

## SECCION B : INGENIERIA QUIMICA

### ANTECEDENTES Y PERSPECTIVAS DE LA OPERACIÓN DE DESTILACION DISCONTINUA

J. Lombira-Echevarria, M. Otiniano-Cáceres

Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Facultad de Química e Ingeniería Química  
Unidad de Post Grado,  
Av. Venezuela s/n Lima -Perú

**Abstract.**-Present contribution constitutes a review that shows the results of bibliographic research carried out about the simulation, design and optimisation of batch distillation operation. It is analysed the present state of the art of this operation, contrasting its recent achieved results with difficulties that still exist in this area. The different batch distillation columns configurations that have been developed recently, such as the inverted column, middle vessels, multiple effects, extractive and azeotropic batch distillation columns are reviewed.

**Key words :** batch distillation, simulation, optimisation, design, configurations.

**Resumen.**-En el presente trabajo se exponen los resultados de la revisión bibliográfica del comportamiento de los estudios realizados referentes a la simulación, diseño y optimización de la destilación discontinua. Se refleja el estado de desarrollo actual de esta operación, contrastando los logros alcanzados, con las dificultades que aun se presentan en esta área. Las diferentes configuraciones recientemente desarrolladas sobre la columna de destilación batch como la variante invertida, con vasos intermedios y la de múltiples efectos son revisadas, así como la destilación batch extractiva y azeotrópica.

**Palabras Clave :** Destilación batch, Simulación, Optimización, Diseño, Configuraciones.

#### INTRODUCCION

La destilación discontinua se utiliza ampliamente como operación unitaria en la industria de procesamiento por lotes, (Figura No 1) como uno de los procesos de separación más antiguos reportados por la industria química.

Actualmente el interés por este tipo de separación se ha renovado notablemente, debido a las crecientes exigencias por la calidad y pureza de los productos obtenidos en las diferentes áreas de la industria en las diferentes áreas de la industria química, fundamentalmente

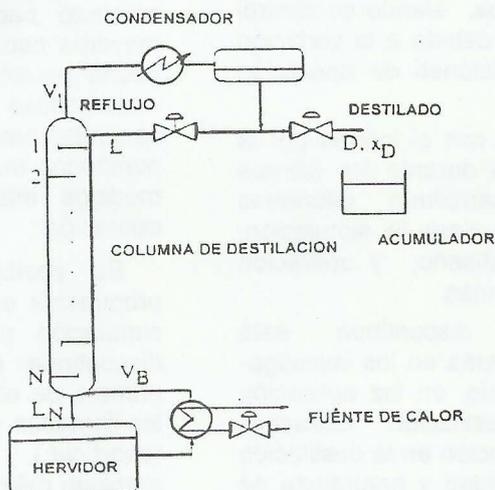


Figura 1. Esquema de una columna de destilación discontinua convencional

en la química fina, la industria farmacéutica y la biotecnología, entre otras.

Entre las principales ventajas de la destilación discontinua o *batch*, con respecto a la destilación continua se encuentra su flexibilidad, lo cual se evidencia en procesos donde la composición química de la alimentación o mezclas a tratar cambian frecuentemente. En estos casos es posible operar dichos procesos con una única columna discontinua, capaz de procesar mezclas con un alto rango de variación en su composición, logrando niveles de separación muy aceptables.

Otra de las razones de la creciente presencia de destilación *batch* a escala industrial, es su operatividad en la separación de mezclas multicomponentes. En estos casos es posible la separación de los componentes presentes con altos niveles de pureza, a partir de la obtención consecutiva de cortes o fracciones de destilado. Sin embargo para procesos conformados por columnas de destilación continuas, estos niveles de separación sólo se pudieran lograr con la instalación de complejos sistemas de columnas interconectadas, lo que encarecería considerablemente los costos de los mismos.

