4} s^{-1}$ y $1,04 s^{-1}$ respectivamente) [24].

Observando la desviación resultante para los dos métodos, la altura muestra un margen de error pequeño respecto al valor definido en la literatura, por lo que se concluye que independientemente del método usado, las variables obtenidas son aceptables para un diseño preliminar de una torre de adsorción de lecho fijo. Cabe señalar que esta afirmación se puede realizar siempre y cuando se disponga de los

coeficientes de transferencia de masa esencialmente el de la fase sólida ya que al contar con datos experimentales que describan la curva de ruptura de un proceso real, el método LUB sería el más confiable para el diseño final del equipo [9].

Tabla 9. Comparación entre la altura obtenida por CRY SAD y la reportada en la literatura para adsorción.

	Parámetro	Literatura	Calculado	Desviación
LUB	Altura	25 cm	22,36 cm	10,56%
MICHAELS		25 cm	27,91 cm	11,64%

Por último, los valores obtenidos por la herramienta de diseño para un cristizador con sus correspondientes comparaciones son:

Tabla 10. Comparación entre los resultados obtenidos por CRY SAD y los reportados en la literatura para cristalización.

	Parámetro	Literatura	Calculado	Desviación
Datos de producción y calor	Producción de cristales [kg/h]	616,9	633,6	2,7 %
	Calor [kJ/h]	$2,6 \times 10^5$	$2,56 \times 10^5$	1,54 %
Parámetros de diseño	Tiempo de residencia [h]	2,99	2,93	2 %
	Volumen [m ³]	12	11,75	2,08 %

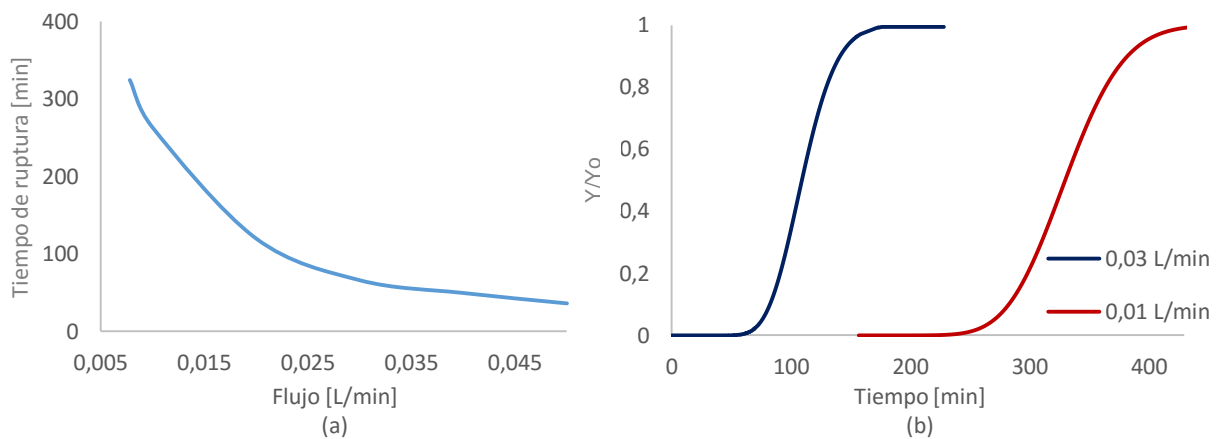
El porcentaje de error de las variables calculadas es lo suficientemente pequeño para asegurar que es posible lograr un diseño preliminar del equipo haciendo uso de esta herramienta. La desviación presentada en la producción de cristales, que además afecta la cantidad de calor, se basa en que el caso de estudio no tiene en cuenta la fracción (1-10% de la masa total) de licor madre (solución resultante después de la cristalización) retenida en los cristales [28].

3.2 EFECTO DE LAS VARIABLES DE ENTRADA EN LOS PARÁMETROS DE DISEÑO.

En la *Figura 7* se muestra la variación del tiempo de ruptura al cambiar el flujo de entrada manteniendo la altura constante y en la *Figura 8* se aprecia la tendencia

que presenta la altura de la torre al usar otros adsorbentes a partir de las características del caso A conservando el mismo tiempo de ruptura. En la *Figura 9* se observa el cambio que sufre el volumen al modificar el tamaño de partícula tomando como referencia la formación de cristales de $MgSO_4$ y de Na_2CO_3 .

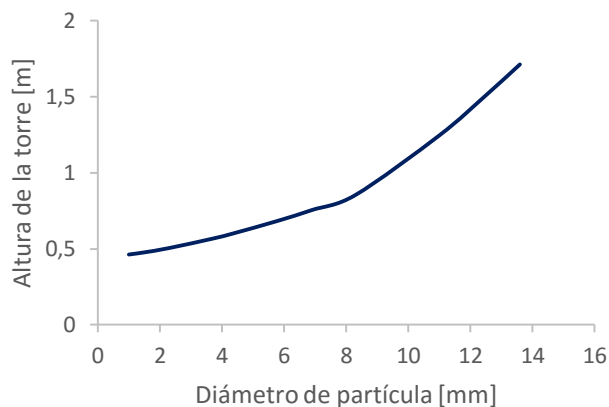
Figura 7. Efecto del flujo de entrada en la curva de ruptura para la columna de adsorción. (a) Variación del tiempo ruptura, (b) Influencia en la curva de ruptura



Se analiza que el tiempo de ruptura disminuye exponencialmente a medida que el flujo de entrada se incrementa (*ver Figura 7a*). Igual comportamiento lo reportan varios autores [22, 27, 29] y para el caso de estudio citado, se concluye que los mejores resultados se obtienen a un flujo de 0,03 L/min debido a que la curva de ruptura es más empinada (*ver Figura 7b*), lo que indica una mejor transferencia dentro de la columna aprovechando la capacidad de adsorción del lecho [22].

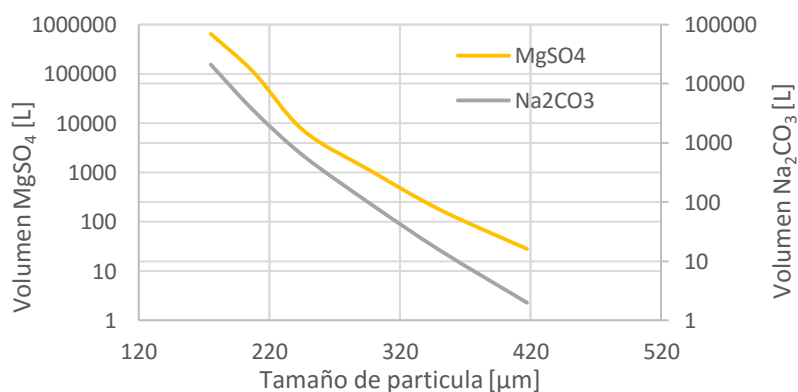
De la *Figura 8* se aprecia que la altura de la torre disminuye exponencialmente al disminuir el diámetro de partícula debido principalmente al aumento del coeficiente de transferencia de masa [6]. Sin embargo, al reducir el diámetro de partícula la caída de presión aumenta considerablemente (Ecuación 4), por lo que se le recomendaría al usuario a su buen criterio emplear un adsorbente que no disminuya excesivamente la altura de la torre para poder mantener una caída de presión baja.

Figura 8. Efecto del diámetro de partícula en la altura de la torre de adsorción.



Finalmente, la variación del volumen de un cristalizador es muy sensible ante una pequeña perturbación en el tamaño del cristal. Como se observa en la *Figura 9*, el volumen para cristalizar $MgSO_4$ pasa de 7000 L a $6,4 \times 10^5$ L y para producir Na_2CO_3 aumenta de 600 L a 21×10^3 L reduciendo de 245 μm a 175 μm el tamaño del cristal en ambos casos; lo que evidencia que la DTC es una variable crítica en el diseño de este equipo y a su vez depende del compuesto que se vaya a procesar.

Figura 9. Efecto del tamaño del cristal en el volumen del cristalizador.

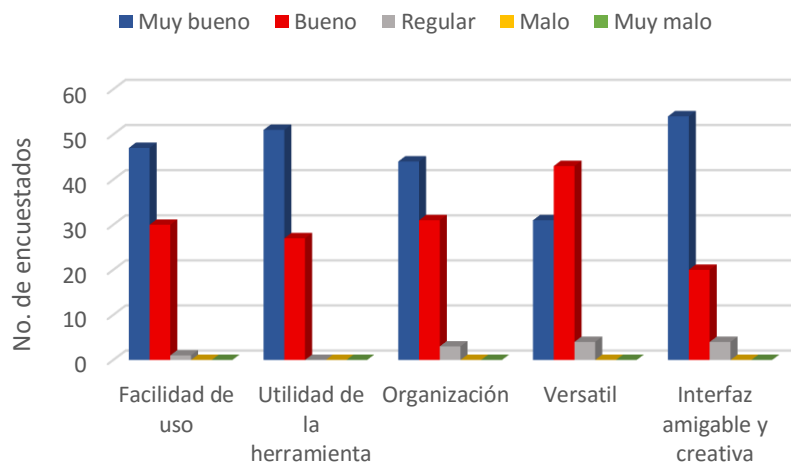


3.3 ANÁLISIS DE LA EVALUACIÓN DE LA HERRAMIENTA

Los resultados obtenidos de la encuesta realizada a 78 estudiantes fueron satisfactorios en todos los casos. Muchos de los comentarios mostraron empatía

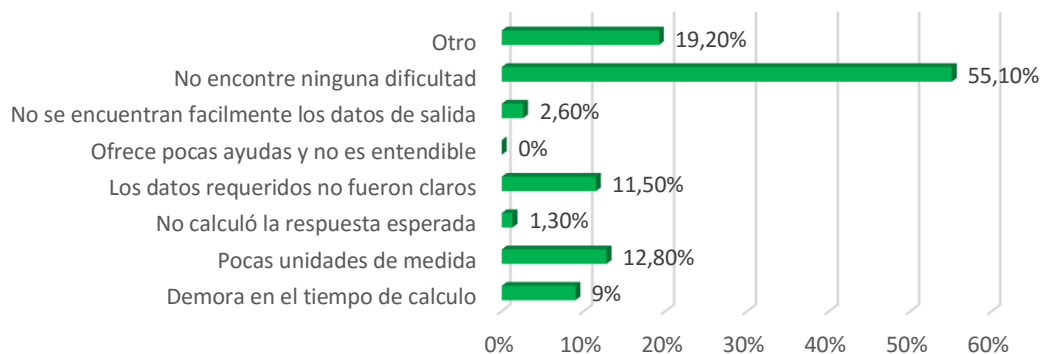
con los recursos utilizados por CRY SAD. Un gran porcentaje de usuarios coincidió en que esta herramienta es de utilidad para realizar el diseño básico de adsorbedores y cristalizadores debido a que es fácil de usar y cuenta con una buena interfaz gráfica donde se visualizan los datos de entrada y de salida de manera clara y organizada (*Figura 10*).

