

ANÁLISIS POR COLOCACION ORTOGONAL DE ADSORCION DE MEZCLAS BINARIAS

Tucídides López y César García
Ciclo Básico
Escuela de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería
Maracaibo - Venezuela

SUMARIO

Para un lecho fijo con control de la fase fluido, se analiza la adsorción de mezclas binarias a través de los perfiles de concentración para el componente fuertemente adsorbido en las fases fluido y sólido como función de los parámetros de tiempo y posición. El balance diferencial de masa expresado en términos de factores adimensionales permite analizar los efectos de equilibrio, capacidad de adsorción y la dinámica de flujo. Se estudió en detalle el sistema acetileno-etileno en un lecho fijo de sílica gel de 40% de porosidad con amplia gama de las condiciones operacionales. El método de cálculo, colocación ortogonal, transforma el balance de derivadas parciales en un sistema de ecuaciones ordinarias integrables por Runge-Kutta de cuarto orden ó el método de Euler.

Cabe destacar que al analizar el comportamiento de la concentración como función de tiempo, se presenta una cierta inestabilidad en los resultados durante el rango de 0 a 30 seg en relación al tiempo de adsorción, dependiendo esto de cada posición del lecho en particular. Sin embargo, luego de este período, los resultados se ajustan a valores muy aceptables según fundamentos teóricos y experimentales. Este comportamiento se atribuye a factores inherentes al método de cálculo (colocación ortogonal asumiendo geometría planar asimétrica) del cual resultan matrices de las cuales algunos de sus elementos negativos inciden desfavorablemente en el cálculo de las concentraciones.

Los resultados también demuestran que la variación de parámetros tales como altura de lecho y velocidad del gas afecta la rapidez de convergencia hacia la concentración inicial (concentración a la entrada del lecho) en las diferentes posiciones y por consiguiente incide también sobre el tiempo de computación. No sucede lo mismo con la porosidad del lecho cuya variación no afecta significativamente la convergencia.

SUMMARY

The gas binary mixture adsorption for a fixed bed with a fluid phase controlled is analyzed through concentration profiles for the strongly

adsorbed component in both fluid and solid phases, as a function of the parameters time and position. The differential mass balance is expressed in terms of dimensionless factors to analyze the equilibrium effects, adsorption capacity and fluid dynamics. In the first part of this work, it was studied the acetylene-ethylene system on a fixed bed of silica-gel with a 40% of porosity considering a broad range of the operational conditions.

The calculation method, orthogonal collocation, transforms the partial derivatives mass balance in a system of ordinary equations which can be integrated by using a fourth order Runge-Kutta method or by Euler method.

It was found that, in most cases, when it is analyzed the behavior of concentration as a function of time, there is a certain instability on the results in the range comprising 0-30 sec, related to the adsorption time, depending on the position of the particular bed. However, after this time, the results fit very well to the real values according to experimental and theoretical fundamentals. This behavior is attributed to inherent factors of the calculation method (orthogonal collocation assuming asymmetric distribution and planar geometry) from which results some matrices with negative elements that influence unfavorably the calculation of the concentrations.

In the first part of this work, the results show that the variation of the parameters, such as bed height and gas velocity, affects the speed of convergence at initial concentration (concentration at the bed entrance) in the different positions, and by the same thing on the computational time. The variation of bed porosity, by the other side, does not affect significantly the convergence.

Finally, in a general way, it can be concluded that the orthogonal calculation method in combination with the Euler numerical method, can be used to solve and analyzed adequately the differential model that governs the adsorption process of a binary mixture through a fixed bed with a fluid phase controlled.

I. INTRODUCCION

En las operaciones de adsorción se aprovecha

la capacidad de ciertos sólidos de extraer preferencialmente ciertas sustancias de una solución, concentrándolas sobre sus superficies. En esta forma se pueden separar entre sí los componentes de soluciones líquidas ó gaseosas.

En el campo de las separaciones gaseosas se utiliza la adsorción para deshumidificar el aire y otros gases, para recuperar vapores de valiosos solventes de las mezclas diluídas con aire y otros gases; para fraccionar mezclas de gases de hidrocarburos que contienen sustancias tales como metano, etano, etileno, acetileno, propano, etc. Todas estas operaciones son semejantes en que la mezcla a separar es puesta en contacto con otra fase insoluble, el adsorbente sólido, y en que la distribución desigual de los componentes originales entre la fase adsorbida sobre la superficie sólida y el seno del fluido permite la separación.

Los sistemas de columnas son los más frecuentemente usados como métodos de contacto fluido-sólido para los procesos de adsorción, con las partículas sólidas empacadas en un arreglo relativamente fijo, operando en régimen continuo o discontinuo, en estado estacionario o no-estacionario. En las operaciones de contacto continuo el fluido y el adsorbente se hallan en contacto en la total extensión de la columna, sin separación periódica de las fases. Puede llevarse a cabo la operación de manera estrictamente continua y estacionaria caracterizada por el movimiento tanto del sólido como del fluido. De otra manera, debido a la rigidez de las partículas adsorbentes (sólidas) es posible operar ventajosamente en forma semicontinua, caracterizada por el fluido en movimiento y el sólido estacionario. Esto origina condiciones de estado no estacionario, en las que cambian con el tiempo las composiciones del sistema.

Debido a la inconveniencia y al costo relativamente alto del transporte continuo de partículas sólidas necesario en las operaciones de estado estacionario, frecuentemente se encuentra más económico pasar la mezcla fluida a través de un lecho estacionario o fijo de adsorbente. A medida que aumenta la cantidad de fluido que pasa a través del lecho, el sólido adsorbe mayores cantidades de soluto y se establece un estado no uniforme.