Precisamente por las características propias de esta operación difusional, la destilación discontinua está limitada para la operación con mezclas en cantidades reducidas. Además presenta como desventajas más notorias el hecho de requerir mucho más trabajo y atención que una destilación continua, siendo su control automático más difícil debido a la variación continua de las condiciones de operación con el tiempo.

Consecuentemente con el interés por la destilación discontinua durante los últimos años se han desarrollado diferentes métodos y programas para la simulación, optimización, control, diseño, y operación de estos tipos de columnas.

La destilación discontinua está despertando nuevo interés en los investigadores como por ejemplo, en la aplicación de la llamada destilación extractiva discontinua, o su aplicación en la destilación azeotrópica. La flexibilidad y naturaleza de la destilación discontinua permite configurar la columna de diferentes maneras. Así, en contraste con la tradicional columna *batch*,

se ha propuesto la inversión de la misma, o sea, disponiendo la alimentación al tope y los productos saliendo por el fondo. Otros investigadores han propuesto la introducción de uno o varios vasos o reservorios a lo largo de la columna, y más recientemente ya se reporta la experimentación de estas alternativas conjugadas con la destilación discontinua reactiva.

De esta forma, la creciente complejidad que va adquiriendo esta operación es cada vez más asombrosa, y consecuentemente con ello el nivel de complejidad de los algoritmos a desarrollar. Esto implica la necesidad de actualizar los programas de cómputo disponible por los investigadores y el mercado en general, para lograr la simulación de tales configuraciones novedosas, y muchas aún por analizar.

Teniendo en consideración el segmento importante que abarca la destilación discontinua en el campo de las investigaciones en la Ingeniería Química, así como de la variada información que se publica al respecto, es objetivo del presente trabajo exponer los resultados del estado actual de este tópico, considerando los avances logrados en su simulación, diseño, operación y optimización.

### **Simulación de la Operación de Destilación Discontinua**

La simulación de la destilación discontinua se ha visto directamente beneficiada, por el desarrollo de equipos de cómputo cada vez más rápidos y con mayores capacidades de memoria. Ello ha hecho posible la introducción de modelos matemáticos cada vez más rigurosos conjuntamente con la aplicación de métodos numéricos más eficientes para resolver los modelos matemáticos asociados a esta operación.

Es posible clasificar los programas propuestos en la literatura para realizar la simulación matemática de la destilación discontinua en dos grandes grupos: el primero de ellos sería el correspondiente a los llamados métodos cortos o aproximados (*short cut*), y en el otro se ubicarían los que emplean métodos rigurosos para la solución de los modelos. A su vez, este segundo grupo de métodos pudieran ser clasificados en la categorías de métodos diferenciales o

como métodos pseudo estacionarios. En el segundo grupo, la destilación discontinua es simulada como una sucesión de procesos estacionarios, utilizando modelos y algoritmos empleados para la destilación continua.

### Métodos Diferenciales

En los métodos diferenciales se encuentran los programas tradicionales que realizan la integración numérica del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que describen esta operación, y que se caracterizan generalmente por consumir gran cantidad de tiempo de cómputo. El modelo que resulta para la simulación del comportamiento de los diferentes componentes y la temperatura de la mezcla en el hervidor, cada una de las etapas y el condensador, queda establecido como sigue:

$m$  ecuaciones diferenciales para el balance de masa en el condensador:

$$\frac{dx_{i,c}}{dt} = \frac{V}{H_c} (y_{i,c} - x_{i,c}), \quad i=1,2,\dots,m \quad (1)$$

$m$  ecuaciones diferenciales de balance de masa por cada una de las etapas en la columna:

$$\frac{dx_{i,j}}{dt} = \frac{V}{H_j} [y_{i,j-1} - y_{i,j} + \frac{R}{R+1} (x_{i,j-1} - x_{i,j})]$$

$i=1,2,\dots,m \quad j=1,2,\dots,n \quad (2)$

$m$  ecuaciones diferenciales de balance de masa para el hervidor:

$$\frac{dx_{i,r}}{dt} = \frac{V}{S} [x_{i,r} - y_{i,r} + \frac{R}{R+1} (x_{i,r} - x_{i,r})]$$

