

## SIMULACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE MEZCLAS BINARIAS IDEALES EN UNA COLUMNA DE DESTILACION DISCONTINUA CON RECTIFICACIÓN

Manuel Otiniano C.

Departamento de Operaciones Unitarias, Facultad de Química e Ingeniería Química, Universidad Nacional Mayor de San Marcos.

### Resumen

En este trabajo se presenta un procedimiento para simular el comportamiento de una mezcla binaria ideal en una columna de destilación discontinua con rectificación en el modo de operación a reflujo constante.

**Palabras claves :** Destilación discontinua, mezclas binarias ideales, reflujo constante, simulación.

### Abstract

In this work it presents an procedure for to simulate the behavior of a ideal binary mixture in a batch column with rectification in the mode of operation of a constant reflux.

**Keywords:** Batch distillation, ideal binary mixtures, constant reflux, simulation.

### I. INTRODUCCIÓN

La destilación discontinua es quizás la operación más antigua utilizada para la separación de mezclas líquidas, una operación unitaria más antigua que la destilación continua. Algunos autores sugieren que fue inventada en Alejandría en la primera centuria. Luego se tiene conocimiento de que la operación fue utilizada para concentrar alcohol por los alquimistas árabes 700 años después del nacimiento de Jesucristo. Fue adoptada por Europa y ya por los años 1500 se publicó el primer libro sobre destilación *Liber de arte distillandi* publicado en latín. Otro libro sobre la materia pero escrito en alemán fue el *Das new gross Distiller Buch* por Walter Ryff en 1545. En 1597 se publicó el libro *The Alchemy of Andreas Libavius* donde se describió un equipo de destilación utilizado para la recuperación de alcohol. Sin embargo, muchos autores concuerdan en darle el crédito de la invención al francés Cellier-Blumenthal por el año de 1818. Por centurias y aún hoy día se le utiliza para la producción de bebidas alcohólicas, aceites esenciales, perfumes y productos farmacéuticos. Actualmente es la operación más frecuentemente utilizada en los procesos por lotes.

En la figura N° 1 se muestra el esquema de una columna de destilación discontinua convencional con rectificación que consiste de un rehervidor, un condensador y una columna de platos que están numerados del 1 a N. La mezcla líquida a ser separada es cargada en el rehervidor, donde cuando se le adiciona calor sucede el cambio de fase de la mezcla de alimentación. El vapor va subiendo por la columna y se pone en contacto con la fase líquida que va en sentido contrario y que proviene del condensador. Conforme el vapor sube por la columna de platos su composición se va enriqueciendo. Finalmente el vapor llega al tope de la columna y pasa al condensador. En el condensador se separan dos flujos líquidos uno será el destilado, que es el producto que se desea obtener con la más alta pureza del componente o los componentes más volátiles. El otro flujo retorna a la columna y puesto en contacto con el vapor que va subiendo por la columna hasta llegar nuevamente al rehervidor. Dicho flujo se le conoce como reflujo de la columna de destilación. La composición de la mezcla líquida en el rehervidor va cambiando con el tiempo hasta eliminar todo o parte del componente más volátil.

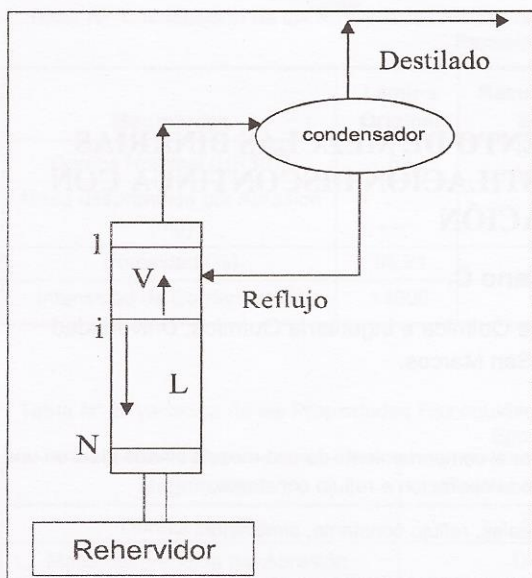


Figura N° 1. Columna de destilación discontinua convencional.