El estado no-estacionario del proceso de transferencia de masa del sistema fluido-sólido (lecho fijo) suele representarse por un comportamiento típico según Michaels (1) sobre la onda de adsorción según se muestra en la Fig. No. 1 (2) para el caso de una solución binaria líquida que contiene un soluto fuertemente adsorbido a una concentración C_0 . El fluido pasará en forma continua hacia abajo a través de un lecho relativamente profundo de adsorbente inicialmente libre de adsorbato. La capa superior extrema sólida, en contacto con la fuerte solución de entrada, primeramente adsorbe rápida y eficazmente soluto, y el escaso soluto que puede quedar en la solución es prácticamente extraído en su totalidad por las capas de sólido ubicadas en la parte inferior del lecho. El efluente del fondo del lecho, resulta prácticamente libre de soluto como en el C_a , en la parte inferior de la Figura No.1. En

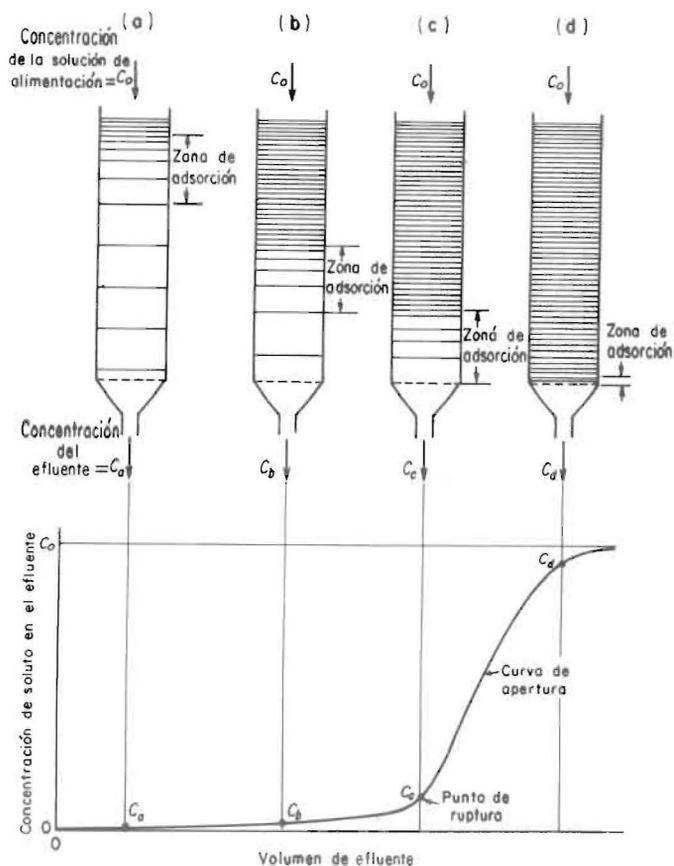


Fig. No. 1 - LA ONDA DE ADSORCION (2)

la parte superior de esta figura, en a, se indica la distribución del adsorbato en el lecho sólido; en el dibujo, la densidad relativa de las líneas horizontales en el lecho indican la concentración relativa del adsorbato. La capa del extremo superior del lecho prácticamente saturada, teniendo lugar el grueso de la adsorción dentro de una zona de adsorción relativamente limitada, en la cual la concentración cambia rápidamente, como se indica. A medida que la solución continúa fluyendo, la zona de adsorción se mueve hacia abajo como una onda, generalmente a un régimen mucho más lento que la velocidad lineal del fluido a través del lecho. En un momento posterior como en b en la figura, aproximadamente la mitad del lecho se halla saturado con soluto, pero todavía la concentración efluente C_b es prácticamente nula. En c, la porción más baja de la zona de adsorción ha alcanzado justamente el fondo del lecho y, subitamente, por primera vez la concentración de soluto en el efluente se ha elevado hasta un valor apreciable C_c .

Se dice que el sistema ha alcanzado el " punto de ruptura". La concentración de soluto en el efluente se eleva ahora rápidamente a medida que la zona de adsorción pasa a través del fondo del lecho y en d alcanza prácticamente el valor inicial C_0 . La posición de la curva de concentración del efluente

te entre las posiciones c y d se denomina curva de apertura. Si continúa fluyendo la solución, tiene lugar muy poca adsorción adicional ya que el lecho se encuentra prácticamente saturada con la solución de alimentación.

La forma y el momento de aparición de la curva de apertura influyen mucho en el método de operación de un adsorbedor de lecho fijo. Generalmente tienen las curvas la forma de una S pero pueden ser también escalonadas o chatas, hallándose en algunos casos considerablemente deformadas. Si el proceso de adsorción fuera infinitamente rápido, en el parte inferior de la figura 1, la curva sería una línea vertical recta.

La naturaleza del equilibrio de la adsorción, la velocidad del fluido, la concentración del soluto en la alimentación y la longitud del lecho adsorbedor, todos contribuyen a configurar la forma de la curva a obtener para cualquier sistema. En algunos casos se define nítidamente el punto de separación y muy vagamente en otros. Generalmente el tiempo de separación disminuye con la disminución de la altura del lecho, con el aumento del tamaño de las partículas del adsorbente, con el aumento del régimen de flujo del fluido a través del lecho y con el aumento del contenido inicial de soluto de la alimentación.

La predicción de la curva de ruptura es de importancia para los Ingenieros de diseño, ya que describe el comportamiento del sistema de adsorción y permite dimensionar las unidades de transferencia. Sin embargo, para la predicción se requieren los parámetros dinámicos del sistema de transferencia de masa, relación de equilibrio y mecanismos de la cinética del transporte del soluto. La velocidad global de adsorción del soluto desde el seno del fluido a través de un lecho de adsorbente granular y poroso, representa los efectos combinados de : i) Difusión a través del seno del fluido a la interfase fluido-sólido; ii) Difusión dentro de los poros de la partícula; iii) Difusión a través de la superficie de los poros y iv) Adsorción sobre la superficie interna de los poros. La literatura presenta resultados analíticos y numéricos para condiciones extremas de transferencia y adaptable a situaciones poco encontradas a nivel práctico. Por ejemplo, Haugen y Marshall (3) construyeron soluciones gráficas para control de la fase fluida y relación lineal o no-lineal de equilibrio; Rosen (4) presenta una solución numérica para difusión a través de las partículas como factor controlante de transferencia de masa y relación de equilibrio lineal; Meyer y Weber (5) presentan soluciones computarizadas usando el método de diferencias finitas incluyendo en el modelo de adsorción una relación de equilibrio no-lineal y efectos combinados de transferencia térmica y de masa a lo largo de la columna; Brown, Mullins y Melsheimer (6) aplicaron el método de Crank-Nicholson para el modelo de adsorción controlada por la fase fluida incorporando dispersión axial y relación de equilibrio lineal; Zwiebel y Yeo (7) estudiaron el efecto del perfil de velocidad de la fase gaseosa sobre la curva de ruptura bajo condiciones isotérmicas e isobáricas

de operación, dispersión axial despreciable, relación de equilibrio no-lineal y control de la fase fluido sobre el proceso de transferencia, resuelto el modelo diferencial a través de un computados híbrido; Wong y Niedzwiecki (8) desarrollaron un modelo simplificado para predecir curvas de rupturas para la recuperación de pentano y hexano a partir de una corriente de metano en un lecho fijo de Sílica gel, las ecuaciones diferenciales de calor y energía son resueltas por el método numérico de líneas para la relación de equilibrio dada por la isoterma de Langmuir.