Figura 10. Evaluación de la herramienta CRY SAD.



Gracias a la manipulación de la herramienta por parte de los estudiantes, fue posible detectar errores de compilación en el código de programación; los cuales fueron corregidos satisfactoriamente. Además, se identificaron algunas dificultades y sugerencias (varias de ellas se detallan en la *Figura 11*) que fueron tenidas en cuenta para mejorar el programa en aspectos visuales y de ejecución.

Figura 11. Dificultades reportadas por los encuestados.



4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

La metodología implementada permitió desarrollar una herramienta de cómputo (CRYSAD) con una interfaz gráfica agradable, con una amplia base de datos y con diferentes tipos de ayudas para facilitar el diseño básico de adsorbedores de lecho fijo y cristalizadores.

Mediante el software CRYSAD se pueden obtener los parámetros básicos de diseño de sistemas de adsorción y cristalización. Según el proceso de validación, se comprobó que los valores calculados por CRYSAD son muy similares a los registrados en la literatura alcanzándose una desviación máxima del 12% para adsorción y 3% para cristalización.

Con las pruebas de satisfacción realizadas, se pudo determinar un alto grado de aceptación por CRYSAD cumpliendo con las expectativas de los usuarios.

Continuar con la elaboración de más programas para el diseño de otros equipos, principalmente los que se usan en procesos en los que intervienen sustancias sólidas, dado que son muy pocas o inexistentes las herramientas que se tienen para lograr un correcto dimensionamiento.

REFERENCIAS

- [1] OMAECHEVARRÍA, María Josefa; PÉREZ, Cynthia Sacristán y FERRERAS, Josefa Fernández. Simulación de un proceso industrial de cristalización de Cloruro de Sodio (NaCl) y aplicaciones. En: @ tic. revista d'innovació educativa [En línea]. No 13 (2014). p. 65-74. [Consultado el 8 de agosto del 2016]. Disponible en: <https://repositorio.unican.es>. ISSN 1989-3477.
- [2] INTELLIGEN, Inc. SuperPro Desinger Product Features. [Consultado el 9 de agosto de 2016]. Disponible en: www.intelligen.com
- [3] ASPENTECH: Optimizing Process Manufacturing. [Consultado el 10 de agosto de 2016]. Disponible en: www.aspentech.com
- [4] BORBA COSTA, Caliane. Modelagem e controle ótimo do processo de cristalização do ácido adípico. São Paulo, 2003. Trabajo de grado (Master en ingeniería química). Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química.
- [5] CARRILLO, Jesús, et al. Construcción de un simulador dinámico para procesos de cristalización por lotes a vacío. En: Información tecnológica [En línea]. Vol. 19, No. 3 (2008). p. 13-24. [Consultado el 15 de diciembre de 2016]. Disponible en: <http://www.citrevistas.cl/revista/volumenes.htm>. ISSN 0718-0764.
- [6] SERRANO, Ina. Diseño y simulación de columnas de adsorción de cromo de aguas tratadas de tenerías utilizando adsorbentes desarrollados en países iberoamericanos. Bucaramanga, 2004. Tesis de grado (Ingeniería Química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de ingenierías fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química.
- [7] McCABE, Warren; SMITH, Julian y HARRIOTT, Peter. Operaciones Unitarias en Ingeniería Química. Sexta edición. España: McGraw Hill, 2002. p. 877-913, 971-1000.
- [8] TREYBAL, Robert. Operaciones de Transferencia de Masa. Primera edición. México: McGraw Hill, 1988, Pág. 625-713.

- [9] TREYBAL, Robert. Operaciones de transferencia de masa. Segunda edición. México: McGraw-Hill, 2002. p. 680-705.
- [10] COONEY, David. Adsorption design for wastewater treatment. Primera edición. New York: Lewis Publishers, 1998. p. 76-89.
- [11] GEANKOPLIS, Christie. Procesos de transporte y operaciones unitarias. Tercera edición. México: Editorial CECSA, 1998. p. 459.
- [12] CASTELLAR ORTEGA, Grey Cecilia. Remoción de Pb(II) en disolución acuosa sobre carbón activado: Experimentos en columna. Bogotá, 2012. Trabajo de grado (Magíster en Ciencias Químicas). Convenio de cooperación Universidad Nacional de Colombia-Universidad del Magdalena. Facultad de ciencias. Departamento de Química.
- [13] MADDOX, Robert y HINES, Anthony. Transferencia de masa, fundamentos y aplicaciones. Primera edición en español. México: Prentice Hall Hispanoamericana, 1987. p. 481-521.
- [14] THOMAS, Jhon y CRITTENDEN, Barry. Adsorption Technology and Design. En: Elsevier Science & Technology Books, 1998. p.174- 175.
- [15] TUTUTI AVILA, Salvador. Control del proceso de cristalización continuo no-isotérmico empleando lógica difusa. Celaya, 2010. Trabajo de grado (Doctor en ingeniería química). Instituto tecnológico de Celaya. Departamento de ingeniería química.
- [16] BOLAÑOS REYNOSO, Eusebio. Control y optimización de las condiciones de operación de cristalizadores batch por enfriamiento. Celaya, 2000. Trabajo de grado (Doctor en ingeniería química). Instituto tecnológico de Celaya. Departamento de ingeniería química.
- [17] PERRY, Roberth y GREEN, Don. Perry's chemical engineers' handbook. Octava edición. Estados Unidos: Mc Graw Hill, 2008. p. 2-215,18-39,18-48.
- [18] RINCÓN LASPRILLA, Astrid Juliana. Puesta en marcha de una planta piloto de cristalización por lotes y análisis de su dinámica de enfriamiento. Bucaramanga, 2008. Trabajo de grado (Ingeniera química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de ingeniería fisicoquímicas. Escuela de ingeniería química.

[19] PÉREZ CHAMORRO, Pablo Andrés. Diseño conceptual y simulación de procesos de cristalización de perrenato de potasio. Santiago de Chile, 2010. Trabajo de grado (Ingeniero civil químico). Universidad de Chile. Facultad de ciencias físicas y matemáticas. Departamento de ingeniería química y biotecnología.

[20] ESTEVEZ, Zayda y OCHOA, Miguel. Diseño de un proceso de tratamiento para remoción de metales pesados en aguas residuales. Valencia 1996. Trabajo de grado (Ingeniero Químico). Universidad de Carabobo. Facultad de Ingeniería.

[21] CALDERÓN, Carlos y SUPERLANO, Francisco. Constucción de una unidad piloto para la remoción y recuperación de cromo (III) presente en aguas residuales. Valencia 2000. Tesis de grado (Ingeniero Químico). Universidad de Carabobo. Facultad de Ingeniería.

[22] NABARLATZ, Debora, et al. Batch and dynamic sorption of Ni(II) ions by activated carbon based on native lignocellulosic precursor. En: Journal of Environmental Management [En línea]. Vol 97 (2012). p. 109-115. [Consultado el 5 de enero de 2017]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[23] RIVERA MARTÍNEZ, María José. Diseño del proceso de purificación de estireno mediante adsorción en alúmina. Cantabria, 2005. Tesis Doctoral en Red (TDR). Universidad de Cantabria, Departamento de Ingenierías Química y Biomolecular.

[24] ESPITIA ABIRL; William Javier. Modelamiento de la adsorción de Cr^{+3} sobre un lecho fijo. Bogotá, 2013. Trabajo de grado (Magister en Ingeniería Química). Universidad Nacional de Colombia. Facultad de ingeniería de maestría en Ingeniería Química.

[25] MARTÍNEZ DE LA CUESTA, Pedro y MARTÍNEZ RUS, Eloísa. Operaciones de separación en ingeniería química, métodos de cálculo. Primera edición. España: Editorial PEARSON, 2004. p. 869-871.

[26] JONES, Alan. Crystallization process systems. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2002. p. 205-207.

[27] VALENCIA RÍOS, Jesús Sigifredo y CASTELLAR ORTEGA, Grey. Predicción de las curvas de ruptura para la remoción de Plomo(II) en disolución acuosa sobre

carbón activado en una columna empacada. En: Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia [En línea]. No 6 (2013). p. 141-158. [Consultado el 6 de enero de 2017]. Disponible en: <http://www.scielo.org.co>. ISSN 0120-6230.

[28] VALENCIA, Benhur. Balances de materia en operaciones de cristalización. Manizales, 1986. Guía para el análisis de balances de masa. Universidad Nacional de Colombia. Departamento de Ingenierías. Sección procesos químicos.

[29] SRIVASTAVA, Vikas, et al. Prediction of breakthrough curves for sorptive removal of phenol by bagasse fly ash packed bed. En: Industrial & Engineering Chemistry Research [En línea]. Vol 47, No 5 (2008). p. 1603-1613. [Consultado el 6 de enero de 2017]. Disponible en: <http://pubs.acs.org>.

[30] MERSMANN, Alfons. Crystallization technology handbook. Segunda edición. New York: CRC Press, 2001. p. 47-98.