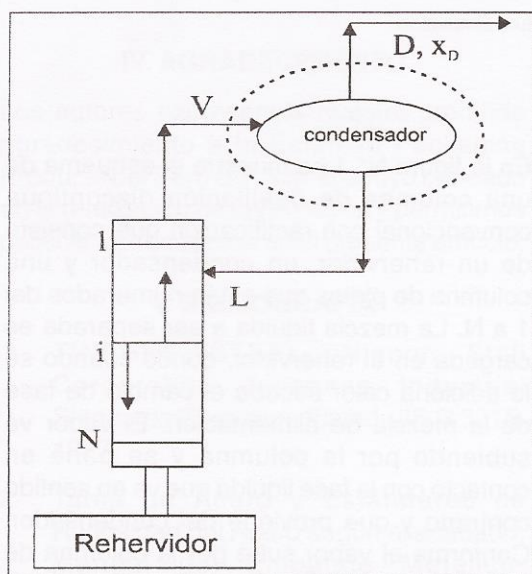


Figura N° 2. Balance de materia en la columna de destilación con rectificación

El modelo para estudiar el comportamiento de la columna de destilación discontinua con rectificación para mezclas binarias se basa en los siguientes supuestos:

- Volatilidad relativa constante (sistemas ideales).
- Flujo equimolar en toda la columna.
- Columna de platos.
- Acumulación despreciable en cada plato.
- Equilibrio termodinámico entre el vapor y el líquido que sale de cada plato.

- Acumulación despreciable de vapor y líquido para un condensador total.
- La composición del líquido que sale del acumulador de reflujo se asume que es la misma del acumulador bien mezclado.

### Métodos de operación de una columna de destilación discontinua

Los dos métodos de operación de columnas de destilación discontinua más utilizados son:

- Reflujo constante y composición del producto destilado variable.
- Reflujo variable y composición del destilado constante.

### Reflujo constante

En este modo de operación la relación de reflujo es constante, la composición del destilado varía con el tiempo y la velocidad de destilado  $D$  es constante.

Un balance de materia en el condensador de la columna se tendrá:

$$V = L + D$$

La relación de reflujo  $R$  se define por:

$$R = \frac{L}{D}$$

Por lo que finalmente:

$$D = \frac{V}{R + 1}$$

Un balance total de materia para la columna con la velocidad de destilado  $D$  constante se tiene:

$$-\frac{dB}{dt} = D$$

Donde  $B$  son los moles en el tanque de alimentación o rehervidor y  $D$  los moles del producto que sale por el tope de la columna.

$$-\frac{dB}{dt} = \frac{V}{R + 1} \tag{A}$$

$V$  es la velocidad de ebullición del vapor. Para cualquier componente  $i$ , un balance de moles instantáneo alrededor de la columna da:

$$\frac{d(x_{B_i} B)}{dt} = x_{D_i} \frac{dB}{dt}$$

Que expandiendo la ecuación y resolviendo para  $dx_{B_i}$ :

$$dx_{B_i} = (x_{D_i} - x_{B_i}) \frac{dB}{B} \quad (B)$$

Las ecuaciones (A) y (B) se les ordena en forma de diferencia finita se tiene:

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} - \left( \frac{V}{R+1} \right) \Delta t \quad (C)$$

$$x_B^{(k+1)} = x_B^{(k)} + (x_D^{(k)} - x_B^{(k)}) \left[ \frac{B^{(k+1)} - B^{(k)}}{B^{(k)}} \right] \quad (D)$$

Donde  $k$  es el índice de incremento del tiempo,  $x_B$  es la fracción molar del componente más volátil en el rehervidor que cambia con el tiempo y  $x_D$  es la fracción molar del componente más volátil en el destilado.

Lo que se requiere es la relación entre  $x_D$  y  $x_B$  instantáneamente para lo cual se utiliza la ecuación de Smoker para mezclas binarias que en realidad es la solución analítica con lo cual se determina el número de etapas teóricas en una columna de destilación continua para mezclas binarias ideales. En este caso se utilizará la ecuación de Smoker para la sección de rectificación.

$$n = \frac{\log \left[ \frac{x'_D (1 - Mx'_n)}{x'_n (1 - Mx'_D)} \right]}{\log \left( \frac{\alpha}{mc^2} \right)} \quad (E)$$

$$x'_D = x_D - k$$

$$x'_n = x_n - k$$

Debido a que no se puede derivar la ecuación para  $x_D$  ya que la ecuación de Smoker está en función de la concentración del destilado se debe resolver para la concentración en el rehervidor  $x_B$ :

$$x_B = k + \frac{x_D - k}{\left[ 1 - M(x_D - k) \right] \left( \frac{\alpha}{mc^2} \right)^{n+1} + M(x_D - k)} \quad (F)$$

Con:

$$M = \frac{mc(\alpha - 1)}{\alpha - mc^2} \quad (G)$$

$$c = 1 + (\alpha - 1)k \quad (H)$$

$$m = \frac{R}{R+1} \quad (I)$$

$$b = \frac{x_D}{R+1} \quad (J)$$

El valor de  $k$  se halla resolviendo la ecuación:

$$m(\alpha - 1)k^2 + [m + b(\alpha - 1) - \alpha]k + b = 0 \quad (K)$$

La raíz a utilizar para reemplazar en la ecuación de  $x_B$  tendrá que estar entre  $0 < k < 1$  y siempre es la de menor valor. Por lo que para hallar el valor de  $x_B$  conociendo la volatilidad relativa, y la relación de reflujo se propone un valor de  $x_D$  con lo que se reemplaza en las ecuaciones (I), (J) y (K) se halla el valor de  $k$ . Con dicho valor se reemplaza en las ecuaciones (G) y (H) para finalmente encontrar el valor de  $x_B$  con la ecuación (F). El proceso es iterativo donde se propone valores de  $x_D$  hasta encontrar un valor con el cual se calcula  $x_B$  que a su vez coincida con el valor de  $x_B$  hallado con la ecuación (D).