En este trabajo se considera la adsorción de mezclas gaseosas binarias a través de un lecho fijo con control de la fase fluido. Para ello se desarrolló un programa de computación a través del cual se calculan, en función del tiempo, las concentraciones del componente fuertemente adsorbido tanto en la fase fluida como en la sólida en diferentes puntos del lecho desde la entrada hasta la salida del mismo. Esto se logra por la aplicación del método de colocación ortogonal, el cual permite transformar las ecuaciones en derivadas parciales envueltas en el proceso en un sistema de ecuaciones ordinarias que son integradas después por el método de Euler. De tal forma que, la solución de las ecuaciones (concentración en ambas fases) son encontradas en los diferentes puntos de colocación considerados en el problema. Como sistema se analiza una mezcla gaseosa binaria de Acetileno- Etileno para la cual se estudió en detalle el proceso de adsorción en un lecho fijo de Sílica Gel de 40% de porosidad. Para este sistema y en base a diversas condiciones impuestas se estudiaron los efectos de equilibrio, la capacidad de adsorción y la dinámica de flujo.

II. FUNDAMENTOS TEORICOS

El balance diferencial de materiales en relación a la adsorción del componente A de una mezcla binaria gaseosa a través de un lecho fijo con control de la fase fluido puede escribirse de la siguiente manera :

$$\frac{\partial X_A}{\partial Z'} + \frac{\epsilon H}{u} \frac{\partial X_A}{\partial \theta} + H \frac{\rho Q}{u C_0} \frac{\partial Y_A}{\partial \theta} = 0 \quad (1)$$

donde :

$X_A(Z', \theta)$ = fracción molar del gas A en la mezcla gaseosa a cualquier posición y tiempo.
 $X_A = \frac{C_A}{C_T}$; con C_A = concentración molar a P, T en gmol A/cm³; C_T = concentración total.

- Y_A = fracción molar del gas A adsorbido (concentración en el lecho).
 $Y_A = \frac{q_A}{Q}$; con q_A = concentración molar del gas adsorbido en g/mol A/gramo adsorbente; y Q = capacidad total de adsorción, g/mol A/gramo adsorbente.
- ε = porosidad del lecho, cm^3/cm^3 .
- u = velocidad superficial de la mezcla gaseosa en cm/seg .
- \emptyset = tiempo de adsorción en seg .
- Z' = posición adimensional.
 $Z' = \frac{Z}{H}$; con Z = altura del lecho en cm ;
y $H = \frac{Z}{H}$ = altura total del lecho en cm .
- ρ = densidad del lecho en gr/cm^3 .

El control de la fase gaseosa viene expresado por la siguiente relación:

$$\frac{\partial Y_A}{\partial \emptyset} = K \frac{C_T}{Q \rho} (X_A - X_A^*) \quad (2)$$

en la cual:

- K = coeficiente de transferencia de masa en $\text{cm}^3/\text{seg}-\text{cm}^3$.
- X_A^* = fracción molar de equilibrio.

Se incluye también la expresión para el factor de separación α , con la cual se completa la información necesaria para el proceso:

$$\alpha = \frac{Y_A (1 - X_A^*)}{X_A^* (1 - Y_A)} \quad (3)$$

Condiciones iniciales y de borde:

1) Condiciones iniciales:

$$\emptyset = 0; \quad q_A = 0 \longrightarrow Y_A = 0$$

$$C_A = 0 \longrightarrow X_A = 0$$

2) Condiciones alimentación:

$$Z = 0 (Z' = 0); X_A = \lambda \text{ para } \emptyset > 0$$

3) Condición de salida:

$$Z = H (Z' = 1); \frac{\partial C_A}{\partial Z} = 0 \text{ para } \emptyset \geq 0$$

$$\sigma \frac{\partial X_A}{\partial Z'} = 0$$

II.1 APLICACION DEL METODO DE COLOCACION ORTOGONAL (9)

Aplicando el método de colocación ortogonal para una distribución asimétrica de la fracción molar del componente A en la mezcla gaseosa, la ecuación (1) se transforma de la siguiente manera:

$$\sum_{i=1}^{N+2} A_{ji} X_{Ai} + \frac{\varepsilon H}{u} \frac{dX_{Aj}}{d\emptyset} + H \frac{\rho Q}{u C_o} \frac{dY_{Aj}}{d\emptyset} = 0 \quad (4)$$

la cual constituye un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales donde Y_{Aj} corresponde a la fracción molar del gas A en el punto de colocación ortogonal Z'_j a un cierto tiempo \emptyset .

Asimismo las ecuaciones (2) y (3) se escriben de la siguiente forma:

$$\frac{dY_{Aj}}{d\emptyset} = K \frac{C_T}{\rho Q} (X_{Aj} - X_{Aj}^*) \quad (5)$$

$$\alpha = \frac{Y_{Aj} (1 - X_{Aj}^*)}{X_{Aj}^* (1 - Y_{Aj})} \quad (6)$$

y las condiciones iniciales y de borde quedan como sigue:

1) Condiciones iniciales:

$$\emptyset = 0; X_{Aj} = 0; Y_{Aj} = 0$$

2) Condición de alimentación:

$$Z' = 0; X_{Aj} = \lambda, \forall \emptyset, 0 < \lambda < 1$$

3) Condición de salida:

$$\sum_{i=1}^{N+2} A_{N+2,i} X_{Ai} = 0$$

todo esto para $j=2, \dots, N+1$ ya que las posiciones 1 y $N+2$ corresponden a la entrada y salida del lecho que ya han sido consideradas a través de las condiciones de borde, esto es, $Z'_1=0$ y $Z'_{N+2}=1$. Las posiciones $Z'_2, Z'_3, \dots, Z'_{N+1}$ vienen dadas por las raíces de los polinomios en geometría planar y distribución asimétrica.

Los puntos de colocación ortogonal resultan de las raíces de los polinomios ortogonales definidos así :

$$\int_0^1 W(Z') P_n(Z') P_N(Z') Z'^{(a-1)} dZ' = 0;$$

$$n = 1, 2, \dots, N-1$$

$$P_N(Z') = \sum_{j=0}^N C_j Z'^j$$

donde $a = 1$ por la consideración de geometría planar y $W(Z')$ puede ser igual a 1 ó $1-Z'^2$ según se considere.

