

**ELABORACIÓN DE UN MÓDULO COMPUTACIONAL DE DISEÑO Y
SIMULACIÓN DE COLUMNAS DE ADSORCIÓN PARA ASPEN HYSYS**

**DIEGO FERNANDO MERCHÁN CASTELLANOS
IVONNE KATHERINE SALGADO CASTRO**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2009

**ELABORACIÓN DE UN MÓDULO COMPUTACIONAL DE DISEÑO Y
SIMULACIÓN DE COLUMNAS DE ADSORCIÓN PARA ASPEN HYSYS**

**DIEGO FERNANDO MERCHÁN CASTELLANOS
IVONNE KATHERINE SALGADO CASTRO**

**Trabajo de grado para optar al título de
Ingeniero Químico**

Director

MSc. CRISÓSTOMO BARAJAS FERREIRA
Profesor Titular: Escuela de Ingeniería Química

Codirector

Ing. IVÁN DARÍO ORDOÑEZ SEPÚLVEDA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2009

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	1
1. FUNDAMENTOS DEL PROCESO DE ADSORCIÓN EN LECHO FIJO	2
1.1 TRANSFERENCIA DE MASA EN EL PROCESO DE ADSORCIÓN	2
1.2 EQUILIBRIO DE ADSORCIÓN	4
1.3. CAÍDA DE PRESIÓN	6
2. MODELAMIENTO DEL PROCESO DE ADSORCIÓN EN LECHO FIJO	7
2.1. MODELOS MATEMÁTICOS PARA LA ADSORCIÓN EN LECHO FIJO	7
2.2. DESARROLLO DEL MÓDULO DE SIMULACIÓN	11
3. RESULTADOS Y ANÁLISIS	14
3.1. SIMULACIÓN DE LA ADSORCIÓN DE FENANTRENO SOBRE UN LECHO FIJO DE COQUE	14
3.2. RESULTADOS Y CURVA DE RUPTURA DE LA SIMULACIÓN DEL SISTEMA FENANTRENO/COQUE	15
3.3. EFECTO DE LA ETAPA DE CONTROL EN LA CURVA DE RUPTURA DEL MODELO BASADO EN LA ETAPA CONTROLANTE DE LA TRANSFERENCIA DE MASA	18
3.4. PRUEBAS DE SENSIBILIDAD DEL MÓDULO COMPUTACIONAL	19
4. CONCLUSIONES	22
5. RECOMENDACIONES	23
6. NOMENCLATURA	24
BIBLIOGRAFÍA	28
ANEXOS	30

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1: Transferencia de materia en los procesos de adsorción.....	3
Figura 2: La onda de adsorción y la curva de ruptura.....	4
Figura 3: Parámetros de entrada, especificaciones de cálculo y datos de salida del módulo computacional.	12
Figura 4: Página <i>Connections</i> de la pestaña <i>Design</i>	13
Figura 5: Curva de ruptura adimensional para la simulación del sistema Fenantreno/Coque calculada a partir del modelo basado en la zona de adsorción.	16
Figura 6: Curva de ruptura para la simulación del sistema Fenantreno/Coque calculada a partir del modelo basado en la etapa controlante de la transferencia de masa.	16
Figura 7: Curva de ruptura para la simulación del sistema Fenantreno/Coque con difusión en la película de fluido como etapa de control.	18
Figura 8: Curva de ruptura para la simulación del sistema Fenantreno/Coque con difusión en el sólido como etapa de control.	19
Figura 9: Variación de la altura del lecho con respecto al tiempo de operación del modelo basado en la zona de adsorción.....	20
Figura 10: Variación de la altura del lecho con respecto al tiempo de operación del modelo basado en la etapa controlante de la transferencia de masa.	20
Figura 11: Variación del tiempo de ruptura con respecto al flujo másico del fluido.	21
Figura 12: Influencia de la variación del flujo másico del fluido en las curvas de ruptura.	21
Figura 13: Curva semilogarítmica del exponente n de la ecuación de leva en función del número de Reynolds.....	30
Figura 14: Ajuste del exponente n de la ecuación de leva a un polinomio de grado tres.....	31
Figura 15: <i>Views Manager</i> y paleta de <i>Widgets</i> del <i>View Editor</i>	33
Figura 16: <i>Object Manager</i> del <i>View Editor</i>	34

Figura 17: Página <i>Connections</i> de la pestaña <i>Design</i> .	35
Figura 18: Página <i>Parameters</i> de la pestaña <i>Design</i> .	35
Figura 19: Página <i>Specs</i> de la pestaña <i>Design</i> .	35
Figura 20: Página <i>Equilibrium</i> de la pestaña <i>Design</i> .	36
Figura 21: Página <i>Conditions</i> de la pestaña <i>Worksheet</i> .	36
Figura 22: Página <i>Results</i> de la pestaña <i>Performance</i> .	36
Figura 23: Página <i>Plots</i> de la pestaña <i>Performance</i> .	37
Figura 24: Página <i>Warning</i> del módulo computacional.	37
Figura 25: Página <i>References</i> del módulo computacional.	37
Figura 26: Menú <i>Tools</i> del simulador Aspen HYSYS 2006.	38
Figura 27: Ventana <i>Session Preferences</i> del simulador.	38
Figura 28: Opción <i>Extension</i> de la ventana de <i>Session Preferences</i> .	39
Figura 29: Ventana <i>HYSYS Extension Manager</i> del simulador.	39
Figura 30: Ventana <i>UnitOps-Case</i> de Aspen HYSYS.	40

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1: Ecuaciones para el modelo basado en la zona de adsorción.....	8
Tabla 2: Ecuaciones del modelo basado en la etapa controlante en la transferencia de masa.	9
Tabla 3: Ecuaciones de la concentración relativa para cada isoterma.....	10
Tabla 4: Parámetros de entrada para la simulación del sistema Fenantreno/Coque de una corriente de Helio como gas de arrastre.	14
Tabla 5: Tiempos de ruptura obtenidos de la simulación del sistema Fenantreno/Coque.....	15
Tabla 6: Resultados del modelo basado en la zona de adsorción.	17
Tabla 7: Resultados del modelo basado en la etapa controlante de la transferencia de masa.	17

LISTA DE ANEXOS

	Pág.
ANEXO 1: ECUACIÓN DE LEVA.....	30
ANEXO 2: CONDICIONES DE PATRÓN CONSTANTE Y FLUJO TAPÓN.....	31
ANEXO 3: INTERFAZ GRÁFICA DE LA EXTENSIÓN.....	33
ANEXO 4: REGISTRO DE LA EXTENSIÓN	38
ANEXO 5: COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE MASA	40

TÍTULO: ELABORACIÓN DE UN MÓDULO COMPUTACIONAL DE DISEÑO Y SIMULACIÓN DE COLUMNAS DE ADSORCIÓN PARA ASPEN HYSYS*

AUTORES: Diego Fernando Merchán Castellanos.
Ivonne Katherine Salgado Castro. **

PALABRAS CLAVES: Adsorción, Lecho fijo, Diseño, Simulación, HYSYS.

RESUMEN:

En este trabajo se consideró el proceso de adsorción en lecho fijo bajo condiciones isotérmicas para sistemas monovariantes y fluidos de una sola fase (líquida o gaseosa); para su simulación se utilizó la herramienta de programación *Visual Basic 6.0* y el software *Aspen HYSYS*, implementando dos modelos matemáticos aplicables al proceso para estimar el tiempo de ruptura o la altura del lecho a partir del conocimiento previo de variables de operación y especificaciones propias del módulo.

El primer modelo se basa en el concepto de la zona de adsorción desarrollado por Michaels en 1950 y el segundo modelo se basa en el concepto de la etapa controlante en la transferencia de masa propuesto por Robert D. Fleck, Jr., Donald J. Kirwan, y Kenneth R. Hall en 1973.

El módulo se validó por medio de la comparación del tiempo de ruptura obtenido en la simulación con el reportado en la literatura y se obtuvieron valores cercanos para cada modelo, describiéndose satisfactoriamente el comportamiento del proceso de adsorción en lecho fijo. Además, se realizaron pruebas de sensibilidad por medio de la herramienta *Databook* que ofrece HYSYS para verificar las diferentes tendencias que exhibe el módulo en cuanto a tiempos de operación, alturas de lecho empacado y flujos máxicos del fluido.

* Proyecto de Grado

**Facultad de Ingenierías Físico-Químicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Crisóstomo Barajas Ferreira. Codirector: Iván Darío Ordoñez Sepúlveda.

TITLE: DEVELOPMENT OF A COMPUTATIONAL MODULE OF DESIGN AND SIMULATION OF COLUMN ADSORPTION TO ASPEN HYSYS *

AUTHORS: Diego Fernando Merchán Castellanos.
Ivonne Katherine Salgado Castro. **

KEY WORDS: Adsorption, Fixed Bed, Design, Simulation, HYSYS.

SUMMARY:

In this paper was considered the process of fixed-bed adsorption under isothermal conditions for monovariantes systems and a single phase fluid (liquid or gas); for their simulation was used programming tool *Visual Basic 6.0* and *Aspen HYSYS* software, implementing two mathematical models applicable to the process for estimating the breakthrough time or the bed height from prior knowledge of operating variables and particular specifications of the module.

The first model is based on the concept of the adsorption zone developed by Michaels in 1950 and the second model is based on the concept of the controlling mechanism in mass transfer proposed by Robert D. Fleck, Jr., Donald J. Kirwan, and Kenneth R. Hall in 1973.

The module was validated by comparing the breakthrough time obtained in the simulation with that reported in the literature and was obtained values close for each model, successfully describing the behavior of the adsorption process in fixed bed. Furthermore, sensitivity tests were performed using the tool offered HYSYS *Databook* to verify the different trends exhibited by the module in terms of operating times, packed bed height and mass flow of the fluid.

* Degree project

**Faculty of Physicochemical Engineerings. School of Chemical Engineering. Director: Crisóstomo Barajas Ferreira. Codirector: Iván Darío Ordoñez Sepúlveda.

INTRODUCCIÓN

La simulación de procesos químicos en la actualidad es una de las herramientas más importantes dentro de Ingeniería Química ya que intenta interpretar un sistema real sin intervenir en su ambiente manteniendo las mismas características que el objeto simulado. Aspen HYSYS es una de estas herramientas comerciales de simulación que cuenta con algoritmos de diseño de un buen número de operaciones comunes. Sin embargo, esta herramienta no dispone de módulos para la simulación de una de las operaciones unitarias más importantes a nivel industrial como lo es la adsorción en lecho fijo.

Con el propósito de suplir esta carencia y teniendo en cuenta el punto de vista de aplicación académica e industrial surge la necesidad de elaborar un módulo de diseño y simulación de columnas de adsorción para los estudiantes de Ingeniería Química de la Universidad Industrial de Santander.

Para la realización del proyecto se tomaron de la literatura dos modelos matemáticos, el primero basado en el concepto de la zona de adsorción y el segundo en el concepto de la etapa controlante en la transferencia de masa. La metodología se llevo a cabo en tres etapas, la primera de ellas se basó en una amplia revisión bibliográfica, la segunda etapa comprendió la construcción y desarrollo del módulo por medio de la herramienta de programación *Visual Basic 6.0* y del software *Aspen HYSYS* mientras que la etapa final comprendió pruebas de sensibilidad para cada modelo implementado.

Se validó el módulo con la simulación del sistema Fenantreno/Coque de una corriente de Helio como gas de arrastre con los modelos matemáticos implementados obteniéndose valores cercanos para cada modelo con respecto al tomado en la literatura para describir el comportamiento del proceso de adsorción en lecho fijo.

1. FUNDAMENTOS DEL PROCESO DE ADSORCIÓN EN LECHO FIJO

El proceso de adsorción en lecho fijo explota la capacidad especial que tienen ciertos sólidos para hacer que sustancias específicas de una solución se concentren en su superficie. De este modo, pueden separarse uno o varios componentes de soluciones gaseosas o líquidas [2].

Al componente que se desea separar se le denomina *adsorbato* y al sólido encargado de concentrar el soluto en su superficie como *adsorbente* [7]. Los adsorbentes son específicos en cuanto a su naturaleza, propiedades y deben poseer ciertas características relativas a la ingeniería según la aplicación que se les vaya a dar, por ejemplo: para lechos fijos los adsorbentes no deben ofrecer una caída de presión del flujo muy grande, ni deben ser arrastrados con facilidad por la corriente que fluye [2]. Debido a que los adsorbentes son materiales porosos, la adsorción tiene lugar principalmente sobre las paredes de los poros o en sitios específicos dentro de la partícula. 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.