[31] TISCAR CERVERA, Juan Miguel. Modelizado y simulación de un cristalizador continuo industrial: Oscilaciones, sembrado y programación en scilab. Madrid, 2014. Trabajo de grado (Máster en ciencias, tecnología y aplicaciones de los materiales cerámicos).

[32] GONZÁLES RAMÍREZ, José Enrique, et al. Modelo de un proceso de cristalización continua de un sorbete por medio de la metodología de momentos. En: Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería [En línea]. Vol 29, Issue 4 (2013). p. 215-224. [Consultado el 3 de diciembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[33] BADRAN, Laura, et al. Transferencia de masa 1, Barranquilla, 2015. Universidad del atlántico, Facultad de ingenierías, Programa de ingeniería Química.

[34] WAUQUIER, Jean Pierre. Le raffinage du petrole 2, Procédés de séparation. Segunda edición. Paris: Editions Technip, 1998. p.529-540.

[35] NIRAV, Raval; PRAPTI, Shah y NISHA, Shah. Adsorptive removal of nickel (II) ions from aqueous environment: A review en Journal of Environmental Management. Vol. 179 (2016). p.1-20. [Consultado el 26 de agosto de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[36] GOMEZ RENGIFO, Viviana; VELASQUEZ JIMENEZ, Jorge y QUINTANA MARIN, German. Lignina como adsorbente de metales pesados en Revista Investigaciones Aplicadas. Vol. 7(2013). p.74-85. [Consultado el 26 de agosto de 2016]. Disponible en: <http://revistas.upb.edu.co/index.php/investigacionesaplicadas>.

[37] MENACHO, Joaquín, et al. Un método para la simulación de columnas de adsorción en Afinidad LXVIII vol.552 (2011). p.86-94. [Consultado el 1 de septiembre de 2016]. Disponible en: <http://www.url.edu/es>.

[38] CASTELLAR ORTEGA, Grey, et al. Adsorción por lote y en una columna de lecho fijo del colorante B39 sobre carbón activado granular en Prospect. Vol.11 (2013). p.66-75. [Consultado el 1 de septiembre de 2016]. Disponible en: <https://dialnet.unirioja.es/>.

[39] DEMIRBAS, Ayhan. Heavy metal adsorption onto agro-based waste materials: A review en Journal of Environmental Management. Vol. 157 (2016). p.220-229. [Consultado el 4 de septiembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[40] SOSA, Griselda y ZALTS, Anita. Adsorción de colorantes sobre tierra de diatomeas. Un trabajo de laboratorio con enfoque ambiental en educación química para un futuro sostenible. Vol. 23 (2012). p.492-497. [Consultado el 29 de agosto de 2016]. Disponible en: <https://www.unam.mx/>. ISSN 1870-8404

[41] AHMARUZZAMAN, Md. Adsorption of phenolic compounds on low-cost adsorbents: A review en Advances in Colloid and Interface Science. Vol. 143 (2008). p.48-67. [Consultado el 4 de septiembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[42] MOHAN, Dinesh y PITTMAN, Charles. Arsenic removal from water/wastewater using adsorbents—A critical review en Journal of Environmental Management. Vol.142. p.1-53. [Consultado el 4 de septiembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[43] LEE YI, Seul; JIN PARK, Soo. A review on solid adsorbents for carbon dioxide capture en Journal of Industrial and Engineering Chemistry. Vol. 23(2015). p.1-11. [Consultado el 4 de septiembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[44] BABEL, Sandhya y KURNIAWAN, Tonni Agustiono. Low-cost adsorbents for heavy metals uptake from contaminated water: a review en *Journal of Hazardous Materials*. Vol.97 (2003). p.219-243. [Consultado el 4 de septiembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[45] KURNIAWAN, Tonni Agustiono, et al. Comparisons of low-cost adsorbents for treating wastewaters laden with heavy metals en *Science of the Total Environment*. Vol.366 (2006). p.409-426. [Consultado el 4 de septiembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[46] GUPTA, V.K., SUHAS. Application of low-cost adsorbents for dye removal – A review en *Journal of Environmental Management*. Vol.90 (2009). p. 2313–2342. [Consultado el 4 de septiembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[47] BHATNAGAR, Amit y SILLANPÄÄ, Mika. A review of emerging adsorbents for nitrate removal from wáter en *Chemical Engineering Journal*. Vol.168 (2011). p.493-504. [Consultado el 5 de septiembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

[48] RAFATULLAHA, Mohd, et al. Adsorption of methylene blue on low-cost adsorbents: A review en *Journal of Hazardous Materials*. Vol.177. p.70-80. [Consultado el 5 de septiembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

BIBLIOGRAFÍA

BOLAÑOS REYNOSO, Eusebio. Control y optimización de las condiciones de operación de cristalizadores batch por enfriamiento. Celaya, 2000. Trabajo de grado (Doctor en ingeniería química). Instituto tecnológico de Celaya. Departamento de ingeniería química.

BORBA COSTA, Caliane. Modelagem e controle ótimo do proceso de cristalização do ácido adípico. São Paulo, 2003. Trabajo de grado (Master en ingeniería química). Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química.

CALDERÓN, Carlos y SUPERLANO, Francisco. Constucción de una unidad piloto para la remoción y recuperación de cromo (III) presente en aguas residuales. Valencia 2000. Tesis de grado (Ingeniero Químico). Universidad de Carabobo. Facultad de Ingeniería.

COONEY, David. Adsorption design for wastewater treatment. Primera edición. New York: Lewis Publishers, 1998. p. 76-89.

CARRILLO, Jesús, et al. Construcción de un simulador dinámico para procesos de cristalización por lotes a vacío. En: Información tecnológica [En línea]. Vol. 19, No. 3 (2008). p. 13-24. [Consultado el 15 de diciembre de 2016]. Disponible en: <http://www.citrevistas.cl/revista/volumenes.htm>. ISSN 0718-0764.

CASTELLAR ORTEGA, Grey Cecilia. Remoción de Pb(II) en disolución acuosa sobre carbón activado: Experimentos en columna. Bogotá, 2012. Trabajo de grado (Magíster en Ciencias Químicas). Convenio de cooperación Universidad Nacional de Colombia-Universidad del Magdalena. Facultad de ciencias. Departamento de Química.

ESPITIA ABIRL; William Javier. Modelamiento de la adsorción de Cr^{+3} sobre un lecho fijo. Bogotá, 2013. Trabajo de grado (Magister en Ingeniería Química). Universidad Nacional de Colombia. Facultad de ingeniería de maestría en Ingeniería Química.

ESTEVEZ, Zayda y OCHOA, Miguel. Diseño de un proceso de tratamiento para remoción de metales pesados en aguas residuales. Valencia 1996. Trabajo de grado (Ingeniero Químico). Universidad de Carabobo. Facultad de Ingeniería.

GEANKOPLIS, Christie. Procesos de transporte y operaciones unitarias. Tercera edición. México: Editorial CECSA, 1998. p. 459.

GONZÁLES RAMÍREZ, José Enrique, et al. Modelo de un proceso de cristalización continua de un sorbete por medio de la metodología de momentos. En: Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería [En línea]. Vol 29, Issue 4 (2013). p. 215-224. [Consultado el 3 de diciembre de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

JONES, Alan. Crystallization process systems. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2002. p. 205-207.

MADDOX, Robert y HINES, Anthony. Transferencia de masa, fundamentos y aplicaciones. Primera edición en español. México: Prentice Hall Hispanoamericana, 1987. p. 481-521.

MARTÍNEZ DE LA CUESTA, Pedro y MARTÍNEZ RUS, Eloísa. Operaciones de separación en ingeniería química, métodos de cálculo. Primera edición. España: Editorial PEARSON, 2004. p. 869-871.

McCABE, Warren; SMITH, Julian y HARRIOTT, Peter. Operaciones Unitarias en Ingeniería Química. Sexta edición. España: McGraw Hill, 2002. p. 877-913, 971-1000.

MERSMANN, Alfons. Crystallization technology handbook. Segunda edición. New York: CRC Press, 2001. p. 47-98.

NABARLATZ, Debora, et al. Batch and dynamic sorption of Ni(II) ions by activated carbon based on native lignocellulosic precursor. En: Journal of Environmental Management [En línea]. Vol 97 (2012). p. 109-115. [Consultado el 5 de enero de 2017]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

NIRAV, Raval; PRAPTI, Shah y NISHA, Shah. Adsorptive removal of nickel (II) ions from aqueous environment: A review en Journal of Environmental Management. Vol. 179 (2016). p.1-20. [Consultado el 26 de agosto de 2016]. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com>.

OMAECHEVARRÍA, María Josefa; PÉREZ, Cynthia Sacristán y FERRERAS, Josefa Fernández. Simulación de un proceso industrial de cristalización de Cloruro de Sodio (NaCl) y aplicaciones. En: @ tic. revista d'innovació educativa [En línea]. No 13 (2014). p. 65-74. [Consultado el 8 de agosto del 2016]. Disponible en: <https://repositorio.unican.es>. ISSN 1989-3477.

PÉREZ CHAMORRO, Pablo Andrés. Diseño conceptual y simulación de procesos de cristalización de perrenato de potasio. Santiago de Chile, 2010. Trabajo de grado (Ingeniero civil químico). Universidad de Chile. Facultad de ciencias físicas y matemáticas. Departamento de ingeniería química y biotecnología.

PERRY, Roberth y GREEN, Don. Perry's chemical engineers' handbook. Octava edición. Estados unidos: Mc Graw Hill, 2008. p. 2-215,18-39,18-48.

RINCÓN LASPRILLA, Astrid Juliana. Puesta en marcha de una planta piloto de cristalización por lotes y análisis de su dinámica de enfriamiento. Bucaramanga, 2008. Trabajo de grado (Ingeniera química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de ingeniería fisicoquímicas. Escuela de ingeniería química.

