



EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO



TECNOLÓGICO NACIONAL DE MÉXICO
Instituto Tecnológico de Veracruz

**“Optimización del flujo a través de las placas perforadas de una
columna de destilación de biocombustible de la planta de bioetanol
del ITVer”**

Tesis

Que para obtener el grado de:
Maestro en Eficiencia Energética y Energías Renovables

Presenta:

Ing. Enrique Cruz Octaviano

Director:

Dr. Guillermo Efrén Ovando Chacón

Co-director:

Dr. Javier Gómez Rodríguez

H. Veracruz, Ver.

Agosto, 2023

H. Veracruz, Veracruz, **07/AGOSTO/2023**
OFICIO: ITV/DEPI/No.680/2023
Asunto: Autorización de Impresión de Tesis

C. ENRIQUE CRUZ OCTAVIANO

Por este conducto se le comunica que su tesis de Maestría en Eficiencia Energética y Energías Renovables titulada:

"Optimización del flujo a través de las placas perforadas de una columna de destilación de biocombustible de la planta de bioetanol del ITVer"

Fue aprobada en su totalidad en cuanto a formato y calidad del contenido a satisfacción del H. Jurado del examen, por lo que está Usted autorizado a editar la presentación definitiva del trabajo.

ATENTAMENTE

*Excelencia en Educación Tecnológica®
Antorcha y Luz de Fuego Permanente®*



OLAYA PIRENE CASTELLANOS ONORIO
JEFE DE LA DIV. EST. POSG. E INVEST

EL. H. JURADO



Guillermo Efrén Ovando Chacón
PRESIDENTE



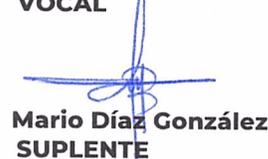
INSTITUTO TECNOLÓGICO DE VERACRUZ
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE
POSGRADO E INVESTIGACIÓN



Javier Gómez Rodríguez
SECRETARIO



Abelardo Rodríguez León
VOCAL



Mario Díaz González
SUPLENTE

CC.P Archivo
OPCO/SMMC





El presente trabajo de tesis titulado "**Optimización del flujo a través de las placas perforadas de una columna de destilación de biocombustible de la planta de bioetanol del ITVer**" Presentado por el (la) **C. Enrique Cruz Octaviano**, ha sido aprobado por su comité tutorial como requisito parcial para obtener el grado de:

MAESTRO EN EFICIENCIA ENERGÉTICA Y ENERGÍAS RENOVABLES

DIRECTOR

DR. GUILLERMO EFRÉN OVANDO CHACÓN

CODIRECTOR

DR. JAVIER GÓMEZ RODRÍGUEZ

REVISOR

DR. ABELARDO RODRÍGUEZ LEÓN

REVISOR

DR. MARIO DÍAZ GONZÁLEZ

CC.P Archivo
OPCO/SMMC



Dedicatoria

A mis padres, **Araceli Octaviano Santamand** y **Enrique Cruz Herrera**, que con sus enseñanzas y gran amor que me dan, han sido el eje fundamental a lo largo de mi vida, apoyando y motivando mi formación académica y mi superación personal.

A mi hermana, **Karina Cruz Octaviano**, que siempre me ha apoyado en todo lo que me he propuesto y aconsejado en todo momento.

A mi novia, **Pamela Isabel Hernández Estrada**, porque pasan los años y siempre has dado por hecho de que puedo con todo, gracias por tu amor, por brindarme tu compañía, formas parte de mis motivos para ser mejor y superarme.

Agradecimientos

A **Dios** por darme la vida, la salud y la fortaleza, por todas las bendiciones que me ha dado y por dirigir mis pasos a lo largo de la realización de este proyecto.

Al **Tecnológico Nacional de México campus Veracruz**, así como a la **Coordinación y Docentes** de la **Maestría en Eficiencia Energética y Energías Renovables** por su invaluable apoyo, que a lo largo de este programa de posgrado me han compartido sus conocimientos, asesorías y experiencias.

Al **CONACyT** (Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología) por brindarme el financiamiento económico para desempeñar mis estudios de maestría.

A mis compañeros de generación, en especial a **Arlet** y **Moisés** que me adoptaron como foráneo que fui en la ciudad y que me hicieron sentir en casa.

Al **Dr. Guillermo Efrén Ovando Chacón**, director de este trabajo, por apoyarme, guiarme y otorgarme la confianza para desarrollar este trabajo de investigación.

Al **Dr. Javier Gómez Rodríguez**, codirector de este trabajo, y **Dr. Abelardo Rodríguez León**, miembro del comité revisor, por apoyarme y brindarme los espacios y herramientas necesarias para desarrollar de manera oportuna esta investigación.

Al **Dr. Mario Díaz González**, miembro del comité revisor, por sus enseñanzas, valiosas observaciones y sugerencias para poner a punto esta tesis de maestría.

Índice

Resumen	1
Abstract.....	2
Capítulo 1. Introducción.....	3
1.1 Planteamiento del problema	5
1.2. Objetivos.....	7
1.2.1. Objetivo general	7
1.2.2. Objetivos específicos.....	7
1.3. Justificación.....	8
1.4 Hipótesis.....	9
Capítulo 2. Marco teórico.....	10
2.1 Energía.....	10
2.2 Energía eléctrica	10
2.3 Energías renovables	10
2.4 Biocombustibles	10
2.5 Bioetanol.....	11
2.5.1 Proceso de obtención de bioetanol	12
2.6 Columnas de destilación.....	13
2.7 Tipos de columnas de destilación.....	14
2.7.1 Columnas empacadas	14
2.7.2 Columnas de platos.....	15
2.8 Eficiencia en columnas de destilación.....	16
2.9 Método de elemento finito.....	18
2.9.1 Software de código numérico	19
2.9.2 Dinámica de fluidos computacional	20
2.9.3 Software de dinámica de fluidos computacional.....	20
2.9.4 Clúster AGAVE.....	21
Capítulo 3. Estado del arte.....	23
Capítulo 4. Desarrollo de la metodología.....	27
4.1 Estructura de la metodología.	27
4.2 Caracterización física y matemática del flujo.....	27

4.2.1 Ecuaciones para evaluar el flujo laminar.....	28
4.2.2 Ecuaciones para evaluar el flujo turbulento	29
4.2.3 Geometría	31
4.3 Diseños del plato perforado.....	32
4.4 Análisis de la mecánica de fluidos y la transferencia de calor.	34
4.4.1 Simulaciones del comportamiento hidrodinámico del fluido.....	34
4.4.2 Simulaciones del comportamiento térmico del fluido.....	35
4.5 Evaluación de la configuración geométrica óptima del plato perforado.	38
Capítulo 5. Resultados.....	39
5.1 Simulación del comportamiento hidrodinámico y térmico del fluido en régimen laminar	39
5.2 Simulación del comportamiento hidrodinámico y térmico del fluido en régimen turbulento.....	45
5.3 Reducción de la humedad.....	52
Conclusiones.....	53
Trabajos futuros.....	54
Referencias bibliográficas	55
Apéndices	61
A. Logros obtenidos	61
A1. Publicación de artículo	61
A2. Constancia de participación como ponente en congreso internacional	62

Índice de figuras

Figura 2.1. Análisis del ciclo de los biocombustibles (<i>Valdez, 2009</i>).	11
Figura 2.2. Generaciones de producción de etanol (<i>Monroy, 2017</i>).	12
Figura 2.3. Diagrama de una columna empacada (<i>Delgado et al., 2012</i>).	14
Figura 2.4. Diagrama de una torre de platos (<i>Delgado et al., 2012</i>).	15
Figura 2.5. Algunos tipos de válvula representativas (<i>Marcilla, 2000</i>).	16
Figura 2.6. Diseños de tapas de burbuja (<i>Marcilla, 2000</i>).	16
Figura 2.7. Elementos y nodos de un dominio (<i>Fernández, 2010</i>).	18
Figura 2.8. Herramientas y modelos del software CFD.	20
Figura 2.9. Clúster Agave (servidor izquierdo) en el laboratorio de cómputo intensivo. ...	22
Figura 4.1. Estructura de la metodología de investigación.	27
Figura 4.2. Tapa de burbuja de referencia.	31
Figura 4.3. Tapa de burbuja en el interior de la columna.	32
Figura 4.4. Tapa de burbuja con ranuras rectangulares (Modelo A).	33
Figura 4.5. Tapa de burbuja con ranuras triangulares (Modelo B).	33
Figura 4.6. Parámetros de “X” y “Y” de las ranuras en a) Modelo A; b) Modelo B.	34
Figura 4.7. Entrada y salida de la columna de destilación.	35
Figura 4.8. Contenido de humedad 1.	36
Figura 4.9. Contenido de humedad 2.	37
Figura 4.10. Contenido de humedad 3.	37
Figura 4.11. Condiciones de temperatura.	38
Figura 5.1. Vectores de velocidad y líneas de corriente en el interior de la tapa de burbuja en flujo laminar.	39
Figura 5.2. Campo de temperatura en el interior de la tapa de burbuja en flujo laminar. ...	40
Figura 5.3. Campo de humedad en el interior de la tapa de burbuja en flujo laminar.	41
Figura 5.4. Comportamiento de la humedad promedio en flujo laminar en la superficie por encima de la tapa de burbuja en todas las configuraciones geométricas del; (a) Modelo A; (b) Modelo B.	43

Figura 5.5. Comportamiento de la humedad promedio en flujo laminar en el volumen total de la columna de destilación en todas las configuraciones geométricas del; (a) Modelo A; (b) Modelo B.	44
Figura 5.6. Vectores de velocidad y líneas de corriente en flujo turbulento en la tapa de burbuja en vista isométrica.....	45
Figura 5.7. Campo de temperatura en el interior de la tapa de burbuja en flujo turbulento.	46
Figura 5.8. Campo de humedad en el interior de la tapa de burbuja en flujo turbulento. ...	47
Figura 5.9. Perfil de humedad en flujo turbulento en la tapa de burbuja en el eje xy.	47
Figura 5.10. Comportamiento de la humedad promedio en flujo turbulento en la superficie por encima de la tapa de burbuja en todas las configuraciones geométricas del; (a) Modelo A; (b) Modelo B.	49
Figura 5.11. Comportamiento de la humedad promedio en flujo turbulento en el volumen total de la columna de destilación en todas las configuraciones geométricas del; (a) Modelo A; (b) Modelo B.	51
Figura 5.12. Pureza alcanzada en las mejores configuraciones geométricas de cada modelo de tapa de burbuja.....	52

Índice de tablas

Tabla 2.1. Especificaciones del Clúster Agave.....	22
Tabla 4.1. Parámetros de la tapa de burbuja.....	31
Tabla 4.2. Parámetros geométricos de las ranuras.	34



Resumen

En este trabajo se estudió el comportamiento hidrodinámico y de humedad del flujo de vapor de bioetanol, que pasa a través de las tapas de burbuja de la columna de destilación de la Planta Piloto de Bioetanol de Segunda Generación del Tecnológico Nacional de México campus Veracruz, con el objetivo de optimizar el proceso de destilación. El estudio se realizó aplicando simulaciones numéricas de dinámica de fluidos computacional (CFD), para ello se modelaron las ecuaciones de conservación en régimen laminar y régimen turbulento, mismas que se discretizaron utilizando el método de elemento finito. Se evaluaron dos modelos de tapas de burbuja, un modelo A, con ranuras rectangulares y un modelo B, con ranuras triangulares, se crearon 25 configuraciones geométricas para las ranuras de cada modelo en las que se varió su altura y anchura. Las simulaciones realizadas generaron gráficos donde se mostraron vectores de velocidad, líneas de corriente, campos de temperatura y campos de humedad, siendo este último parámetro el de mayor importancia en el proceso de destilación, ya que se emplea para indicar que tanto porcentaje de humedad hay en el bioetanol. Las simulaciones realizadas de ambos modelos permitieron definir cuál de las configuraciones geométricas es la más eficiente para la mayor transferencia de masa y por ende desarrollar un menor valor de humedad en el flujo de bioetanol, después de que este circule por la tapa de burbuja, siendo la configuración de 10x1 mm del modelo A (ranuras rectangulares) la óptima, desarrollando un valor de 0.37077 de humedad en la primera etapa de destilación. Se consideró una segunda etapa de destilación con las mejores configuraciones geométricas logrando alcanzar un 94% de concentración de bioetanol con la configuración de 10x1 mm del modelo A. El modelo A tuvo menores valores de porcentaje de humedad comparado con el modelo B.

Palabras clave: columna de destilación, tapa de burbuja, bioetanol, humedad, CFD.



Abstract

In this work, the hydrodynamic and humidity behavior of the bioethanol vapor flow, which passes through the bubble caps of the distillation column of the Second Generation Bioethanol Pilot Plant of the Tecnológico Nacional de México campus Veracruz, was studied, with the objective of optimizing the distillation process. The study was carried out applying numerical simulations of computational fluid dynamics (CFD), for which the conservation equations in laminar regime and turbulent regime were modeled, which were discretized using the finite element method. Two models of bubble caps were evaluated, a model A, with rectangular slots and a model B, with triangular slots, 25 geometric configurations were created for the slots of each model in which their height and width were varied. The simulations carried out generated graphs where velocity vectors, current lines, temperature fields and humidity fields were shown, this last parameter being the most important in the distillation process, since it is used to indicate how much percentage of moisture in the bioethanol. The simulations carried out of both models allowed us to define which of the geometric configurations is the most efficient for the greatest mass transfer and therefore develop a lower value of humidity in the bioethanol flow, after it circulates through the bubble cap. the 10x1 mm configuration of model A (rectangular slots) being the optimum, developing a moisture value of 0.37077 in the first distillation stage. A second distillation stage was considered with the best geometric configurations, achieving a 94% bioethanol concentration with the 10x1 mm configuration of model A. Model A had lower moisture percentage values compared to model B.

Keywords: distillation column, bubble cap, bioethanol, humidity, CFD.



Capítulo 1. Introducción

El consumo energético es un tema de importancia en la actualidad, con el paso del tiempo, debido al aumento en las poblaciones, la demanda energética es cada vez mayor, al tener mayor demanda por ende se requiere mayor generación de energía eléctrica; en México la energía eléctrica en su mayoría es generada mediante el uso de recursos no renovables como los hidrocarburos, estos se utilizan en centrales que aprovechan el calor en el proceso de generación, este es producto de la combustión, no obstante, se generan gases contaminantes que propician el efecto invernadero, generando el cambio climático, lluvia acida, contaminación en el suelo y el aire, por ello es necesario el uso de energías renovables que puedan servir para la generación de energía eléctrica de manera limpia, o puedan utilizarse como energía en algún otro tipo de sector. Los biocombustibles son una gran alternativa, pueden producirse mediante materia prima vegetal, ya sea cultivada para el propósito de generación de biocombustibles o recolectada de otros procesos como el sorgo, olote, bagazo, esta materia es transformada en plantas de biocombustibles a alcoholes; el punto más importante de esta transformación es la separación del agua del biocombustible que se realiza en las columnas de destilación. En general los fabricantes de columnas de destilación realizan estos agujeros barrenando empíricamente en una placa metálica, sin estudios previos que consideren aspectos como la geometría de las tapas de burbujas de los platos perforados y el efecto que tienen estos sobre el flujo cuando pasa a través de ellos, lo cual implica que la eficiencia de estas columnas no sea la óptima.

La presente tesis se encuentra organizada de la siguiente manera: En el capítulo 1 se hace una introducción al proyecto, definiendo la problemática, los objetivos tanto general como los específicos, la justificación y la hipótesis. El capítulo 2 se presenta el marco teórico que abarca conceptos de energía, biocombustibles, el proceso de obtención de bioetanol, las columnas de destilación y sus diferentes tipos, así como los platos perforados y sus variaciones y la eficiencia de estos, por último, se presentan conceptos sobre la dinámica de fluido computacional y códigos numéricos. En el capítulo 3 se redacta el estado de arte, en donde aparecen trabajos e investigaciones de otros autores relacionados con la problemática similar, obtener el comportamiento del fluido en columnas de destilación y tapas de burbuja utilizando simulaciones CFD. En el capítulo 4 se muestra el desarrollo de la metodología, primeramente, en un diagrama de bloques se muestran los pasos a realizar para alcanzar el objetivo del proyecto, de manera



paralela a los pasos se explica el cómo o con qué se hará cada uno de manera. Seguidamente se explica de manera profunda cada paso de la metodología a seguir. El capítulo 5 presenta la aplicación de la metodología, donde se realizan los pasos a seguir compartiendo además los resultados que se obtuvieron en cada uno de ellos, se discuten los resultados con y se mencionan conclusiones sobre estos. Por último, se muestran las referencias con que se sustenta esta tesis de maestría y los diferentes anexos.



1.1 Planteamiento del problema

La energía eléctrica en México en su mayoría es generada mediante el uso de hidrocarburos formando parte del 69.9% de la capacidad eléctrica instalada en el país como menciona la Secretaría de Energía (SENER, 2021a), estos generan un amplio grupo de contaminantes atmosféricos debido a la combustión realizada para la producción de electricidad, sucede lo mismo con los vehículos de motor de combustión interna, al realizar la combustión para generar el movimiento mecánico. El sector de transporte, que es el más intensivo respecto al uso de energía en México representa el 42.58% del consumo final total de energía como lo indica la SENER (2021b) en el Balance nacional de Energía correspondiente al año 2019, el cual muestra el desempeño y evolución que tuvo México en el sector energético.