1.1. TRANSFERENCIA DE MASA EN EL PROCESO DE ADSORCIÓN

1.1.1. Mecanismos de transferencia de masa. La transferencia de materia se lleva a cabo en tres etapas principales: la primera ocurre por la difusión del soluto desde el seno de la fase fluida hasta la superficie externa del adsorbente, la segunda etapa se da por la difusión de las moléculas de adsorbato hasta el interior de los poros para alcanzar la superficie libre de los mismos, mientras que la tercera se debe a fuerzas de tipo físico o químico y se lleva a cabo sobre la superficie del sólido [8]. El modelo más utilizado para describir la transferencia de materia es el de la *Fuerza Lineal Impulsora*, (*Linear Driving Force, LDF*), este modelo asume que la velocidad de adsorción es proporcional a una fuerza impulsora que viene dada por una diferencia de

concentraciones [1]. En la siguiente figura se muestra un diagrama esquemático de los distintos tipos de transferencia de materia.

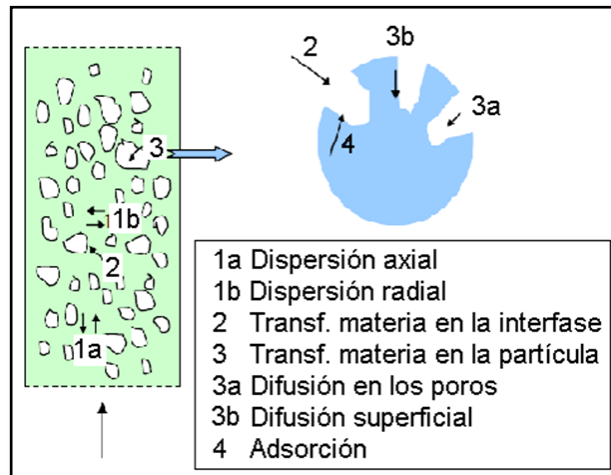


Figura 1: Transferencia de materia en los procesos de adsorción¹.

1.1.2. La onda de adsorción y la curva de ruptura. La onda de adsorción permite predecir cómo va ocurriendo el proceso en un lecho fijo debido a que el problema principal es que el adsorbente se va “*gastando*” a medida que transcurre el tiempo, dado que se satura de soluto. Por ello, la frontera entre el lecho saturado y el no saturado pareciera moverse ya que el sólido más cercano a la entrada del fluido es el primero que se satura, mientras que al más lejano le ocurre lo contrario. Dicho frente es en realidad toda una región denominada *Zona de adsorción o de transferencia de masa* y el tamaño de esta zona es un indicador de la rapidez del proceso. Si toda esa región es muy pequeña implica una adsorción instantánea y por tanto habría una frontera bien clara entre la sección ya adsorbida y la sección posterior, creando con ello lo que se conoce como una *curva de ruptura* bien definida. La curva de ruptura representa el perfil de concentración de adsorbato frente al tiempo que consume el fluido en abandonar el lecho. Cuando la concentración alcanza el valor límite permisible (*punto de ruptura*), entonces se interrumpe el flujo o bien se conduce este a otro lecho de adsorbente fresco. Con frecuencia el punto de

¹ RIVERO, MARTÍNEZ MARÍA JOSÉ. Diseño del Proceso de Purificación de Estireno mediante Adsorción en Alúmina. Tesis doctoral Doctora. Santander España: Universidad de Cantabria. Departamento de Ingeniería Química y Química Inorgánica, 2002. P. 145.

ruptura se toma arbitrariamente como el 5% de la concentración de soluto en el alimento y, en el punto de saturación como el 95% (Figura 2) [5].

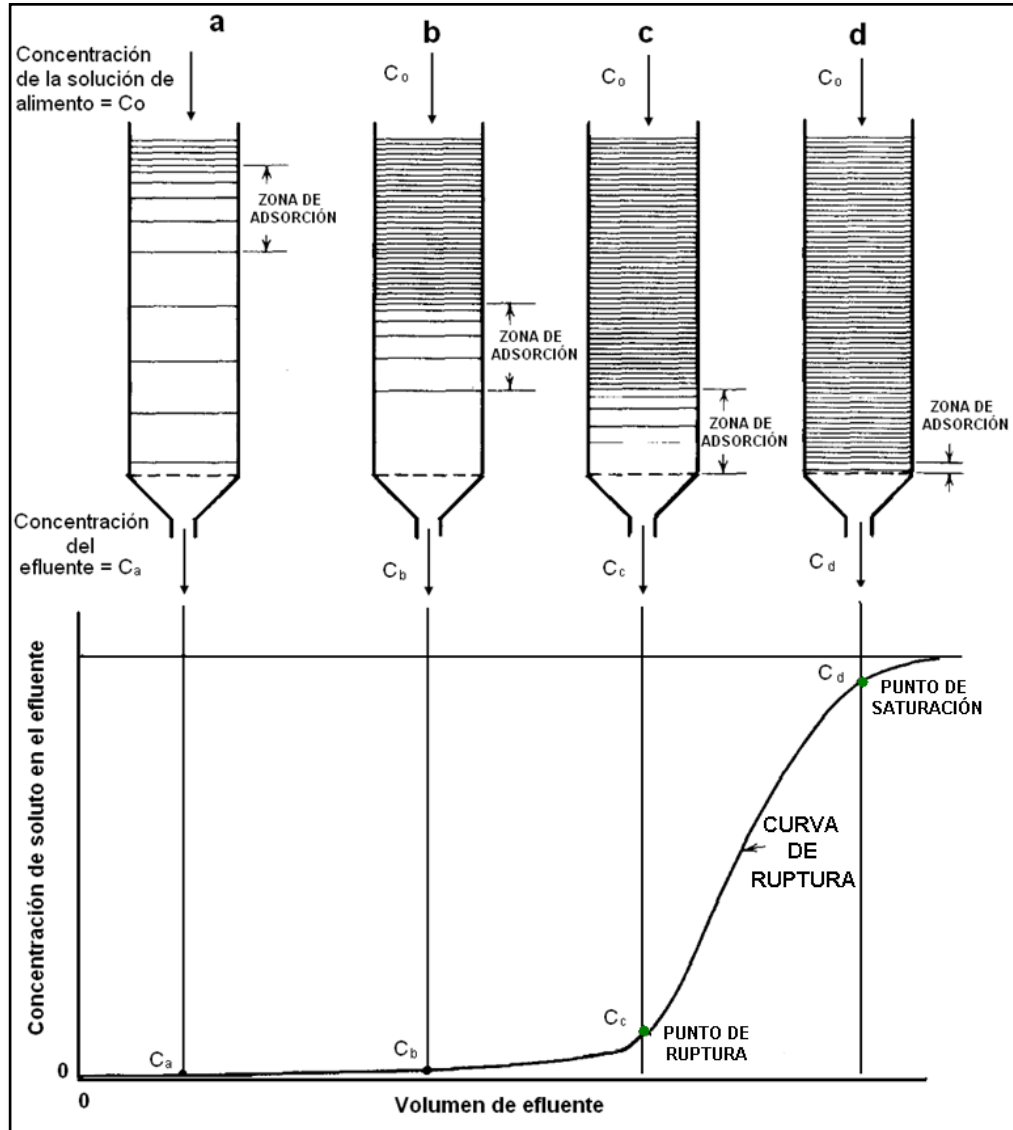


Figura 2: La onda de adsorción y la curva de ruptura².

1.2. EQUILIBRIO DE ADSORCIÓN

Una manera común de representar el equilibrio del proceso de adsorción es mediante isotermas de equilibrio, éstas representan la distribución del material

² TREYBAL ROBERT. Operaciones de transferencia de masa. Segunda edición. México: Editorial McGraw-Hill, 2002 .P. 688.

adsorbido entre fase sólida y la fase fluida en el equilibrio a una temperatura determinada [1]. Históricamente las isothermas se han clasificado de acuerdo a su concavidad en favorables y desfavorables; las primeras son cóncavas hacia abajo y las más representativas para este caso son las isothermas de Langmuir y Freundlich. Estas isothermas se escogieron para el desarrollo del módulo debido a que puede obtenerse una concentración relativamente elevada de adsorbato en el adsorbente para una baja concentración de adsorbato en el fluido, mientras que las desfavorables son cóncavas hacia arriba [5].

1.2.1. Isotherma de Langmuir. Esta isoterma se basa en tres consideraciones principales: **(1)** La superficie es homogénea, lo que implica que la energía de adsorción es la misma en todos los puntos, **(2)** La adsorción está localizada en determinados puntos de la superficie y **(3)** Cada punto de la superficie sólo puede acomodar a una molécula o átomo. Teniendo en cuenta estas consideraciones Langmuir propuso la siguiente expresión [9]:

$$q^*/Q_M = K C / (1 + K C) \quad (1)$$

Aplicando la misma ecuación para $C = C_0$

$$q_{max}/Q_M = K C_0 / (1 + K C_0) \quad (2)$$

Dividiendo las ecuaciones (1) y (2) y al presentar el parámetro de equilibrio (R), como $R = 1 / (1 + K C_0)$ y las concentraciones adimensionales $X = C / C_0$ y $Y = q^* / q_{max}$ se tiene la forma adimensional de la ecuación de Langmuir [1]:

$$Y = X / (R + (1 - R)X) \quad (3)$$

1.2.2. Isotherma de Freundlich. Es una de las primeras ecuaciones empíricas empleadas para describir equilibrios de adsorción. Esta isoterma es válida en superficies heterogéneas planas que consta de sitios potenciales de adsorción diferentes y supone que en cada uno se absorbe una sola molécula. Esta

ecuación es muy útil en el caso de adsorción de vapores de hidrocarburos sobre carbón activo [1]:

$$q^* = K_F C^W \quad (4)$$

Adimensionalmente la isoterma de Freundlich se puede escribir como:

$$Y = X^W \quad (5)$$

1.3. CAÍDA DE PRESIÓN

La caída de presión del flujo es un factor muy importante para el diseño de torres de adsorción y para calcularla se consideraron dos ecuaciones válidas para todo tipo de régimen de flujo, la correlación de Ergun para sistemas gaseosos y la de Leva para líquidos incompresibles [6].

- Ecuación de Ergun [4]:

$$\frac{\Delta P}{(\rho * V)^2} \frac{\rho}{Z} \frac{d_p}{1 - \epsilon} = \frac{150}{Re_p} + 1,75 \quad (6)$$

- Ecuación de Leva [5]:

$$\Delta P = \frac{2 f_m (\rho * V)^2 Z}{d_p \rho \phi_s^{3-n}} \frac{(1 - \epsilon)^{3-n}}{\epsilon^3} \quad (7)$$

- ✓ Si $0 < \text{Log}(Re_p) < 1$: $n = 1$
- ✓ Si $1 < \text{Log}(Re_p) < 4$: $n = f(\text{Log}(Re_p))$
- ✓ Si $Re_p \leq 10$: $f_m = 100/Re_p$
- ✓ Si $Re_p > 10$: $f_m = 1$

El valor de n ha sido correlacionado de acuerdo a lo reportado en la literatura (Ver Anexo 1).

2. MODELAMIENTO DEL PROCESO DE ADSORCIÓN EN LECHO FIJO

El modelamiento del proceso se basó en la implementación de dos modelos matemáticos reportados en la literatura bajo condiciones isotérmicas existentes dentro del lecho empacado.

2.1. MODELOS MATEMÁTICOS PARA LA ADSORCIÓN EN LECHO FIJO

Uno de los modelos utilizados se basa en el concepto de la zona de adsorción (Michaels, 1952) y el otro en el concepto de la etapa controlante en la transferencia de masa (Robert D. Fleck, Jr., Donald J. Kirwan, y Kenneth R. Hall, 1973). Para su selección se consideró que los modelos fueran limitados para casos de mezclas de alimentación diluida y curvas de isothermas de adsorción favorables ya que esto conduce a una transferencia de masa rápida y curvas de ruptura en forma sigmoidea [2, 3].

2.1.1. Modelo basado en la zona de adsorción (Modelo A). Este modelo se crea para simplificar las condiciones de estado no estacionario de la adsorción en lecho fijo y muchos otros factores que hacen que la solución de los balances de masa sea difícil. La consideración principal es la formación de la zona de adsorción y el hecho de que permanece constante a medida que viaja a través de la columna, además de que la altura del lecho adsorbente es grande con respecto a la altura de la zona de adsorción ya que es en esta zona donde ocurre la mayor parte del cambio de concentración. Por consiguiente, las ecuaciones establecidas para este modelo se muestran en la tabla 1, donde el poder fraccionario se refiere a la fracción de adsorbente en la zona de adsorción capaz de adsorber soluto [2].

Tabla 1: Ecuaciones para el modelo basado en la zona de adsorción.

