

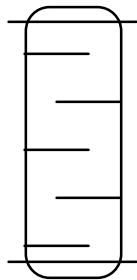
# OPERACIONES DE TRANSFERENCIA DE MASA

## Absorción No Isotérmica Multicomponente por Etapas

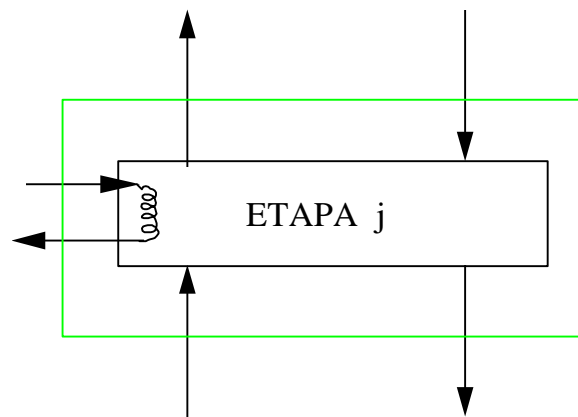
La característica general de los sistemas de absorción es que se tienen componentes de muy diferente punto de ebullición en la mezcla y que los flujos de gas y líquido en cada etapa son diferentes. Esto hace que se utilice un algoritmo llamado *Suma de Flujos* (*Sum of Rates, SR*).

### Modelo Matemático.

Un esquema general de la columna de absorción multicomponente por etapas considerada es el siguiente:



donde el diagrama general de una etapa sería:



Un balance de materia sobre el componente  $i$  en la etapa  $j$  quedaría:

$$G_j y_{ij} + L_j x_{ij} - G_{j+1} y_{ij+1} - L_{j-1} x_{ij-1} = 0 \quad (1)$$

Sustituyendo las composiciones del gas  $y_{ij}$  y  $y_{ij+1}$  por la relación de equilibrio:

$$(2)$$

Donde los valores de las constantes de equilibrio  $k_{ij}$  y  $k_{ij+1}$  dependen de la temperatura y de la presión. Además, las variables  $x_{ij}$  y  $x_{ij-1}$  se pueden redefinir como:

$$x_{ij} = \frac{l_{ij}}{L_j} \quad x_{ij-1} = \frac{l_{ij-1}}{L_{j-1}} \quad \text{donde} \quad (3)$$

donde  $l_{ij}$  es el flujo molar individual del componente  $i$  en la etapa  $j$ . Sustituyendo (2) y (3) en (1) se obtiene:

$$(-1)l_{ij-1} + \left(1 + \frac{G_j k_{ij}}{L_j}\right)l_{ij} + \left(\frac{-G_{j+1} k_{ij+1}}{L_{j+1}}\right)l_{ij+1} = 0 \quad (4)$$

Que es un sistema de ecuaciones algebraicas en forma tridiagonal:

$$(5)$$

donde:

$$A_{ij} = -1 \quad (6)$$

$$B_{ij} = \left(1 + \frac{G_j k_{ij}}{L_j}\right) = 1 + \frac{1}{A_j} \quad (7)$$

$$C_{ij} = \left(\frac{-G_{j+1} k_{ij+1}}{L_{j+1}}\right) = -\frac{1}{A_{j+1}} \quad (8)$$

$$D_{ij} = 0 \quad (9)$$

$A_{ij}$  es el factor de absorción del componente  $i$  en la etapa  $j$ . Las ecuaciones (5) a (9) son válidas para todas las etapas de la columna, desde la 2 hasta la  $N-1$  ( $2 \leq j \leq N-1$ ). Para la etapa 1, el balance de materia sobre el componente  $i$  queda:

$$\left(1 + \frac{G_1 k_{i1}}{L_1}\right)l_{i1} + \left(\frac{-G_2 k_{i2}}{L_2}\right)l_{i2} = L_0 x_{i0} = l_{i0} \quad (10)$$

por lo que

$$A_{i1} = 0$$

$$B_{i1} = \left(1 + \frac{G_1 k_{i1}}{L_1}\right)$$

$$C_{i1} = \left( \frac{-G_2 k_{i2}}{L_2} \right)$$

$$D_{i1} = L_0 x_{i0} = l_{i0}$$

mientras que para la etapa N:

$$(-1)l_{iN-1} + \left( 1 + \frac{G_N k_{iN}}{L_N} \right) l_{iN} = G_{N+1} y_{iN+1} \quad (15)$$

donde

$$A_{ij} = -1$$

$$B_{ij} = \left( 1 + \frac{G_N k_{iN}}{L_N} \right)$$

$$C_{ij} = 0$$

$$D_{ij} = G_{N+1} y_{iN+1}$$

en forma matricial, el sistema de ecuaciones que representa a los balances de materia del componente i en la columna será:

$$\begin{bmatrix} B_{i1} & C_{i1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_{i2} & B_{i2} & C_{i2} & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & A_{iN-1} & B_{iN-1} & C_{iN-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{iN} & B_{iN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{i1} \\ l_{i2} \\ \vdots \\ l_{iN-1} \\ l_{iN} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{i1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ D_{iN} \end{bmatrix} \quad (20)$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones por medio del algoritmo de Thomas, se encuentran fácilmente los flujos molares por componente  $l_{ij}$ . En base a estos se pueden calcular flujos totales de líquido corregidos:

Y los flujos de gas se determinan sumando los flujos individuales de gas por cada componente en cada etapa:

$$G_{j,NEW} = \sum_{i=1}^c \left[ \left( \frac{k_{ij} G_j}{L_j} \right)_{OLD} l_{ij} \right] \quad (22)$$

Antes de resolver los balances de energía, se deberá checar la convergencia de los balances de materia para todas las etapas:

$$\left| \frac{L_{j,OLD} - L_{j,NEW}}{L_{j,OLD}} \right| \leq \varepsilon \quad y \quad \left| \frac{G_{j,OLD} - G_{j,NEW}}{G_{j,OLD}} \right| \leq \varepsilon \quad (23)$$

En estas ecuaciones,  $\varepsilon$  sería del orden de  $1 \times 10^{-5}$ . Una vez que se obtiene convergencia (por ejemplo usando el método de sustituciones sucesivas), se procede a iterar sobre el balance de energía. Un balance de energía sobre la etapa típica  $j$  queda:

$$\mathbf{E}_j(T_{j-1}, T_j, T_{j+1}) = L_j \hat{h}_j + G_j \hat{H}_j - L_{j-1} \hat{h}_{j-1} - G_{j+1} \hat{H}_{j+1} - Q_j = 0 \quad (24)$$

En este caso se puede utilizar el método de Newton-Raphson generalizado para encontrar el conjunto de temperaturas  $T_j$  que satisfacen las  $N$  ecuaciones de balance de energía. El cambio en el balance está dado por:

$$(\mathbf{E}_j)^{k+1} - (\mathbf{E}_j)^k = \frac{\partial \mathbf{E}_j}{\partial T_{j-1}} (\Delta T_{j-1}) + \frac{\partial \mathbf{E}_j}{\partial T_j} (\Delta T_j) + \frac{\partial \mathbf{E}_j}{\partial T_{j+1}} (\Delta T_{j+1}) \quad (25)$$

Donde  $k$  es el número de iteración. Las derivadas parciales se determinan a partir de (24):

$$\frac{\partial \mathbf{E}_j}{\partial T_{j-1}} = -L_{j-1} \frac{\partial \hat{h}_{j-1}}{\partial T_{j-1}} = -L_{j-1} C_{pL_j} = \alpha_j \quad (26)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}_j}{\partial T_j} = L_j \frac{\partial \hat{h}_j}{\partial T_j} + G_j \frac{\partial \hat{H}_j}{\partial T_j} = L_j C_{pL_j} + G_j C_{pG_j} = \beta_j \quad (27)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}_j}{\partial T_{j+1}} = -G_{j+1} \frac{\partial \hat{H}_{j+1}}{\partial T_{j+1}} = -G_{j+1} C_{pG_{j+1}} = \gamma_j \quad (28)$$

Las capacidades caloríficas de las mezclas gaseosa y líquida se pueden calcular a partir de:

Para la iteración  $(k+1)$  se desea que  $(\mathbf{E}_j)^{k+1}$  sea cero. Definiendo:

$$\delta_j = -(\mathbf{E}_j)^k$$

las ecuaciones para las correcciones de temperatura  $\Delta T_j$  quedan en forma tridiagonal:

$$\begin{bmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_2 & \beta_2 & \gamma_2 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_{iN-1} & \beta_{iN-1} & \gamma_{iN-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha_{iN} & \beta_{iN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta T_1 \\ \Delta T_2 \\ \vdots \\ \Delta T_{N-1} \\ \Delta T_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_{N-1} \\ \delta_N \end{bmatrix} \quad (31)$$

Se utilizan las correcciones para obtener nuevos estimados de temperaturas  $T_j$  hasta que se cumpla el criterio de convergencia:

$$|\Delta T_j| \leq \varepsilon_T \quad (32)$$

un valor razonable de  $\varepsilon_T$  sería en el rango de 0.001 a 0.01. Un diagrama de flujo general del algoritmo de suma de flujos se presenta a continuación.

## Algoritmo de Solución.