Respecto al impacto Iñesta y García (2002) opinan que la generación y utilización de cualquier tipo de energía supone un efecto sobre el medio, en todas las fases de su ciclo desde la generación hasta el consumo final, pasando por la transformación y el transporte. Yang, et al. (2018), mencionan que el impacto ambiental generado depende, básicamente, del tipo de proceso de obtención de la energía y de la tecnología usada para consumirla y transformarla. Los gases generados por la combustión contienen dióxido de azufre (SO₂), dióxido nítrico y dióxido de nitrógeno mejor conocidos como gases NO_x, que contribuyen a la generación de lluvia ácida, además contienen dióxido de carbono (CO₂) que contribuye al efecto invernadero, y partículas en suspensión de menos de 2.5 micras (PM_{2.5}), (Linares & Díaz, 2008). Gómez, et al. (2019), indican que una alternativa para solucionar la problemática de contaminación es la implementación de biocombustibles en el sector de transporte ya que este es uno de los mayores consumidores de energía en México.

Los biocombustibles son una fuente de combustible alterna, el bioetanol se puede utilizar como aditivo para oxigenar la gasolina reemplazando al éter metil tert-butílico (MTBE) que es responsable de la contaminación del suelo y del agua subterránea, El uso de los biocombustibles como el bioetanol permite contrarrestar el

impacto al medio ambiente (Gómez et al., 2019; Monroy et al., 2017) ya que se puede evitar contaminar el suelo y el



agua mediante la oxigenación de la gasolina (Velásquez, 2017), o bien se puede usar directamente o combinándolo

con la gasolina (Carrasco et al., 2001). Carrasco y Guevara (2001) mencionan que puede también utilizarse directo como combustible o mezclado con la gasolina a diferentes porciones que son conocidas como gasolinas E6, E10, E20 y hasta E100: la gasolina E6 tiene un 94% de gasolina y un 6% de etanol en su composición, la E10 tiene un 90% de gasolina y un 10% de etanol, la E20 tiene un 80% de gasolina y un 20% de etanol y la E100 es 100% de etanol.

En este sentido el Tecnológico Nacional de México campus Veracruz cuenta con una planta de bioetanol, conformada por diferentes componentes entre ellos la columna de destilación, donde realiza la destilación, en esta operación unitaria se lleva a cabo la separación del agua del etanol, para garantizar que este último componente no dañe a los motores de combustión interna al ser usado como combustible. Uno de los componentes que efectúan la transferencia líquido - vapor y por ende la separación en la columna de destilación son los platos perforados, en general los fabricantes de los platos perforados de columnas de destilación realizan estos agujeros barrenando empíricamente en una placa metálica, sin estudios previos que consideren aspectos como la geometría de las tapas de burbujas de los platos perforados y el efecto que tienen estos sobre el flujo cuando pasa a través de ellos, lo cual implica que la eficiencia de estas columnas no sea la óptima.



1.2. Objetivos

1.2.1. Objetivo general

Determinar una configuración geométrica del plato perforado que optimice el proceso de operación de la columna de destilación de la planta piloto de bioetanol del ITVer.

1.2.2. Objetivos específicos

- Caracterizar física y matemáticamente el flujo en el interior de la columna de destilación
- Proponer diferentes configuraciones de un plato perforado para la columna de destilación.
- Analizar la mecánica de fluidos y la transferencia de calor a las distintas configuraciones del plato perforado de la columna de destilación.
- Evaluar la configuración geométrica del plato perforado que optimice el proceso en la columna de destilación para diferentes condiciones de operación.



1.3. Justificación

La destilación se ha mantenido como la primera opción para los procesos de separación, esta se hace a través de las columnas de destilación, que tienen una alta demanda energética. Una forma de hacer eficiente a la columna es mejorando la eficiencia termo hidrodinámica del proceso, debido a esto es importante conocer el comportamiento que tiene el fluido a través de los platos perforados.

Implementar simulaciones CFD en la columna de destilación de la planta de bioetanol del ITVer es una opción viable en el diseño de sus platos perforados, para determinar una configuración geométrica que optimice la eficiencia termo hidrodinámica del proceso en la columna y reduzca el consumo energético, disminuyendo costos energéticos y reduciendo el impacto ambiental negativo, además con la presente investigación se beneficia a la planta piloto de bioetanol optimizando el proceso de destilación de la columna, al sector industrial que utiliza columnas de destilación, así como los fabricantes de estas y se beneficia al medio ambiente reduciendo el impacto generado mediante la generación de bioetanol de mayor pureza.



1.4 Hipótesis

La configuración geométrica óptima del plato perforado de la columna de destilación permitirá optimizar el proceso para diferentes condiciones de operación.



Capítulo 2. Marco teórico

2.1 Energía

La energía es un concepto fundamental que se define como la capacidad para realizar un trabajo, de producir movimiento, de generar cambio. Es inherente a todos los sistemas físicos, y la vida en todas sus formas, se basa en la conversión, uso, almacenamiento y transferencia de energía (Rex et al., 2011). La energía no puede ser creada ni destruida, sólo transformada de una forma en otra como lo menciona la Primera Ley de la Termodinámica (Cengel y Boles, 2012).

2.2 Energía eléctrica

La energía eléctrica es la forma de energía que resulta de la existencia de una diferencia de potencial entre dos puntos, lo que permite establecer una corriente eléctrica entre ambos cuando se los pone en contacto por medio de un conductor eléctrico.

La energía eléctrica es la conversión de la energía primaria que proviene de la naturaleza, además la energía eléctrica transformarse en muchas otras formas de energía, tales como la energía lumínica o luz, la energía mecánica o la energía térmica, todo depende de la necesidad a cubrir como menciona Morales et al. (2021).

2.3 Energías renovables

Las energías renovables son aquellas provenientes de la naturaleza y que tienen la particularidad de poder regenerarse con el tiempo, algunos tipos de energía primaria renovable y su medio de conversión a energía eléctrica son: energía solar (paneles fotovoltaicos, energía eólica (aerogeneradores), energía hídrica (turbina-generator), energía nuclear (centrales nucleares) y la biomasa que es tratada dependiendo del tipo de en plantas de biocombustibles, mencionan Cortés y Arango, (2017).

2.4 Biocombustibles

Los biocombustibles son aquellos combustibles que se obtienen de biomasa. El término biomasa, se refiere a cualquier tipo de materia orgánica que provenga inmediatamente en el proceso biológico de organismos recientemente vivos, como plantas, o sus desechos metabólicos, el término biomasa abarca productos tanto de origen vegetal como de origen animal mencionan Salinas y Gasca, (2009). Actualmente se ha aceptado este término para denominar al grupo de



productos energéticos y materias primas de tipo renovable que son transformadas a partir de la materia prima orgánica formada por vía biológica (Hernández y Hernández, 2008).

Los biocombustibles más conocidos son: el biodiesel, que se obtiene de aceites vegetales y el bioetanol derivado de la caña de azúcar o del maíz como lo indica Valdez, (2009). Los biocombustibles a comparación de los combustibles fósiles contribuyen a contrarrestar el calentamiento global resultado del efecto invernadero. El uso de los biocombustibles a largo plazo pretende que se disminuya la dependencia energética de los combustibles fósiles y lograr. Un ciclo de uso de los biocombustibles puede verse en la figura 2.1.

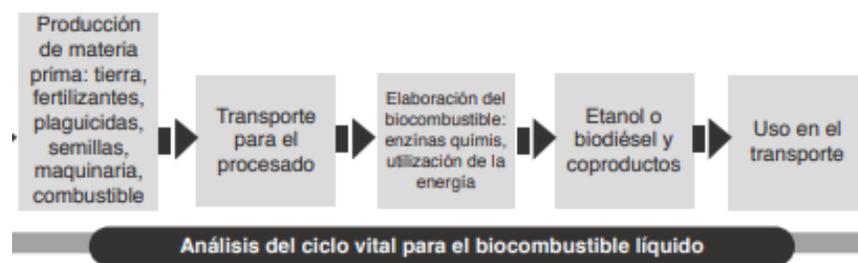


Figura 2.1. Análisis del ciclo de los biocombustibles (Valdez, 2009).

2.5 Bioetanol

El bioetanol forma parte de los bioalcoholes. Se fabrica mediante un proceso muy parecido al de la cerveza (Cortés et al., 2009; Salinas & Gasca, 2009). La materia prima puede ser: cereales (maíz, trigo y cebada), tubérculos (yuca, camote, patata y malanga), celulosa (madera y residuos agrícolas), y sacarosa (remolacha, caña de azúcar, melaza y sorgo dulce). Estos compuestos energéticos se transforman en azúcares, y a continuación se convierten en etanol por medio de la fermentación alcohólica (Salinas & Gasca, 2009). El uso de los biocombustibles como el bioetanol permite contrarrestar el impacto al medio ambiente (Gómez et al., 2019; Monroy et al., 2017) ya que se puede evitar contaminar el suelo y el agua mediante la oxigenación de la gasolina (Velásquez, 2017), o bien se puede usar directamente o combinándolo con la gasolina (Carrasco et al., 2001), las mezclas pueden ser de E5, E10, E20 y hasta E95, el número indica la cantidad de bioetanol que se encuentra en el combustible (E5: la gasolina E5 tiene un 95% de gasolina y un 5% de etanol en su composición).



2.5.1 Proceso de obtención de bioetanol

Las técnicas de producción han evolucionado con el paso de los años, en donde pueden distinguirse dos generaciones de producción de bioetanol. La primera generación se basa en aprovechar los azúcares y almidón presente principalmente en la caña de azúcar y el maíz, mientras que en la segunda generación de combustibles se utilizan los residuos de cultivos alimentarios (Monroy, et al. 2017), como se muestra en la figura 2.2.

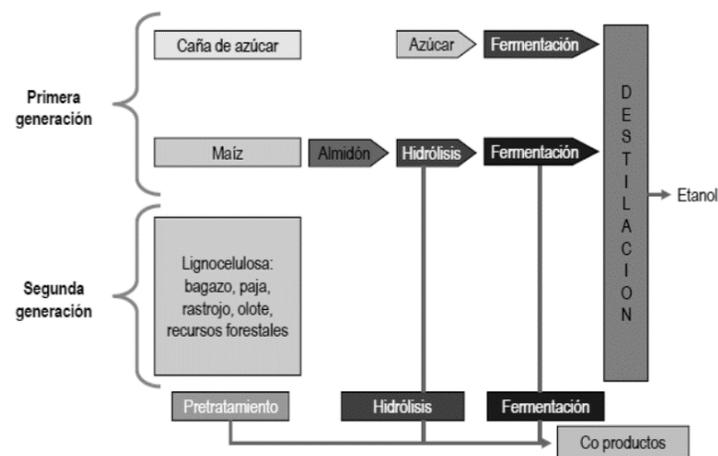


Figura 2.2. Generaciones de producción de etanol (Monroy, 2017).

Gómez et al. (2019), explican que el bioetanol de segunda generación es producido específicamente a través de las siguientes etapas:

Molienda: La molienda es una etapa que tiene como finalidad la reducción de partículas del bagazo de caña mediante el uso de un molino de rodillos y cuchillas (Gómez et al. 2019).

Pre-tratamientos (ácido y alcalino): Los pretratamientos tienen como función la desinteracción de la estructura molecular de los compuestos lignocelulósicos para facilitar la liberación de celulosa para su aprovechamiento en la fermentación (Guarnizo et al. 2009).

Prensado: Después de cada pre-tratamiento se realiza un prensado, el primero para obtener un material con mayor contenido de celulosa y lignina, y el segundo para obtener una masa sólida con una pequeña cantidad de lignina.



Hidrólisis enzimática: La hidrólisis enzimática tiene como finalidad convertir la celulosa en glucosa. Esta reacción es catalizada por las enzimas denominadas celulasas, cuyo propósito es la transformación de la celulosa a azúcares simples como la glucosa (Gómez et al. 2019).

Centrifugación: Se realiza para separar compuestos el licor de glucosa y xilosa para pasar a la etapa de fermentación (Gómez et al. 2019).

Fermentación: En este proceso el licor rico en azúcares fermentables es llevado a los tres diferentes tanques de fermentación, en donde se llevan a cabo tres etapas, la primera es una activación o adaptación de la levadura en el medio que contiene el hidrolizado enzimático y medio de cultivo sintético, posteriormente todo este mosto pasa a un fermentador en donde se airea para producir la levadura y finalmente se pasa a un tercer tanque en donde se lleva a cabo el proceso bajo condiciones anaerobias no estrictas, durante cierto periodo y con agitación moderada (Gómez et al. 2019).

Destilación: El proceso de destilación es fundamental para purificar el etanol producido en la fermentación. En los procesos de destilación convencionales, la separación del etanol no es completa en su totalidad, ya que se presenta un punto azeotrópico de la mezcla etanol-agua cerca del 95 % de concentración de etanol (Monroy, et al. 2017).

En este proceso el mosto fermentado que contiene entre un 9-12% de alcohol es pasado a través de dos columnas de destilación, en donde en la primera se obtiene un producto con 86% de pureza de etanol, el cual es pasado a la segunda columna rectificadora para obtener un alcohol con una pureza del 96.5%. Este proceso se lleva a cabo utilizando vapor directo suministrado a través de una caldera de vapor (Gómez et al. 2019).

Deshidratación: Consiste en concentrar el etanol obtenido en la destilación (96.5%) a través de unas columnas de absorción cargadas con zeolitas naturales, en donde estas tienen la finalidad de atrapar el agua contenido en el etanol para así producir un etanol al 99.6% de pureza, el cual puede ser utilizado como biocombustible directo o como aditivo en las gasolinas (Gómez et al. 2019).

2.6 Columnas de destilación

Una columna de destilación es un elemento esencial utilizado en la destilación de mezclas líquidas para separar la mezcla en sus partes componentes o fracciones, en función de las diferencias en las



volatilidades (Wankat, 2008). La destilación es, por mucho, la técnica de separación más común en la industria de proceso químicos.

2.7 Tipos de columnas de destilación

Existen dos tipos de columnas de destilación de acuerdo con su interior (Seader, 2000).

2.7.1 Columnas empacadas

En las columnas empacadas o de contacto continuo no hay etapas diferenciadas y la separación de fases ocurre en los extremos del equipo. Generalmente, la fase gaseosa es continua y el objetivo del relleno es aumentar la turbulencia. El líquido fluye por el interior del relleno o sus alrededores donde hace contacto con el gas para realizar la transferencia de masa. El relleno puede estar formado por anillos o por monturas de material cerámico, metálico o plástico, puestos en la torre al azar. Igualmente, el relleno puede ser ordenado por medio de espirales, rejillas o mallas metálicas (Seader, 2000). Un diagrama de una columna empacada se puede ver en la figura 2.3.

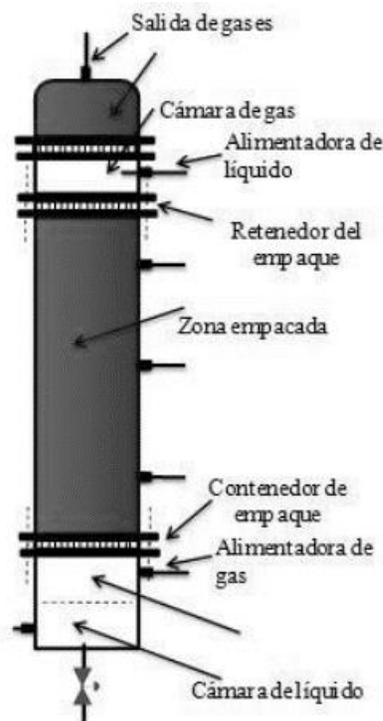


Figura 2.3. Diagrama de una columna empacada (Delgado et al., 2012).



2.7.2 Columnas de platos

En las columnas de platos o de etapas discretas, se ponen en contacto con la fase ligera y pesada en cada una de las etapas o platos, donde se mezclan y posteriormente se separan. Las fases fluyen en contracorriente y la separación depende de algunas variables como la temperatura, presión, velocidad de flujo, composición de alimentación y el número de etapas (Seader, 2000). En la figura 2.4 se muestra el diagrama de una columna de platos

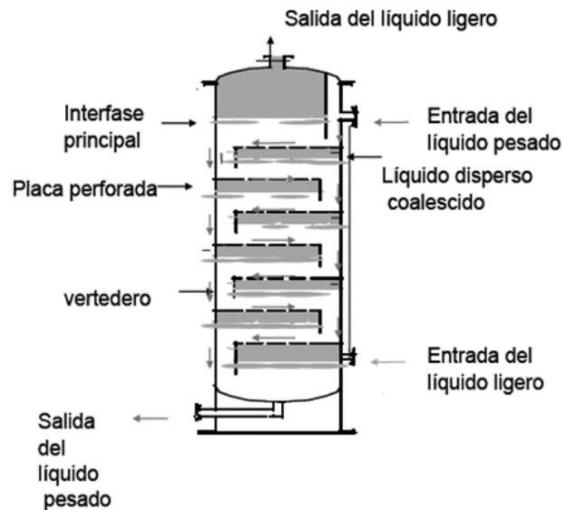


Figura 2.4. Diagrama de una torre de platos (Delgado et al., 2012).