DESCRIPCIÓN	ECUACIONES
Número global de unidades de transferencia de masa en la zona de adsorción (N_{total}).	$N_{total} = \int_{C_B}^{C_E} dC / C - C^* \quad (10)$
Altura global de una unidad de transferencia de masa (H_{total})	$H_{total} = (F/A) / a_p K_Y \quad (11)$
Altura de la zona de adsorción (Z_a)	$Z_a = H_{total} N_{total} \quad (12)$
Poder fraccionario del adsorbente en el punto de ruptura (f)	$f = \int_0^1 \left(1 - \frac{C}{C_0}\right) d \frac{Z - Z_B}{Z_a} \quad (13)$
Relación de altura adimensional ($(Z - Z_B) / Z_a$)	$(Z - Z_B) / Z_a = \left(\int_{C_B}^C \frac{dC}{C - C^*} \right) / N_{total} \quad (14)$
Tiempo de ruptura de la columna de adsorción (t_B)	$t_B = \frac{A \rho_b q_{max}}{F C_0} (Z - f Z_a) \quad (15)$

2.1.2. Modelo basado en la etapa controlante en la transferencia de masa (Modelo B). Este modelo posee dos restricciones principales, la primera es la consideración de un *flujo tapón*, para lo cual el balance de masa en un lecho fijo es el siguiente:

$$V \frac{\partial X}{\partial Z} + \rho_b \frac{q_{max}}{C_0} \frac{\partial Y}{\partial \theta} + \epsilon \frac{\partial X}{\partial \theta} = 0 \quad (16)$$

Y la segunda es *la condición de patrón constante* que globalmente cumple la relación de concentraciones tal que $C/C_0 = q^*/q_{max}$ (Anexo 2). El modelo plantea ecuaciones que constituyen soluciones analíticas para las isothermas de Langmuir y de Freundlich teniendo en cuentas tres etapas controlantes de acuerdo a los mecanismos de la transferencia de masa y la suposición del modelo de la *Fuerza Lineal Impulsora*:

- Difusión en la película de fluido para la isoterma de Langmuir propuesta por Perry y Green en 1999 y para la isoterma de Freundlich por Fleck *et al.*, en 1973.
- Difusión en el sólido para la isoterma de Langmuir propuesta por Inglezakis en 2002 y por Miura y Hashimoto en 1977 para la isoterma de Freundlich.
- Difusión en la película de fluido y en el sólido actuando en forma combinada para ambas isotermas por Miura y Hashimoto en 1977.

En la mayoría de los casos, la difusión que ocurre dentro de la matriz sólida es el mecanismo de control, pero si se tienen bajas velocidades de flujo el mecanismo controlante ya no será el mismo y corresponderá al transporte que ocurre en la película de fluido que rodea la partícula. Por ello se debe utilizar la velocidad lineal del fluido como patrón para la evaluación de la etapa de control [1,3]. En la tabla 2 se hace relación al sistema de ecuaciones algebraicas que corresponden a una solución aproximada al balance de masa mostrado anteriormente para cada etapa de control junto con la isoterma aplicada.

Tabla 2: Ecuaciones del modelo basado en la etapa controlante en la transferencia de masa.

ZONA DE DIFUSIÓN	ECUACIÓN
Película de fluido para la isoterma de Langmuir	$N_F (\mathcal{T} - 1) = 1 - [R \ln(1 - X) - \ln X / 1 - R] \quad (17)$
Sólido para la isoterma de Langmuir	$N_S (\mathcal{T} - 1) = [(R \ln(X) - \ln(1 - X)) / (1 - R) - 1] / \psi_s \quad (18)$ $\psi_s = 0.894 / (1 - 0.106 R^{0.5}) \quad (19)$
Película de fluido para la isoterma de Freundlich	$N_F (\mathcal{T} - 1) = 1 + \ln X - (W / (1 - W)) \ln(1 - X^{(1-W)/W}) + \zeta \quad (20)$ $\zeta = (W / (1 - W)) \sum_{k=1}^{\infty} W / (k[k(1 - W) + W]) \quad (21)$

<p>Sólido y película de fluido para la isoterma de Langmuir</p>	$\theta_t - X_t = [\varphi_1/1 + \zeta] + [\varphi_2\zeta/\eta(1 + \zeta)] \quad (22)$ $\varphi_1 = \ln X_i/(1 - R) - [R \ln(1 - X_i)/(R/(1 - R))] - \ln[R + (1 - R)X_i] - [(R/(1 - R))\ln(R + 1)] \quad (23)$ $\varphi_2 = [(R/(1 - R))\ln X_i - [(1/(1 - R))\ln(1 - X_i) - 1] \quad (24)$ $\eta = 1 - 0.192(1 - R)^3 \quad (25)$
<p>Sólido actuando por si solo y actuando en forma combinada con la película de fluido para la isoterma de Freundlich</p>	$\theta_t - X_t = [\omega_1/(1 + \zeta)] + [\zeta\omega_2/\eta(1 + \zeta)] + [\zeta\omega_3/((\eta + \zeta)(1 + \zeta))] \quad (26)$ $\omega_1 = (W/(W - 1))\ln(X_i^{W-1} - 1) + 1 + I_A(W^2/(W - 1))(\eta/(\eta + \zeta)) \quad (27)$ $\omega_2 = (1/(W - 1))\ln(1 - X_i^{1-W}) + (I_B/(W - 1))(\zeta/\eta + \zeta) \quad (28)$ $\omega_3 = W - 1 + (W/(W - 1))(I_A + I_B) \quad (29)$ $\eta = 0.808 + 0.192W \quad (30)$ $I_A = 65.33W^6 - 151.6W^5 + 132.8W^4 - 53.66W^3 + 10.54W^2 - 0.238W + 1.623 \quad (31)$ $I_B = 46.74W^6 - 106.6W^5 + 92.27W^4 - 35.94W^3 + 6.985W^2 + 0.122W + 1.001 \quad (32)$ $\theta_t = K_s a_p / (\rho_b(1 + 1/\zeta)) * (t - \epsilon Z/V) \quad (33)$ $X_t = K_s a_p \gamma Z / (1 + 1/\zeta)V \quad (34)$ $\gamma = q_0^*/C_0 \quad (35)$ $\zeta = K_f a_p / K_s a_p \gamma \quad (36)$

Donde X_i es la concentración relativa y se relaciona con la concentración adimensional X de la siguiente manera:

Tabla 3: Ecuaciones de la concentración relativa para cada isoterma.

LANGMUIR	$X = [(\zeta R + \eta)X_i + \zeta(1 - R)X_i^2]/[(\zeta + \eta)[R + (1 - R)X_i]] \quad (37)$
FREUNDLICH	$X = [\zeta X_i + \eta X_i^W]/[\zeta + \eta] \quad (38)$

2.2. DESARROLLO DEL MÓDULO DE SIMULACIÓN

Aspen HYSYS es un programa enfocado a la ingeniería de procesos que cuenta con una interfaz amigable para el usuario y permite el empleo de operadores lógicos y de herramientas que facilitan la simulación de diversos procesos industriales; Adicionalmente, Hysys permite la interacción con otros programas como *Visual Basic 6.0* que permiten complementar el software [12]. Esta última facilidad del software se le conoce como automatización y se realizó a través del *Extension View Editor*.

2.2.1. Extensión. Aspen HYSYS permite crear tres tipos de extensiones: de reacciones cinéticas, de paquetes de propiedades y de operaciones unitarias. La extensión usada para este proyecto es del tipo de operación unitaria y se comporta de manera similar a cualquier otra operación que ofrece el software y su interfaz gráfica se diseñó de tal manera que siguiera la filosofía de trabajo de HYSYS (Anexo 3), aunque su ejecución necesita de un registro previo (Anexo 4) y de una archivo externo a HYSYS.

2.2.2. Algoritmos de diseño del módulo computacional. Ambos modelos se programaron en *Visual Basic 6.0* y tienen como finalidad dos objetivos de cálculo, simulación o diseño de la columna; la primera opción es útil para estimar tiempos de ruptura a partir de la altura de la torre (variable principal para la simulación) mientras que la segunda opción es para dimensionar la torre a partir de un tiempo de ruptura estimado (variable principal para el diseño). Aparte de las dos variables nombradas anteriormente, los modelos matemáticos comparten otros parámetros de entrada, especificaciones para los cálculos y resultados propios de cada modelo. En la Figura 3 se observa una descripción detallada de cada uno de los parámetros de entrada y de los resultados para cada modelo.

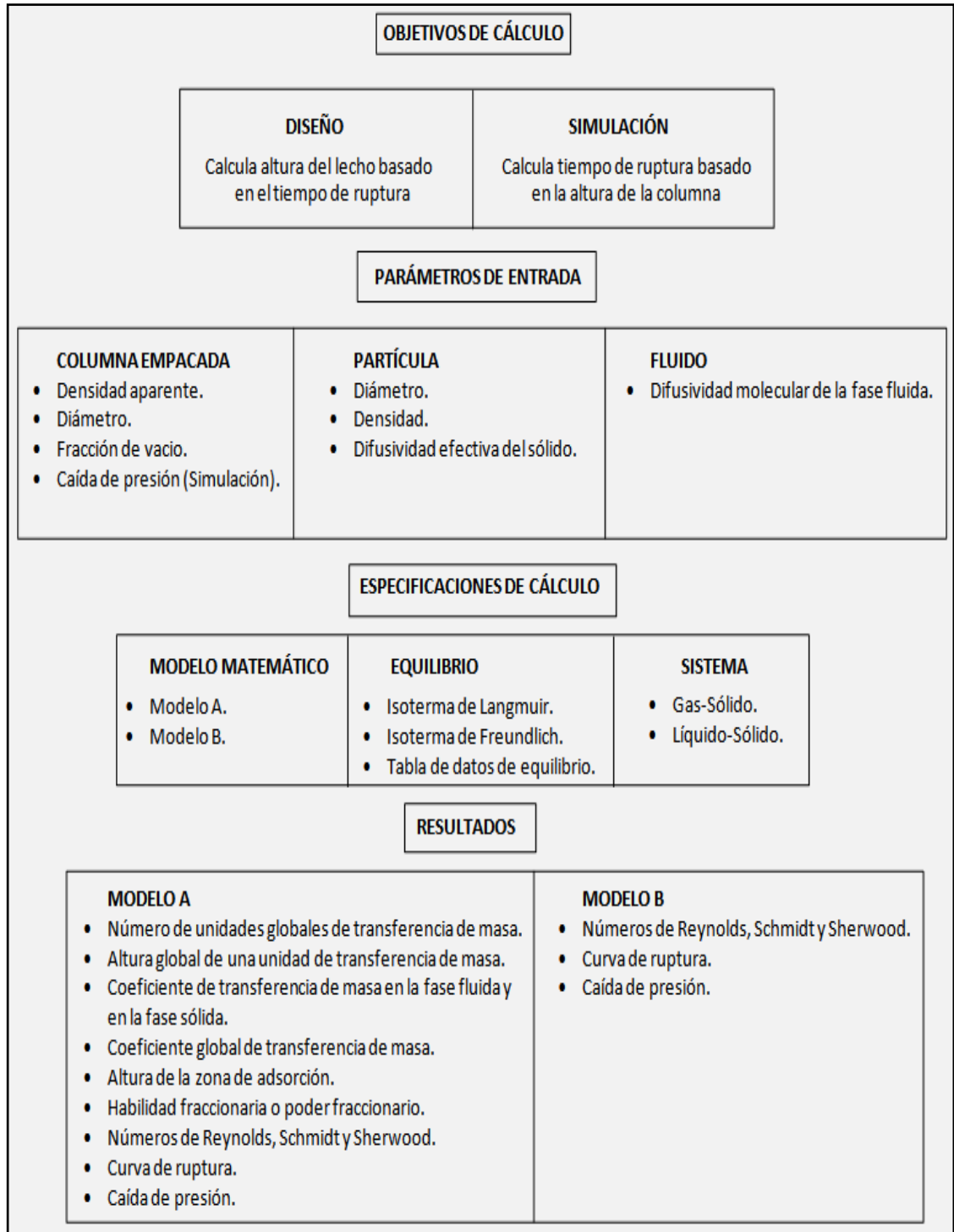


Figura 3: Parámetros de entrada, especificaciones de cálculo y datos de salida del módulo computacional.

2.2.3. Especificaciones de la extensión. Para que converja el módulo se debe considerar que en el proceso no debe haber cambio de fase y la corriente de entrada al adsorbedor debe ser vapor o líquido únicamente. Además como se trabajan con sistemas monovariantes (un solo compuesto se adsorbe) se debe definir el adsorbato.

El cálculo de los coeficientes de transferencia de masa se basó en correlaciones empíricas tomadas de la literatura (Anexo 5) y se diseñó la opción que permite al usuario cambiar los valores de coeficientes independientes y/o exponentes de estas ecuaciones. Por defecto el módulo utiliza los valores que se reportan en la literatura. La figura 4, muestra la página *Connections* de la pestaña *Design* del módulo, en la cual las corrientes de entrada y de salida son requeridas al igual que una tercera corriente “*Adsorbate*”, necesaria para completar el balance de masa pero que no es propia del proceso de adsorción en lecho fijo.