II.1.1. ADIMENSIONAMIENTO DEL SISTEMA

Es conveniente para efecto de ahorrar tiempo de computación, adimensionar los diversos parámetros que intervienen en el proceso, de esta manera:

$$\tau = \frac{u\phi}{\epsilon H} = \frac{\text{cm/seg} \times \text{seg}}{\text{cm}} = \text{adimensional}$$

$$\Omega = \frac{\rho Q}{\epsilon C_0} = \frac{\text{gr/cm}^3 \times \text{gmol/gr}}{\text{gmol/cm}^3} = \text{adimensional}$$

$$\beta = \frac{HK}{u} = \frac{\text{cm} \times \text{cm}^3/\text{seg} \times \text{cm}^3}{\text{cm/seg}} = \text{adimensional}$$

de tal forma que introduciendo estos factores adimensionales en las ecuaciones (1) y (2), se obtiene lo siguiente :

$$\frac{\partial X_A}{\partial Z} + \frac{\partial X_A}{\partial \tau} + \omega \frac{\partial Y_A}{\partial \tau} = 0 \quad (1')$$

$$\frac{\partial Y_A}{\partial \tau} = \frac{\beta}{\omega} (X_A - X_A^*) \quad (2')$$

debe observarse que los cálculos se harán en función de τ , el cual representa el adimensionamiento del tiempo ϕ .

III. DISCUSION DE RESULTADOS

A través de un programa de computación (10) se resolvió el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias obtenido al aplicar colocación ortogonal (asumiendo distribución asimétrica y geometría planar) a la ecuación diferencial en derivadas parciales proveniente del balance diferencial de materia para un proceso de adsorción con control de la fase gaseosa. El sistema se resolvió aplicando el método de Euler.

El programa calcula la fracción molar del componente A de una mezcla gaseosa binaria tanto en la fase fluída como en la fase adsorbente o lecho fijo, en los puntos de colocación ortogonal (posiciones en el lecho) a diferentes tiempos de adsorción. Debe indicarse que el programa incluye una subrutina que calcula las matrices del método de colocación ortogonal para cualquier tipo y característica de geometría.

Concretamente se consideró como sistema de trabajo una mezcla gaseosa de acetileno - etileno fluyendo a través de un lecho fijo de sílica gel y se hicieron estudios de su comportamiento bajo ciertas condiciones establecidas y sujeto a la variación de diversos parámetros tales como : altura del lecho, velocidad del fluido y porosidad del lecho.

A continuación se darán los datos del sistema utilizados en el estudio del mismo :

Sistema : ACETILENO - ETILENO
 Adsorbente: SILICA GEL
 Datos : $H=100$ cm; $u = 4$ cm/seg; $\epsilon = 0.4$; $\rho = 0.65$ gr/cm³; $Q=0.001$ gmolA/gradsorb; $C_0 = 0.00246$ gmolA/cm³; $C_T = 0.00246$ gmolA/cm³; $k=0.00624$ cm³/seg-cm³(11)
 $\alpha = 3.1$ (10); $\lambda = 0.1$

El análisis fue realizado variando el número de puntos de colocación ortogonal, esto es, $N=1, 2, \dots, 6$, considerando un factor pesante $W=1$ y $N=1, 2, \dots, 4$ para $w = 1-Z'^2$. Vale decir que en esta discusión se hará mayor énfasis para los resultados obtenidos con $N=6$ y $W=1$ por ser este el caso que permite un mejor análisis del proceso de adsorción, ya que en él se analizan 8 posiciones en el lecho. Sin embargo, debe decirse que el comportamiento del sistema es análogo para cualquier valor de N el cual incide primordialmente en el tiempo de compu-

tación en una forma proporcional. Cabe destacar también que al utilizar $w = 1 - Z'^2$ el programa requiere mayor tiempo de computación en comparación a $w = 1$ referido a un mismo valor de N .

III.1. ANALISIS DEL COMPORTAMIENTO DEL ACETILENO (ADSORBATO) EN LA FASE GASEOSA DURANTE EL PROCESO DE ADSORCION

Las figuras 2-4 construídas a partir de los resultados obtenidos del computador de la fracción molar de acetileno en la fase gaseosa (X_A) en función del tiempo de adsorción (θ) a diferentes posiciones en el lecho, reflejan un comportamiento esperado en este tipo de proceso (curva en forma de S) en el cual la composición del acetileno en la fase fluida, en cada punto o posición del lecho, tiende a alcanzar la composición original o de entrada (en nuestro caso, $X_{A1} = 0.1$). Lógicamente mientras más lejos esté el punto de la entrada, más tardará en converger a dicha concentración. En el momento de

alcanzar esta situación en todos los puntos se dice que el lecho está en equilibrio con la fase gaseosa, es decir, está saturado. En este caso tal saturación se alcanza entre los 14 y 18 minutos de adsorción.

Es de hacer notar que en algunos casos los resultados presentan cierta inestabilidad, generalmente en los primeros 30 ó 40 seg. de adsorción, dependiendo esto de cada posición en particular. Esto es debido a factores inherentes al método de colocación ortogonal del cual resultan matrices de las cuales algunos de sus elementos negativos inciden desfavorablemente en el cálculo de las composiciones.

Al expresar la fracción molar del acetileno en la fase gaseosa en función de la posición en el lecho para diferentes tiempos de adsorción, puede observarse que en la medida que transcurre el tiempo se va alcanzando una mayor uniformidad de la composición de un punto con respecto a otro de tal forma que, a un tiempo de aproximadamente 6 minutos, la tendencia resultante es una recta como se observa en la fig. No. 5.