Tipos de platos

El equipo para separaciones en múltiple etapa consiste frecuentemente en platos horizontales de contacto entre las fases dispuestos en una columna vertical (Ramírez, 2014). Existen tres tipos de platos para las columnas de etapa múltiple:

Platos de válvula: Son platos con orificios de gran diámetro cubiertos por tapaderas móviles de diferentes formas o geometrías, como muestra la figura 2.5, que se elevan cuando el flujo de vapor aumenta. Estos platos pueden operar eficazmente a velocidades bajas de vapor (Marcilla, 2000).

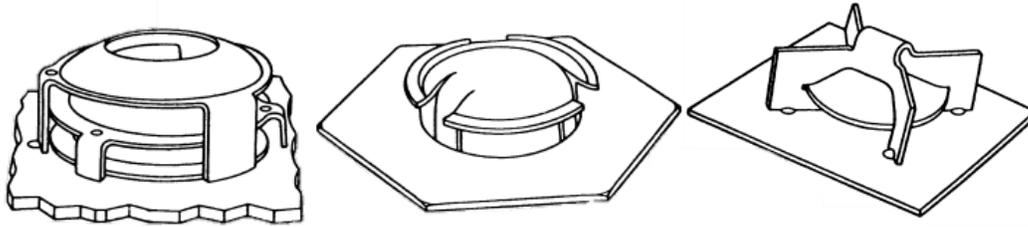


Figura 2.5. Algunos tipos de válvula representativas (Marcilla, 2000).

Platos perforados: Es uno de los platos de mayor sencillez, ya que es una placa metálica con agujeros barrenados en su superficie, con la finalidad de que el vapor pase a través de ellos (Marcilla, 2000).

Platos de tapa de burbuja: Una tapa de burbuja consta de un tubo ascendente sujeto al plato mediante soldadura, tornillos, etc., y una tapa sujeta al tubo. Generalmente están dispuestas sobre el plato en los vértices de triángulos equiláteros formando filas orientadas en dirección perpendicular al flujo (Marcilla, 2000). Algunos diseños de tapas de burbuja se muestran en la figura 2.6.

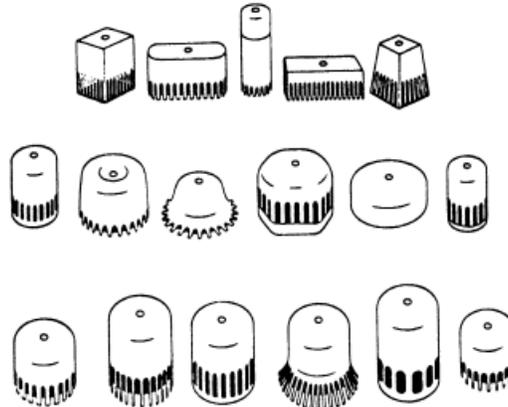


Figura 2.6. Diseños de tapas de burbuja (Marcilla, 2000).

2.8 Eficiencia en columnas de destilación

Wankat, (2008), menciona que para poder determinar la eficacia se debe tener en cuenta las siguientes funciones:

- Diseño de los platos.
- Propiedades del fluido.



- Modelo de flujo.

Si los platos están bien diseñados y la velocidad del flujo esta aproximada al límite de la capacidad entonces la eficacia depende principalmente de las propiedades físicas de los fluidos. Se suelen seguir los siguientes métodos para estimar la eficacia de una determinada columna:

- Por comparación de datos con otras columnas que se encuentren en operaciones en plantas industriales que contengan los mismos sistemas o que sean similares.
- Utilizando modelos empíricos obtenidos a partir de los datos obtenidos.
- Utilizando modelos semiteóricos basados en la transferencia de materia y de calor.

Se puede calcular la eficacia a partir de la eficacia global de una columna mediante la ecuación siguiente:

$$E_0 = \frac{Nt}{Na} * 100 \quad (2.1)$$

Donde:

Nt : es el número de platos teóricos

Na : es el número de platos reales

Otro método para calcular la eficacia es mediante la eficacia de todo el plato según Murphree, la cual se realiza con la siguiente ecuación:

$$E_{MV} = \frac{Y_n - Y_{n+1}}{Y_n^* - Y_{n+1}} \quad (2.2)$$

Donde:

E_{MV} : Eficacia de Murphree para el vapor en la etapa n.

Y_n : Composición real del vapor que sale del plato n

Y_{n+1} : Composición real del vapor que sale del plato n

Y_n^* : Composición del vapor en el equilibrio con el líquido que sale de la etapa n.



2.9 Método de elemento finito

El método de elemento finito es un método numérico para resolver ecuaciones relacionadas por aproximación de variables de campo continuas. (Chapra et al., 2011). Todo sistema físico representado por medio de un modelo matemático es susceptible de modelarse numéricamente, mediante una evaluación que permite encontrar una solución a través de un algoritmo computacional desarrollado específicamente para tal fin. El método de los elementos finitos (MEF) provee una formulación matemática, capaz de encontrar una solución en función de las variables involucradas en el sistema bajo análisis.

La base del MEF consiste en considerar pequeñas partes llamadas "elementos", los cuales subdividen el dominio del sólido, conectándose unos con otros en un número finito de puntos llamados "nodos", estos son los puntos de unión de cada elemento con sus adyacentes como se muestra en la figura 2.7 (Fernández, 2010).

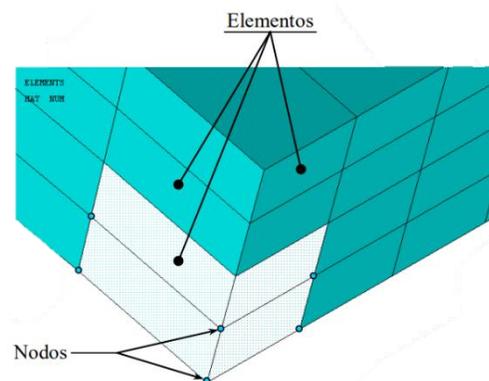


Figura 2.7. Elementos y nodos de un dominio (Fernández, 2010).

Este ensamble proporciona un modelo para el elemento, en el cual el dominio de cada elemento asume una solución general simple a las ecuaciones de gobierno. La solución de cada elemento viene a ser una función de valor desconocido en los nodos. Aplicando una solución de forma general a todos los elementos, resulta en un grupo finito de ecuaciones algebraicas que deben ser resueltas para las incógnitas de valor nodal. Las ecuaciones para cada elemento finito se combinan para obtener la solución del sistema físico completo, las cuales se resuelven por procedimientos numéricos comunes. La solución obtenida mediante MEF es una solución bastante aproximada, existiendo siempre una diferencia con la solución exacta. El error es la diferencia entre la solución obtenida mediante MEF y la solución exacta. Existen dos fuentes de error. En la



primera, la magnitud de este error depende de la medida de los elementos en la subdivisión relativa a la variación de la solución. A medida que se incrementa el número de elementos, es posible disminuir el error y obtener una mejor aproximación. La segunda fuente de error es la precisión de la solución de las ecuaciones algebraicas, lo cual depende de la precisión del equipo de cómputo, el algoritmo computacional, el número de ecuaciones y la subdivisión de los elementos (Fernández, 2010).

2.9.1 Software de código numérico

En este trabajo se usará un software de código numérico basado en el método de elemento finito (MEF) para la elaboración del modelado y la realización del análisis de manera virtual de algunos fenómenos físicos como el movimiento de fluidos, el transporte de masa y la transferencia de calor, mismos que se pueden representar con ecuaciones diferenciales parciales (EDP). El método de elemento finito fue desarrollado inicialmente para resolver problemas de mecánica estructural, pero en la actualidad se puede aplicar al análisis de problemas de termofluidos (Lazaro, 1999). Este método tiene la ventaja de que se puede aplicar a diseños de una alta complejidad en su forma o geometría, como las tapas de burbujas de los platos perforados de las columnas de destilación (Moya, 2021).

Existen tres etapas que conforman el uso de un software de elemento finito, las cuales son: el preprocesamiento, el procesamiento y el postprocesamiento. En el preprocesamiento se crea el modelo a evaluar mediante los datos de entrada suministrados por el investigador, como el tipo de estudio, la generación del modelo geométrico, la elección de los materiales del modelo a través de la librería de materiales del software o asignando las propiedades de manera manual, la asignación de modelos y condiciones de frontera y la generación de la malla (elemento finito). En el procesamiento se selecciona el tipo de cálculo a realizar, se configuran los parámetros de cálculo y posteriormente el código computacional genera el sistema de ecuaciones del modelo creado y realiza los cálculos necesarios para dar una solución al modelo considerando todas las variables asignadas en el preprocesamiento, dependiendo del poder computacional donde se ejecute el software de elemento finito el tiempo para obtener la solución del sistema puede variar. En el postprocesamiento la solución numérica se presenta a través de gráficos de campos o perfiles, así como también valores promedios o puntuales. El investigador es el encargado de la interpretación



de las simulaciones, la lectura de los resultados y de la toma de decisiones que sea pertinente (Fernández, 2010).

2.9.2 Dinámica de fluidos computacional

Fernández y Casan (2015), mencionan que la dinámica de fluidos computacional (CFD) se define como la técnica informática que busca la simulación del movimiento de los fluidos. Las principales ventajas de esta técnica sobre otro tipo de estudios de mecánica de fluidos son la reducción sustancial de tiempo y costos en los experimentos, la posibilidad de analizar sistemas o condiciones muy difíciles de simular experimentalmente.

2.9.3 Software de dinámica de fluidos computacional

El software de dinámica de fluidos computacional se basa en las leyes de conservación de la cantidad de movimiento, la masa y la energía en los fluidos. Los diferentes modelos de flujo contienen diferentes combinaciones y formulaciones de las leyes de conservación que se aplican a la física del campo de flujo. Estas leyes de la física se traducen en ecuaciones diferenciales parciales y se resuelven junto con las condiciones iniciales y de frontera especificadas mediante un código numérico (Ferziger y Peric, 2002).

Mediante el software de código numérico se usarán distintas herramientas para el desarrollo y evaluación de las distintas configuraciones de los modelos de los platos perforados. La figura 2.8 muestra de manera general el usos de las herramientas y los modelos que se implementaran para realizar el estudio.

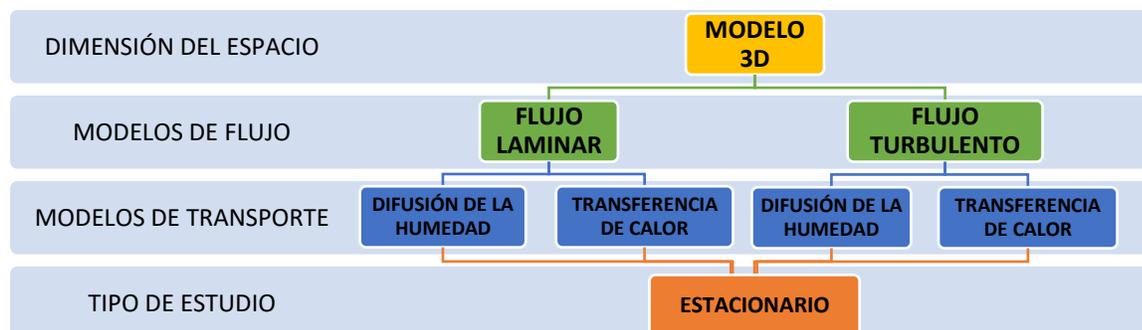


Figura 2.8. Herramientas y modelos del software CFD.



Modelo 3D: Se utilizará el modelo tridimensional (modelo 3D), el cual permitirá el diseño en tres dimensiones de la tapa de burbuja para evaluar el comportamiento del flujo que pasa a través de ella.

Flujo laminar: Se aplica principalmente a flujos con números de Reynolds de bajos a intermedios. Este tipo de flujo resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes, para flujos incompresibles, débilmente compresibles y compresibles (hasta Mach 0,3) (Mataix, 1986). Las simulaciones preliminares en flujo laminar servirán para ahorrar tiempo de procesamiento en las distintas configuraciones y así obtener valores de referencia para las simulaciones que demanden alto poder computacional como las evaluaciones en flujo turbulento.

Flujo turbulento: Se aplica a números de Reynolds altos. Este flujo resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes (RANS) promediadas por Reynolds para los campos de velocidad y presión promediados (Mataix, 1986). Se utilizará el modelo k- ϵ estándar para las ecuaciones de transporte.

Difusión de la humedad: Se utiliza para calcular la distribución de la humedad. Simula el transporte de humedad por convección y difusión de vapor y la evaporación o condensación en paredes (Ullauri, 2010).

Transferencia de calor: La física de transferencia de calor permite evaluar el comportamiento térmico de conducción y convección en sólidos y fluidos (Kreith et al. 2012).

Estudio estacionario: Este estudio se utiliza cuando las variables de campo no cambian con respecto al tiempo (Simscale, 2023).

2.9.4 Clúster AGAVE

Para la resolución del sistema de ecuaciones y los cálculos necesarios para dar una solución al modelo en la etapa de procesamiento en el software de dinámica de fluidos computacional, es necesario de un equipo de alto nivel de procesamiento. Para este estudio, concretamente, para las evaluaciones en flujo turbulento, es necesario el uso de equipo especializado. Para ello, el software de dinámica de fluidos computacional es ejecutado en el clúster AGAVE (figura 2.9) que se encuentra en laboratorio de cómputo intensivo CI-ITVer1 ubicado en la Unidad de Ingeniería Mecánica (UDIM) del Tecnológico Nacional de México campus Veracruz.



Figura 2.9. Clúster Agave (servidor izquierdo) en el laboratorio de cómputo intensivo.

Agave es un clúster de alto rendimiento (HPC - High Performance Clúster) utilizado para ejecutar tareas que necesitan de grandes cantidades de memoria, gran capacidad computacional o ambos, como la simulación numérica de problemas de termofluidos, transferencia de calor o flujo de fluidos. Actualmente Agave cuenta con 9 nodos de cómputo y uno de ellos funge como Front – End. Las especificaciones del clúster Agave se muestran en la tabla 2.1.

Tabla 2.1. Especificaciones del Clúster Agave.

Sistema Operativo	CentOS⁷
Middleware	XCAT
CPU	70 x Intel Xeon
RAM	166 GB
Almacenamiento	6.42 TB
Rendimiento	5950 Gflops



Capítulo 3. Estado del arte

El uso de herramientas de dinámica de fluidos computacionales (CFD) ha sido parte fundamental para la investigación de fluidos con el fin de predecir el comportamiento hidrodinámico y térmico del flujo en el interior de las columnas de destilación, específicamente cuando este pasa a través de los platos perforados.

Shenastaghi et al. (2018), investigaron los patrones de flujo y el comportamiento hidrodinámico de flujo vapor - líquido concretamente aire - agua para bandejas de tapas de burbujas de 88 mm de diámetro utilizando la técnica CFD, además presentaron las consideraciones hechas en cuanto a la generación de mallas, condiciones de frontera y valores iniciales usados en la simulación de las tapas de burbujas, lograron predecir valores de velocidad y presión.

Parizi et al. (2015), desarrollaron un modelo CFD para predecir los patrones de flujo y la hidrodinámica de una columna de dos platos con orificios de 12.7 mm, que utiliza un sistema aire-agua. Ellos utilizaron mallas híbridas para la cuadrícula de la geometría de elemento finito, enfatizando la importancia de realizar simulaciones CFD antes de construir bandejas de platos perforados.

Varios autores han realizado estudios en distintas columnas de destilación, las cuales tienen bandejas de diferentes formas para su operación, como los platos perforados, tapas de burbuja, tapas cónicas, platos perforados inclinados o incluso platos rotatorios. La variedad de bandejas hace que la simulación CFD sea una opción necesaria con el fin de conocer el comportamiento del flujo en las distintas bandejas.

En cuanto al análisis de platos perforados, Zhao et al. (2018), diseñaron una bandeja con válvula fija por tamiz agregando orificios de guía de flujo en las tapas de las válvulas. Ellos usaron un modelo de dinámica de fluidos computacional de flujo tridimensional de dos fases para describir el comportamiento del flujo de la bandeja, indicando la importancia de la dinámica de fluidos computacional, siendo esta una herramienta imprescindible para analizar bandejas de tamices y válvulas.

El comportamiento hidrodinámico en las columnas de muro dividido (DWC) también ha sido de interés por otros autores.



Lavasani et al. (2018), mediante CFD, diseñaron una configuración experimental que permitió cuantificar las tasas de goteo de una columna de muro dividido, simulando bandejas de 0.5 m de diámetro con orificios de 12.7 mm y 9 mm de diámetro, indicando que la tasa de goteo es un parámetro importante en la eficiencia de las columnas de platos, así como las variaciones de la geometría, por otro lado Rodríguez-Angeles et al. (2015), presentaron una metodología para el diseño y análisis mecánico de platos perforados para la separación de una mezcla de hidrocarburos en una columna de muro dividido, el cual fue validado mediante CFD.

Otro de los diseños de bandejas son los que tienen tapas de burbuja, Zarei et al. (2017), evaluaron un modelo de dinámica de fluidos computacional en tres dimensiones para predecir la hidrodinámica de la bandeja ConCap (bandeja de tapa cónica) que opera en el régimen de aspersión. Utilizaron el método de volumen finito para simular una bandeja de tapa cónica de 1.2 m con 21 tapas. Estudiaron el mecanismo de formación de burbujas, la dispersión del líquido y el efecto de las diferentes alturas de la tapa en el rendimiento de la bandeja. De igual forma, Rahimi, et al. (2012) evaluaron la tapa de burbuja que se denomina Concap (tapa cónica), aplicando un modelo CFD transitorio tridimensional. Ellos compararon el comportamiento de una bandeja Concap de 1.2 m de diámetro contra una bandeja de válvulas. Posteriormente estudiaron mediante CFD un modelo de flujo bifásico tridimensional para predecir la hidrodinámica, la transferencia de masa y la eficiencia de la bandeja de platos perforados. Para estimar la eficiencia de las bandejas, utilizaron dos bandejas con geometría similar, pero diámetros de agujeros desiguales (7.5 mm y 1.8 mm) para observar los efectos de los diámetros de agujeros (Rahimi, et al., 2013).