RIVERA MARTÍNEZ, María José. Diseño del proceso de purificación de estireno mediante adsorción en alúmina. Cantabria, 2005. Tesis Doctoral en Red (TDR). Universidad de Cantabria, Departamento de Ingenierías Química y Biomolecular.

SERRANO, Ina. Diseño y simulación de columnas de adsorción de cromo de aguas tratadas de tenerías utilizando adsorbentes desarrollados en países iberoamericanos. Bucaramanga, 2004. Tesis de grado (Ingeniería Química). Universidad Industrial de Santander. Facultad de ingenierías fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química.

SRIVASTAVA, Vikas, et al. Prediction of breakthrough curves for sorptive removal of phenol by bagasse fly ash packed bed. En: Industrial & Engineering Chemistry Research [En línea]. Vol 47, No 5 (2008). p. 1603-1613. [Consultado el 6 de enero de 2017]. Disponible en: <http://pubs.acs.org>.

THOMAS, Jhon y CRITTENDEN, Barry. Adsorption Technology and Design. En: Elsevier Science & Technology Books, 1998. p.174- 175.

TISCAR CERVERA, Juan Miguel. Modelizado y simulación de un cristizador continuo industrial: Oscilaciones, sembrado y programación en scilab. Madrid,

2014. Trabajo de grado (Máster en ciencias, tecnología y aplicaciones de los materiales cerámicos).

TREYBAL, Robert. Operaciones de Transferencia de Masa. Primera edición. México: McGraw Hill, 1988, Pág. 625-713.

TREYBAL, Robert. Operaciones de transferencia de masa. Segunda edición. México: McGraw-Hill, 2002. p. 680-705.

TUTUTI AVILA, Salvador. Control del proceso de cristalización continuo no-isotérmico empleando lógica difusa. Celaya, 2010. Trabajo de grado (Doctor en ingeniería química). Instituto tecnológico de Celaya. Departamento de ingeniería química.

VALENCIA, Benhur. Balances de materia en operaciones de cristalización. Manizales, 1986. Guía para el análisis de balances de masa. Universidad Nacional de Colombia. Departamento de Ingenierías. Sección procesos químicos.

VALENCIA RÍOS, Jesús Sigifredo y CASTELLAR ORTEGA, Grey. Predicción de las curvas de ruptura para la remoción de Plomo(II) en disolución acuosa sobre carbón activado en una columna empacada. En: Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia [En línea]. No 6 (2013). p. 141-158. [Consultado el 6 de enero de 2017]. Disponible en: <http://www.scielo.org.co>. ISSN 0120-6230.

ANEXO A. BALANCE DE MASA DE ADSORBATO Y SU SOLUCIÓN

En este balance (A.1) se asume que el adsorbato se transporta a través del elemento diferencial de lecho empacado por el fenómeno de difusión acumulándose en las partículas del adsorbente.

$$\varepsilon A_T \left(-D_{Aa} \frac{dY}{dZ} + YU_L \right)_z - \varepsilon A_T \left(-D_{Aa} \frac{dY}{dZ} + YU_L \right)_{z+\Delta z} = \varepsilon A_T \left(\Delta z \frac{dY}{dt} \right) + A_T \left(\rho_a \frac{dX}{dt} \right) \quad (A.1)$$

Aplicando un límite para ΔZ , dividiendo entre $\varepsilon A_T \Delta Z$ y suponiendo que: la velocidad es constante, la concentración de adsorbato en el fluido es diluida, el término de dispersión axial es despreciable para regímenes alto-moderados; entonces el balance de adsorbato se expresa [13]:

$$\left(\varepsilon U_L \frac{dY}{dZ} \right) + \left(\varepsilon \frac{dY}{dt} \right) + \left(\rho_a \frac{dX}{dt} \right) = 0 \quad (A.2)$$

Mediante la revisión bibliográfica realizada se encontró que el segundo término del lado izquierdo de la ecuación (A.2) presenta valores pequeños con relación a los otros términos del balance [13]. De este modo la ecuación (A.2) queda:

$$\left(\varepsilon U_L \frac{dY}{dZ} \right) + \left(\rho_a \frac{dX}{dt} \right) = 0 \quad (A.3)$$

La ecuación (7) y (A.3) se pueden simplificar rescribiéndolas en términos de variables adimensionales. Esto se hace con la finalidad de definir nuevas variables independientes, que agrupen en un solo término los parámetros de la ecuación para que permanezcan constantes con el tiempo y la longitud, que son las variables independientes del sistema [13, 19]. Estas nuevas variables adimensionales son la longitud (η) y el tiempo (τ) representadas por medio de las ecuaciones (A.4) y (A.5). Se definen los parámetros adimensionales de concentración y y x con las ecuaciones (A.6) y (A.7) respectivamente.

$$\eta = \frac{K_f a_p Z}{\varepsilon U_L} \quad (A.4)$$

$$y = \frac{Y}{Y_0} \quad (A.6)$$

$$\tau = \frac{K_f a_p Y_0}{\rho_A X_T} \left(t - \frac{Z}{U_L} \right) \quad (A.5)$$

$$x = \frac{X}{X_T} \quad (A.7)$$

De acuerdo a lo anterior, las ecuaciones (7) y (A.3) se obtienen de la siguiente forma:

$$\frac{dx}{d\tau} = y - x \quad (A.8)$$

$$\frac{dy}{d\eta} = -y + x \quad (A.9)$$

Para el caso en que la concentración del influente es constante a la entrada y la concentración inicial de soluto en el lecho es cero, las condiciones límites son [7]:

$$Y = Y_0 \text{ En } Z = 0 \quad Y = 1 \text{ En } \eta = 0 \text{ para todo } \tau$$

$$X = 0 \text{ En } t - \frac{Z}{U_L} \quad X = 0 \text{ En } \tau = 0 \text{ para todo } \eta$$

La solución de las ecuaciones (A.8) y (A.9) se realiza por el método de diferencias finitas hacia delante, y teniendo presentes las condiciones de borde conocidas se obtiene la curva de ruptura. Estas ecuaciones en forma discretizada quedan:

$$x_{(i,j+1)} = x_{(i,j)} + \Delta\tau(y_{(i,j)} - x_{(i,j)}) \quad (A.10)$$

$$y_{(i,j+1)} = y_{(i,j)} + \Delta\eta(y_{(i,j)} - x_{(i,j)}) \quad (A.11)$$

ANEXO B. CORRELACIONES PARA EL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA Y DIFUSIVIDADES PARA LA OPERACIÓN DE ADSORCIÓN

1. Correlaciones para gases

<p>Correlación de Hougen [18] (Reynolds < 90)</p>	$K_f a_p = \frac{10,9F(1-\varepsilon)}{d_p A_T} \left(\frac{D_f}{d_p F/A_T}\right)^{0,51} \left(\frac{D_f \rho}{\mu}\right)^{0,16} \quad (B.1)$
<p>Correlaciones a través de un lecho fijo [9] (90 < Reynolds < 4000)</p>	$Sc = 0,6$ $J_D = \frac{2,06}{\varepsilon} * Re^{-0,575} \quad (B.2)$ $S_{tn} = (J_D/Sc)^{0,66} \quad (B.3)$ $Sh = S_{tn} Re Sc \quad (B.4)$ $K_L = \frac{Sh D_f}{d_p} \quad (B.5)$ $K_f a_p = 6 K_L \rho \frac{1-\varepsilon}{d_p} \quad (B.6)$
<p>Correlaciones a través de un lecho fijo [8] (5000 < Reynolds < 10300)</p>	$Sc = 0,6$ $J_D = \frac{20,4}{\varepsilon} Re^{-0,815} \quad (B.7)$ $S_{tn} = (J_D/Sc)^{0,66} \quad Sh = S_{tn} Re Sc$ $K_L = \frac{Sh D_f}{d_p}$ $K_f a_p = 6 K_L \rho \frac{1-\varepsilon}{d_p}$
<p>Correlaciones para lechos fijos [11] (4000 < Reynolds < 5000) (Reynolds > 10300)</p>	$Sc = \frac{\mu}{\rho D_f} \quad (B.8)$ $Sh = 2 + 1,1 Sc^{0,33} Re^{0,6} \quad (B.9)$ $K_L = \frac{Sh D_f}{d_p}$ $K_f a_p = 6 K_L \rho \frac{1-\varepsilon}{d_p}$

2. Correlaciones para líquidos

Correlación de Hougen [13] Soluciones acuosas (flujo laminar)	$K_f a_p = 4,37\rho \left(\frac{\left(\frac{D_f F}{A_T} \right)^{0,5} (1 - \varepsilon)}{d_p^{1,5}} \right) \quad (B. 10)$
Correlaciones para lechos fijos [11] (otros solventes incluyen agua en flujo transitorio y turbulento)	$Sh = 2 + 1,1Sc^{0,33} Re^{0,6} \quad Sc = \frac{\mu}{\rho D_f}$ $K_L = \frac{Sh D_f}{d_p} \quad K_f a_p = 6K_L \rho \frac{1 - \varepsilon}{d_p}$

$K_f a_p$ = Coeficiente de transferencia de masa [s^{-1}]

F = Flujo volumétrico [m^3/s]

ε = Fracción de vacío

D_f = Difusividad [m^2/s]

A_T = Área transversal [m^2]

d_p = Diámetro de partícula del adsorbente [m]

ρ = Densidad de la solución [kg/m^3]

μ = Viscosidad de la solución [$Pa \cdot s$]

Sc y Sh = Número de Schmidt y número de Sherwood [adimensional]

Jd = Grupo adimensional de transferencia de masa [adimensional]

Stn = Número de Stanton [adimensional]

K_L = Coeficiente de transferencia de masa de la fase fluida [s^{-1}]

Re = Número de Reynolds [adimensional]

3. Difusividad en líquidos

- Ecuación de Nernst-Haskell para soluciones electrolíticas

$$D_L = \frac{RT \left(\frac{1}{N_+} \right) + \left(\frac{1}{N_-} \right)}{F^2 \left(\frac{1}{\lambda_+} \right) + \left(\frac{1}{\lambda_-} \right)} \quad (B. 11)$$