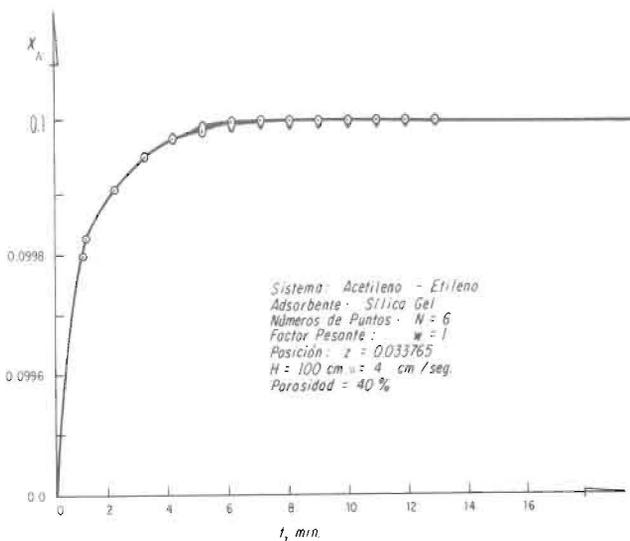


Fig. No. 2 - VARIACION DE LA FRACCION MOLAR DEL ADSORBATO (ACETILENO) COMO FUNCION DE TIEMPO

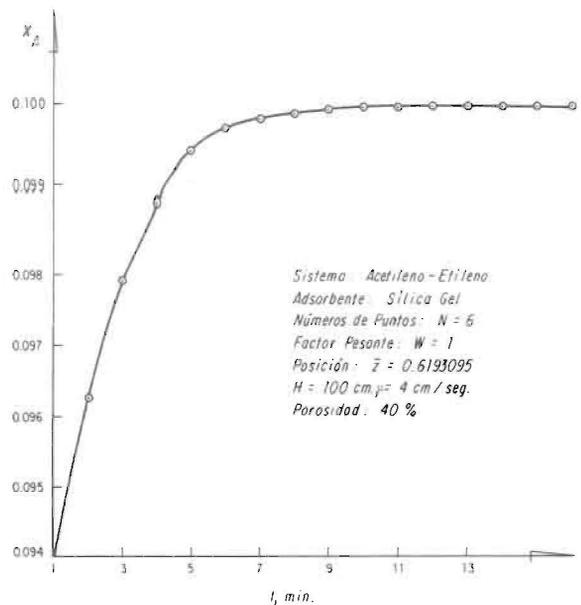


Fig. No. 3 - VARIACION DE LA FRACCION MOLAR DEL ADSORBATO (ACETILENO) COMO FUNCION DE TIEMPO

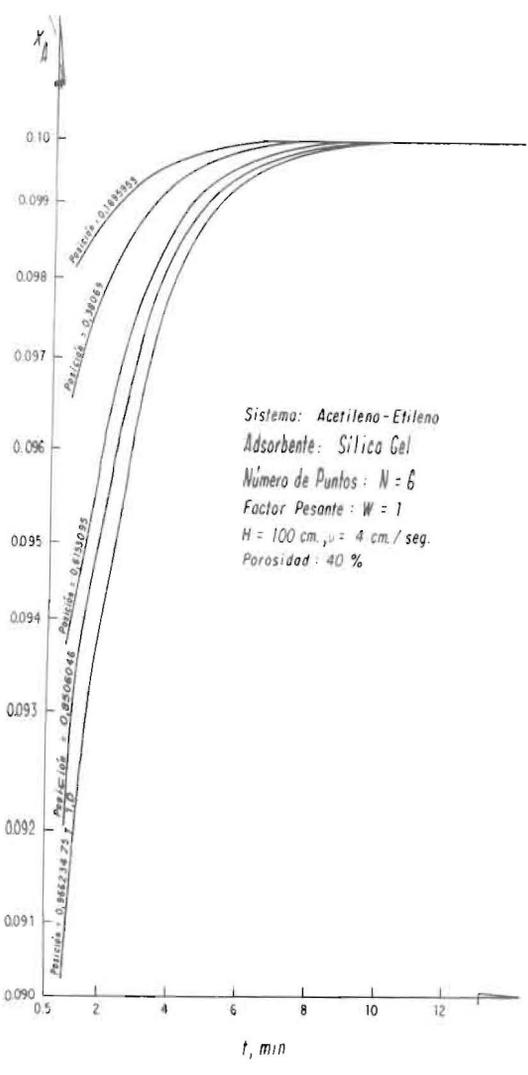


Fig. No. 4 - VARIACION DE LA FRACCION MOLAR DEL ADSORBATO (ACETILENO) COMO FUNCION DE TIEMPO

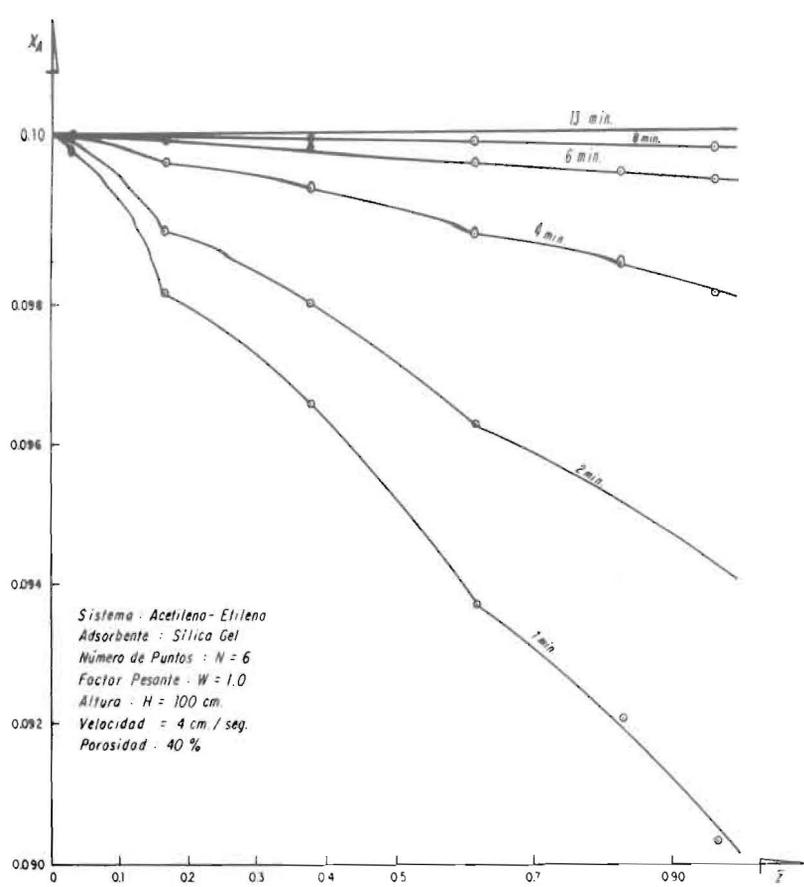


Fig. No. 5 - FRACCION MOLAR DEL ADSORBATO A DIFERENTES POSICIONES DEL LECHO COMO FUNCION DE TIEMPO

III.2. ANALISIS DEL COMPORTAMIENTO DEL (ADSORBATO)
EN LA FASE ADSORBENTE O LECHO SOLIDO

También se expresaron los resultados obtenidos con respecto a la composición del gas adsorbido en términos de fracción molar de acetileno (Y_A) en función del tiempo de adsorción (ϕ) para diferentes posiciones en el lecho. En esta forma se obtienen curvas semejantes a las de X_A vs ϕ donde la concentración máxima que se alcanza en cada punto es de $Y_A = 0.25619$ correspondiente al estado de saturación del lecho (según las figs. 6-7)

Si se construyen gráficas de Y_A contra X_A para diferentes tiempos de adsorción se obtienen líneas de operación que comparadas con aquellas que representan algunas referencias bibliográficas (1) resultan muy satisfactorias, tal como se observa en la Fig. No. 8.