La eficiencia es un parámetro importante en las columnas de destilación, ya que al existir en los platos perforados una correcta transferencia de masa entre la composición líquido - vapor existe una mejor separación de los componentes, reduciendo energía en el proceso, hasta ahora, distintos análisis de la eficiencia han sido realizados. Abbasnia et al. (2019) mediante simulaciones CFD, diseñaron un modelo bifásico tridimensional para comparar la transferencia de masa y la eficiencia de la bandeja de tamiz de orificios de 12.7 mm y la bandeja de Nye, mediante el cálculo de cuatro perfiles de composición líquida en solución y cuatro eficiencias de Murphree a lo largo de ambas bandejas en el eje central. Noriler et al. (2008), describieron a partir de técnicas CFD el flujo térmico e hidrodinámico del líquido - vapor en una columna de destilación de platos perforados, y a partir de estos estudios numéricos CFD evaluaron distintos parámetros



hidrodinámicos para obtener la eficiencia de los platos perforados de una columna de destilación, con lo anterior determinaron la eficiencia global de la bandeja de platos perforados en la columna de destilación mediante la eficiencia de Murphree, pudiendo así optimizar el diseño para diferentes condiciones de operación (Noriler et al., 2009). Teniendo buenos resultados en las simulaciones de los platos perforados, Noriler et al. (2010), aplicaron mediante CFD un modelo tridimensional y transitorio con balances de conservación de especies químicas, energía y cantidad de movimiento para predecir la fracción de volumen, la velocidad, la presión, la temperatura y los campos de concentración de los flujos bifásicos en las bandejas de destilación. Además, validaron los resultados obtenidos con un modelo experimental con las mismas condiciones de operación obteniendo resultados similares. Li et al. (2016), realizaron un modelo CFD multiescala para caracterizar la eficiencia hidrodinámica de empaques estructurados, confirmando la concordancia de los datos en las simulaciones CFD con los datos experimentales del comportamiento hidrodinámico de empaques, recomendando así la aplicación de CFD para diseñar y optimizar empaques estructurados complejos en columnas de destilación.

Las modificaciones a las configuraciones geométricas de los platos perforados han sido un parámetro de interés para varios investigadores, Wang et al. (2021), simularon mediante CFD el campo de flujo tridimensional de una bandeja de tamizado en forma de álabes, analizando el flujo rotacional a través de las perforaciones de 4 mm hechas a diferentes distancias axiales. Lavasani et al. (2018), estudiaron el comportamiento hidrodinámico debido al efecto del tamaño del orificio, la dirección del flujo líquido y el tipo de tubo descendente en una bandeja de columna de muro dividido con un diámetro de la columna de 0.5 m. Ellos utilizaron bandejas con tamaños de orificios de 12.7 mm y 9 mm. Krshna et al. (2003), examinaron la capacidad de la dinámica de fluidos computacional (CFD) para modelar la compleja hidrodinámica bifásica de platos perforados de 0.3 m y 0.9 m de diámetro.

Como se ha mostrado la dinámica de fluidos computacional es una herramienta muy utilizada en el estudio del flujo en columnas de destilación, no obstante, existen pocas investigaciones sobre la obtención de la configuración óptima de los platos perforados de la columna utilizando CFD, Tang et al. (2019) obtuvieron la configuración óptima de un plato perforado de flujo rotacional tridimensional para una columna de destilación, describiendo la geometría, las condiciones de frontera y mallado de la bandeja de tamiz. Lo anterior es producto



de trabajos realizados en los años 2018 donde compararon la caída de presión en una geometría de bandeja de platos perforados y en 2017 donde efectuaron simulaciones CFD para analizar la caída de presión y la distribución del gas interno del campo de flujo del plato perforado de flujo rotacional tridimensional.

La destilación se ha mantenido como la primera opción para los procesos de separación, esta se hace a través de las columnas de destilación, que tienen una alta demanda energética. Una forma de hacer eficiente a la columna es mejorando la eficiencia termo hidrodinámica del proceso, debido a esto es importante conocer el comportamiento que tiene el fluido a través de los platos perforados. Realizar simulaciones CFD de columnas de destilación de biocombustible es una opción viable en el diseño de sus platos perforados, para determinar una configuración geométrica que optimice la eficiencia termo hidrodinámica del proceso en la columna.



Capítulo 4. Desarrollo de la metodología

4.1 Estructura de la metodología.

Para cumplir con los objetivos planteados para la presente tesis, la estructura de la metodología propuesta se muestra esquemáticamente en la figura 4.1.



Figura 4.1. Estructura de la metodología de investigación.

4.2 Caracterización física y matemática del flujo.

Esta etapa consiste en presentar los principios físicos y matemáticos que caractericen el flujo en el interior de la columna de destilación y que a través del código numérico por método de elemento finito permita definir la velocidad, la transferencia de calor y el transporte de masa en el régimen laminar y en el régimen turbulento.



4.2.1 Ecuaciones para evaluar el flujo laminar

- **Ecuaciones de Navier-Stokes o ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad.**

Los modelos simulados numéricamente se resolverán en un dominio tridimensional definido por el volumen de tránsito del fluido a través de la tapa de burbuja mediante la aplicación de las ecuaciones de Navier-Stokes que modelan el flujo de fluidos viscosos incompresibles (Moya et al. 2020).

Se considera una región del espacio dimensional Ω , la cual está delimitada por una frontera $\partial\Omega$, dividida en dos partes, de donde $\partial\Omega_1$ representa la frontera tipo Dirichlet y $\partial\Omega_2$ representa la frontera tipo Newman. La frontera está definida por un vector normal unitario \vec{n} hacia fuera del dominio. Las ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad están dadas por:

$$-v\Delta\vec{u} + \vec{u} * \nabla\vec{u} + \nabla P = \vec{f} \text{ en } \Omega \quad (4.1)$$

$$\nabla * \vec{u} = 0 \text{ en } \Omega \quad (4.2)$$

$$\vec{u} = \vec{g}_1 \text{ sobre } \partial\Omega_1 \quad (4.3)$$

$$v \frac{\partial\vec{u}}{\partial\vec{n}} - \vec{n}P = \vec{g}_2 \text{ sobre } \partial\Omega_2 \quad (4.4)$$

Donde v es la viscosidad cinemática del fluido, \vec{u} es el vector velocidad, \vec{f} es el vector fuente, \vec{g}_1 es la condición de frontera tipo Dirichlet, \vec{g}_2 es la condición de frontera tipo Newman y \vec{x} es el vector de posición. $P = p/\rho$ donde p es la presión y ρ es la densidad. Cuando las ecuaciones de Navier-Stokes se acoplan con la ecuación de la energía se usa la aproximación de Boussinesq $\vec{f} = g\beta T\hat{j}$, donde g es la gravedad, β es el coeficiente de compresibilidad, T es la temperatura del fluido y \hat{j} es un vector unitario en la dirección de la fuerza de la gravedad (Ovando, 2006).

- **Ecuación de la energía**

La ecuación de la energía que modela la transferencia de calor en Ω , donde la frontera $\partial\Omega$ se divide en dos partes tal que $\partial\Omega_3$ representa la frontera tipo Dirichlet y $\partial\Omega_4$ representa la frontera tipo Newman, está dada por:

$$-\alpha\Delta T + \vec{u} * \nabla T = 0 \text{ en } \Omega \quad (4.5)$$

$$T = T_1 \text{ sobre } \partial\Omega_3 \quad (4.6)$$



$$\bar{\alpha} \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = Q \text{ sobre } \partial\Omega_4 \quad (4.7)$$

Donde T es la temperatura del fluido, \vec{u} es el vector velocidad T_1 es la condición de frontera tipo Dirichlet, Q es el flujo de calor (condición de frontera tipo Newman), \vec{x} es el vector de posición y $a = k/\rho c_p$ es la difusividad térmica, siendo k la conductividad térmica del fluido, ρ la densidad y c_p el calor específico a presión constante (Ovando, 2006).

- **Ecuación de transporte de masa**

La ecuación que modela el transporte de masa está dada por:

$$-D\Delta C + \vec{u} * \nabla C = 0 \text{ en } \Omega \quad (4.8)$$

$$C = C_1 \text{ sobre } \partial\Omega_3 \quad (4.9)$$

$$D \frac{\partial C}{\partial \vec{n}} = Q \text{ sobre } \partial\Omega_4 \quad (4.10)$$

Donde C es la concentración del fluido y D es la difusividad.

4.2.2 Ecuaciones para evaluar el flujo turbulento

- **Ecuaciones de Navier-Stokes o ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad.**

Las ecuaciones de conservación en estado estacionario para flujos turbulentos (Wilcox, 2006), están dadas por:

$$\frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \overline{\rho u_i' u_j'} \right] + F_i \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial(\rho C_p u_j T)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho C_p \overline{u_j' T'} \right] \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial(u_j C)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[D \frac{\partial C}{\partial x_j} - \overline{u_j' C'} \right] \quad (4.14)$$



- **Ecuación de la energía**

En las Ecuaciones (4.11)–(4.14), el tensor de tensión de Reynolds, el flujo de calor turbulento y el flujo másico turbulento (Wilcox, 2006), se pueden aproximar mediante:

$$\overline{\rho u_i' u_j'} = -\mu_t \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] + \frac{2}{3} \rho K \delta_{ij} \quad (4.15)$$

$$\overline{\rho u_i' T'} = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (4.16)$$

$$\overline{u_i' C'} = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad (4.17)$$

Donde Pr_t es el número turbulento de Prandtl y Sc_t es el número turbulento de Schmidt.

- **Ecuación de transporte de masa**

La energía cinética turbulenta K y la disipación de energía cinética turbulenta ϵ (Wilcox, 2006), se calculan mediante:

$$\frac{\partial(\rho u_i K)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_K} \right) \frac{\partial K}{\partial x_i} \right] + P_K - \rho \epsilon \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i \epsilon)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{K} P_K - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{K} \quad (4.19)$$

$$\mu_t = C_\mu \frac{\rho K^2}{\epsilon} \quad (4.20)$$

En las ecuaciones anteriores μ_t es la viscosidad turbulenta.



4.2.3 Geometría

La geometría en este trabajo se basa en las medidas y formas reales de las tapas de burbuja (figura 4.2) de una planta de bioetanol ubicada en las instalaciones del Instituto Tecnológico de Veracruz, la cual consiste en una geometría tridimensional implementada en el código numérico.



Figura 4.2. Tapa de burbuja de referencia.

La tapa de burbuja se ubica de manera centrada dentro de una columna de 0.1516 m de altura y 0.078 m de diámetro. En la tabla 4.1 se detallan las características dimensionales generales de la tapa de burbuja.

Tabla 4.1. Parámetros de la tapa de burbuja.

Parámetro	Valor (m)
Diámetro de la tapa	0.039
Altura de la tapa	0.028
Diámetro del tubo interno	0.015
Altura del tubo interno	0.018
Espesor de las paredes	0.004
Diámetro de la columna	0.078
Altura de la columna	0.1516

En la figura 4.3 se muestra la tapa de burbuja que se encuentra en el interior de la columna de destilación.

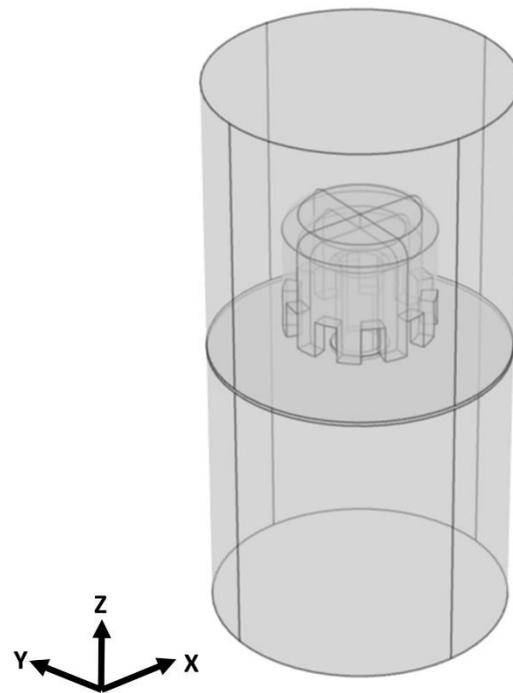


Figura 4.3. Tapa de burbuja en el interior de la columna.

4.3 Diseños del plato perforado.

A partir del modelo tridimensional base de la tapa de burbuja, se diseñaron dos modelos de tapas de burbuja. Estos dos modelos varían principalmente en la forma geométrica característica de sus ranuras y de las dimensiones de estas, tanto en su altura como en su anchura.

El primer diseño denominado “Modelo A”, es un modelo basado en la tapa de burbuja de la columna de destilación, como se puede ver en la figura 4.4, el cual está conformado por ranuras rectangulares.

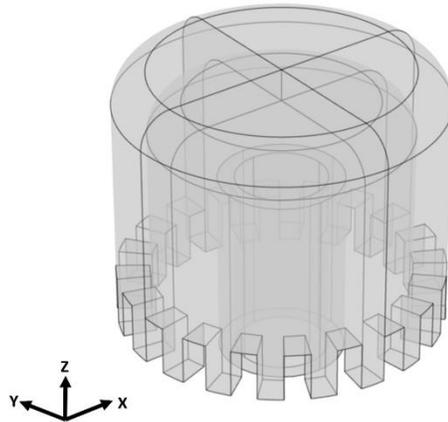


Figura 4.4. Tapa de burbuja con ranuras rectangulares (Modelo A).

El segundo diseño denominado “Modelo B”, es una tapa de burbuja similar al modelo A, con la diferencia de que las ranuras son triangulares como se muestra en la figura 4.5.

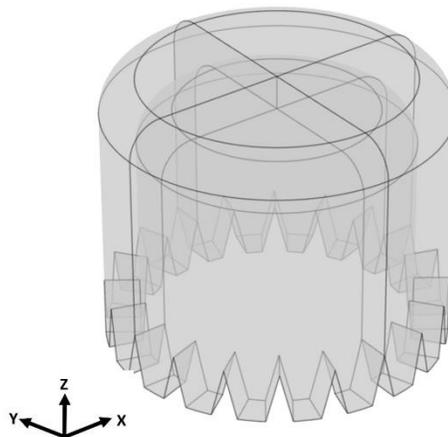


Figura 4.5. Tapa de burbuja con ranuras triangulares (Modelo B).

Teniendo ambos modelos, posteriormente se realizaron modelos similares, pero con diferentes configuraciones geométricas de las ranuras, en las dimensiones de las ranuras se consideran 5 parámetros geométricos del ancho “X” y para cada uno de ellos 5 parámetros geométricos de altura de “Y”, formando así 25 casos para cada modelo de tapa de burbuja (50 en total). La figura 4.6 muestran cuales son los parámetros geométricos de “X” y “Y” de las ranuras en cada modelo.

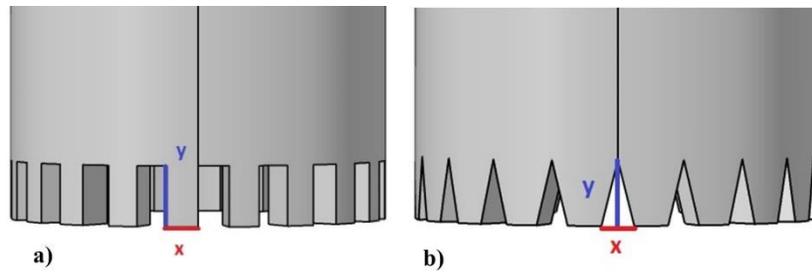


Figura 4.6. Parámetros de “X” y “Y” de las ranuras en a) Modelo A; b) Modelo B.

La tabla 4.2 muestra los 25 parámetros geométricos de “X” y “Y” de las ranuras que tendrá el modelo A y el modelo B.

Tabla 4.2. Parámetros geométricos de las ranuras.

Altura “Y” (mm)	Ancho “X” (mm)					
	1	2	3	4	6	
2	2.1	2.2	2.3	2.4	2.6	
4	4.1	4.2	4.3	4.4	4.6	
6	6.1	6.2	6.3	6.4	6.6	
8	8.1	8.2	8.3	8.4	8.6	
10	10.1	10.2	10.3	10.4	10.6	

4.4 Análisis de la mecánica de fluidos y la transferencia de calor.

En este paso de la metodología se realizó el análisis de la mecánica de fluidos y de la transferencia de calor de la mezcla etanol – agua, para los 25 casos del modelo A y del modelo B que se diseñaron en la sección 4.3. Las simulaciones en flujo laminar se realizaron en un equipo de cómputo con un procesador de 6 núcleos a velocidad de reloj de 2.6 GHz, con 8 GB de memoria RAM y una tarjeta gráfica de 4 GB, mientras que la simulaciones en flujo turbulento se realizaron en el clúster Agave.