R = Constante de los gases [8,314 J/mol K]

F = Constante da Faraday [96,488 C/mol]

N_+ , N_- = carga del catión y el anión [valor absoluto]

λ_+ , λ_- = Conductividad del catión y el anión [$m^2/\Omega mol$]

T = Temperatura [K]

- Ecuación de Wilke-Chang (modelo para disoluciones con un soluto distinto al agua).

$$D_L = \frac{(1,173 \times 10^{-16})(\varphi M_B)^{0,5} T}{\mu_B V_A^{0,6}} \quad (B. 12)$$

- Ecuación de Sitaraman (modelo para trabajar cuando el soluto es agua).

$$D_L = 16,79E^{-14} \left(\frac{M_B^{0,5} \Delta H_B^{0,33} T}{\mu_B V_A^{0,5} \Delta H_A^{0,3}} \right)^{0,93} \quad (B. 13)$$

φ = Parámetro de asociación del solvente

μ_B = Viscosidad del solvente [cP]

4. Difusividad en gases

- Ecuación de Fuller

$$D_G = \frac{1E^{-9} T^{1,75} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{0,5}}{P [(\sum V_A)^{0,33} + (\sum V_B)^{0,33}]^2} \quad (B. 14)$$

V_A , V_B = Volumen molar del soluto y solvente en el punto de ebullición [$m^3/kmol$]

ΔH_A , ΔH_B = Calor latente de vaporización en el punto de ebullición normal [J/kg]

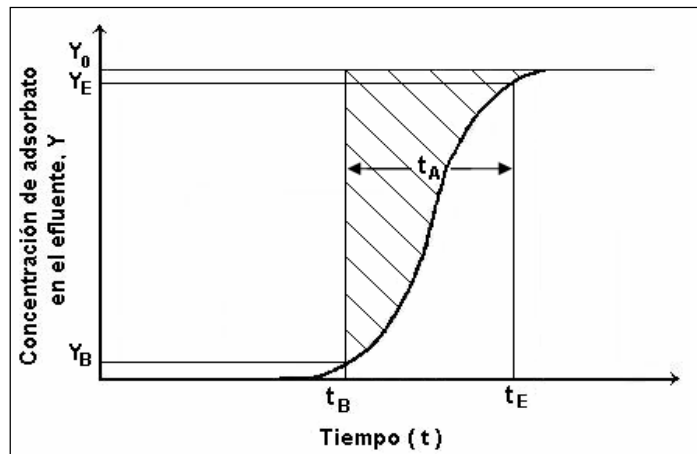
M_B , M_A = Pesos moleculares del solvente y soluto respectivamente [kg/kmol]

P = Presión [atm]

ANEXO C. MODELO DE MICHAELS

Como ya se describió, la concentración de adsorbato en el efluente, Y , aumenta del 5 al 95% de la concentración inicial [7], estos valores corresponden a Y_B y Y_E respectivamente en la curva de ruptura que se muestra en la *Figura 12*.

Figura 12. Curva de ruptura.



Fuente: Tomado de [3].

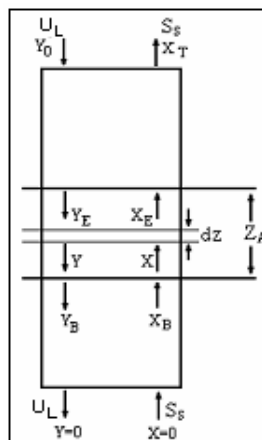
El tiempo correspondiente a Y_B es el tiempo de ruptura, t_B ; y el tiempo propio para Y_E es el tiempo de saturación del lecho, t_E . Después que se establece la *zona de adsorción* se requiere un tiempo, t_A , para pasar de Y_B a Y_E [8].

Es posible establecer una analogía entre la zona de adsorción calculada mediante el tratamiento del adsorbedor como lecho fijo, y la calculada por el tratamiento del adsorbedor como una unidad de extracción en contracorriente. Si las condiciones a través de la zona de adsorción en un lecho fijo son equivalentes a aquellas que existen en estado estable en una unidad de extracción en contracorriente, es posible aplicar directamente la teoría de extracción a este caso. Un análisis simplificado de las condiciones existentes en una unidad ideal de adsorción en contracorriente está basado en las siguientes suposiciones [8]:

- Las condiciones de flujo y concentración en las fases sólida y líquida son uniformes y constantes a través de la sección transversal del lecho.
- Los coeficientes de transferencia de masa son constantes.

Considerando una columna en la cual la solución contaminada se pasa en forma descendente en contracorriente con el sólido adsorbente, las velocidades relativas del adsorbente y la solución deben ser ajustadas de tal manera que el líquido que deja el fondo de la columna esté esencialmente libre de adsorbato y el sólido que abandona la columna esté saturado con adsorbato. Este proceso evidentemente requiere de una columna con longitud infinita, por lo tanto, como aproximación, se considera que en la mitad de la columna es donde ocurre la mayoría de la transferencia de masa, y donde se localiza la zona de adsorción [8]. Una representación de lo anterior se aprecia en la *Figura 13*.

Figura 13. Zona de adsorción en una torre de adsorción en contracorriente.



Fuente: Tomado de [3].

El balance de adsorbato en esta unidad de adsorción se expresa mediante la ecuación (C.1)

$$U_L * (Y_0 - 0) = S_S * (X_T - 0) \quad (C.1)$$

En donde, S_S y U_L son el flujo másico de adsorbato y el flujo másico de fluido por unidad de área respectivamente. En los procesos de extracción en contracorriente

se define el número de unidades de transferencia de masa, N_{TOG} , mediante la ecuación. (C.2)

$$N_{TOG} = \int_{Y_B}^{Y_E} \frac{dY}{Y-Y^*} = \int_{0,05Y_0}^{0,95Y_0} \frac{dY}{Y-Y^*} = \frac{Z_A}{H_{TOG}} \quad (C.2)$$

La altura de cada unidad de transferencia de masa, H_{TOG} , ecuación (C.3), y la altura de la *zona de adsorción*, ecuación (C.4) se obtienen [3]:

$$H_{TOG} = \frac{U_L}{K_f a_p} \quad (C.3) \quad Z_A = N_{TOG} * H_{TOG} \quad (C.4)$$

El valor N_{TOG} puede calcularse por integración numérica con la ecuación (C.2), y es independiente para cada concentración inicial de adsorbato. De acuerdo con el modelo planteado por Michaels, se definen unos nuevos parámetros y variables para realizar el diseño de columnas de adsorción. El grado de saturación del lecho, GS , se establece en el punto de ruptura por medio de la ecuación (C.5) y La fracción de adsorbente que puede retener adsorbato en la zona de adsorción, f , puede ser calculada con la ecuación (C.6).

$$GS = \frac{Z-f*Z_A}{Z} \quad (C.5) \quad f = \int_0^1 \left(1 - \frac{Y}{Y_0}\right) * d \frac{V-V_B}{V_A} \quad (C.6)$$

La masa de adsorbato retenida por el adsorbente por unidad de área transversal del lecho hasta el punto de ruptura, W_{Rupt} , se estima con la ecuación (C.7) en donde W_{Ads} es la masa del adsorbente y X_T es la concentración en equilibrio con Y_0 .

$$W_{rupt} = \frac{W_{ads}}{At} * GS * X_T \quad (C.7)$$

Una relación que permite calcular el tiempo de ruptura, t_B de la torre según las características de la columna, es la que se muestra en la ecuación (C.8) en la que G_{SP} se determina por la ecuación (C.9).

$$t_B = \frac{W_{rupt}}{G_{SP}} \quad (C.8) \quad G_{SP} = U_L * Y_0 \quad (C.9)$$

Partiendo de la ecuación (C.5) a la (C.9), suponiendo una altura mayor a Z_A , se itera comparando el tiempo, t_B , con el tiempo supuesto hasta conseguir la altura final de la torre.

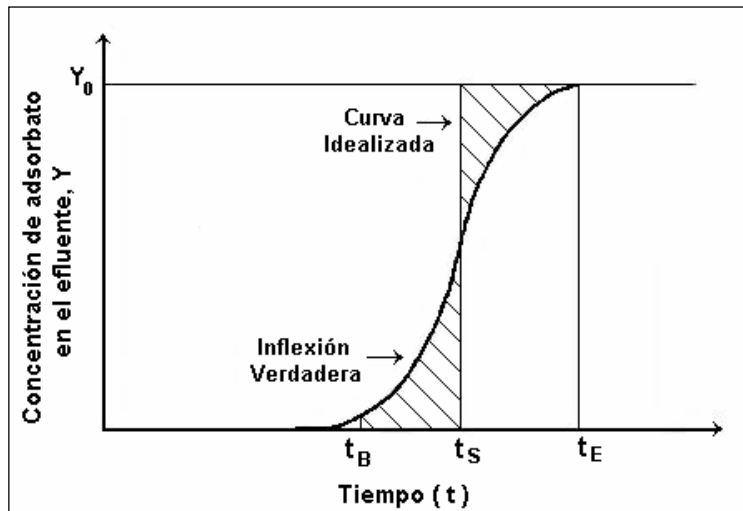
ANEXO D. MODELO LUB

Este método permite realizar un escalamiento de torres de adsorción de lecho fijo, tomando como base la curva de ruptura que se obtiene bajo condiciones experimentales específicas, y la isoterma de adsorción [7]. Las principales suposiciones en las que se basa este modelo son:

- El régimen de flujo, la temperatura y la concentración de alimentación son constantes y no varían en la dirección radial.
- La zona de transferencia de masa es estable.

Al considerar la transferencia de masa infinitamente rápida, la *curva de ruptura* tendría la forma idealizada que se muestra en la *Figura 14*; la curva idealizada se localizaría en el tiempo, t_s , en el cual las áreas sombreadas son iguales [9].