$i=1,2,\dots,m \quad (3)$

considerando:

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{V}{R+1} \quad (4)$$

a este sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias se le adiciona como relación de

equilibrio para cada componente en cada etapa, la restricción:

$$\sum_i^M K_{ij} x_{ij} - 1 = 0 \quad i=1,2,\dots,m$$

$j=1,2,\dots,n \quad (5)$

donde:

$$K_{ij} = \frac{y_{ij}}{x_{ij}} = \frac{\gamma_{ij} P^{o_{ij}}}{\phi_{ij} P_{ij}} \quad (6)$$

los coeficientes de actividad para cada uno de los componentes presentes en cada una de las etapas,  $\gamma_{ij}$ , pueden evaluarse a partir de los diferentes modelos disponibles, como lo constituyen la ecuación de Wilson, la de Tsuboka-Katayama, el modelo UNIQUAC, tanto en su versión original como en las importantes modificaciones del mismo, el modelo NRTL o el método UNIFAC, entre otros. De igual forma los coeficientes de fugacidades  $\phi_{ij}$  son calculados a partir de las diferentes Ecuaciones de Estado reportadas en la literatura científica.

A pesar de la variedad de ecuaciones disponibles para la evaluación de  $\gamma_{ij}$  y  $\phi_{ij}$ , es importante destacar que la inmensa mayoría de los artículos publicados consideran comportamiento ideal para la mezcla a destilar, lo cual significa considerar como unitarias estas magnitudes termodinámicas. Si bien esta simplificación aumenta considerablemente el tiempo de cómputo requerido para la solución del sistema de EDO, sus resultados se pueden traducir en una falta de rigurosidad termodinámica en el tratamiento de la mezcla a estudiar, con el consiguiente error o discrepancia en ocasiones inaceptables entre los perfiles calculados por el programa simulador, con los reportados experimentalmente.

Uno de los primeros métodos reportados para la determinación gráfica de las curvas de destilación para mezclas binarias fueron propuestos por Smoker y Rose [1,2], y luego por Cichelli [3] con ecuaciones que relacionan el número de platos y la relación de reflujo.

Rose [4,5] y Colburn et al. [6] presentaron expresiones más exactas para la destilación de mezclas binarias. También se encuentra que Rose [7,8,9] es uno de los primeros autores que aplican los métodos

de integración numérica, en esta ocasión el Euler para resolver los problemas de destilación discontinua. Este trabajo fue continuado por Huckaba y Danly [10], que desarrollaron una descripción matemáticamente rigurosa de los procesos de rectificación batch binario, utilizando los métodos de Euler y la regla trapezoidal, e introduciendo el criterio correspondiente para convergencia y estabilidad de solución numérica.

Meadows [11] presentó otro programa para destilación multicomponente discontinua, pero con soluciones limitadas, mientras que posteriormente Distefano [12] propuso otro modelo matemático sobre la base de un procedimiento de cálculo de etapa por etapa. En este trabajo Distefano también investiga veinte diferentes métodos de integración numérica, concluyendo que el método predictor-corrector Moulton-Sell presenta la estabilidad más favorable. Otros autores han presentado trabajos utilizando diferentes métodos de integración numérica como el Runge-Kutta de segundo orden [13], el Runge-Kutta de cuarto orden y los métodos Milne de quinto orden [14] y el método corrector predictor Hamming de quinto orden [15].

Domenech [16] investigó comparando su propio método de integración con el Euler, Euler-Cauchy, Runge-Kutta de cuarto orden y el Adams-Moulton, obteniendo para este último los mejores resultados para el modelamiento de la rectificación batch de mezclas binarias en una columna de cuatro platos.

En 1981 Domenech y Enjalbert [17] presentaron un programa para simular la rectificación discontinua, considerando los períodos de inicio y de producción. Boston et al. [18] presentó un programa para rectificación discontinua empleando esencialmente las mismas ecuaciones propuestas por Distefano [12], pero considerando la fase líquida real y utilizando el método Runge-Kutta.