4.4.1 Simulaciones del comportamiento hidrodinámico del fluido.

Para las simulaciones numéricas del comportamiento hidrodinámico del fluido se ocupó primeramente el modelo de flujo laminar y luego se simuló el flujo turbulento, específicamente se usaron las ecuaciones de Navier-Stokes y la ecuación de continuidad, las cuales se discretizaron



con el método de elemento, con la finalidad de obtener los vectores de velocidad, presión y líneas de corriente del fluido.

- **Condiciones de frontera**

Como condiciones de frontera de velocidad se impuso una velocidad de entrada de 1 m/s, por otro lado, se definió una salida abierta a la atmosfera ($P=0$) en la parte superior de la columna de destilación, además en el resto de las paredes se consideraron en condiciones de no deslizamiento (la velocidad es igual cero).

En la figura 4.7 se muestra la columna de destilación con la tapa de burbuja de ranura 10x6 mm rectangular en donde la parte inferior de la columna es la entrada y la parte superior es la salida.

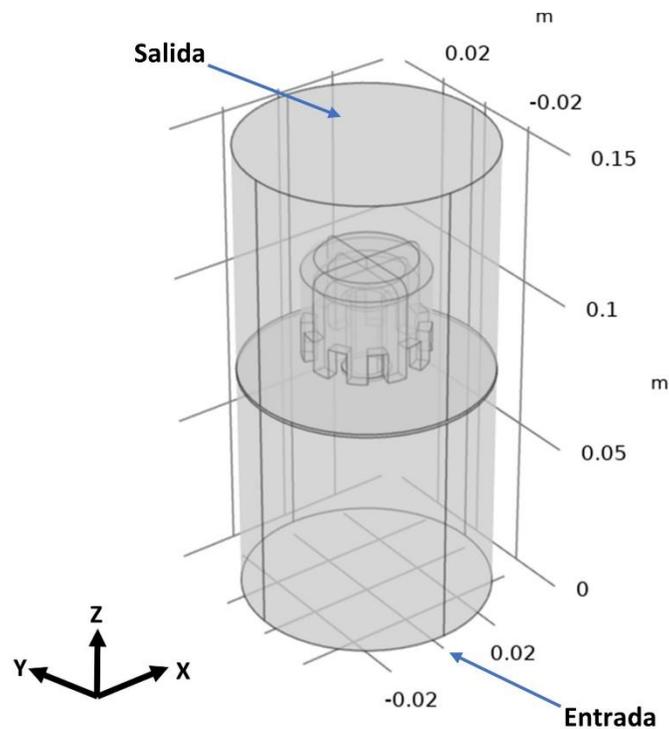


Figura 4.7. Entrada y salida de la columna de destilación.

4.4.2 Simulaciones del comportamiento térmico del fluido.

Para las simulaciones numéricas del comportamiento térmico del fluido se ocuparon los modelos de transporte de especies diluidas para analizar el flujo de humedad y el modelo de transferencia de calor en sólidos y fluidos, estas ecuaciones se discretizaron con el método de elemento finito, con la finalidad de obtener perfiles de temperatura y perfiles de humedad en la columna de destilación y tapa de burbuja.



- **Condiciones de frontera**

Para el flujo de humedad se consideraron tres condiciones de frontera, la primera es en la parte inferior de la columna en la entrada del fluido con un valor de 0.8 (figura 4.8), la segunda en la superficie interior de la tapa de burbuja con un valor de 0.1 (figura 4.9) y por último un valor de 0.6 en la superficie interior del tubo de la tapa de burbuja (figura 4.10).

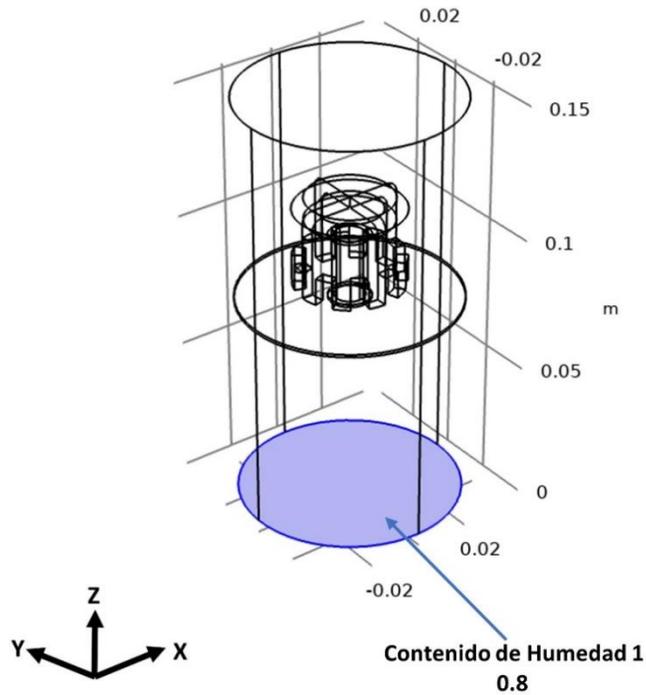


Figura 4.8. Contenido de humedad 1.

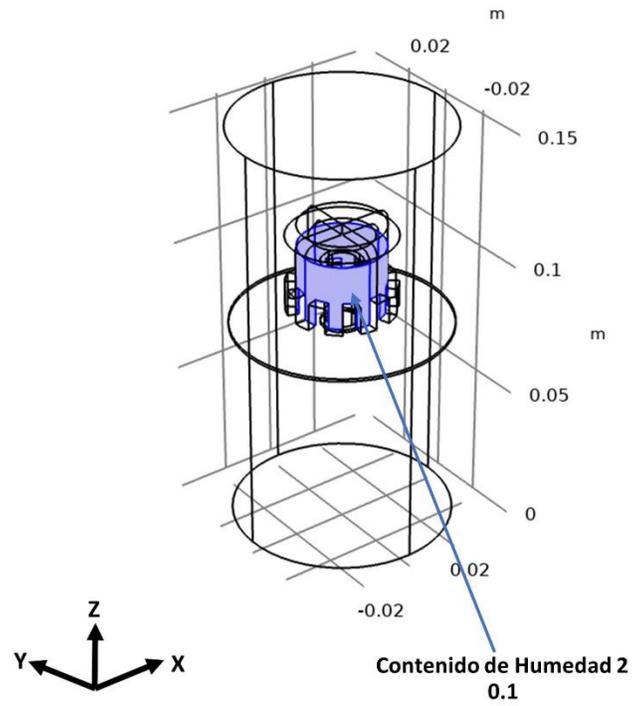


Figura 4.9. Contenido de humedad 2.

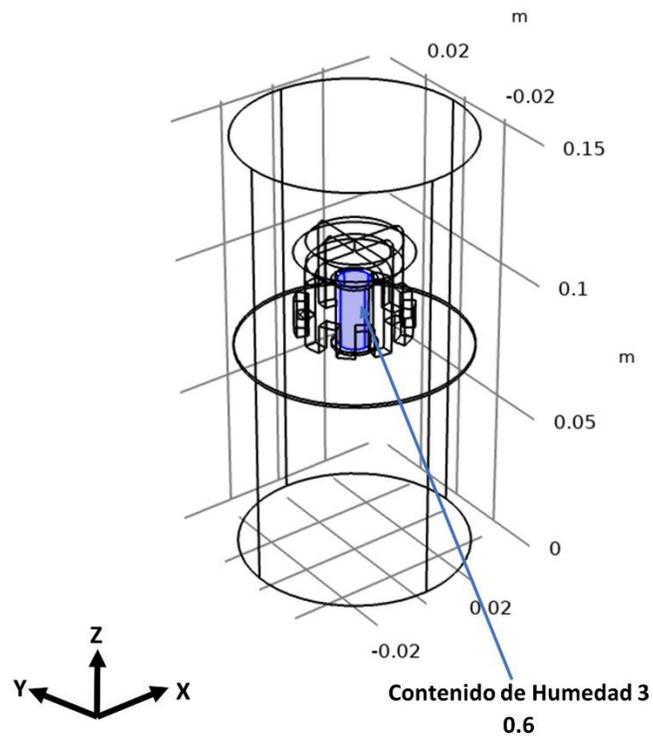


Figura 4.10. Contenido de humedad 3.



Como condiciones de frontera de temperatura se estableció que el fluido entra a una temperatura de 100°C , por otra parte, en la sección inferior de la columna de destilación se consideró una pérdida de calor de 10 W/m^2 , en las salidas se consideraron gradientes de temperatura iguales a cero, el resto de las paredes se consideran adiabáticas. En la figura 4.11 se muestra la columna de destilación con la tapa de burbuja de ranura $10\times 6\text{ mm}$ rectangular en donde se muestran las condiciones de temperatura antes mencionadas.

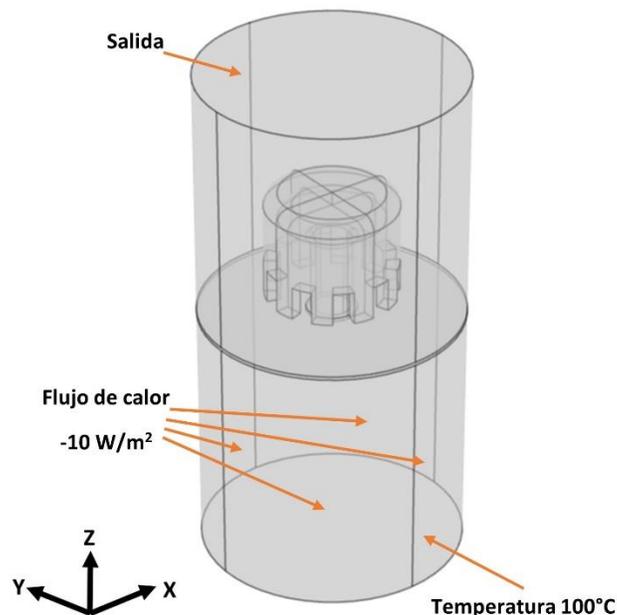


Figura 4.11. Condiciones de temperatura.

4.5 Evaluación de la configuración geométrica óptima del plato perforado.

En esta etapa del estudio se organizaron y analizaron los resultados obtenidos a partir de las simulaciones donde se obtuvieron perfiles de velocidad, perfiles de temperatura y perfiles de humedad, con la finalidad de determinar cuál de las 25 configuraciones geométricas del modelo A y modelo B, son las más efectivas en distintos parámetros de operación de destilación de la columna y así poder optimizar el proceso de la obtención de bioetanol en la planta piloto de bioetanol de segunda generación del Instituto Tecnológico de Veracruz.



Capítulo 5. Resultados

Mediante la dinámica de fluidos computacional se simuló el comportamiento hidrodinámico y térmico del flujo en régimen laminar y turbulento de dos modelos de tapas de burbuja, un modelo A con ranuras rectangulares y un modelo B con ranuras triangulares, teniendo cada modelo 25 configuraciones distintas, haciendo un total de 50 configuraciones de tapas de burbuja.

5.1 Simulación del comportamiento hidrodinámico y térmico del fluido en régimen laminar

Con las simulaciones realizadas se obtuvieron campos de velocidad, temperatura y de humedad. Se presenta de manera detallada el análisis realizado a una configuración geométrica, concretamente del modelo A en su configuración de 6x3mm. En la figura 5.1, se evalúa a la configuración de la tapa de burbuja con ranuras rectangulares de 6x3 mm en flujo laminar y se muestra un ejemplo del campo de velocidad donde se destacan los vectores de velocidad y las líneas de corriente del flujo de vapor del etanol. En este caso el flujo logra alcanzar un máximo de 25 m/s.

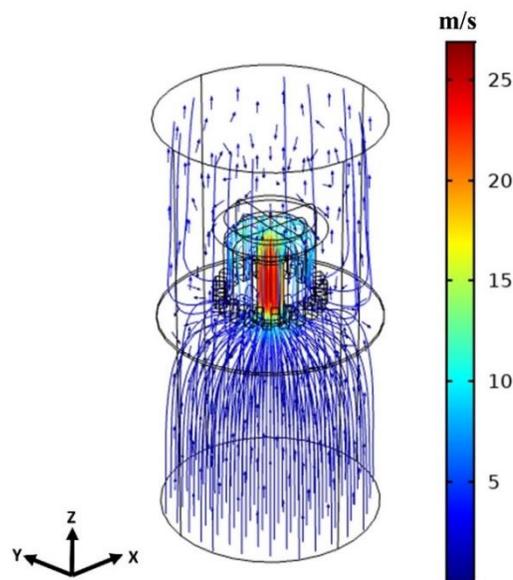


Figura 5.1. Vectores de velocidad y líneas de corriente en el interior de la tapa de burbuja en flujo laminar.

En la figura 5.2 se muestra el campo de temperatura en el interior de la tapa de burbuja con ranuras rectangulares de 6x3 mm en flujo laminar, se verifica que la temperatura de la parte inferior de la columna es de 100°C como se estableció, mientras que avanza el fluido por la columna de



destilación se observa como se va reduciendo la temperatura, hasta llegar a la parte superior de la columna en donde la temperatura es de 91.5°C .

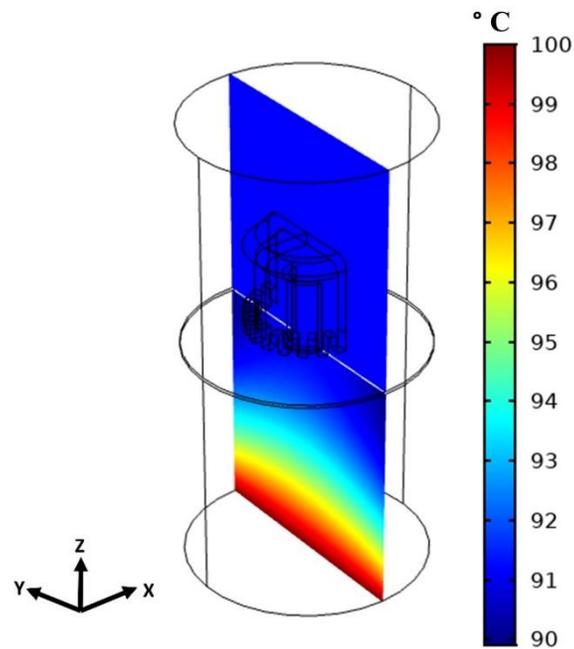


Figura 5.2. Campo de temperatura en el interior de la tapa de burbuja en flujo laminar.

En la figura 5.3 se observa el campo de humedad en el interior de la tapa de burbuja con ranuras rectangulares de 6×3 mm en flujo laminar, el comportamiento es el esperado, antes de que el flujo pase por la tapa de burbuja se tiene un valor de 0.8 en la parte inferior y después de que el flujo pasa por la tapa ese valor va cambiando debido a la transferencia de masa y energía.

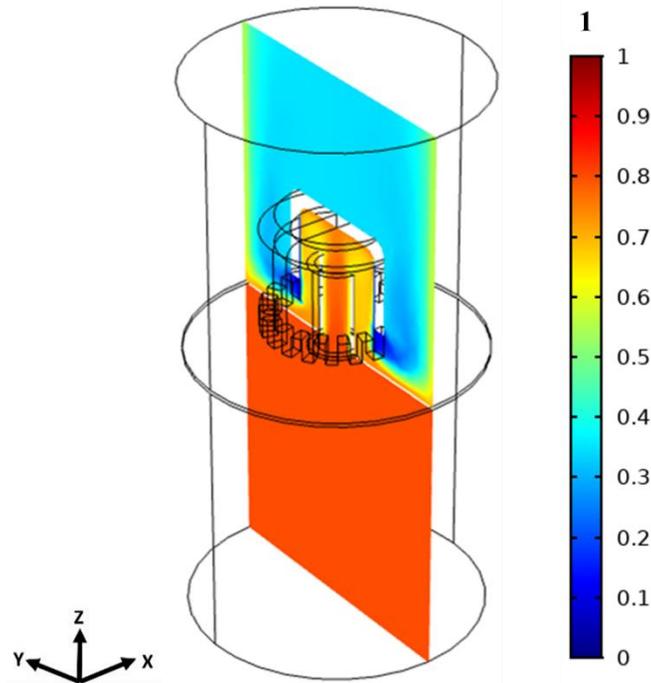


Figura 5.3. Campo de humedad en el interior de la tapa de burbuja en flujo laminar.

En el proceso de obtención de etanol, específicamente en la destilación, se requiere de que el etanol con cierto porcentaje de agua, entre en la columna de destilación para poder realizar la separación del agua del etanol con el fin de aumentar la pureza de este y pueda ser usado en distintas aplicaciones asegurando un alto grado de pureza, en este trabajo además de evaluar modelos de velocidad y temperatura se evalúa el modelo de la humedad, siendo este un parámetro de importancia en el proceso de transferencia masa – energía, ya que se emplea para indicar que tanto porcentaje de humedad hay en el bioetanol. A través de las simulaciones procesadas se pudo observar el comportamiento de este parámetro que tuvieron cada una de las configuraciones geométricas.

En la figura. 5.4 (a)-(b) se observan las gráficas del comportamiento de la humedad promedio en flujo laminar en la superficie por encima de la tapa de burbuja, de los 25 casos de cada modelo.

Para el modelo A (ver figura. 5.4 (a)), se logra apreciar una tendencia para cada configuración de altura (y). Con un ancho (x) de 1 mm en la ranura, la humedad es alta a comparación de las demás dimensiones de ancho. Con el ancho de 2 mm, la humedad tiene los



valores más bajos en cada una de las dimensiones de altura, y para las siguientes dimensiones de ancho de 3, 4 y 6 mm, los valores de la humedad comienzan a aumentar y a converger independientemente de la altura.