Figura 14. Curva de ruptura idealizada.



Fuente: Tomado de [3].

En el punto de ruptura, la longitud total se toma como la suma de LUB y la longitud de lecho en equilibrio con la corriente de alimentación.

$$Z = LUB + Z_S \quad (D.1)$$

El LUB, se calcula con la ecuación (D.2).

$$LUB = Z - Z_S = Z \frac{(t_S - t_B)}{t_S} \quad (D.2)$$

El balance de adsorbato para la unidad de adsorción de lecho fijo, se muestra en la ecuación (D.3).

$$U_L(Y_0 - Y^*) * t_{op} = Z_S * \rho * (X_T - X_0) \quad (D.3)$$

En donde, X_0 es la concentración inicial de adsorbato en el adsorbente, Y^* es la concentración en equilibrio con X_0 y t_{op} es el tiempo requerido para la operación de la columna. Reemplazando t_{op} por un tiempo de ruptura, Z_S puede calcularse mediante la ecuación (D.3) [9].

El fundamento del escalamiento de torres de adsorción empleando este método, reside en que la cantidad de lecho sin utilizar (LUB), no varía con la longitud total del lecho si se mantienen constantes entre el experimento y el diseño: la velocidad media del fluido, U_L y la concentración de adsorbato en la alimentación [7, 9].

ANEXO E. ETAPAS DEL PROCESO DE CRISTALIZACIÓN

5. Etapa de sobresaturación

Los cristales se forman cuando se excede el límite de solubilidad (sobresaturación) en las condiciones de concentración y temperatura a las que se encuentra la solución. Para alcanzar la sobresaturación se pueden aplicar los siguientes métodos [15]: enfriamiento de la solución, evaporación de solventes, adición de otras sustancias, aplicando vacío o combinando las técnicas anteriores.

La selección del método depende de las condiciones de la solución, en especial de la solubilidad. El proceso de cristalización por enfriamiento es utilizado cuando la solubilidad de una sustancia aumenta con el incremento de la temperatura. La evaporación es el segundo método más usado y es el indicado cuando la solubilidad no es tan dependiente de la temperatura [4].

El grado de sobresaturación y sobresaturación relativa de una solución puede expresarse como [4]:

$$\Delta c = c - c^* \quad (E.1) \quad \sigma = \Delta c / c^* \quad (E.2)$$

Donde c es la concentración de la solución, c^* es el valor de la concentración en el equilibrio, Δc el grado de sobresaturación y σ la sobresaturación relativa.

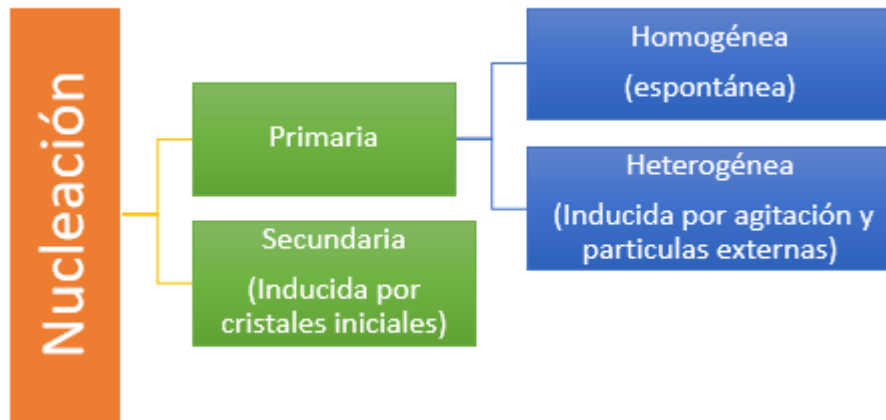
6. Etapa de nucleación de los cristales

Cuando la sobresaturación es inducida, el sistema intenta lograr el equilibrio termodinámico a través de la nucleación y el crecimiento de núcleos. Si una solución no contiene partículas extranjeras sólidas ni cristales de su propio tipo, entonces los núcleos se forman por colisiones de partículas de soluto que se aglomeran, proceso llamado nucleación homogénea; si partículas extranjeras están presentes, la nucleación se facilita y el proceso es conocido como nucleación

heterogénea [30]. Estos dos mecanismos tienen lugar en ausencia de cristales propios de la solución y son colectivamente conocidos como nucleación primaria o espontánea y es asociada a altos niveles de sobresaturación.

La nucleación secundaria se genera cuando cristales propios de la solución son formados, principalmente por el roce de cristales existentes, debido a las colisiones con el agitador, con las paredes del cristizador, rotura, abrasión, fragmento de aguja y colisiones entre ellos, o por adición de cristales semilla [30].

Figura 15. Mecanismos de nucleación presentes en la cristalización.



Fuente: Tomado y adaptado de [19].

La nucleación primaria homogénea casi nunca se presenta debido a que esta conduce a porcentajes de sobresaturación por encima del 100% y esto es prácticamente imposible [7]. Por otro lado, la nucleación primaria heterogénea se presenta a niveles altos de sobresaturación en comparación a la nucleación secundaria; la cual ocurre a niveles moderados-bajos. Costa Caliene [4] define para cristalizadores industriales que la tasa de nucleación puede calcularse mediante la siguiente relación empírica:

$$B = k_b M_T^j N_a^p \sigma^b \quad (E.3)$$

Donde B es la tasa de nucleación, k_b es una constante de la tasa de nucleación, M_T es la densidad de la mezcla, N_a está relacionado con la velocidad de agitación en el sistema y σ es la sobresaturación relativa. Los exponentes j , p y b varían de acuerdo a las condiciones de operación. Donde b toma valores entre 0,5-2,5; j valores cercanos a 1 y p entre 0-8 [16, 30].

7. Etapa de crecimiento de los cristales

Luego de la nucleación, cada semilla comienza a extenderse convirtiéndose en cristales de mayor tamaño. La forma y el tamaño son propiedades comunes del cristal relacionadas con la velocidad de crecimiento que se describe con la relación empírica desarrollada por Costa Caliene [4], ecuación (E.4). Dentro de los hábitos de crecimiento de cristales se encuentran: sistema cristalino triclinico, monoclinico, ortorrómbico, tetragonal, hexagonal y cúbico [19]. De acuerdo a la forma que la sustancia se cristalice dependerá el tamaño final o predominante del cristal.

$$G = k_g \sigma^g N_a^p \quad (E.4)$$

Donde G es la tasa de crecimiento, k_g es una constante de la tasa de crecimiento y el exponente g toma valores entre 1 y 2.

En la literatura se pueden encontrar la cinética de nucleación y de crecimiento combinadas. Por lo tanto las ecuaciones (E.3) y (E.4) se pueden escribir [17, 26]:

$$B = k_r M_T^j N_a^l G^i \quad (E.5) \quad k_r = k_b / k_g^i \quad (E.6)$$

$$i = b/g \quad (E.7) \quad l = (gp - bp)/g \quad (E.8)$$

La cristalización tiene como objetivo obtener un producto que tenga una DTC determinada. Esta distribución es clave a la hora de fijar los precios del producto. Por esta razón la DTC es una de las principales variables de diseño y operación de los cristalizadores [31].

ANEXO F. BALANCE DE POBLACIÓN DE CRISTALES.

El concepto de balance de población se encarga de representar la distribución de las partículas en un proceso de cristalización. Este balance surge del análisis del número de partículas $n(L)$ en un intervalo de tamaño de cristal diferencia dL . La ecuación general para expresar todas las cantidades en un volumen específico se describe como:

$$\frac{dn}{dt} + \frac{d(Gn)}{dL} + \frac{n}{V} \frac{dV}{dt} + D(L) - B(L) + \sum_i \frac{F_i n_i}{V} = 0 \quad (F.1)$$

dn/dt da el cambio en el número de densidad de partículas respecto al tiempo en una operación batch y tiene el valor de cero en un equipo operado en continuo. La expresión $d(Gn)/dL$ describe la diferencia entre cristales creciendo dentro y fuera de un intervalo da tamaño de cristal dL debido a la velocidad de crecimiento G . el término $n(dV/Vdt)$ toma en cuenta los cambios en el volumen respecto al tiempo. Los parámetros $D(L)$ y $B(L)$ representan la velocidad de muerte y velocidad de nacimiento, respectivamente; las cuales surgen debido a la aglomeración o rompimiento de los cristales. Finalmente, la expresión $\sum_i \frac{F_i n_i}{V}$ representa la suma de todos los flujos de partículas entrando y saliendo del cristizador.

Tabla 11. Descripción de las variables y unidades dimensionales del balance de población.

Variable	Nombre	Unidades
t	Tiempo	min
n	Densidad de población (#)	N° part/cm ³ licor
V	Volumen	cm ³
G	Velocidad de crecimiento	cm/min
L	Longitud del cristal	cm
F	Flujo volumétrico	cm ³ /min
B-D	Velocidad de producción y reducción	N° part/cm ³ *min*cm ³ licor

ANEXO G. MODELAMIENTO PARA UN CRISTALIZADOR MSMPR

Este modelo debe seguir los siguientes requisitos de operación:

- ✓ La operación transcurre en estado estacionario.
- ✓ En todo momento hay una sobresaturación uniforme en toda la mezcla.
- ✓ La velocidad de crecimiento del cristal es independiente del tamaño del cristal.
- ✓ No hay cristales en la alimentación.
- ✓ El licor madre (líquido que acompaña a los sólidos formados) abandona el cristalizador en equilibrio, de forma que la disolución se encuentra saturada con respecto al producto.
- ✓ No hay ruptura de cristales en partículas de tamaño finito.