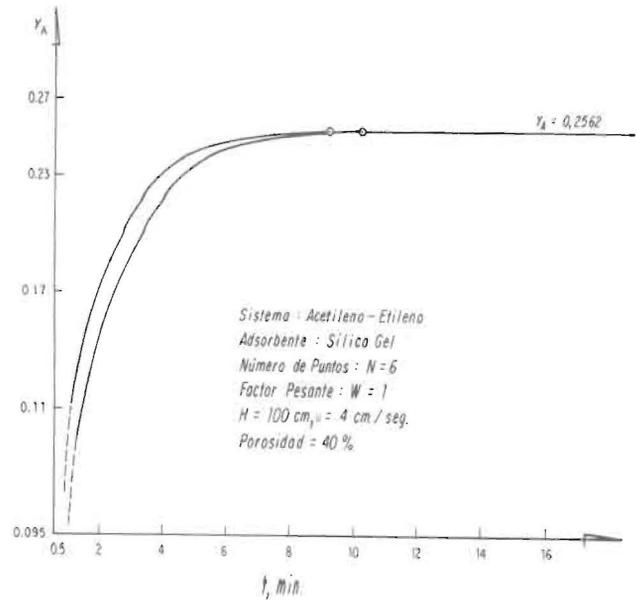


Fig. No. 7 - VARIACION DEL ACETILENO EN FASE SOLIDA COMO FUNCION DEL TIEMPO

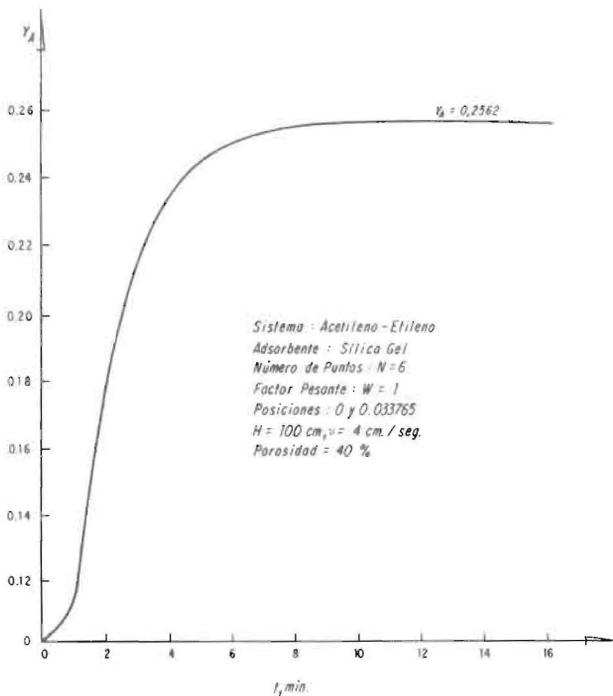


Fig. No. 6 - VARIACION DEL ACETILENO EN LA FASE SOLIDA COMO FUNCION DEL TIEMPO

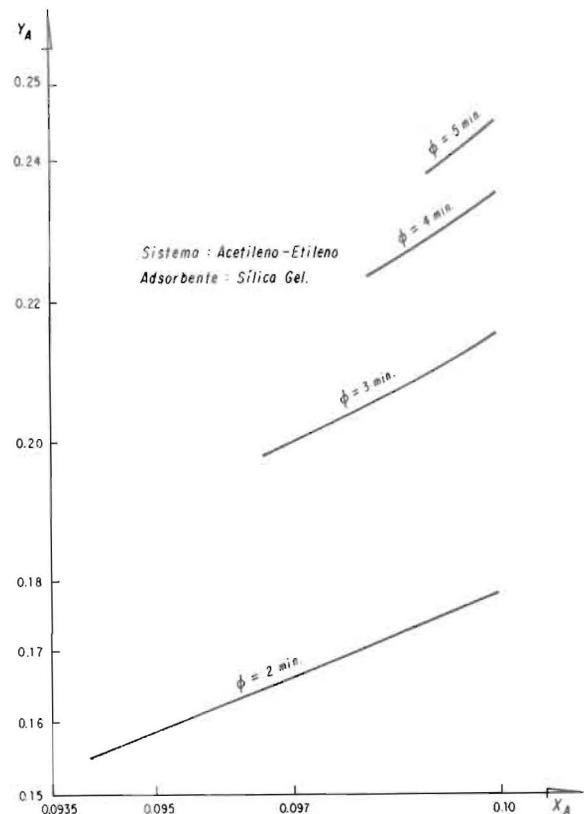


Fig. No. 8 - CURVAS DE OPERACION PARA DIFERENTES TIEMPOS DE ADSORCION

III.3. ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO DEL SISTEMA SUJETO A VARIACION DE ALTURA DEL LECHO, VELOCIDAD DEL FLUIDO Y POROSIDAD DEL LECHO

1. Variación en la altura del lecho.

Se construyeron gráficas de fracción molar de acetileno en la mezcla gaseosa (X_A) contra tiempo de adsorción (θ) para diferentes posiciones en el lecho, las mismas fueron construidas para distintas alturas de lecho, esto es, $H = 100, 150, 200$ cm, manteniendo el resto de los datos del sistema constantes, esto se ilustra en las figs. 9-10.