Entonces el procedimiento para la simulación consiste:

- 1) Para un incremento de tiempo  $\Delta t$ , se computa  $B^{(k+1)}$  con la ecuación (C)
- 2) Luego se computa  $x_B^{(k+1)}$  con la ecuación (D)
- 3) Finalmente se encuentra el valor de  $x_D$  con el método propuesto utilizando la ecuación de Smoker.
- 4) Se completa el balance de masa encontrando los moles de destilado y los moles que quedan en el rehervidor.

### Ejemplo:

Una mezcla equimolar inicial de benceno-tolueno tiene una volatilidad relativa constante de 2.4. La columna de destilación discontinua tiene 4 platos teóricos. Simular la operación de destilación si la columna opera en el modo de reflujo constante con una relación de reflujo de 4.

Toda la información fue incluida en una hoja de cálculo EXCEL así como las fórmulas para

la simulación para un incremento de tiempo de 0.1, los resultados para un tiempo total de 1 hora de operación fueron los siguientes:

Tabla N° 1. Resultados de la simulación

Tiempo (h)	B (moles)	$x_B$	$x_D$	D (moles)
0	100	0.5	0.971	0
0.1	97.8	0.49	0.97	2.2
0.2	95.6	0.479	0.968	4.4
0.3	93.4	0.468	0.966	6.6
0.4	91.2	0.456	0.964	8.8
0.5	89	0.444	0.962	11
0.6	86.8	0.431	0.96	13.2
0.7	84.6	0.417	0.957	15.4
0.8	82.4	0.403	0.954	17.6
0.9	80.2	0.389	0.951	19.8
1	78	0.373	0.947	22

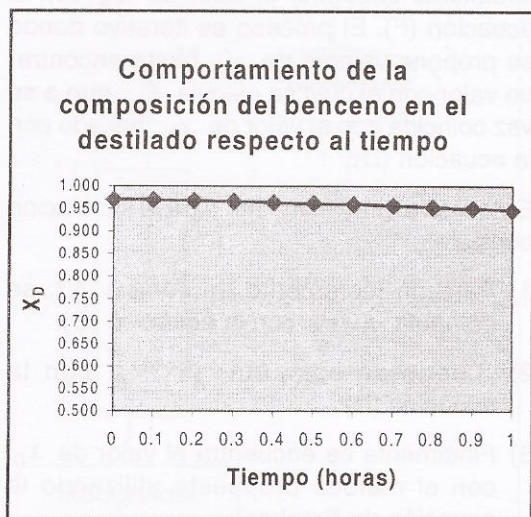


Figura N° 3. Variación de la fracción molar del benceno en el destilado con respecto al tiempo

Los resultados muestran como la composición del benceno en el rehervidor va disminuyendo conforme pasa el tiempo, mientras que la composición del benceno en el destilado también disminuye con el respecto al tiempo, lo cual también se nota en el gráfico correspondiente. De la misma tabla se encuentra también la variación de la cantidad de moles que queda en el rehervidor que inicialmente es de 100 moles pero que disminuye con el tiempo. En otra columna de la tabla N° 1 se nota el incremento de la cantidad de moles de destilado conforme

aumenta el tiempo. Con este procedimiento se puede hacer la simulación del comportamiento de una mezcla binaria ideal en una columna de destilación discontinua en el modo de operación a reflujo constante utilizando la ecuación de Smoker para relacionar la composición del destilado con la del rehervidor, con lo cual se puede predecir el comportamiento de tales mezclas en el tiempo.

## II. CONCLUSIONES

Se ha presentado un procedimiento simple para simular el comportamiento de una mezcla binaria ideal en una columna de destilación discontinua en el modo de operación a reflujo constante sin considerar los efectos de la acumulación en los platos y el condensador.

## III. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Kister, H., *Distillation Design*. McGraw-Hill Inc., New York, página 213, 1990.
2. Diwekar, U., *Batch Distillation: simulation, optimal design and control*. Taylor & Francis, Washington, página 15, 1995
3. Mujtaba, I. M., *Batch Distillation: Design and Operation*. Imperial College Press, Londres, página 11, 2004.
4. Seader, J.D., Henley E., *Separation Process Principles*. John Wiley & Sons, página 469, 2005.
5. Wankat, P., *Separation Process Engineering*. Prentice-Hall, página 276, 2006.