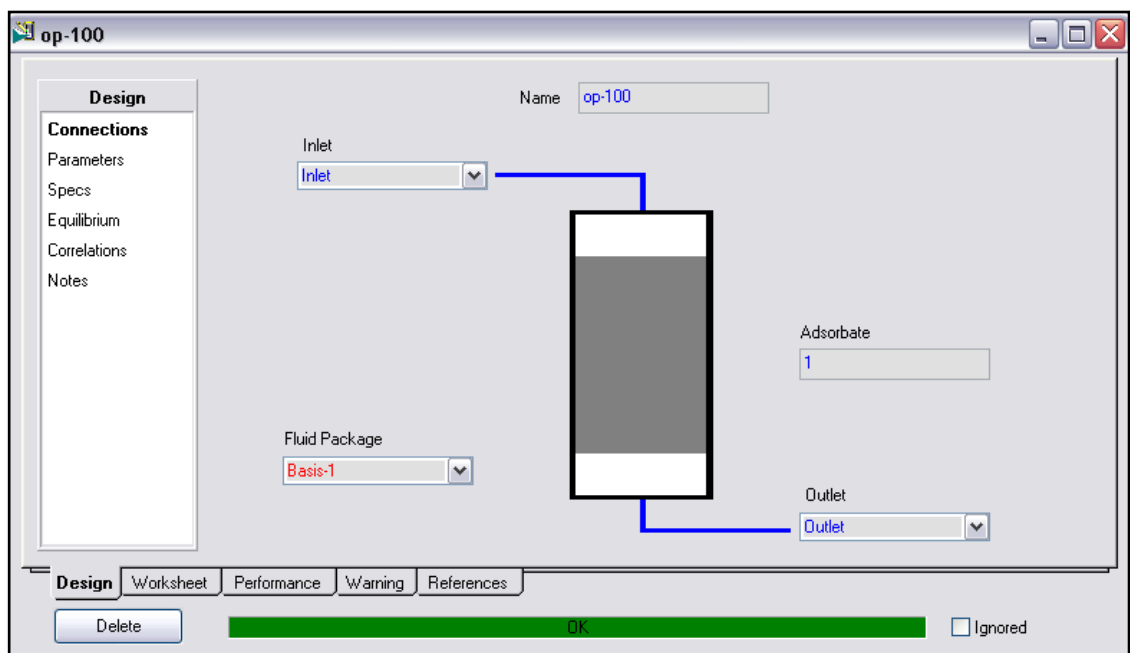


Figura 4: Página *Connections* de la pestaña *Design*.

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

3.1. SIMULACIÓN DE LA ADSORCIÓN DE FENANTRENO SOBRE UN LECHO FIJO DE COQUE

Con la estimación del tiempo de ruptura calculado a través de los dos modelos matemáticos A y B, mencionados anteriormente, el módulo fue validado para el sistema Fenantreno/Coque de una corriente de Helio como gas de arrastre en cuyo caso se describe el equilibrio por medio de la isoterma de Freundlich [1]. Las condiciones para la simulación se resumen en la siguiente tabla:

Tabla 4: Parámetros de entrada para la simulación del sistema Fenantreno/Coque de una corriente de Helio como gas de arrastre.

PARÁMETROS DE ENTRADA		
Condiciones de Operación	Temperatura [$^{\circ}C$]	150
	Concentración inicial de Fenantreno en el fluido [mol/m^3]	$1,5 \times 10^{-3}$
Condiciones de Equilibrio	Parámetro de Freundlich (W)	0,1587
	Constante de Freundlich [$(mol/kg) (m^3/kg)^W$]	2,18
Condiciones de la partícula	Flujo volumétrico [m^3/s]	$4,864 \times 10^{-5}$
	Densidad [kg/m^3]	1,352
	Viscosidad [$kg/m * s$]	$3,03 \times 10^{-4}$
	Difusividad molecular del Fenantreno en Helio [m^2/s]	$8,78 \times 10^{-6}$
Condiciones del lecho adsorbente	Diámetro [m]	0,018
	Altura [m]	0,03
	Fracción de vacío	0,358
	Densidad aparente [kg/m^3]	365,9
Condiciones del coque	Diámetro [m]	$1,5 \times 10^{-4}$
	Difusividad efectiva del sólido [m^2/s]	$2,22 \times 10^{-12}$

Se especificó un porcentaje de retención en el punto de ruptura de 2% y de un 95% en el punto de saturación del lecho requerido únicamente por el modelo A. Además se escogió como tipo de sistema la condición de “Gas-Solid”, se asumió que el lecho involucra partículas esféricas de coque y como etapa de

control requerida por el modelo B se escogió la opción “*Determination of the controlling mechanism*”.

Para el simulador se especificó la lista de los componentes y se tomó el “*PSRV*” como paquete termodinámico; por último se ajustó las condiciones de operación de la corriente de alimento a una presión de 1185 *kPa* para alcanzar las condiciones del fluido especificadas en la tabla 4.

En la siguiente tabla se presentan los resultados de la simulación obtenidos para ambos modelos junto con el rango de tiempo experimental reportado en la literatura [13]:

Tabla 5: Tiempos de ruptura obtenidos de la simulación del sistema Fenantreno/Coque.

MODELO MATEMÁTICO	TIEMPO EXPERIMENTAL (h)	TIEMPO TEÓRICO (h)
A	7 – 7,5	7,33
B	7 – 7,5	7,29

Una comparación entre los datos tabulados anteriormente muestra que los modelos implementados son adecuados para describir el comportamiento del proceso de adsorción en lecho fijo, ya que se encuentran dentro del rango del tiempo experimental.

3.2. RESULTADOS Y CURVA DE RUPTURA DE LA SIMULACIÓN DEL SISTEMA FENANTRENO/COQUE

La simulación permite obtener la curva de ruptura y los resultados propios de cada modelo. La figura 5 muestra la curva de ruptura para el modelo A, esta curva es adimensional y grafica (*X vs Altura adimensional*), donde la altura adimensional hace referencia a una relación de alturas, entre una altura menor

a la altura de la zona de adsorción y Z_a , la figura 6 muestra la curva de ruptura (X vs t) para el modelo B.

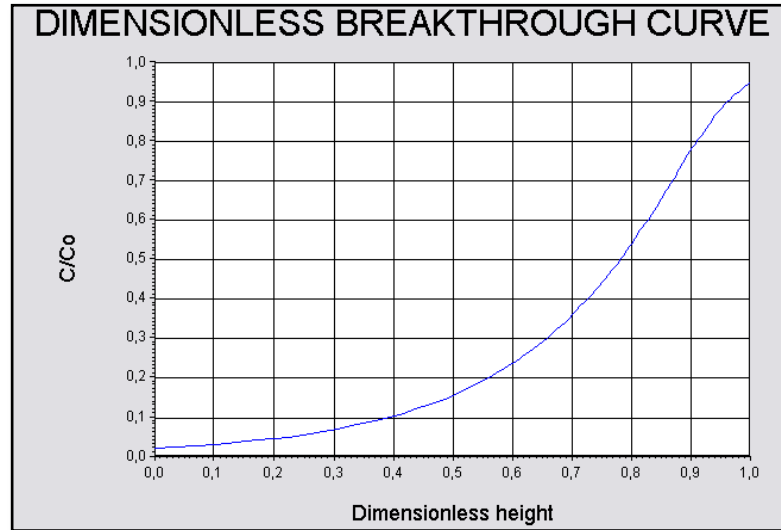


Figura 5: Curva de ruptura adimensional para la simulación del sistema Fenantreno/Coque calculada a partir del modelo basado en la zona de adsorción.

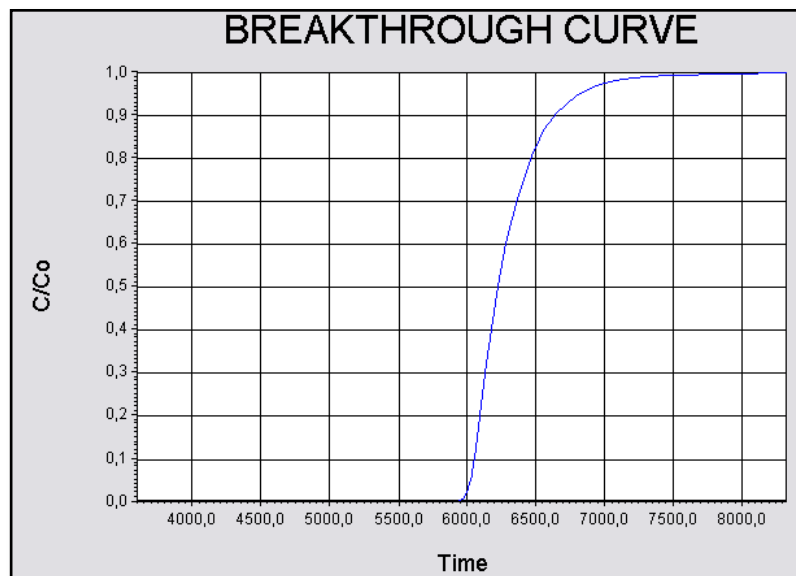


Figura 6: Curva de ruptura para la simulación del sistema Fenantreno/Coque calculada a partir del modelo basado en la etapa controlante de la transferencia de masa.

Los resultados obtenidos para cada modelo se presentan en las siguientes tablas:

Tabla 6: Resultados del modelo basado en la zona de adsorción.

MODELO A	
Número global de unidades de transferencia de masa	4,152
Altura global de una unidad de transferencia de masa [m]	$7,366 \times 10^{-5}$
Coeficiente global de transferencia de masa [s^{-1}]	2594
Coeficiente de transferencia de masa de la fase fluida [s^{-1}]	2646
Coeficiente de transferencia de masa de la fase sólida [s^{-1}]	2,166
Altura de la zona de adsorción [m]	$3,059 \times 10^{-4}$
Poder fraccionario	0,7207
Número de Reynolds	0,1282
Número de Schmidt	25,48
Número de Sherwood	1,76
Caída de presión [kPa]	161,9

Tabla 7: Resultados del modelo basado en la etapa controlante de la transferencia de masa.

MODELO B	
Número de Reynolds	0,1282
Número de Schmidt	25,48
Número de Sherwood	1,76
Caída de presión [kPa]	161,9

El modelo A es de gran utilidad por que muestra más posibilidades para el análisis del proceso que el modelo B, ya que dispone de gran variedad de resultados facilitando la descripción del fenómeno en cuanto a la rapidez del proceso de adsorción, caracterización del flujo y de la zona de adsorción, difusividad másica y de cantidad de movimiento, etc.

3.3. EFECTO DE LA ETAPA DE CONTROL EN LA CURVA DE RUPTURA DEL MODELO BASADO EN LA ETAPA CONTROLANTE DE LA TRANSFERENCIA DE MASA

Tomando los datos mostrados en la tabla 4 como parámetros de entrada para la simulación del sistema Fenantreno/Coque, se comparó la curva de ruptura obtenida para la difusión en la película de fluido con la curva para la difusión en el sólido como etapas de control de la transferencia de masa (figuras 7 y 8) y se corroboró la importancia de la selección de la etapa controlante del sistema; ya que se observa que la curva de la figura 7 es menos pronunciada en su pendiente con respecto a la curva de la figura 8 desfavoreciendo el proceso de adsorción.

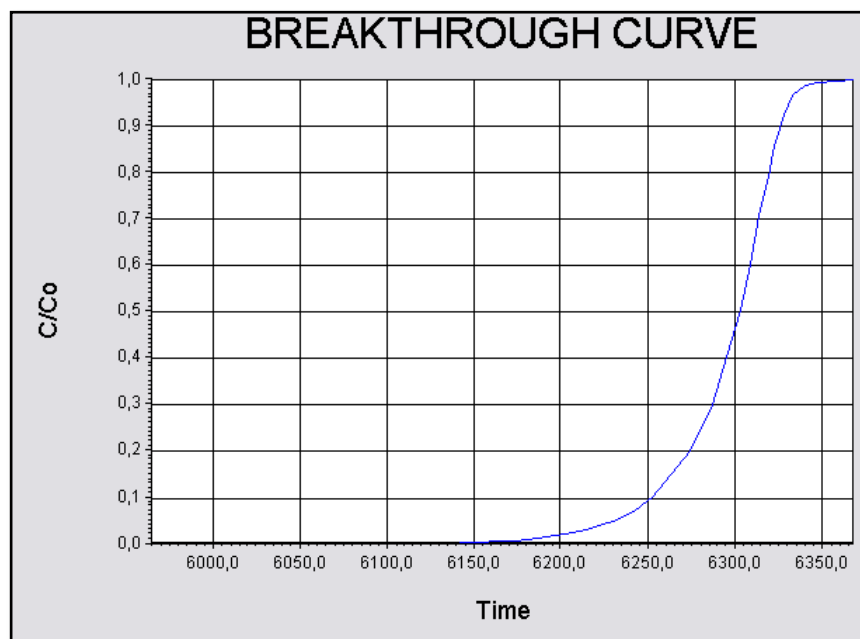


Figura 7: Curva de ruptura para la simulación del sistema Fenantreno/Coque con difusión en la película de fluido como etapa de control.