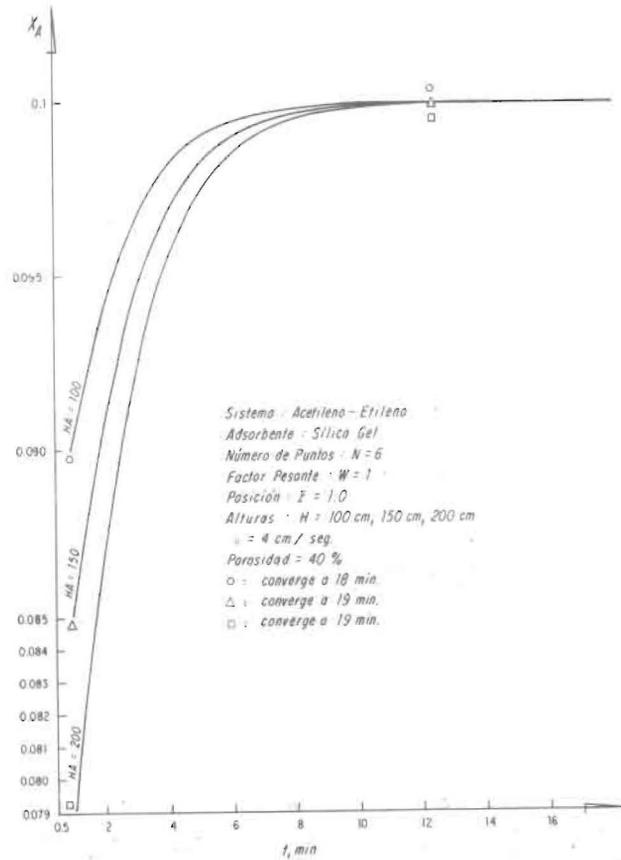


Fig. No. 9 - VARIACION DE LA FRACCION MOLAR DEL ADSORBATO (ACETILENO) COMO FUNCION DE TIEMPO PARA DIFERENTES ALTURAS DEL LECHO.

Tomando como referencia la fracción molar del acetileno en el gas, para un tiempo de adsorción de 1 minuto, se observa que al aumentar la altura del lecho dicha composición disminuye para una misma porción. Por supuesto que en la medida que pasa el tiempo la concentración tiende a igualarse en cada punto para las diferentes alturas de lecho, aunque generalmente, y esto dependiendo del punto, la convergencia a la concentración inicial se consigue primero en el lecho de menor altura.

Contrariamente a lo que pudiera esperarse el tiempo de computación disminuye significativamente al aumentar la altura del lecho. Esto es debido a que los cálculos se realizan en función del parámetro adimensional $\tau (= u \theta / \epsilon H)$ el cual como puede apreciarse es inversamente proporcional a la altura del lecho, esto implica que para alcanzar un determinado valor del θ se necesite menor tiempo de simulación cuanto mayor sea la altura y por ende menor tiempo de computación.

2. Variación en la velocidad del fluido

Se construyeron gráficas de fracción molar de acetileno en el gas (X_A) contra tiempo de adsorción (θ) a diferentes posiciones en el lecho para velocidades del fluido de 2,4 y 8 cm/seg manteniendo el resto de los datos del sistema constantes, esto se ilustra en la Figs. No. 11-12.

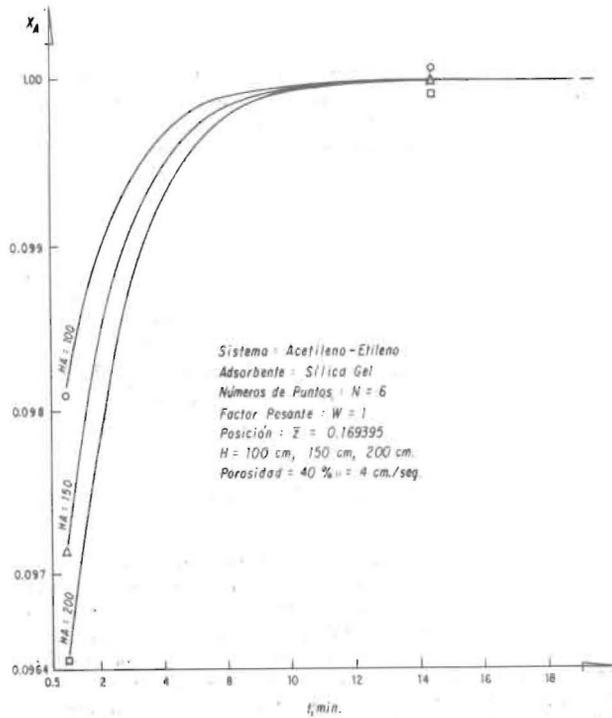


Fig. No. 10 - VARIACION DE LA FRACCION MOLAR DEL ADSORBATO (ACETILENO) COMO FUNCION DE TIEMPO, A DIFERENTES ALTURAS.