Sodomoto y Migakara [19] desarrollaron un procedimiento estable y rápido para el cálculo de rectificación batch multicomponente, pero restringiéndola para

sistemas con comportamiento ideal para las fases líquida y vapor. Posteriormente Lapácek [20] presenta un programa más riguroso utilizando un método Runge-Kutta-Merson combinado con el Euler explícito y los modelos termodinámicos de Wilson y el NRTL.

Otros esfuerzos se han dirigido en desarrollar métodos cortos para la simulación de columnas de destilación discontinua tanto para mezclas binarias como multicomponente-es como son los trabajos de Wu [21], Diwekar [22,23,24] y Al-Tuwain[25].

Lombira [26] propone el programa BATCH1 para la simulación de columnas de destilación discontinua para sistemas complejos y multicomponentes, validándolo a partir de datos experimentales. El programa introduce nuevos modelos para la determinación de los coeficientes de actividad, y está estructurado con integración numérica relativamente más rápida, empleando para ello una modificación del método de Runge-Kutta de tercer orden según Villadsen [33] con paso variable.

$$u_{i+1} = u_i + \omega_1 k_i + \omega_2 \bar{k}_i + \omega_3 \bar{k}_3,$$

$$i=0, 1, \dots, N-1 \quad u \text{ es en negrilla, } \quad (7)$$

$$u_0 = y_0 \quad (8)$$

$$\bar{k}_1 = h[I - ha_1 \frac{\partial f}{\partial y}(u)]^{-1} f(u) \quad (9)$$

$$\bar{k}_2 = h[I - ha_1 \frac{\partial f}{\partial y}(u)]^{-1} f(u + b_2 \bar{k}_1) \quad (10)$$

$$\bar{k}_3 = h[I - ha_1 \frac{\partial f}{\partial y}(u)]^{-1} (b_{31} \bar{k}_1 + b_{32} \bar{k}_2) \quad (11)$$

Los parámetros  $a_1, b_2, b_{31}, b_{32}, \omega_1, \omega_2, \omega_3$  son reportados por el autor [33]. A diferencia de otros procedimientos que operan con paso de integración constante, la gran ventaja de este método radica en la posibilidad de establecer un paso  $h$  para cada intervalo de integración, lo cual es de suma importancia en la elevación del tiempo de cómputo de estos sistemas de EDO tipo *stiff*. Este paso es ajustado de acuerdo al

algoritmo que se detalla a continuación, el cual trata preferiblemente de incrementar  $h$  siempre y cuando no se genere un error superior al establecido por el usuario. De lo contrario, se trata de disminuir el paso en una integración dada hasta que la diferencia en el cálculo satisfaga las condiciones de error o convergencia.

El error por truncamiento  $e$  en la integración  $i+1$  es estimado como:

$$e_{i+1} = \omega_{i+1} - u_{i+1} = -\frac{7}{8}gh^4 + O(h^5) \quad (12)$$

donde:

$$u_{i+1} = y(x_{i+1}) + gh^4 + O(h^5) \quad (13)$$

$$\omega_{i+1} = y(x_{i+1}) + 2g\left(\frac{h}{2}\right)^4 + O(h^5) \quad (14)$$

El término  $u_{i+1}$  denota la solución numérica del Sistema de EDO para un paso de integración  $h$ , y el término  $\omega_{i+1}$  se refiere a dicha solución numérica, pero para un paso de integración  $h/2$ . Si el error por truncamiento local  $e^j$  es lo suficientemente pequeño, como para cumplir la condición:

$$e^{(j)} < TOL^{(j)}, \quad \text{para cada una de las } j \text{ EDO, desde } j=1,2,\dots,m, \quad (15)$$

entonces es aceptado el paso de integración  $h$ . Para el caso en que se haya logrado dicho paso de integración satisfactorio, se puede ajustar el mismo, tratando de aumentarlo convenientemente de acuerdo a la siguiente estrategia:

$$h_{i+1} = h \min\left[\left\{4 \max_{j=1,2,\dots,m} \left|\frac{e^{(j)}}{TOL^{(j)}}\right|\right\}^{-\frac{1}{4}}, 3\right], \quad (16)$$