Para el modelo B (ver figura. 5.4 (b)), el comportamiento es similar, con las ranuras con dimensiones de 1 y 2 mm de ancho los valores de humedad son altos y luego se reducen, con la dimensión de 3 mm de ancho se logran los valores más bajos de humedad para cada altura de ranura, a excepción de la ranura con una altura de 4 mm donde la humedad aumenta, para las siguientes dimensiones de 4 mm de ancho, los valores de la humedad comienzan a aumentar y para los 6 mm de ancho los valores de húmeda disminuyen y convergen independientemente de la altura.

En la figura. 5.5 (a)-(b) se muestra el comportamiento de la humedad promedio en flujo laminar en el volumen de toda la columna de destilación para los 25 casos de cada modelo, donde de igual forma se mantiene la tendencia que se refleja en la superficie por encima de la tapa de burbuja.

En la figura. 5.5 (a) se observa que la humedad promedio en el modelo A (ranuras rectangulares) es baja en las geometrías con ranuras de un ancho (x) de 2 mm independientemente de la altura (y) de la ranura, mientras que en la Fig. 5.5 (b) se observa que en el modelo B (ranuras triangulares), la humedad promedio es baja en las geometrías con ranuras de un ancho de 3 mm, independientemente de la altura de la ranura. No obstante, la humedad promedio de las geometrías con ranuras rectangulares es menor, comparada con las geometrías con ranuras triangulares.

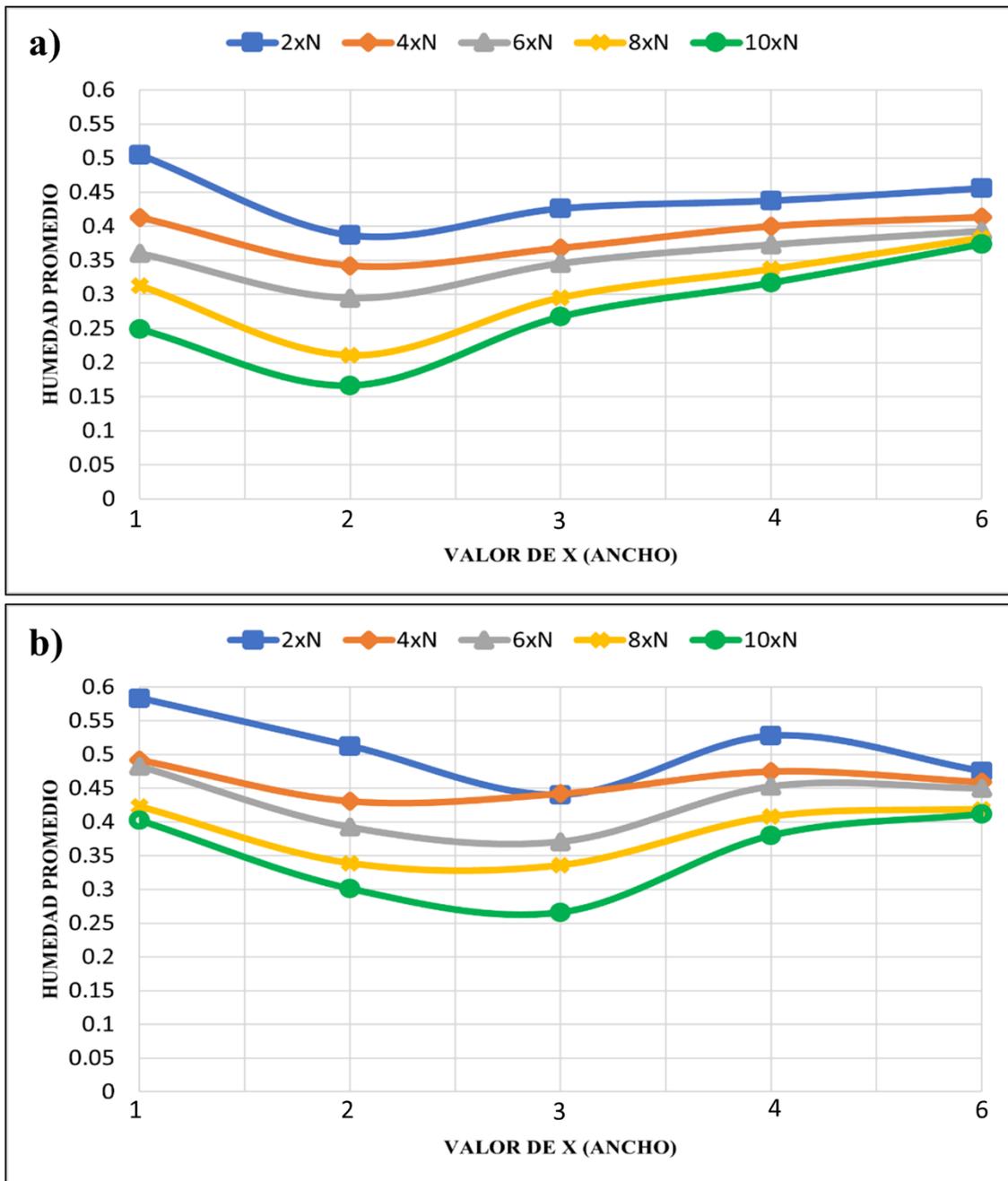


Figura 5.4. Comportamiento de la humedad promedio en flujo laminar en la superficie por encima de la tapa de burbuja en todas las configuraciones geométricas del; (a) Modelo A; (b) Modelo B.

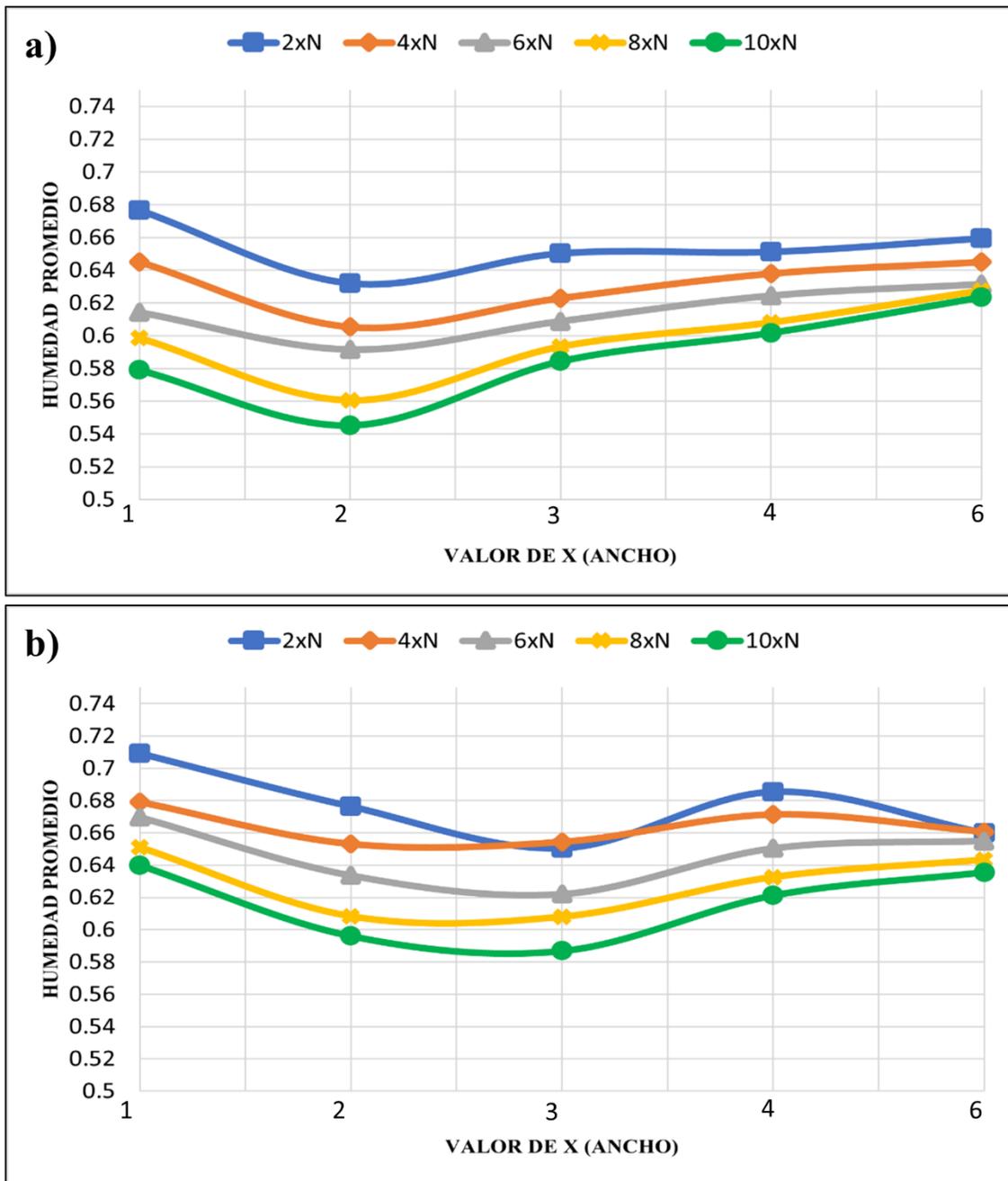


Figura 5.5. Comportamiento de la humedad promedio en flujo laminar en el volumen total de la columna de destilación en todas las configuraciones geométricas del; (a) Modelo A; (b) Modelo B.



5.2 Simulación del comportamiento hidrodinámico y térmico del fluido en régimen turbulento

Se simularon los 50 casos en el régimen turbulento y de igual forma se obtuvieron campos de velocidad, temperatura y de humedad. En la figura 5.6 se evalúa a la configuración de la tapa de burbuja con ranuras rectangulares de 6x3 mm en flujo turbulento y se muestra un ejemplo del campo de velocidad donde se destacan los vectores de velocidad y las líneas de corriente del flujo de vapor del etanol, en este caso la velocidad máxima que el flujo llega a tener es de 50 m/s.

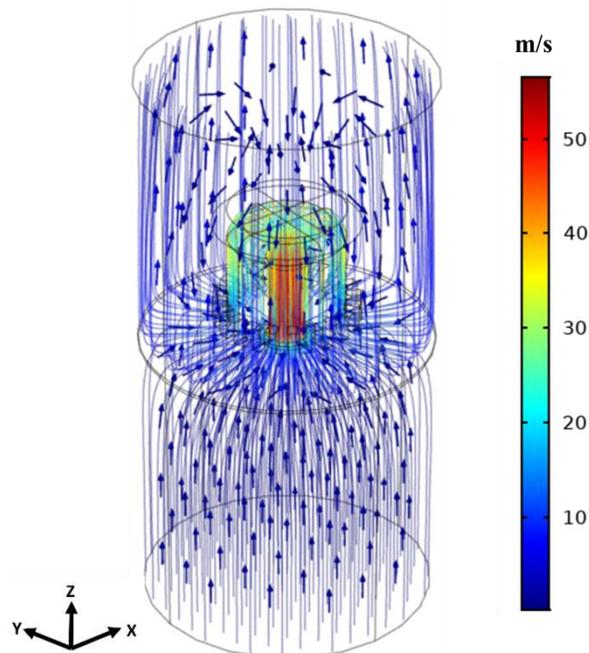


Figura 5.6. Vectores de velocidad y líneas de corriente en flujo turbulento en la tapa de burbuja en vista isométrica.

En la figura 5.7 se muestra el campo de temperatura en el interior de la tapa de burbuja con ranuras rectangulares de 6x3 mm en flujo turbulento, se verifica que la temperatura de la parte inferior de la columna es de 100°C como se estableció, mientras que avanza el fluido por la columna de destilación se observa como se va reduciendo la temperatura, hasta llegar a la parte superior de la columna en donde la temperatura es de 91.5°C.

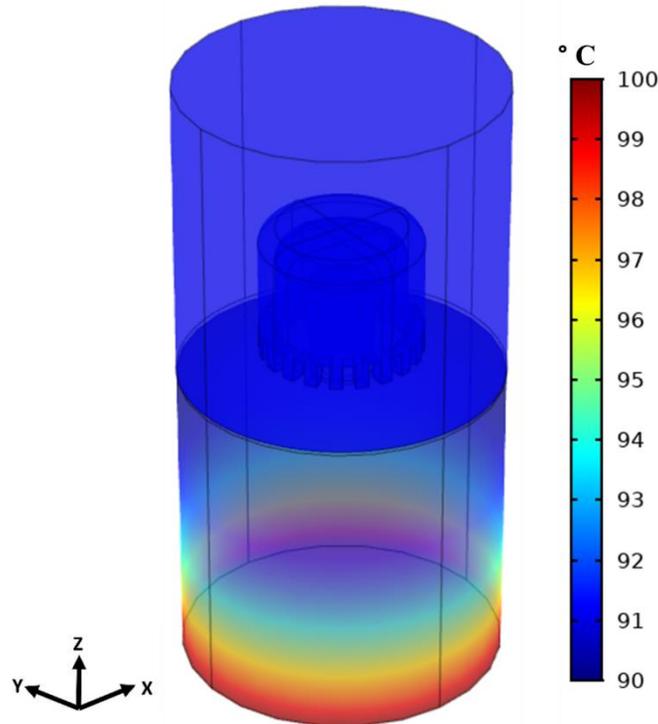


Figura 5.7. Campo de temperatura en el interior de la tapa de burbuja en flujo turbulento.

En la figura 5.8 se observa el campo de humedad en el interior de la tapa de burbuja con ranuras rectangulares de 6x3 mm en flujo turbulento, el comportamiento es el siguiente, antes de que el flujo pase por la tapa de burbuja se tiene un valor de 0.8 en la parte inferior y después de que el flujo pasa por la tapa ese valor va cambiando debido a la transferencia de masa y energía. No obstante, a comparación de la evaluación en flujo laminar que el comportamiento de la humedad se puede apreciar a lo largo de toda la columna evaluada, en el caso del comportamiento de la humedad en flujo turbulento se aprecia de manera más concentrada en la entrada, en el interior y en la salida de la tapa de burbuja, siendo el comportamiento el esperado debido a la función que desarrolla la tapa de burbuja.

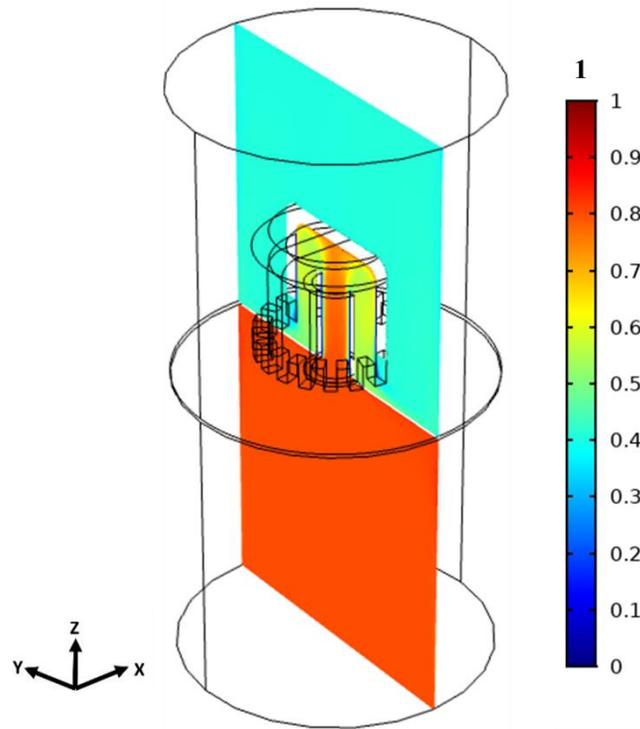


Figura 5.8. Campo de humedad en el interior de la tapa de burbuja en flujo turbulento.

En la figura 5.9 se aprecia de manera más clara el comportamiento que tiene la humedad en el interior de la tapa de burbuja en el eje xy.

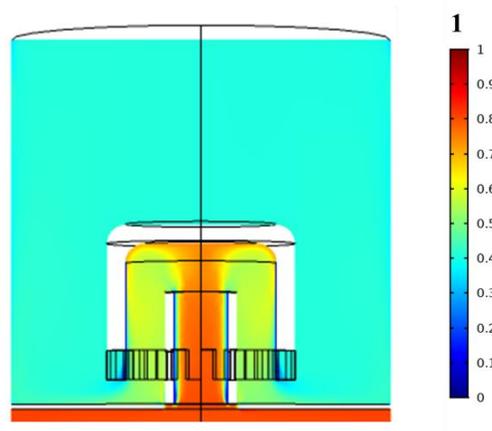


Figura 5.9. Perfil de humedad en flujo turbulento en la tapa de burbuja en el eje xy.



En la figura. 5.10 (a)-(b) se observan las gráficas del comportamiento de la humedad promedio en flujo turbulento en la superficie por encima de la tapa de burbuja, de los 25 casos de cada modelo.

Para el modelo A (ver figura. 5.10 (a)), se tiene una tendencia para cada configuración de altura (y) que cambia al llegar a el valor de ancho (x) de 3 mm . Con un ancho (x) de 1 mm en la ranura, la humedad es la más baja en cada configuración de altura a comparación de las demás dimensiones de ancho, siendo la configuración 10x1 mm la que menor humedad promedio por encima de la tapa de burbuja con un valor de 0.37077. Con el ancho de 2 mm, la humedad comienza a aumentar, en cada una de las dimensiones de altura, sin embargo, con un ancho de 3 mm el comportamiento varia en cada altura llegando incluso a ser casi similares como las alturas de 4 mm y 10 mm así como 6 mm y 8 mm, y para las siguientes dimensiones de ancho de 4 y 6 mm, los valores de la humedad comienzan a tener una tendencia inversa, es decir mientras la configuración de 10 mm de alto era la que tenía menor humedad promedio por encima de la tapa de burbuja ahora empieza a ser la que mayor humedad tiene con un valor de 0.43130 y de ahí le siguen las ranuras con altura de 8 mm, 6 mm, 4 mm y 2 mm.