Debido a las condiciones anteriores la ecuación (8) se reduce a la ecuación (G.1) donde: la velocidad de nucleación es constante en todos los puntos de la mezcla; la velocidad de crecimiento es constante e independiente del tamaño del cristal y la localización; y la DTC es independiente de la localización dentro del cristalizador.

$$G \frac{dn}{dL} + \frac{n}{\tau} = 0 \quad (G.1)$$

Donde τ representa el tiempo de residencia (V/F). Resolviendo analíticamente se obtiene:

$$n = n^0 e^{-L/G\tau} \quad (G.2)$$

La ecuación (G.2) por si sola solo indica la densidad de partículas de un tamaño determinado que hay en un volumen fijo. Gonzáles et al [32], con el fin de obtener las dimensiones de un cristalizador, hacen mención a calcular otras variables de diseño como lo son: el número total de partículas, tamaño medio de partícula, superficie total de los cristales y la suma de los volúmenes de cristales; todas estas

variables por unidad de volumen de producto. Así, el método nombrado *método de momentos* ha sido aplicado para el desarrollo del balance de población donde los 4 primeros momentos representan las variables descritas.

El principio de este método consiste en calcular los diferentes momentos de la ecuación (G.2) definidos por:

$$\mu_j = \int_0^{\infty} L^j n(L) dL \quad j = 0,1,2,3 \dots \quad (G.3)$$

Remplazando la ecuación (G.2) en la ecuación (G.3) e integrando para $j=0, 1, 2$ y 3 , se tiene:

$$N_T = n^0 G\tau \quad (G.4)$$

$$\bar{L}_T = n^0 (G\tau)^2 \quad (G.5)$$

$$A_T = 2k_a n^0 (G\tau)^3 \quad k_a = \text{factor de forma superficial} \quad (G.6)$$

$$M_T = 6k_v \rho_c n^0 (G\tau)^4 \quad k_v = \text{factor de forma volumétrico} \quad (G.7)$$

Finalmente, el tamaño predominante en una DTC está dado por la relación entre el momento 4 y el momento 3 del balance de población:

$$L_{predominante} = \frac{\int_0^{\infty} L^3 n^0 e^{-L/G\tau} dL}{\int_0^{\infty} L^2 n^0 e^{-L/G\tau} dL} = 3G\tau \quad (G.8)$$

ANEXO H. ADSORBENTES DISPONIBLES EN CRY SAD

Tabla 12. Revisión bibliográfica sobre los adsorbentes disponibles en CRY SAD

MATERIAL	Referencias
Alúminas	
Porosidad Baja	[9, 17, 35, 36]
Porosidad Alta	[9, 17, 35, 36, 43]
Desecante, Recubierto CaCl ₂	[9, 17, 35, 36, 43]
Bauxita Activada	[1, 9, 17, 35, 36, 48]
Alúmina Cromatográfica	[9, 17, 35, 36]
Silicatos y Aluminosilicatos	
<i>Tamices Moleculares</i>	
Tipo 3A	[9, 11, 17, 34, 43, 46]
Tipo 4A	[9, 11, 17, 34, 46]
Tipo 5A	[9, 11, 17, 34, 46]
Tipo 13X	[9, 11, 17, 34, 43, 46]
silicalita	[9, 11, 17, 34, 46]
Desaluminato Y	[9, 11, 17, 34, 46]
Modernita	[9, 11, 17, 34, 46]
Chabazita	[9, 11, 17, 34, 46]
Gel de Sílice	[33, 9, 11, 17, 34, 36, 37, 38, 43, 46]
Silicato Magnésico	[17, 34, 48, 48]
Silicato Cálcico	[17, 34, 47]
Arcilla Tratada con Acido	[33, 17, 34]
Tierras de Fuller	[9, 17, 34, 48]
Tierra de Diatomeas	[17, 38, 40, 48]
Carbones Activados	
Basados en Conchas	[33, 9, 35, 36, 42, 45, 47]
Basados en Maderas	[33, 9, 35, 36, 38, 45, 48]
Basados en Petróleo	[33, 9, 35, 36, 39, 44, 45]
Basados en Turba	[33, 9, 35, 36, 42, 45, 47]
Basados en Lignito	[33, 9, 35, 36, 45, 61]
Basados en Carbones Bituminosos	[33, 9, 35, 36, 42, 45, 47]
Basados en Polímeros	[33, 9, 35, 36, 45]
Sintéticos	
Tamices de Carbón Molecular	[33, 9, 17, 35, 36, 41, 45, 46]
Polímeros Orgánicos	
Poliestireno	[9, 17, 46]
Ester Poliácrico	[9, 17, 42, 46]
Resinas Fenólicas	[9, 17, 46]

ANEXO I. SUBRUTINAS PARA EL DISEÑO DE ADSORBEDORES Y CRISTALIZADORES

Figura 16. Subrutina para diseñar una columna de adsorción (Método de Michaels)

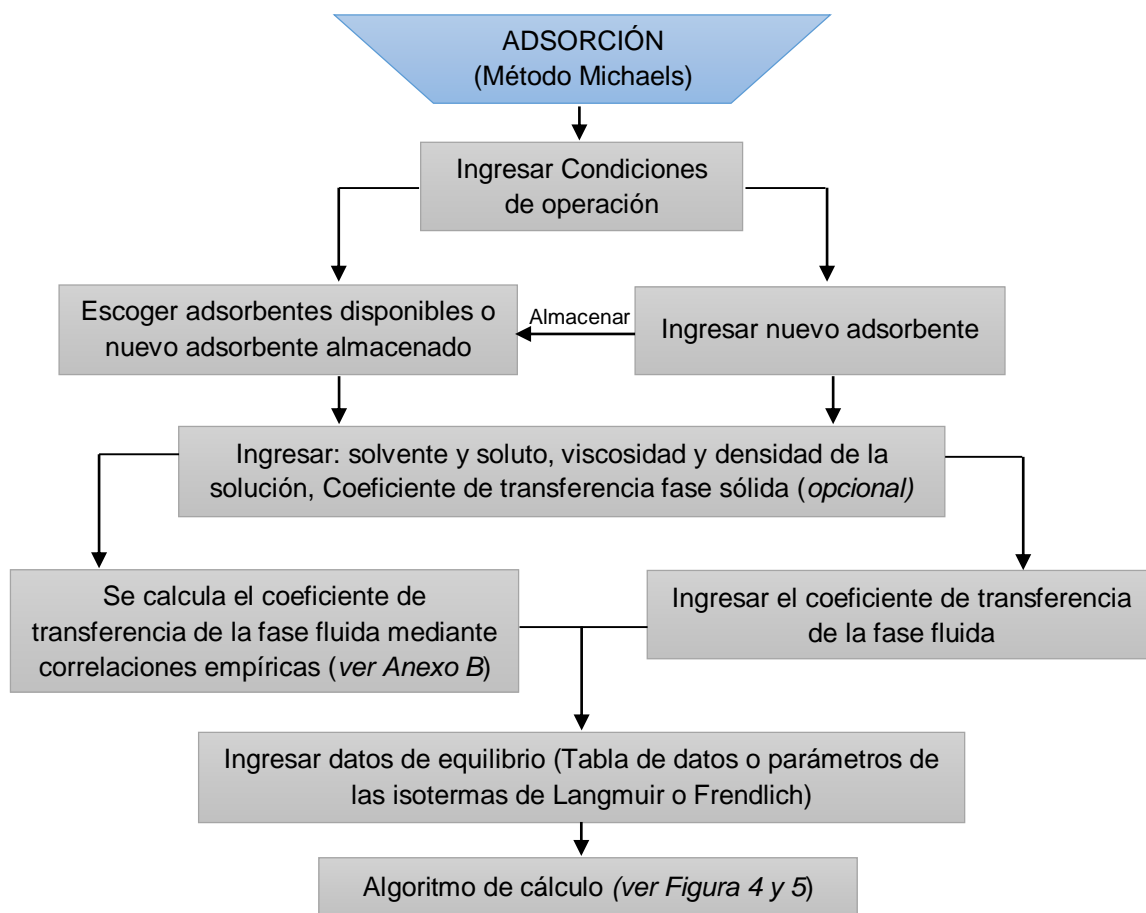


Figura 17. Subrutina para diseñar una columna de adsorción (Método LUB)