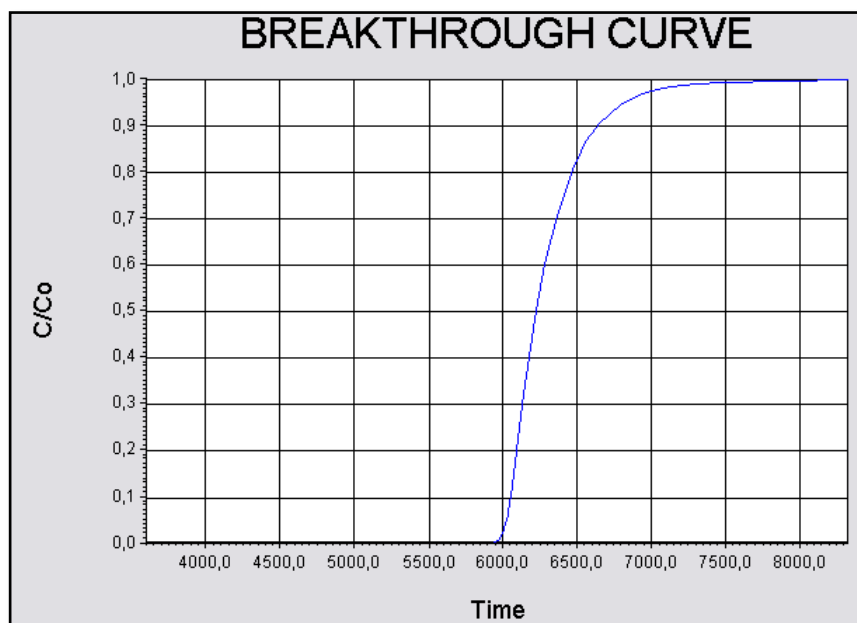


Figura 8: Curva de ruptura para la simulación del sistema Fenantreno/Coque con difusión en el sólido como etapa de control.

3.4. PRUEBAS DE SENSIBILIDAD DEL MÓDULO COMPUTACIONAL

Se realizaron pruebas de sensibilidad utilizando la herramienta *Databook* del software para verificar las diferentes tendencias que exhibe el módulo en cuanto a tiempos de operación, alturas de lecho empacado y flujos másicos del fluido.

3.4.1. Variación de la altura del lecho con respecto al tiempo de operación. Las expresiones matemáticas que describen los modelos A y B en función del tiempo de operación marcan tendencias lineales y en este caso en particular se observó la misma tendencia para ambos modelos (figuras 9 y 10), es decir se comprobó que el tiempo de operación de la columna es directamente proporcional con la altura del lecho adsorbente.

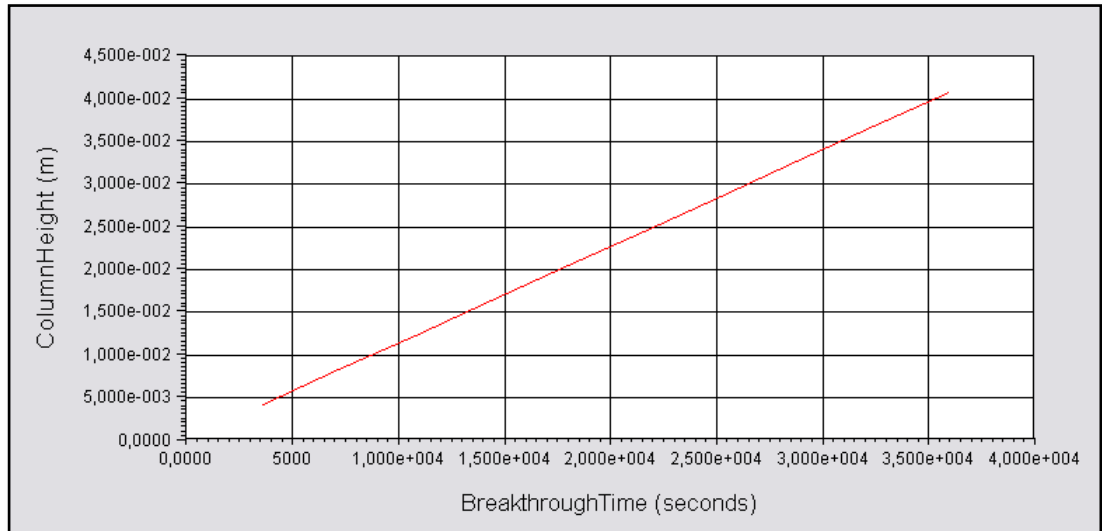


Figura 9: Variación de la altura del lecho con respecto al tiempo de operación del modelo basado en la zona de adsorción.

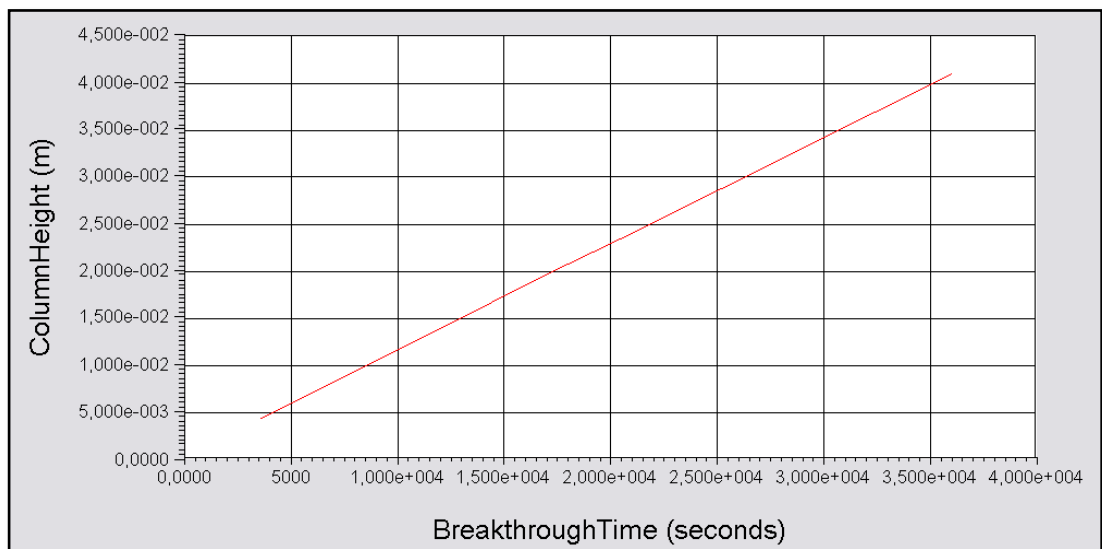


Figura 10: Variación de la altura del lecho con respecto al tiempo de operación del modelo basado en la etapa controlante de la transferencia de masa.

3.4.2. Variación del tiempo de ruptura con respecto al flujo másico del fluido y su influencia en las curvas de ruptura. En la figura 11 se observa la variación del tiempo de ruptura con respecto al flujo másico del fluido y en la figura 12 se muestra su influencia en la pendiente de la curva de ruptura.

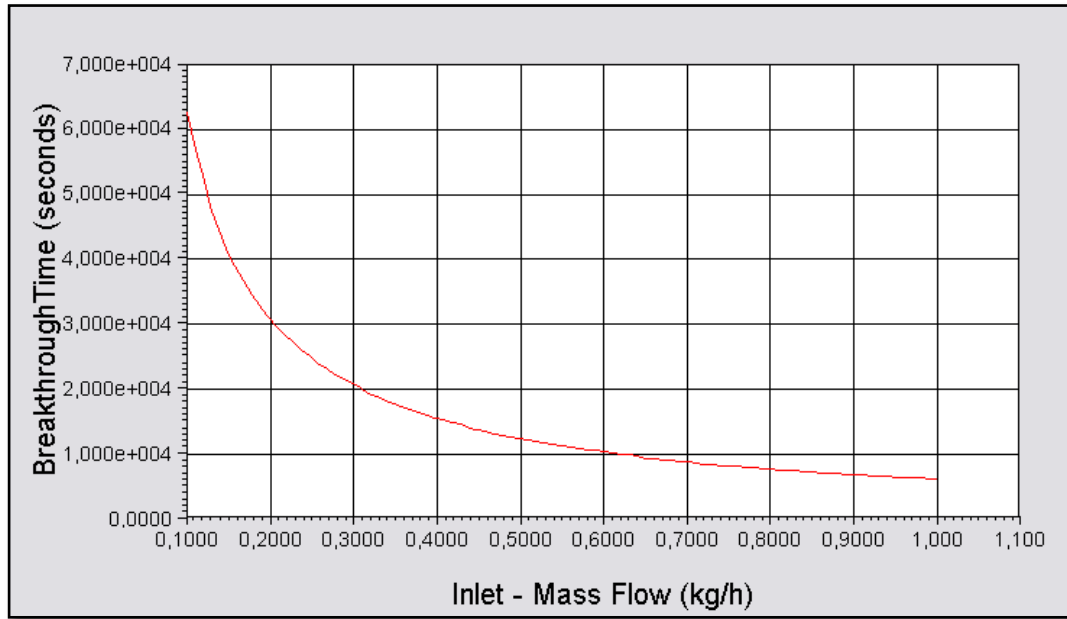


Figura 11: Variación del tiempo de ruptura con respecto al flujo másico del fluido.

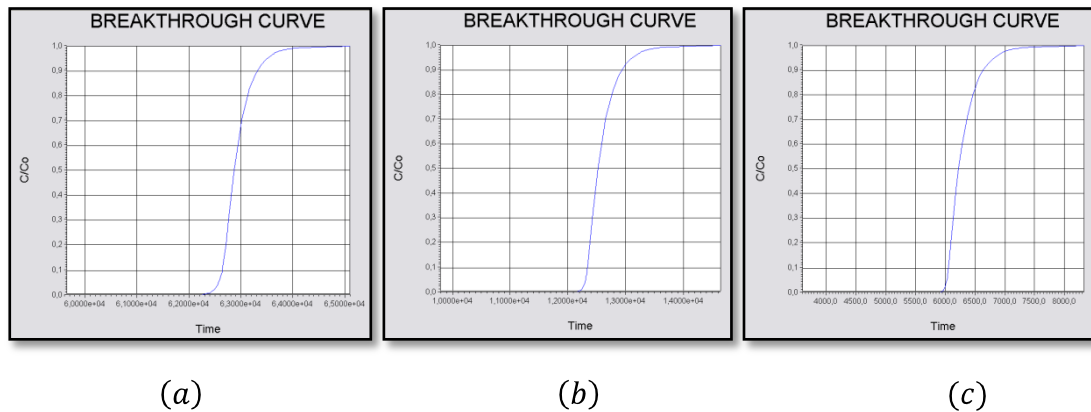


Figura 12: Influencia de la variación del flujo másico del fluido en las curvas de ruptura.

Se observó en la figura 12 que a medida que aumenta el flujo másico ((a) $\dot{m} = 0.1 \text{ kg/h}$; (b) $\dot{m} = 0.5 \text{ kg/h}$; (c) $\dot{m} = 1 \text{ kg/h}$) se obtienen curvas de rupturas más pronunciadas y disminución en el tiempo de ruptura (figura 11). Esto favorece el proceso de adsorción, ya que el tiempo de residencia del soluto en el lecho no es suficiente para que se alcance el equilibrio de adsorción garantizando una transferencia de masa rápida aprovechando la capacidad de adsorción del lecho.

4. CONCLUSIONES

Se elaboró un módulo computacional para el diseño y simulación de columnas de adsorción como herramienta y soporte del proceso de enseñanza para la Escuela de Ingeniería Química de la universidad Industrial de Santander.

Se validó el módulo computacional con la simulación del sistema Fenantreno/Coque de una corriente de Helio como gas de arrastre obteniéndose valores cercanos para cada modelo con respecto al tomado en la literatura describiendo favorablemente el comportamiento del proceso de adsorción en lecho fijo.

Se encontró que las curvas obtenidas para los casos de estudio analizados presentaron formas sigmoidales, tal y como se observan en la literatura.

5. RECOMENDACIONES

Debido a que el módulo de simulación no puede ser acoplado a otros equipos de HYSYS por su condición de estado transitorio, se recomienda entonces implementar un módulo del proceso de regeneración del lecho y con ello trabajar en conjunto para poder garantizar condiciones estables del proceso durante la operación del ciclo adsorción/regeneración.