Para el modelo B (ver figura. 5.10 (b)), el comportamiento es similar, con la ranura con dimensión de 1 mm de ancho los valores de humedad son los más bajos siendo de igual forma la configuración de 10x1 mm la más baja con un valor de humedad promedio por encima de la tapa de burbuja de 0.38025 y luego los valores de humedad promedio comienzan a aumentar en las ranuras con un ancho de 2 mm, 3 mm y hasta 4 mm, no obstante, esta tendencia desaparece con el ancho de 6 mm, donde los valores llegan a ser casi lo mismo para las configuraciones de 10 mm, 8 mm y 4 mm de alto, de igual forma sucede una convergencia de humedad como los valores de 6 mm y 2 mm de ancho, para este modelo de geometrías la configuración geométrica que tiene el mayor valor de humedad es la de 8x6 mm con un valor de humedad promedio de 0.42510 por encima de la tapa de burbuja.

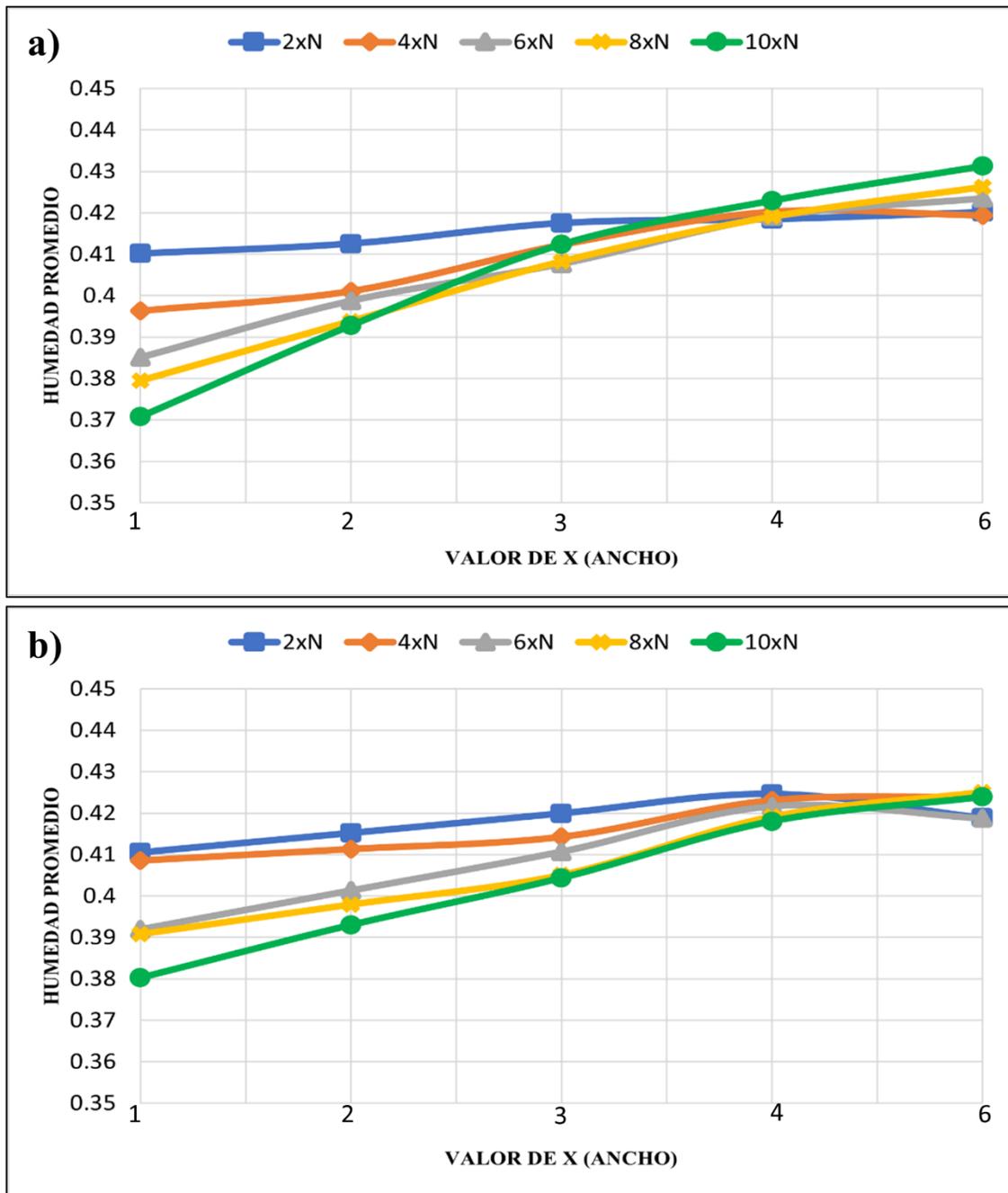


Figura 5.10. Comportamiento de la humedad promedio en flujo turbulento en la superficie por encima de la tapa de burbuja en todas las configuraciones geométricas del; (a) Modelo A; (b) Modelo B.

En la figura. 5.11 (a)-(b) se muestra el comportamiento de la humedad promedio en flujo turbulento en el volumen de toda la columna de destilación para los 25 casos de cada modelo, donde de igual forma se mantiene la tendencia que se refleja en la superficie por encima de la tapa de burbuja.



En la figura. 5.11 (a) se observa que la humedad promedio en el modelo A (ranuras rectangulares) es baja en las geometrías con ranuras de un ancho (x) de 1 mm independientemente de la altura (y) de la ranura, de la misma forma la configuración de 10x1 mm es la que tiene menor humedad promedio en el volumen total de la columna de destilación con un valor de 0.62712, con un ancho de 2 mm, la humedad aumenta para cada configuración de altura, con el ancho de 3 mm de la ranura el comportamiento cambia, con las alturas de 4 mm y 10 mm tienden a ser similares, lo mismo sucede con las alturas de 6 mm y 8 mm, para la altura de 2 mm el valor de la humedad difiere significativamente comparado con las alturas anteriores, con el valor de ranura de 4 mm de ancho, todas las dimensiones de altura oscilan en un valor de 0.62000 de humedad promedio en toda la columna variando muy poco entre cada una de ellas, por último, con un ancho de 6 mm el comportamiento es inverso, de igual forma la configuración con mayor humedad promedio en el volumen total de toda la columna es la de 10x6 mm con un valor de 0.62712, siguiendo la configuración de 8x6 mm, 6x6 mm, 2x6 mm y 4x6 mm.

En la Fig. 5.11 (b) se observa que en el modelo B (ranuras triangulares), la humedad promedio en el volumen total de la columna de destilación es baja en las geometrías con ranuras de un ancho de 1 mm, independientemente de la altura de la ranura, siendo la configuración de 10x1 mm la que tiene la menor humedad promedio en el volumen total de la columna de destilación con un valor de 0.60405, el valor de la humedad aumenta gradualmente en los siguientes valores de ancho de 2 mm, 3 mm y 4 mm, por último en el valor de 6 mm de ancho todas las configuraciones de alto oscilan dentro de 0.62000, siendo la configuración geométrica de 8x6 mm la de mayor humedad promedio en el volumen total de la columna de destilación con un valor de 0.62479.

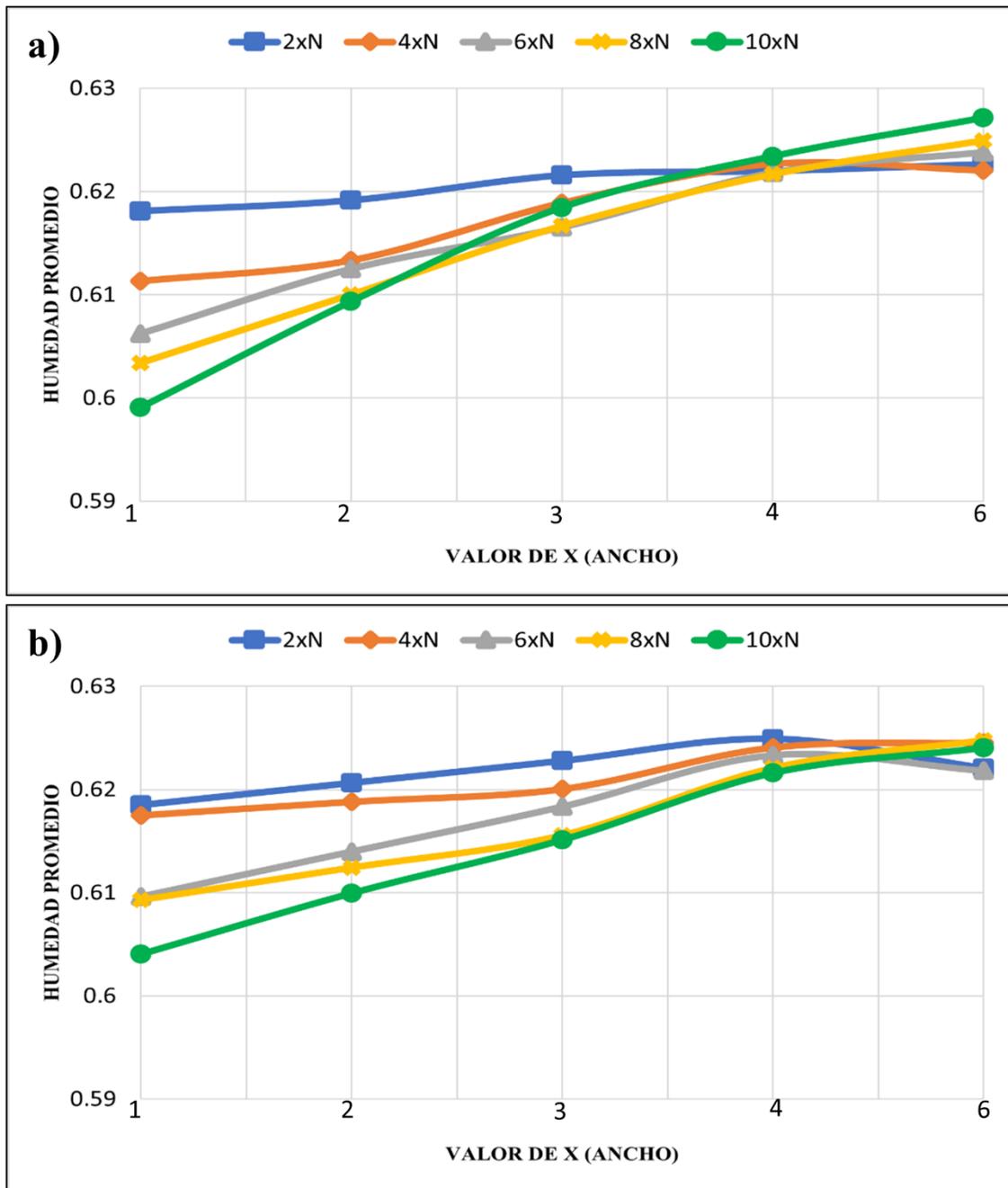


Figura 5.11. Comportamiento de la humedad promedio en flujo turbulento en el volumen total de la columna de destilación en todas las configuraciones geométricas del; (a) Modelo A; (b) Modelo B.



5.3 Reducción de la humedad

Analizado el comportamiento de la humedad se escogieron las tres configuraciones geométricas de la tapa de burbuja de cada modelo que menor humedad lograron obtener, siendo las configuraciones 10x1 mm, 10x2 mm y 10x3 mm (en el caso de la configuración de 10x3 mm del modelo A no es la que menor humedad consigue, sin embargo, se seleccionó debido a que a partir de ella la tendencia de la humedad empieza a variar). Posteriormente, las condiciones de los modelos seleccionados se consideraron como condiciones de frontera para la segunda columna de destilación del proceso de obtención de bioetanol (Gómez et al., 2019), estableciéndose que el etanol entra en la columna con una humedad del 0.3 (70% de pureza) y en la salida de la columna se establecieron gradientes de humedad iguales a cero. En la figura 5.12 se muestra la pureza que el bioetanol logra obtener en cada configuración geométrica considerada como segunda columna, siendo la configuración del modelo A de 10x1 mm la que mayor porcentaje de pureza de bioetanol logró, alcanzando un 94% de pureza en el bioetanol.

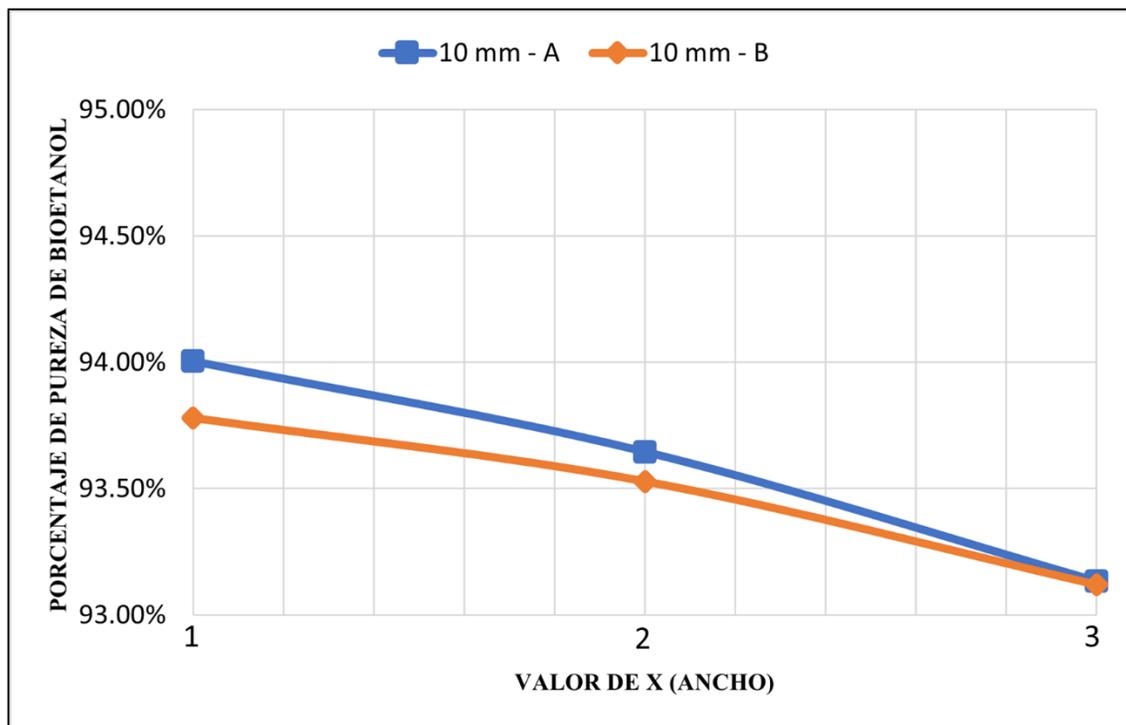


Figura 5.12. Pureza alcanzada en las mejores configuraciones geométricas de cada modelo de tapa de burbuja.



Conclusiones

A partir de las diferentes simulaciones realizadas de las configuraciones geométricas del modelo A y modelo B de la tapa de burbuja se tienen las siguientes conclusiones:

- Los resultados de las simulaciones muestran que el valor de la humedad es inversamente proporcional a la altura, la humedad se reduce cuando la altura de las ranuras de la tapa de burbujas aumenta, independientemente del modelo de ranura.
- Con base a las simulaciones realizadas en flujo turbulento, la configuración geométrica 10x1 mm del modelo A es la mejor para la transferencia de masa - energía, obteniendo un valor de 0.37077 de humedad en la parte superior de la tapa de burbuja.
- Con base a las simulaciones realizadas en flujo turbulento, la configuración geométrica 10x1 mm del modelo B es la mejor para la generación en la transferencia de masa - energía, obteniendo un valor de 0.38025 de humedad en la parte superior de la tapa de burbuja.
- Se consideraron nuevas condiciones de frontera para simular una segunda columna en el proceso de destilación de bioetanol, donde la configuración geométrica de 10x1 mm del modelo A (tapa de burbuja con ranuras rectangulares) es la que menor humedad obtuvo, logrando alcanzar un valor del 94% de pureza en el bioetanol.
- Las tapas de burbuja con muescas rectangulares reducen en mayor medida la humedad en comparación con las tapas de burbuja con muescas triangulares, lo que las hace más adecuadas para el proceso de destilación.
- Realizar simulaciones CFD del comportamiento de variables como el flujo, temperatura y humedad en distintos modelos y diseños de tapas de burbuja es importante para seleccionar la configuración que reduzca el valor de la humedad en el flujo de bioetanol y por ende maximice el proceso de destilación produciendo así bioetanol de mayor pureza.



Trabajos futuros

Con base a los resultados obtenidos en este trabajo de investigación y con la finalidad de seguir evaluando el comportamiento del flujo que pasa a través de las tapas de burbuja en la columna de destilación a continuación, se presentan algunos productos futuros:

- Efectuar simulaciones del comportamiento del flujo de bioetanol de los distintos platos de la columna de destilación.
- Realizar simulaciones numéricas de una nueva geometría de la tapa de burbuja considerando ranuras rectangulares.
- Evaluar la eficiencia de las tapas de burbuja o de los platos perforados de la columna de destilación.