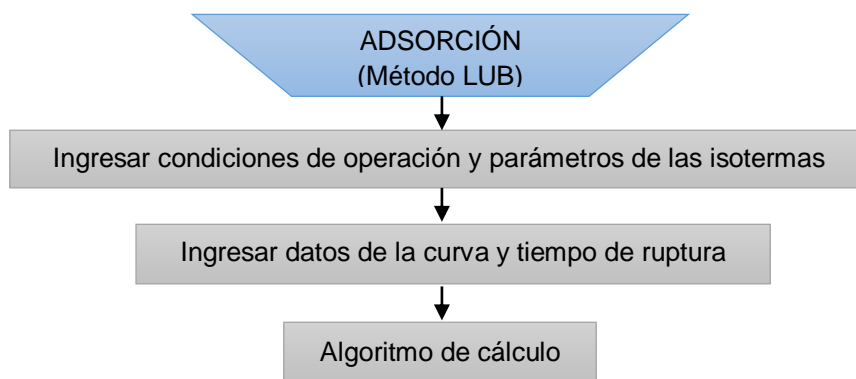
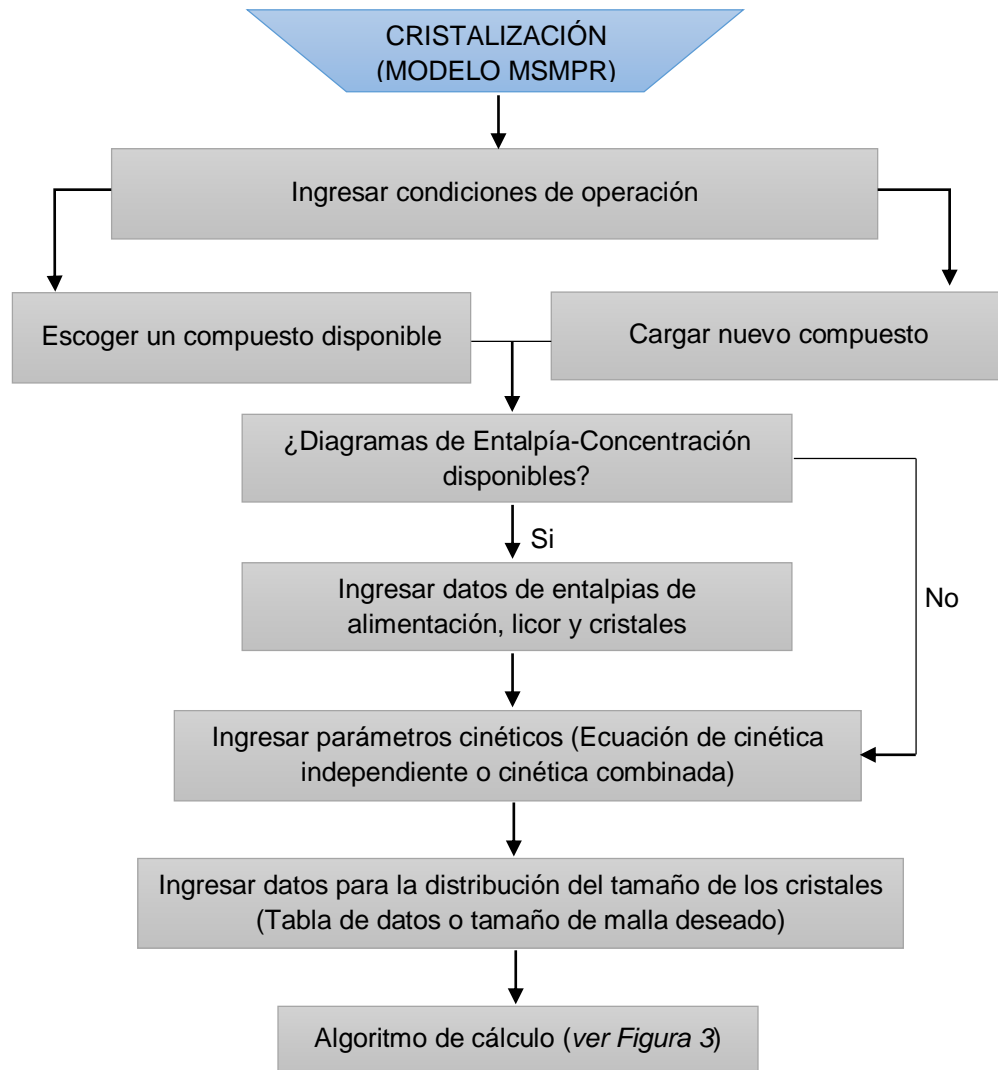


Figura 18. Subrutina para diseñar un cristalizador



ANEXO J. ENCUESTA DE SATISFACIÓN DEL PROGRAMA CRY SAD

Encuesta de satisfacción del usuario CRY SAD

Es de nuestro interés conocer su opinión sobre la herramienta de diseño CRY SAD, por lo cual amablemente solicitamos responder la siguiente encuesta.

*Obligatorio

¿Cómo considera el desempeño de la herramienta de diseño CRY SAD? *

	Muy bueno	Bueno	Regular	Malo	Muy malo
Facilidad de uso	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Utilidad de la herramienta	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Organización	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Versatilidad	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

Desde su punto de vista como usuario de CRY SAD: *

	Muy de acuerdo	De acuerdo	Poco de acuerdo	Nada de acuerdo
La herramienta es clara y precisa	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
La interfaz es amigable y creativa	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Cumple sus expectativas	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Es efectiva	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

¿Que dificultades encontró al hacer uso de la herramienta? *

Seleccione por lo menos una casilla

- Demora en el tiempo de cálculo y respuesta
- Pocas unidades de medida
- No calculó la respuesta esperada
- Los datos requeridos por la herramienta no fueron claros
- Ofrece pocas ayudas y no es entendible
- No se encuentra fácilmente donde leer los datos de entrada y de salida
- No encontré ninguna dificultad
- Otros: _____

Según la experiencia que acaba de tener, ¿considera que CRY SAD sirve para? *

- Diseñar adsorbedores y cristalizadores
- Simular el proceso de adsorción y cristalización
- Optimizar el proceso de adsorción y cristalización
- Controlar el proceso de adsorción y cristalización

¿Qué tan útil considera que es CRY SAD para realizar el diseño de adsorbedores y cristalizadores? *

- Muy útil
- Útil
- Poco útil
- Nada útil

ANEXO K. INTERFAZ E INGRESO DE LOS DATOS DE ENTRADA PARA EL DISEÑO DE UN ADSORBEDOR

Figura 19. Ingreso de las condiciones de operación de una torre de adsorción.

The screenshot shows the 'CONDICIONES DE OPERACIÓN' (Operating Conditions) tab in the software. The interface is divided into four main sections: 'Condiciones de Operación', 'Adsorbente', 'Parámetros', and 'Diseñar'. The 'Parámetros' section contains the following input fields:

Parámetro	Valor	Unidad
Flujo volumétrico de la solución	0,03	l/min
Diámetro de la columna	4	cm
Concentración de la solución adsorbato/solución	1563	ppm
Tiempo de operación supuesto	70	min
Temperatura	298,15	K
Presión de operación	1	atm
% Adsorbato en el punto de ruptura	5	
% Adsorbato en el punto de saturación	95	

The background of the interface features an industrial refinery scene at night.

Figura 20. Ingreso de las características del adsorbente

The screenshot shows the 'CARACTERÍSTICAS DEL ADSORBENTE' (Adsorbent Characteristics) tab in the software. The interface is divided into four main sections: 'Condiciones de Operación', 'Adsorbente', 'Parámetros', and 'Diseñar'. The 'Parámetros' section contains the following input fields:

Parámetro	Valor	Unidad
Diámetro de la partícula	4	mm
Altura de la partícula	15	mm
Densidad del lecho seco	0,67	g/cm ³
Fracción de vacío del lecho	0,36	
Conc. inicial de adsorbato en el lecho Adsorbato/Adsorbente	0	ppm
% Expansión por saturación del lecho % expansión que sufre el adsorbente mientras se va concentrando de adsorbato	0	

The 'Forma del Material' (Material Shape) section includes radio buttons for 'Esférico', 'Pellets Cilíndricos' (selected), and 'Otro'. The 'Nombre del adsorbente' field contains the text 'Aminapropilgel'. There is an 'Almacenar' (Save) button at the bottom right.

The background of the interface features an industrial refinery scene at night.

Figura 21. Ingreso de las características de la solución

The screenshot shows the 'INTERFAZ ADSORCION' software interface. The 'Parámetros' tab is active, displaying the following fields and values:

- Solvente:** Agua (líquida)
- Soluto:** Cromo
- Fase de la Solución:**
 - Líquida
 - Gas
- Densidad de la solución:** 0,997 g/cm³
- Viscosidad de la solución:** 0,9 cP
- Coef. de masa de fase sólida:** 0 1/s
- Coef. de masa fase fluida:** 5,09E-03 1/s

The interface includes a sidebar with 'Características de la solución' and 'Datos de equilibrio' sections, and a bottom status bar with 'LISTO' and 'INTERFAZ ADSORCION' labels.

Figura 22. Ingreso de los parámetros de la isoterma de adsorción.

The screenshot shows the 'INTERFAZ ADSORCION' software interface. The 'Parámetros' tab is active, displaying the following fields and values:

- Isoterma de Langmuir:** (selected)
- Isoterma de Freundlich:**
- Ecuación:**
$$X = \frac{KQY}{1 + KY}$$
- Ecuación de la isoterma de Langmuir:** (text label)
- Parámetro K [L solución/mg adsorbente]:** 2,30E-03
- Parámetro Q [mg adsorbato/g adsorbente]:** 1,07E01
- Ver isotermas de la base de datos:** (button)

The interface includes a sidebar with 'Características de la solución' and 'Datos de equilibrio' sections, and a bottom status bar with 'LISTO' and 'INTERFAZ ADSORCION' labels.

Figura 23. Resultados (Parámetros de diseño)

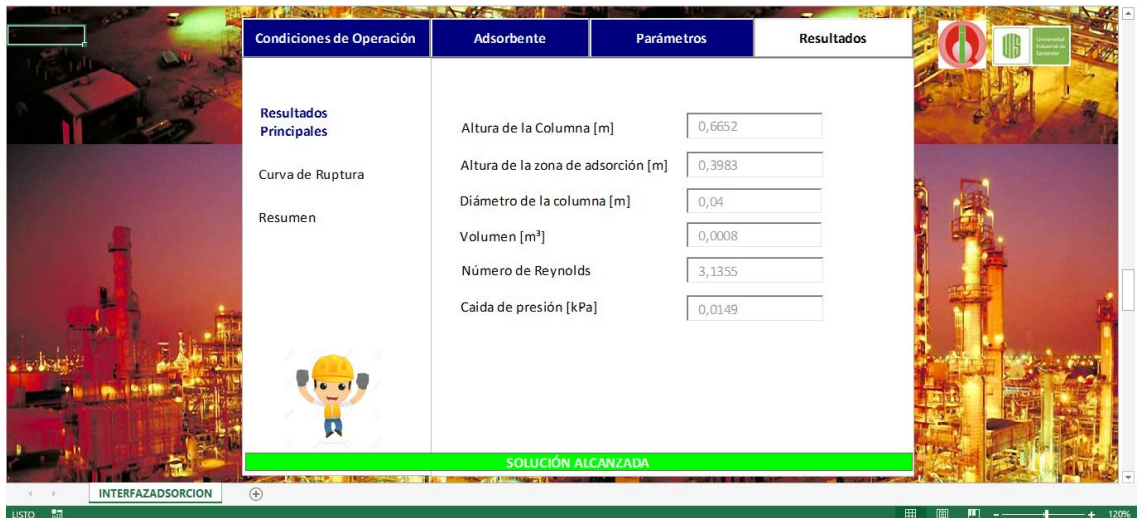


Figura 24. Resultados (Curva de ruptura)