Complementar el modelo basado en el concepto de la etapa controlante en la transferencia de masa con el empleo de ecuaciones que describan la difusión en el poro actuando individualmente. Además, de sus combinaciones con los demás tipos de mecanismos de control con el fin de aumentar criterios de comparación entre los resultados.

6. NOMENCLATURA

A	Área de la sección transversal del lecho adsorbente, L^2 .
a_p	Superficie de partículas por unidad de volumen, L^2/L^3 .
C	Concentración de soluto en el fluido, M/L^3 .
C^*	Concentración de equilibrio del soluto en el fluido, M/L^3 .
C_B	Concentración de soluto en el efluente en el punto de ruptura, M/L^3 .
C_E	Concentración de soluto en el efluente en el agotamiento del lecho, M/L^3 .
d	Diámetro del lecho adsorbente, L .
d_p	Diámetro de la partícula, L .
D_s	Difusividad efectiva, L^2/θ .
D_p	Difusividad efectiva de poro, L^2/θ .
\mathcal{D}_{AB}	Difusividad molecular, L^2/θ .
f	Habilidad fraccionaria de la zona de adsorción para adsorber soluto, <i>adimensional</i> .
F	Flujo volumétrico del fluido, L^3/θ .
H_{fluido}	Altura de una unidad de transferencia del fluido, L .
H_{total}	Altura de una unidad global de transferencia del fluido, L .
$H_{sólido}$	Altura de una unidad de transferencia del sólido, L .
K	Constante de equilibrio de la isoterma de Langmuir, L^3/M .
K_f	Coefficiente de transferencia de masa en la fase fluida, L/θ .

K_s	Coeficiente de transferencia de masa en la fase sólida, $L./\theta$.
K_Y	Coeficiente global de transferencia de masa de la fase fluida, $L./\theta$
K_F	Constante de equilibrio de la isoterma de Freundlich.
R	Parámetro de equilibrio de la isoterma de Langmuir, <i>adimensional</i> .
m	Pendiente de la isoterma de adsorción en el equilibrio, M/L^3
N_S	Número de unidades de transferencia de masa para la difusión en el sólido, <i>adimensional</i> .
N_F	Número de unidades de transferencia de masa para la difusión externa, <i>adimensional</i> .
N_{total}	Número de unidades globales de transferencia del fluido, <i>adimensional</i> .
q	Concentración de adsorbato en el sólido, M/M .
q^*	Concentración de adsorbato en equilibrio con el fluido entrante, M/M .
q_{max}	Concentración de adsorbato en equilibrio con la concentración inicial de soluto en el fluido, M/M .
Q_M	Máxima cantidad posible de adsorción, M/M .
Re_p	Número de Reynolds, <i>adimensional</i> .
S_s	Flujo másico de adsorbente por unidad de área transversal, $M/\theta L^2$.
S_{cp}	Número de Schmidt, <i>adimensional</i> .

S_{hL}	Número de Sherwood, <i>adimensional</i> .
t_B	Tiempo de ruptura, θ .
T	Temperatura absoluta, T .
V	Velocidad del fluido, L/θ .
v_{lecho}	Volumen del lecho adsorbente, L^3 .
Z_A	$z_E - Z_B, L$.
Z_B	Altura de un adsorbedor de lecho fijo en el punto de ruptura, L .
Z_E	Altura de un adsorbedor en el agotamiento del lecho, L .
W	Parámetro de la isoterma de Freundlich, <i>adimensional</i> .
X	Parámetro adimensional de concentración de adsorbato en el fluido.
Y	Parámetro adimensional de concentración de adsorbato en el sólido.
Z	Altura de la columna adsorbente o lecho fijo, L .
Z_a	Altura de la zona de adsorción, L .
ρ	Densidad del fluido, M/L^3 .
ρ_b	Densidad aparente del lecho adsorbente, M/L^3 .
ρ_p	Densidad del adsorbente, M/L^3 .
μ	Viscosidad del fluido, $M/L\theta$.
ϕ_s	Factor de forma, <i>adimensional</i> .
ϵ	Fracción de vacío del lecho, <i>adimensional</i> .
Λ	Coefficiente de distribución, <i>adimensional</i> .

χ	Porosidad de la partícula, <i>adimensional</i> .
\mathcal{T}	Parámetro de rendimiento, <i>adimensional</i> .
ΔP	Caída de presión, $M/L \theta^2$.
ΔL	Diferencial de longitud del lecho, L .

BIBLIOGRAFÍA

- [1] INGLEZAKIS V.J. Y POULOPOULOS S.G. Adsorption, Ion Exchange and Catalysis Design of Operations and Environmental Applications. Editorial: Elsevier, 2007. P.141-339
- [2] TREYBAL ROBERT. Operaciones de transferencia de masa. Segunda edición. México: Editorial McGraw-Hill, 2002 .P. 680-705.
- [3] ROBERT D. FLECK, JR., DONALD J. KIRWAN, Y KENNETH R. HALL. Mixed-Resistance Diffusion Kinetics in Fixed Bed Adsorption under Constant Pattern Conditions. Industrial & Engineering Chemistry Fundamental. Vol. 12, Nº 1. (1973)
- [4] GEANKOPLIS.C.J. Procesos de transporte y operaciones unitarias. Tercera edición. México: Editorial CECSA., 1998. P.137-138
- [5] McCABE, W.; SMITH, J. y HARRIOT, P. Operaciones Unitarias en Ingeniería Química. Sexta edición. España: Editorial Mc Graw Hill, 2002. P. 877-913
- [6] THOMAS, W.J. y CRITTENDEN BARRY. Adsorption Technology and Design. Publicación: Elsevier Science & Technology Books. Abril 1998. P.174-175.
- [7] MARTÍNEZ DE LA CUESTA, PEDRO J. Y RUS MARTÍNEZ ELOÍZA. Operaciones de separación en ingeniería química, Métodos de cálculo. Editorial Pearson. P.318-320
- [8] Operación unitaria: Adsorción, Adsorción física y Química. Internet: (<http://www.fcyt.umss.edu.bo/docentes/29/documento/adsorcion.pdf>).

[9] RIVERO, MARTÍNEZ MARÍA JOSÉ. Diseño del Proceso de Purificación de Estireno mediante Adsorción en Alúmina. Tesis doctoral Doctora. Santander España: Universidad de Cantabria. Departamento de Ingeniería Química y Química Inorgánica. 2002.

[10] LASTRE SERRANO INA YADITH. Diseño y simulación de columnas de adsorción de cromo de aguas tratadas de tenerías utilizando adsorbentes desarrollados en países iberoamericanos. Tesis de pregrado, Ingeniero químico. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander, 2004.

[11] PERRY ROBERT H y GREEN DON W. Perry`s Chemical Engineer`s Handbook. Séptima edición. Editorial: Mc Graw Hill. Secciones 6 y 16.

[12] ASPEN TECHNOLOGY, INC. Aspen Hysys Customization Guide. Versión 2006.

[13] NAVARRO LÓPEZ, MARÍA VICTORIA. Materiales carbonosos para el control de contaminantes orgánicos atmosféricos. Diseño y Rendimiento. Tesis doctoral, Doctor en ciencias químicas. Zaragoza, 2003.

ANEXOS

ANEXO 1: ECUACIÓN DE LEVA

La ecuación de leva se utilizó principalmente en el cálculo de la caída de presión para sistemas líquidos. Esta ecuación presenta un exponente (n) como una función del número de Reynolds que se determina a partir de la siguiente grafica [11]:

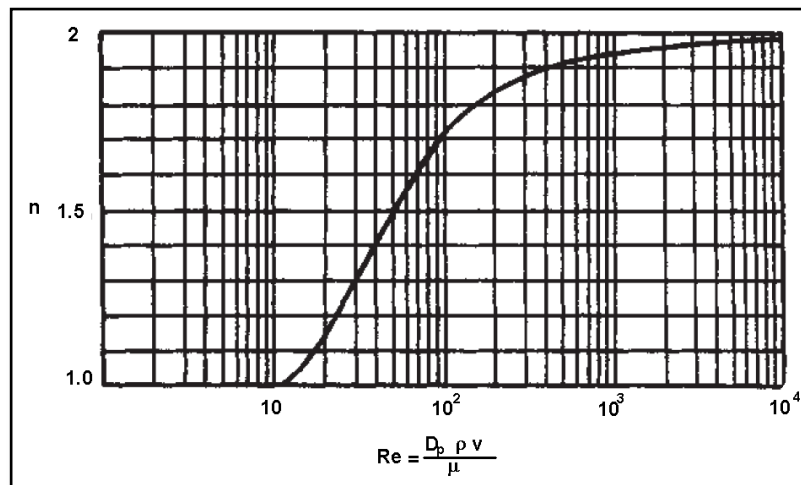


Figura 13: Curva semilogarítmica del exponente (n) de la ecuación de leva en función del número de Reynolds³.

Para determinar una expresión $n = f(\text{Log}(Re))$ se graficaron los puntos de la figura anterior y se ajustaron a un polinomio de grado tres (figura 14):

El polinomio que se obtuvo para $1 < \text{Log}(Re_p) < 4$ es:

$$n = 0,0339 \text{Log}(Re_p)^3 - 0,435 \text{Log}(Re_p)^2 + 1,8111 \text{Log}(Re_p)^1 - 0,4807 \quad (39)$$

Con un parámetro de ajuste de $R^2 = 0,9903$.

³ PERRY ROBERT H y GREEN DON W. Perry's Chemical Engineer's Handbook. Séptima edición. Editorial: Mc Graw Hill. Secciones 6 y 16.

Para $0 < \text{Log}(Re_p) < 1$ se tomó $n = 1$ ya que ese rango pertenece a una línea recta.

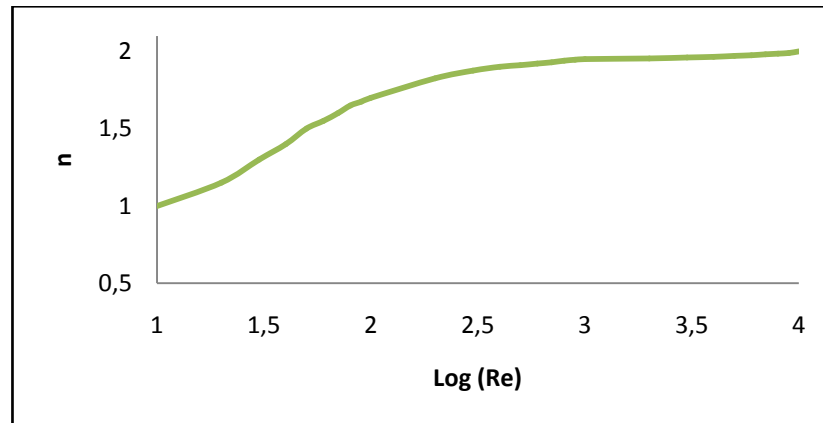


Figura 14: Ajuste del exponente (n) de la ecuación de leva a un polinomio de grado tres.

ANEXO 2: CONDICIONES DE PATRÓN CONSTANTE Y FLUJO TAPÓN

FLUJO TAPÓN

La consideración de flujo tapón es la situación en la que mezcla axial a través de varias secciones del lecho es mínima, mientras que en la mezcla radial es total y por tanto el término de dispersión axial se desprecia. El parámetro principal para distinguir entre las dos mezclas es el número Peclet de la partícula:

$$P_{ep} = (V d_p) / D_L \quad (40)$$

Pero al multiplicar este número por el término Z / d_p , se obtiene el número de Peclet del lecho (P_{El}) y por lo tanto la suposición de flujo tapón es válida sólo si éste número es aproximadamente mayor que a 100 [1].

PATRÓN CONSTANTE

Esta condición reduce la ecuación de balance de masa a la simple relación: $C/C_o = q^* / q_{max}$. En la práctica, esta relación se mantiene si el equilibrio es

favorable y los tiempos de residencia son altos. Sin embargo, este supuesto es "débil" si el sistema presenta una cinética muy lenta [1].

Bajo la hipótesis de flujo de tapón, en el balance de materia en un lecho fijo (Ec.8) las derivadas parciales con respecto al tiempo son positivas, mientras que con respecto a la longitud es negativa. Además, $X = C/C_o$ y $Y = q/q_{max}$, obteniéndose la siguiente expresión:

$$\frac{\partial Z}{\partial t} = - \left(V / \left(\epsilon + \frac{q_{max} \rho_b}{C_o} \frac{dY}{dX} \right) \right) \quad (41)$$

Donde $\partial Z / \partial t < 0$. Esta derivada parcial es la velocidad del frente de concentración en el lecho. La suposición de patrón constante presupone que ésta velocidad es constante, o en otras palabras, es independiente de la concentración de la solución. Esto significa que todos los puntos de la curva de ruptura "viajan" en el lecho bajo la misma velocidad, y por lo tanto se establece una forma constante de la curva. De acuerdo con la ecuación anterior, esto puede suceder sólo si:

$$\frac{dY}{dX} = constante \Rightarrow Y = C_1 X + C_1 \Rightarrow Y = X \quad (42)$$

Esta relación es la condición de patrón constante. Según la literatura, un criterio para este supuesto es el siguiente [1]:

$$\left(\frac{q_{max}}{C_o} \right) \left(\frac{V}{Z} \right)^{-1} \left(\frac{\partial X}{\partial t} \right)_Z \gg 1 \quad (43)$$

El primer término es el coeficiente de carga máxima de sólidos para una concentración de entrada específica, mientras que el segundo término es la velocidad espacial (el inverso del tiempo de residencia), y la tercera es la pendiente de la curva de ruptura.