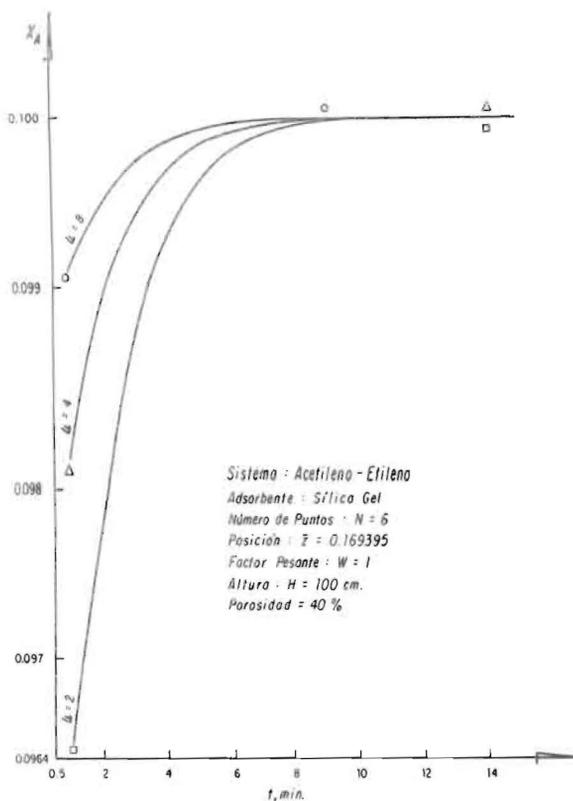


Fig. No. 11 - VARIACION DE LA FRACCION MOLAR DEL ADSORBATO (ACETILENO) COMO FUNCION DEL TIEMPO, A DIFERENTES VELOCIDADES

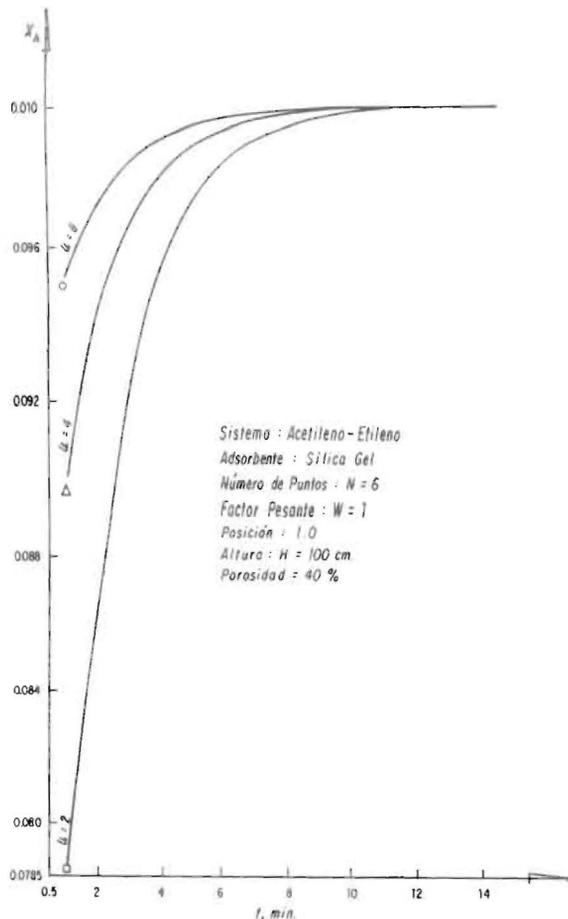


Fig. No. 12 - VARIACION DE LA FRACCION MOLAR DEL ADSORBATO (ACETILENO) COMO FUNCION DEL TIEMPO A DIFERENTES VELOCIDADES

En este caso la reducción de la velocidad del fluido hace que la concentración de acetileno sea menor en una misma posición para cualquier tiempo de adsorción. Esto ocasiona que la convergencia hacia la concentración inicial o de entrada, en cada posición del lecho, necesite un tiempo mayor.

Por otro lado el tiempo de computación disminuye al reducir la velocidad del fluido. En este caso τ es directamente proporcional a dicha velocidad, lo cual implica que para alcanzar un determinado valor de ϕ se necesite menor tiempo de simulación cuanto menor sea la velocidad del fluido y por consiguiente menor tiempo de computación.

3. Variación en la porosidad del lecho

Los resultados obtenidos utilizando valores de porosidad de 0.4, 0.6 y 0.8 manteniendo los restantes datos del sistema constantes, demuestran que ésta no influye considerablemente en la convergencia del sistema ni en el tiempo de computación. Esto es explicable debido a que a pesar de ser τ inversamente proporcional a la porosidad, la variación de ésta, por ser valores pequeños, no afecta significativamente el tiempo de simulación necesario para alcanzar un determinado ϕ .

Para finalizar esta discusión de resultados debe indicarse que el programa, aún cuando calcula las concentraciones en función del parámetro adimensional τ , en el momento de escribir los resultados hace de nuevo la conversión a ϕ .

IV. CONCLUSIONES

La utilización del método de colocación ortogonal en combinación con un método numérico, en este caso Euler, permite resolver y analizar adecuadamente el modelo diferencial que rige el proceso de adsorción de una mezcla binaria a través de un lecho fijo con control de la fase fluido.

El programa de computación utilizado para efectuar los cálculos correspondientes a la adsorción de una mezcla gaseosa de acetileno-etileno a través de un lecho de sílica gel y en base a factores adimensionales inherentes al proceso, demuestra una alta eficiencia en cuanto a la calidad de los resultados obtenidos y al tiempo de computación requerido. Con respecto a este tiempo, debe decirse que para el caso más complicado en consideración, es decir, para un valor de $N=6$ equivalente a 8 posiciones en el lecho, el programa necesitó aproximadamente 52 minutos de tiempo de computación lo cual corrobora la eficiencia del mismo tomando en

cuenta los diversos tipos de cálculos envueltos en el proceso.

El estudio de los perfiles de concentración para el componente fuertemente adsorbido en las fases fluido y sólida como función de los parámetros de tiempo y posición demuestra un comportamiento altamente lógico y satisfactorio del proceso de adsorción en cuanto a la dinámica de flujo, capacidad de adsorción y efectos de equilibrio.

La variación de parámetros tales como altura

de lecho y velocidad del fluido afecta la rapidez de convergencia hacia la concentración inicial (entrada al lecho) en los diferentes puntos de colocación ortogonal o posiciones en el lecho y así mismo incide sobre el tiempo de computación requerido por el programa (a mayor altura menor tiempo y a menor velocidad menor tiempo). No sucede lo mismo con la porosidad del lecho cuya variación no afecta significativamente el tiempo de convergencia en cada punto, ni el tiempo de computación.

LITERATURA CITADA

- 1) MICHAELS, A.S. : *Ing. Eng. Chem.*, 44, 1922(1952)
- 2) TREYBAL, R. : "*Operaciones con Transferencia de Masa*", Editorial Hispano Americana S.A., Buenos Aires.
- 3) HOUGEN, O.A. and MARSHALL, W.R.: *Chem. Eng. Prog.* 4, 197(1947).
- 4) ROSEN, J.B. : *Ind. Eng. Chem.*, 46, 1590 (1954).
- 5) MEYER, O.A. and WEBER, T.W.: *AICHE, J.*, 13, 457 (1967)
- 6) BROWN, N., MULLINS, J.C. and MELSHEIMER S. : *AICHE Symposium Series*, 179, Volúmen 74,9(1978)
- 7) ZWIEBEL, I. and YEO, G. : *AICHE Symposium Series*, 179, Volúmen 74, 19 (1978).
- 8) WONG, Y.W. and NIEDZWIECKI, J.L. : *AICHE Symposium Series*, 219, Volúmen 78, 120 (1982).
- 9) FINLAYSON, B. : "*Non-linear analysis in Chemical Engineering*", McGraw-Hill Book Co. (1980).
- 10) TUCIDIDES, L. : "*Análisis por Colocación Ortogonal de Adsorción de Mezclas Binarias*". M.Sc. en Ingeniería de Gas, Universidad del Zulia, Maracaibo (1983).
- 11) PRIETO, L., GARCIA, C. y SANCHEZ, J. : "*Fundamentos de Transferencia de Masa*". 2da. Edición, 1978, Publicación Interna-LUZ, pág. 353.

Recibido el 17 de mayo de 1985