Referencias bibliográficas

- Abbasnia, S., Nasri, Z., y Najafi, M. (2019). Comparison of the mass transfer and efficiency of Nye tray and sieve tray by computational fluid dynamics. *Separation and Purification Technology*, 215, 276–286. doi:10.1016/j.seppur.2019.01.010
- Carrasco, M., y Guevara, E. (2001). Efectos ambientales del uso del Metil Terc Butil Eter (MTBE) como oxigenante en la formulación de gasolinas. *Revista Ingeniería*, 8(1), 1-11.
- Cengel, Y. y Boles, M. A. (2012). *Termodinámica*. McGraw-Hill
- Chapra, S. C., Canale, R. P., Ruiz, R. S. G., Mercado, V. H. I., Díaz, E. M., y Benites, G. E. (2011). *Métodos numéricos para ingenieros (Vol. 5)*. New York, NY, USA: McGraw-Hill.
- Cortés, K., Suarez, H. y Pardo, S. (2009). Biocombustibles y autosuficiencia energética. *Dyna*, 76(158),101-110. [fecha de Consulta 6 de diciembre de 2021]. ISSN: 0012-7353. Disponible en: <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=49612069011>
- Cortés, S. y Arango, A. (2017). Energías renovables en Colombia: una aproximación desde la economía. *Revista Ciencias Estratégicas*, 25(38),375-390. [fecha de Consulta 5 de diciembre de 2021]. ISSN: 1794-8347. Disponible en: <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=151354939007>
- Delgado, Y., Rojas-Vargas, A., Nieves, M. y Hernández, J. (2012). Diseño y evaluación hidrodinámica de una minicolumna empacada. 32. 248-256. 10.1590/2224-6185.2012.3.%25x.
- Fernández, A. y Casan, P. (2015). Aplicaciones de la dinámica de fluidos computacional a la neumología. *Archivos de Bronconeumología*, 51(6), 293–298. doi:10.1016/j.arbres.2014.09.005
- Fernández Cueto, M.J. (2010). Análisis por MEF del comportamiento mecánico de grietas internas en la región metal base – zac – metal depositado de soldadura SAW en tubo API 5L X52. [Tesis de doctorado]. Instituto Politécnico Nacional.



- Ferziger, J. H. y Perić, M. (2002). *Computational Methods for Fluid Dynamics* (3rd Edition) Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Gómez Aguilar, J., Martínez Castellanos, G., Santiago Cruz, S., y Aguilar Uscanga, M. (2019). Proceso de producción de bioetanol de segunda generación (2G) en planta piloto, una oportunidad para mitigar la contaminación ambiental en México. *Revista Ingeniantes*, 2(3), 22-28.
- Guarnizo, A., Martínez, P. y Valencia, H. (2009). Pretratamientos de la celulosa y biomasa para la sacarificación. *Scientia Et Technica*, 2(42). <https://doi.org/10.22517/23447214.2655>
- Hernández Rodríguez M.A., y Hernández Zárata J.A., (2008). Verdades y mitos de los biocombustibles. *Elementos: Ciencia y Cultura*, 15(71), 15-18.
- Iñesta Burgos, J. y García Fernández, P. (2002). El buen uso de la energía. *Consejería de Economía e Innovación Tecnológica Dirección General de Industria, Energía y Minas*.
- Kreith, F., Manglik, R. y Bohn, M. (2012) *Principios de transferencia de calor*. 7ma edición. Cengage Learning.
- Krishna, R. y Van Baten, J. M. (2003). Modelling Sieve Tray Hydraulics Using Computational Fluid Dynamics. *Chemical Engineering Research and Design*, 81(1), 27–38. doi:10.1205/026387603321158168
- Lavasani, M., Rahimi, R. y Zivdar, M. (2018a). Experimental and CFD investigation for predicting weeping from sieve trays of Divided Wall colum.
- Lavasani, M. S., Rahimi, R., y Zivdar, M. (2018b). Hydrodynamic study of different configurations of sieve trays for a dividing wall column by using experimental and CFD methods. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 129, 162–170. doi:10.1016/j.cep.2018.05.008
- Lázaro Naranjo, C. (1999). *Aplicaciones del método de elementos finitos a problemas de termofluidos*. [Tesis de maestría]. Universidad Autónoma de Nuevo León.



- Li, Q., Wang, T., Dai, C., y Lei, Z. (2016). Hydrodynamics of novel structured packings: An experimental and multi-scale CFD study. *Chemical Engineering Science*, 143, 23–35. doi:10.1016/j.ces.2015.12.014
- Linares, C. y Díaz J. (2008). ¿Qué son las PM_{2,5} y cómo afectan a nuestra salud? *El Ecologista* No. 58.
- Marcilla, A. (2000). *Introducción a Las Operaciones de Separación*. Universidad de Alicante.
- Mataix, C. (1986). *Mecánica de Fluidos y Máquinas Hidráulicas*. 2da. Ediciones del Castillo S, A.
- Monroy, A., Narváez, R., Vera, B. y Bautista, L. (2017) Generación de bioetanol como combustible alternativo a partir de compuestos lignocelulósicos a nivel laboratorio. *Revista de Energía Química y Física*, 4 (13), 49-57.
- Morales, D., Alvarado, E. y González, L. (2021). Disposición al ahorro de energía eléctrica en los hogares de México. *Estudios Demográficos y Urbanos*, 36(2),533-561. [fecha de Consulta 4 de diciembre de 2021]. ISSN: 0186-7210. Disponible en: <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=31267410005>
- Moya Montiel, J.A. (2021). Estudio de la transferencia de masa y energía en columnas de purificación de una planta piloto de biocombustible. [Tesis de maestría]. Instituto Tecnológico de Veracruz.
- Moya Montiel, J.A, Ovando Chacón, G., Gómez Rodríguez, J., Rodríguez León, A. y Ovando Chacón, S. (2020). Simulación CFD de la hidrodinámica del vapor de etanol en una tapa de burbuja. *Memorias del XXVI congreso internacional anual de la SOMIM*.
- Noriler, D., Barros, A., Maciel, M., y Meier, H.F. (2010). Simultaneous Momentum, Mass, and Energy Transfer Analysis of a Distillation Sieve Tray Using CFD Techniques: Prediction of Efficiencies. *Industrial & Engineering Chemistry Research - IND ENG CHEM RES*. 49. 6599-6611. 10.1021/ie9013925.
- Noriler, D., Meier, H. F., Barros, A. A. C., y Maciel, M. R. W. (2009). Prediction of Efficiencies Through Simultaneous Momentum, Mass and Energy Transfer Analyses in a Distillation Sieve Tray by CFD Techniques. *10th International Symposium on*



Process Systems Engineering: Part A, 1167–1172. doi:10.1016/s1570-7946(09)70415-8

Noriler, D., Meier, H. F., Barros, A. A. C., y Wolf Maciel, M. R. (2008). Thermal fluid dynamics analysis of gas–liquid flow on a distillation sieve tray. *Chemical Engineering Journal*, 136(2-3), 133–143. doi:10.1016/j.cej.2007.03.023

Ovando Chacón, G.E. (2006). Modelado y simulación de dispositivos de transformación de energía. [Tesis de doctorado]. Universidad Nacional Autónoma de México.

Parizi, M., Rahimi, R., Baluchestan, S. e Iran, I. (2015). Hydrodynamics of Sieve Tray Distillation Column Using CFD Simulation. *Chemical and Petroleum Engineering*. 49. 119-129.

Rahimi, R., Mazarei Sotoodeh, M., y Bahramifar, E. (2012). The effect of tray geometry on the sieve tray efficiency. *Chemical Engineering Science*, 76, 90–98. doi:10.1016/j.ces.2012.01.006

Rahimi, R., Ostadzehi, M., Zarei, T. y Zivdar, M. (2013). CFD Simulation of Concap Tray Hydrodynamics. *Journal of Chemical and Petroleum Engineering*, University of Tehran. 47. 10.22059/JCHPE.2013.2977.

Ramírez Reyes, E. (2014). Estudio de una torre de separación para mejorar su desempeño. [Tesis de licenciatura]. Universidad Nacional Autónoma de México.

Rex, A. y Wolfson, R. (2011). *Fundamentos de física*. Pearson Educación.

Rodríguez-Ángeles, M. A., Gómez-Castro, F. I., Segovia-Hernández, J. G., y Uribe-Ramírez, A. R. (2015). Mechanical design and hydrodynamic analysis of sieve trays in a dividing wall column for a hydrocarbon mixture. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 97, 55–65. doi:10.1016/j.cep.2015.09.002

Salinas, E. y Gasca, V. (2009). Los biocombustibles. *El Cotidiano*, (157),75-82. [fecha de Consulta 1 de diciembre de 2021]. ISSN: 0186-1840. Disponible en: <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=32512739009>



- Seader, J. D. (2000). Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química. Editorial Reverté
- SENER. (2021a, junio 30). Programa de desarrollo del sistema eléctrico nacional. Secretaría de Energía. Recuperado 2 de noviembre de 2021, de <https://www.gob.mx/sener/articulos/programa-para-el-desarrollo-del-sistema-electrico-nacional>.
- SENER. (2021b, 25 febrero). Balance Nacional de Energía 2019. Secretaría de Energía. Recuperado 25 de octubre de 2021, de <https://www.gob.mx/sener/documentos/balance-nacional-de-energia-2019>.
- Shenastaghi, F. K., Roshdi, S., Kasiri, N., y Hasan Khanof, M. (2018). CFD simulation and experimental validation of bubble cap tray hydrodynamics. Separation and Purification Technology, 192, 110–122. doi:10.1016/j.seppur.2017.09.055
- Simscale. (2023). Simscale documentation – Simulation Setup - Global Settings. <https://www.simscale.com/docs/simulation-setup/global-settings/>
- Tang, M., Zhang, S., Wang, D., Liu, Y. y Zhang, Y. (2017). CFD simulation and experimental study of dry pressure drop and gas flow distribution of the tridimensional rotational flow sieve tray. Chemical Engineering Research and Design, 126, 241–254. doi:10.1016/j.cherd.2017.08.026
- Tang, M., Zhang, S., Wang, D., Liu, Y., Wang, L. y Liu, C. (2018). Experimental study and modeling development of pressure drop in concurrent gas-liquid columns with a tridimensional rotational flow sieve tray. Chemical Engineering Science, 191, 383–397. doi:10.1016/j.ces.2018.06.080
- Tang, M., Zhang, S., Wang, D., Liu, Y., zhang, Y., Wang, L. y Liu, C. (2019). CFD simulation of gas flow field distribution and design optimization of the tridimensional rotational flow sieve tray with different structural parameters. Chemical Engineering Science, 201, 34–49. doi:10.1016/j.ces.2019.01.049
- Ullauri, P. G. (2010). Transporte de masa en extracción fase sólido-líquido. ReCiTeIA 10(2) 1-12.



- Valdez, R. (2009). Biocombustibles, perspectivas, riesgos y oportunidades. *Perspectivas*, (23),41-53.[fecha de Consulta 1 de diciembre de 2021]. ISSN: 1994-3733. Disponible en: <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=425942159004>
- Wang, H., Tang, M., Wang, D., Liu, Y., Yan, F., Wang, R. y Zhang, S. (2021). CFD simulation of flow properties on the blade unit of a tridimensional rotational flow sieve tray with concurrent gas–liquid flow. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 126, 112–118. doi:10.1016/j.jtice.2021.06.058
- Wankat, P. (2008) *Ingeniería de procesos de separación*. Person Educación.
- Wilcox, D. (2006). *Turbulence modeling for CFD*. 3th edition. DCW Industries.
- Yang, Y., Liu, J., Lin, Y. y Li, Q. (2018). The Impact of Urbanization on China’s Residential Energy Consumption. *Structural Change and Economic Dynamics*, 49, 170-182.
- Zarei, T., Abedini, E., Rahimi, R. y Khorshidi, J. (2017). Computational fluid dynamics on the hydrodynamic characteristics of the conical cap tray. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 34(4), 969–976. doi:10.1007/s11814-017-0004-6
- Zhao, H., Li, L., Jin, J. y Li, Q. (2018). CFD simulation of sieve-fixed valve tray hydrodynamics. *Chemical Engineering Research and Design*, 129, 55–63. doi:10.1016/j.cherd.2017.10.034



Apéndices

A. Logros obtenidos

A1. Publicación de artículo

- a) XXVIII Congreso Internacional de la Sociedad Mexicana de Ingeniería Mecánica (SOMIM) 2022.



Tema A4 Termofluidos: Flujo en columnas de destilación

“Simulación numérica del flujo a través de las placas perforadas de una columna de destilación”

Enrique Cruz-Octaviano^{a,*}, Guillermo Efrén Ovando-Chacon^a, Javier Gomez-Rodriguez^a, Abelardo Rodriguez-Leon^a, Sandy Luz Ovando-Chacon^b

^aDepto. Metal-Mecánica y Mecatrónica, Tecnológico Nacional de México, Instituto Tecnológico de Veracruz, Carretera Miguel Ángel de Quevedo 2779, Veracruz, Veracruz, C.P. 91860 México.

^bDepto. Química y Bioquímica, Tecnológico Nacional de México, Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez, Carretera Panamericana Km. 1080, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, C.P. 29000 México.

*Autor de Contacto. Dirección de correo electrónico: m21020034@veracruz.tecnm.mx

RESUMEN

En este trabajo se estudia el comportamiento hidrodinámico y la humedad relativa del flujo de vapor de etanol a través de las tapas de burbuja de una columna de destilación. El estudio se realiza, aplicando simulaciones numéricas de dinámica de fluidos computacional (CFD). Se evalúan dos modelos de tapas de burbuja, una con ranuras rectangulares y otra con ranuras triangulares, se crean 25 configuraciones geométricas para cada modelo que van desde 2x1 mm hasta 10x6 mm. Las simulaciones realizadas de los modelos permitieron definir cual de los modelos es más eficiente para la mayor transferencia de masa y por ende un menor valor de humedad relativa en la parte superior de la columna de destilación, siendo la configuración de ranuras rectangulares la óptima. La menor humedad (0.26637) en la parte superior de la columna se obtuvo para la mayor altura de la ranura (10 mm).

Palabras Clave: CFD, Columna de destilación, Placas perforadas, Tapas de burbuja, Etanol

ABSTRACT

In this work, the hydrodynamic and the relative humidity behavior of the ethanol vapor flow through the bubble caps of a distillation column are studied. The study is carried out by applying numerical simulations of computational fluid dynamics (CFD). Two models of bubble caps are evaluated, one with rectangular slots and the other with triangular slots, 25 geometric configurations are created for each model ranging from 2x1 mm to 10x6 mm. The simulations of the models made it possible to define which of the models is more efficient for the highest mass transfer and therefore a lower value of relative humidity in the upper part of the distillation column, with the rectangular slot configuration being the optimal one. The lowest humidity (0.26637) in the upper part of the column was obtained for the highest slot height (10 mm).

Keywords: CFD, Distillation column, Perforated plates, Bubble caps, Ethanol

1. Introducción

Los biocombustibles son una fuente de combustible alterno, de los cuales el bioetanol se puede utilizar como aditivo para oxigenar la gasolina reemplazando al éter metil tert-butílico (MTBE) que es responsable de la contaminación del suelo y del agua subterránea, Carrasco y colaboradores [1] mencionaron que puede también utilizarse directo como combustible o mezclado con la gasolina a diferentes porciones (E6, E10, E20 y hasta E100). No obstante, para la obtención de bioetanol, es

necesaria una columna de destilación, la cual, está conformada por placas perforadas. En general los fabricantes de columnas de destilación realizan estos agujeros barrenando empíricamente en una placa metálica, sin estudios previos que consideren aspectos como la geometría de las tapas de burbujas de las placas perforadas y el efecto que tienen estas sobre el flujo cuando pasa a través de ellas, lo cual implica que la eficiencia de estas columnas no sea la óptima.

El uso de herramientas de dinámica de fluidos computacionales (CFD) ha sido parte fundamental para la investigación de fluidos con el fin de predecir el



A2. Constancia de participación como ponente en congreso internacional

- a) XXVIII Congreso Internacional de la Sociedad Mexicana de Ingeniería Mecánica (SOMIM) 2022.

20 Aniversario SOMIM
Sociedad Mexicana de Ingeniería Mecánica

La Sociedad Mexicana de Ingeniería Mecánica, A.C.
otorga el presente
RECONOCIMIENTO
a
Enrique Cruz Octaviano
al presentar el artículo

A4_19 "Simulación numérica del flujo a través de las placas perforadas de una columna de destilación"

durante el XXVIII CONGRESO INTERNACIONAL ANUAL DE LA SOMIM, VI CONGRESO INTERNACIONAL DE ENERGÍA Y DESARROLLO SOSTENIBLE Y VII SIMPOSIO INTERNACIONAL DE INGENIERÍA INDUSTRIAL celebrado del 21 al 23 de septiembre de 2022 en la Universidad El Bosque, Bogotá, Colombia.

Dr. Simón Martínez Martínez
Presidente de la SOMIM A.C.

CONGRESO DE DESARROLLO SOSTENIBLE

UNIVERSIDAD EL BOSQUE UANL ECECCI UNIAGRARIA UNIVERSIDAD SANTO TOMÁS CIC-LAC ASHRAE Colombia Chapter Jacaire