ANEXO 3: INTERFAZ GRÁFICA DE LA EXTENSIÓN

EXTENSION VIEW EDITOR

La *Extension View Editor* es la conexión entre el código del módulo y la simulación en HYSYS que permite crear o modificar el archivo de *definición de la extensión (*.EDF)*. Este archivo de extensión permite que los usuarios tengan acceso a la automatización y la ampliación de la capacidad del software, a su vez actúa como la interfaz gráfica en HYSYS [12].

La interfaz gráfica se crea a partir de la ventana de propiedades **Views Manager** (Director de vista) y de la paleta de *Widgets*. El *Views Manager* tiene dos opciones: el *View File* que indica la ruta y el nombre del archivo (*.EDF) actual y *Select Object* que consiste en una lista desplegable que permite seleccionar uno de los objetos definidos en el **Object Manager** (Director de Objeto) (figura15 y 16). En esta opción se ingresa la información necesaria para que la extensión funciones correctamente y sea usada para el almacenamiento y declaración de las variables y objetos aplicados en la extensión.

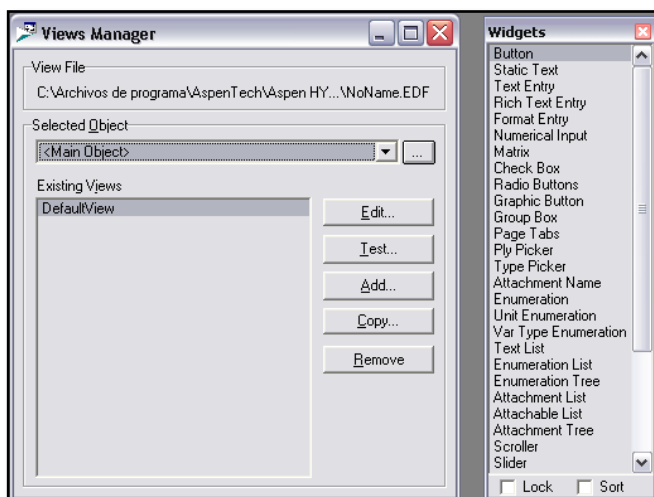


Figura 15: Views Manager y paleta de Widgets del View Editor.

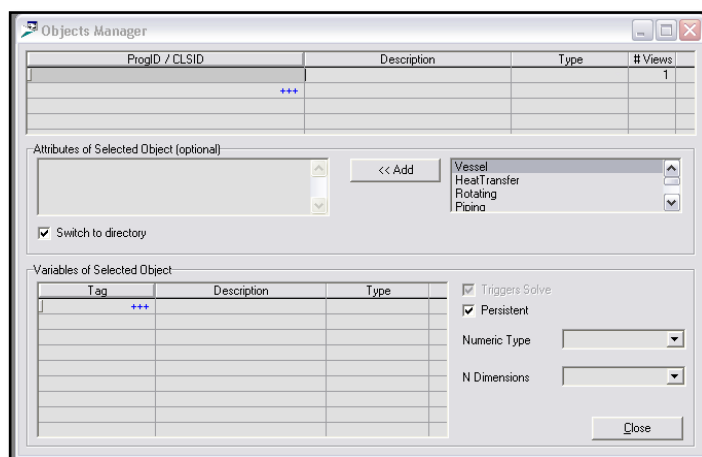


Figura 16: *Object Manager* del *View Editor*.

INTERFAZ DEL ADSORBEDOR DE LECHO FIJO

La interfaz gráfica se creó de tal modo que el entorno de la extensión fuese similar al de HYSYS. Comprende cinco pestañas de selección:

- **Design:** comprende la conexión de corrientes y la entrada de parámetros y especificaciones necesarios para la operación; a su vez se subdivide en seis páginas: *Connections*, *Parameters*, *Specs*, *Equilibrium*, *Correlations* y *Notes* (Figuras 17 a la 20).
- **Worksheet:** presenta la información de las corrientes de entrada y salida del equipo (Figura 21).
- **Performance:** se refiere a los resultados propios de cada modelo, tiene dos opciones: *Results* en donde se imprimen los valores calculados y *Plots* en la cual aparecen las curvas de ruptura junto con la tabla de datos graficados (Figuras 22 y 23).
- **Warning:** se encuentran algunas consideraciones necesarias para los cálculos del proceso de adsorción (Figura 24).
- **References:** se detalla la información de los creadores de la extensión (Figura 25).

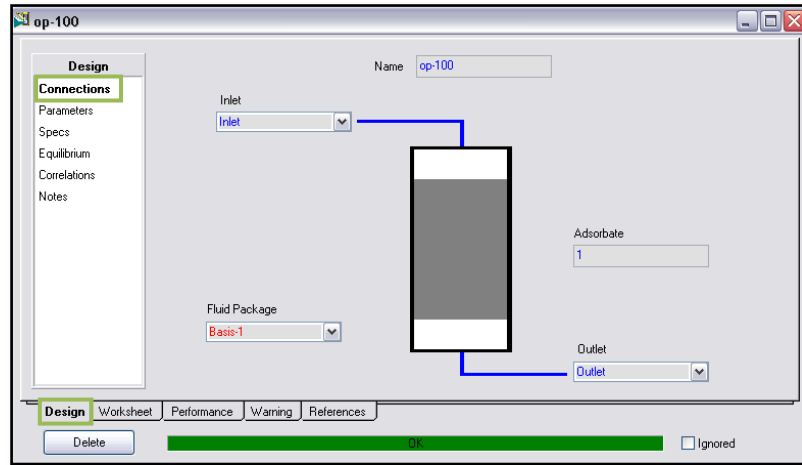


Figura 17: Página *Connections* de la pestaña *Design*.

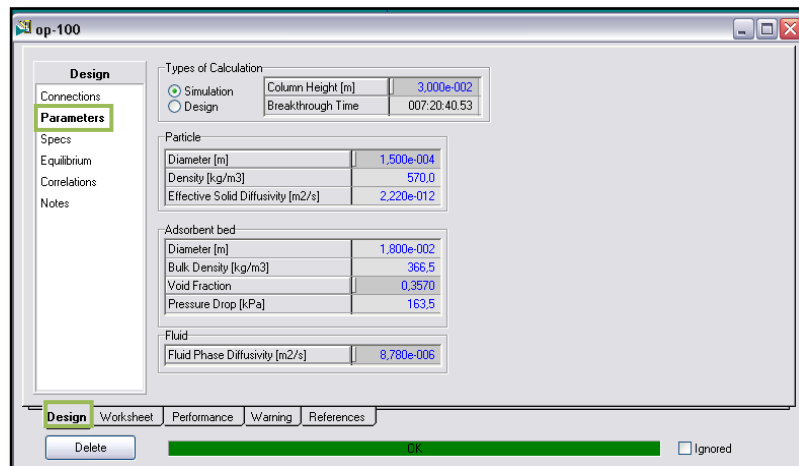


Figura 18: Página *Parameters* de la pestaña *Design*.

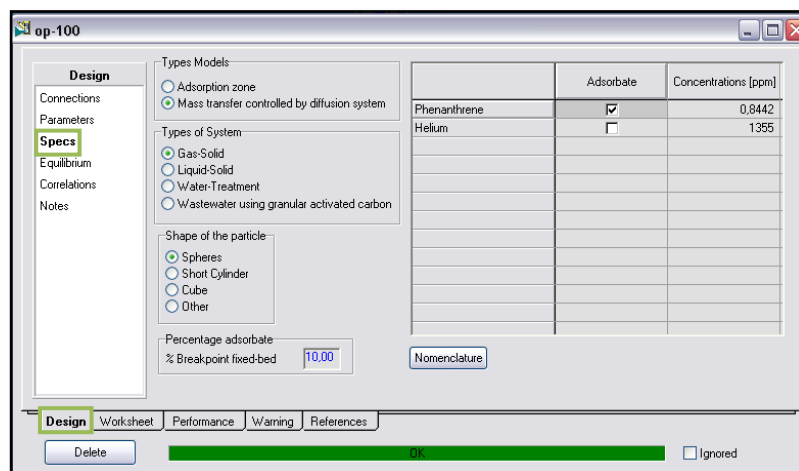


Figura 19: Página *Specs* de la pestaña *Design*.

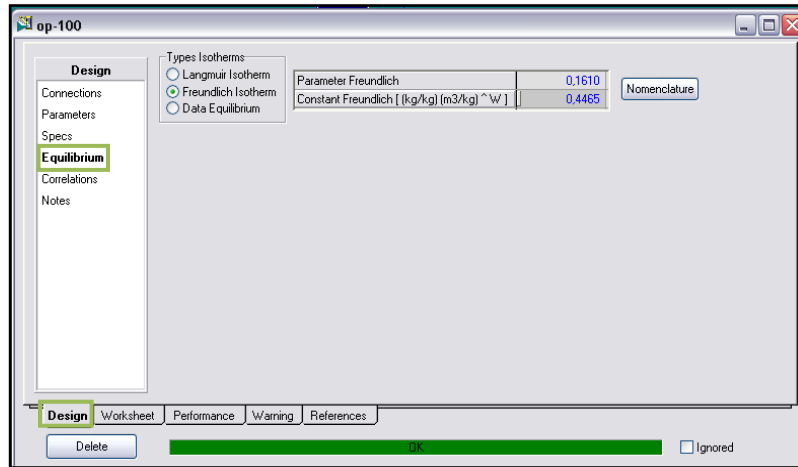


Figura 20: Página *Equilibrium* de la pestaña *Design*.

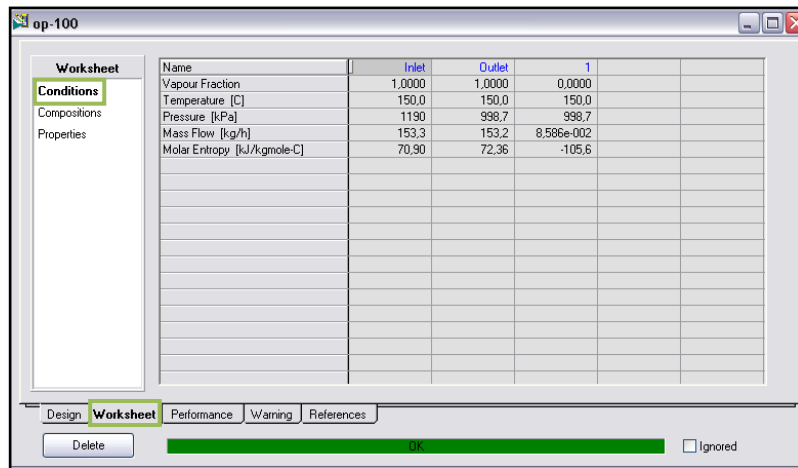


Figura 21: Página *Conditions* de la pestaña *Worksheet*.

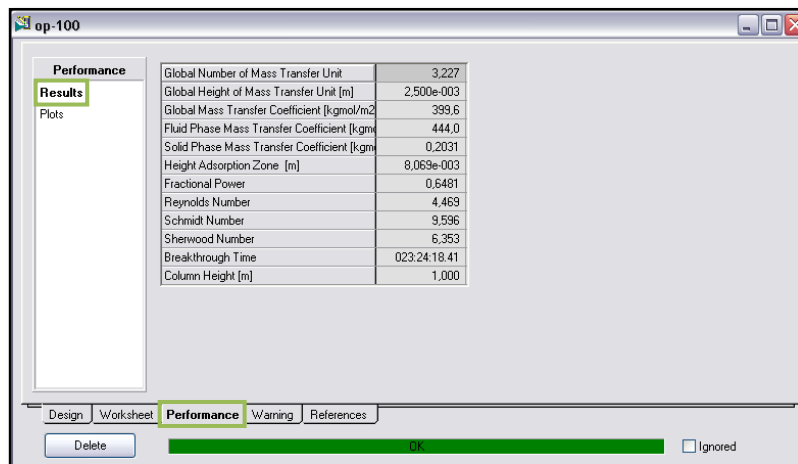


Figura 22: Página *Results* de la pestaña *Performance*.

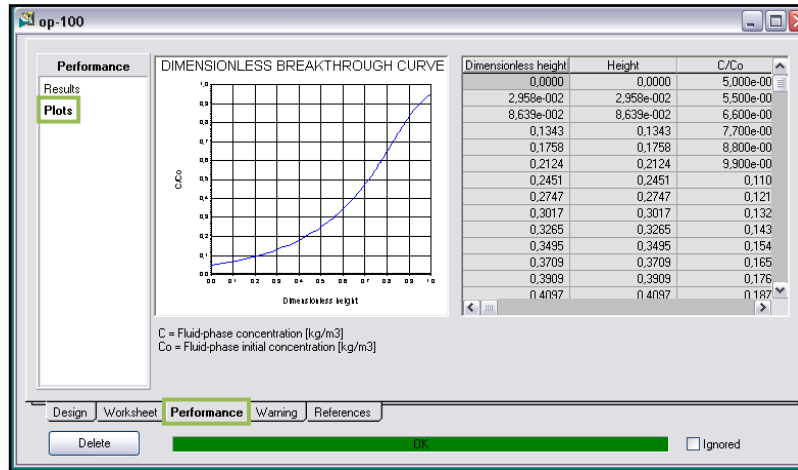


Figura 23: Página *Plots* de la pestaña *Performance*.

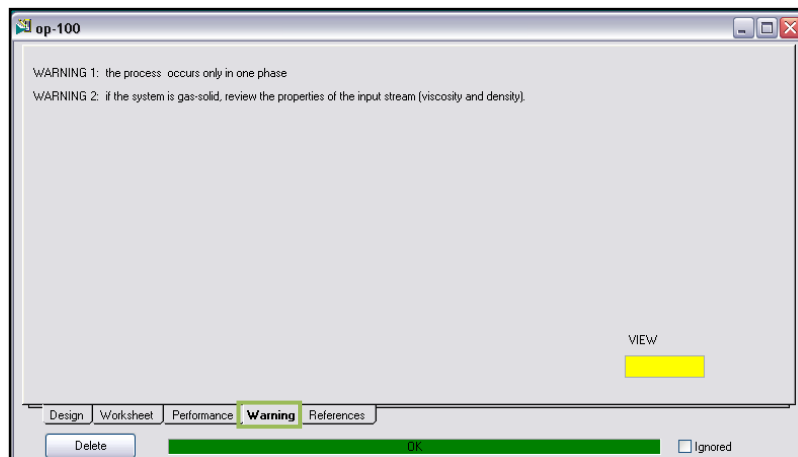


Figura 24: Página *Warning* del módulo computacional.

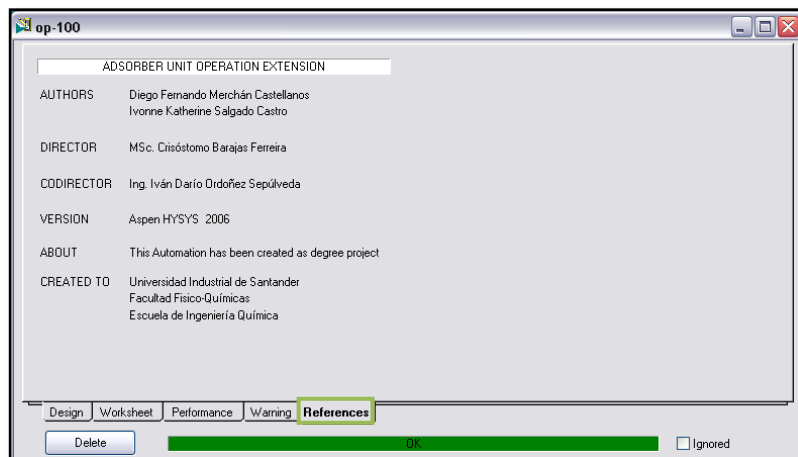


Figura 25: Página *References* del módulo computacional.

ANEXO 4: REGISTRO DE LA EXTENSIÓN

Para registrar la extensión escrita en *Visual Basic 6.0*, basta con seguir el siguiente procedimiento:

1. Iniciar HYSYS y en el menú **Tools**, seleccione el comando **Preferences**.

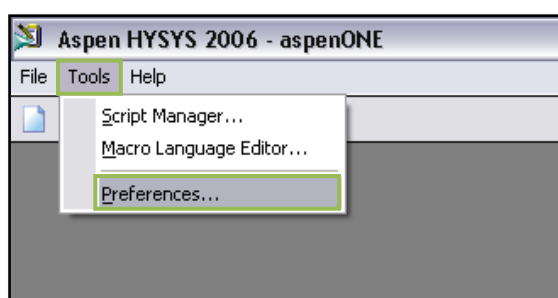


Figura 26: Menú Tools del simulador Aspen HYSYS 2006.

2. Buscar a la opción de **Extensions** y hacer clic en el botón **Register an Extension**.

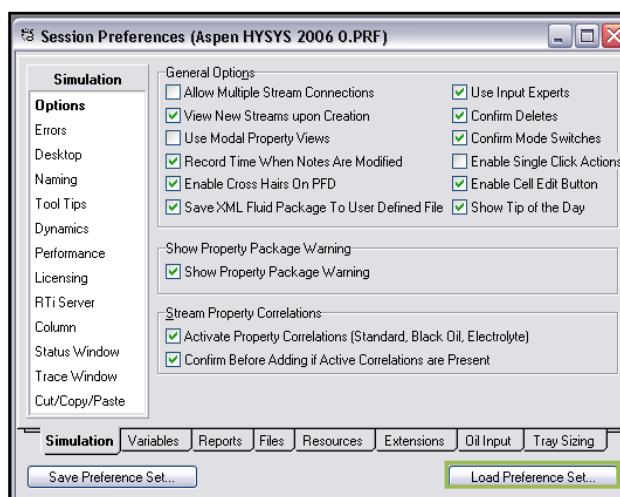


Figura 27: Ventana *Session Preferences* del simulador.

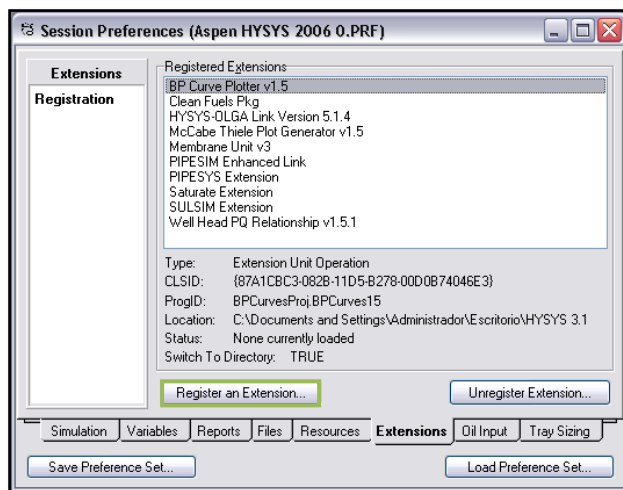


Figura 28: Opción *Extension* de la ventana de *Session Preferences*.

Esto abre el cuadro de dialogo que permite buscar el archivo DLL correspondiente a la extensión para realizar el registro, este archivo debe estar ubicado en la misma carpeta donde se encuentre el archivo EDF.

3. Una vez encontrado el archivo DLL, hacer clic en el botón **OK**.

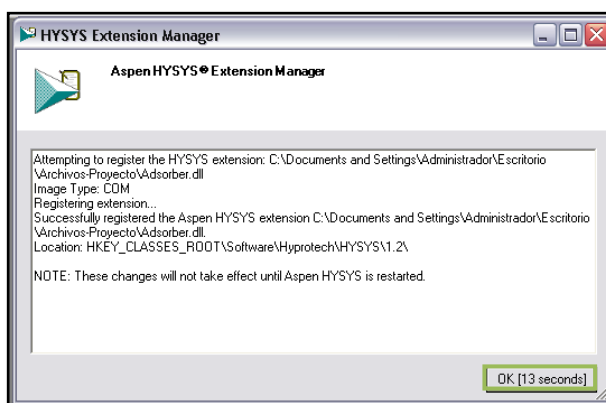


Figura 29: Ventana *HYSYS Extension Manager* del simulador.

Nota: El adsorbedor es una extensión de HYSYS por lo tanto no se encuentra en la paleta de los equipos del software, por ello para acceder al equipo debe realizarse a través del *flowsheet* y del comando *add operation* o por medio del acceso rápido oprimiendo la tecla *F12*. Aparecerá una ventana en la cual debe escoger la opción *Extensions* y allí seleccionar el nombre de la extensión para

poder trabajar normalmente como cualquier otro equipo existente en el software.

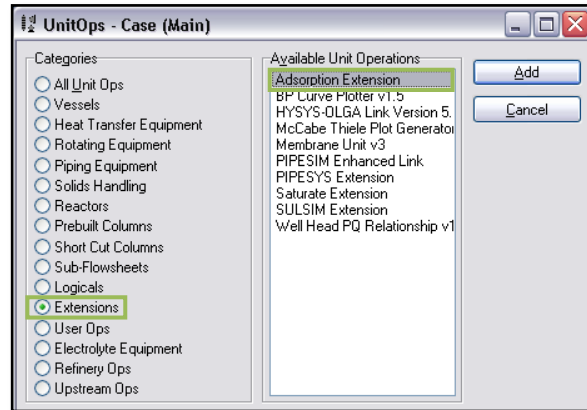


Figura 30: Ventana *UnitOps-Case* de Aspen HYSYS.

ANEXO 5: COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSFERENCIA DE MASA

La masa puede transferirse de manera conductiva por medio del movimiento molecular fortuito en los fluidos (movimiento individual de las moléculas), debido a una diferencia de concentraciones y/o convectivamente debido al movimiento global del fluido. Usualmente, ambos mecanismos actúan simultáneamente y uno de ellos puede ser cuantitativamente más predominante que el otro.

El coeficiente global de transferencia de masa involucra los coeficientes locales de la fase sólida y de la fase fluida y son útiles para conocer la rapidez de la transferencia de masa de una fase a otra. La rapidez define el tiempo que se requiere para la separación del componente, para el dimensionamiento del equipo y la estimación de su costo. Matemáticamente el coeficiente global se calcula mediante la siguiente expresión [2]:

$$1/(K_Y a_p) = 1/(K_f a_p) + m/(K_s a_p \rho_p) \quad (44)$$

Donde m es la pendiente promedio de la isoterma de adsorción en el equilibrio $m = dq^*/dC$, (Masa de adsorbente / Volumen de solución); K_f es el coeficiente de transferencia de masa para la fase fluida y K_s es el coeficiente de transferencia de masa para la fase sólida. Estos dos últimos se calculan por medio de las siguientes ecuaciones:

- Coeficiente de transferencia de masa para la fase fluida [1]:

$$K_f = (D_{AB} S_{h_L})/d_p \quad (45)$$

- Coeficiente de transferencia de masa para la fase sólida [1]:

$$K_s a_p = (60 D_s)/d_p^2 \quad (46)$$

El coeficiente de la fase fluida se determina a partir del *número de Sherwood* S_{h_L} este es un número adimensional que representa el cociente entre la transferencia de masa por convección y difusión. Este número se calculó a partir de unas correlaciones empíricas que dependen del sistema; Los sistemas que se implementaron para el desarrollo del módulo son: gas-sólido, líquido-sólido y aplicaciones para tratamiento de agua y aguas residuales usando carbón activado granulado.

- Número de Sherwood para sistemas líquido-sólido [1]:

Para $0.0015 < Re_p < 55$ (Wilson-Geankoplis)

$$S_{h_L} = 1.85 (Re_p S_{c_p})^{1/3} ((1 - \epsilon)/\epsilon)^{1/3} \quad (47)$$

Para $55 < Re_p < 1050$ (Perry y Green, 1999):

$$S_{h_L} = (1.09/\epsilon) S_{c_p}^{1/3} Re_p^{1/3} \quad (48)$$

- Número de Sherwood para sistemas gas-sólido [1]:

$$\text{Para } 3 < R_{ep} < 2000 \text{ (Wakao): } S_{hL} = (0.357/\epsilon) R_{ep}^{0.64} S_{cp}^{0.33} \quad (49)$$

Donde el número de Reynolds y el de Schmidt son [1]:

$$R_{ep} = (\rho V d_p)/\mu \quad (50) \quad S_{cp} = \frac{\mu}{\rho D_{AB}} \quad (51)$$

- Número de Sherwood para tratamiento de agua (Chern y Chien, 2002) [1]:

$$S_{hL} = \left(2 + 0.644 R_{ep}^{\frac{1}{2}} S_{cp}^{\frac{1}{3}}\right) (1 + 1.5(1 - \epsilon)) \quad (52)$$

- Número de Sherwood para procesos de adsorción para aguas residuales (Ko *et al* 2000; Crittenden *et al* 1987). [1]:

$$S_{hL} = 2.4 \epsilon^{0.66} R_{ep}^{0.34} S_{cp}^{0.33} \quad (53)$$