Dado el caso que no se haya podido cumplir con la condición de convergencia planteada en la ecuación 15, para todas y cada una de las EDO, entonces se establece el nuevo

paso  $h_{i+1}$  como la mitad del paso  $h$  correspondiente a la integración anterior. De esta forma se va reduciendo el paso de integración hasta alcanzar un error local por truncamiento menor a la tolerancia

Posteriormente se reporta un trabajo [70] en el que empleando esta técnica numérica, se plantean los resultados de la simulación calculan los perfiles de temperatura y fijada, repitiéndose así el algoritmo de variación de paso.

composiciones para cada uno de los cinco componentes, en el hervidor, condensador y en cada una de las ocho etapas de la columna. Muestra de estos resultados se ilustran en las **Gráficas No 1 y 2** para el comportamiento transiente de la composición de la mezcla destilada y su temperatura en el condensador.

El programa BATCH1 es modificado posteriormente por Castillo [71], introduciéndole la Ecuación de Tsuboka-Katayama para el cálculo de los coeficientes de actividades, y la Ecuación de Estado del virial con la modificación de Hayden-O'Connell para la determinación de los coeficientes de fugacidades.

Diwekar *et al.* [27] presenta un paquete llamado BATCH-DIST para el diseño, simulación y optimización de columnas de destilación discontinuas, que incluye la posibilidad de operar a reflujo constante o variable en el tiempo, tanto para mezclas multicomponentes y que en el caso de la simulación incluye tanto los modelos rigurosos diferenciales como los modelos cortos simplificados.

En 1994 Bosley *et al.* [28] desarrolla una técnica eficiente para el modelamiento de la columna incorporando, balances de energía rigurosos así como la representación de la hidráulica del plato y la transferencia de masa no ideal. El modelo es inclusive aplicable para columnas de destilación continuas.

Albet *et al.* [29] también formula y desarrolla un modelo riguroso para la columna, con un conjunto de ecuaciones diferenciales y algebraicas las cuales son resueltas por una estrategia numérica basada en el método de Gear, el cual es especialmente adaptado para este tipo de sistemas.

Mori *et al.* [30] en 1995 propone Un algoritmo para la solución de los

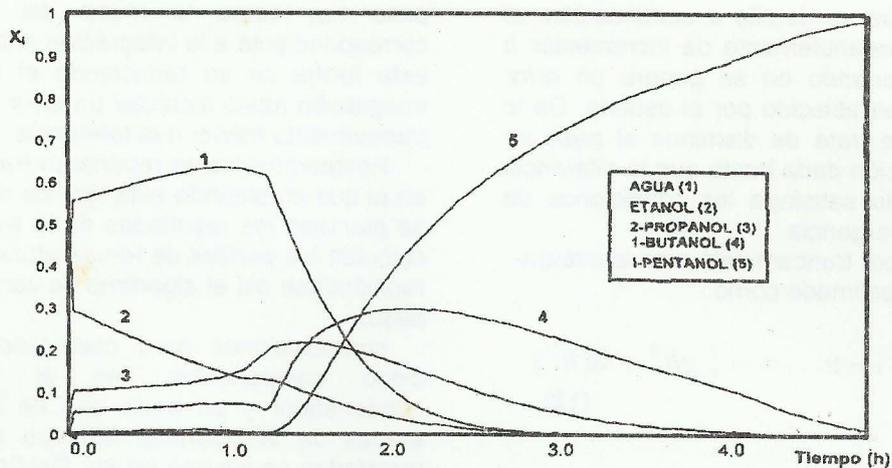


Gráfico 1. Perfil de composición simulado en el condensador para  $R=2$  y  $N=8$

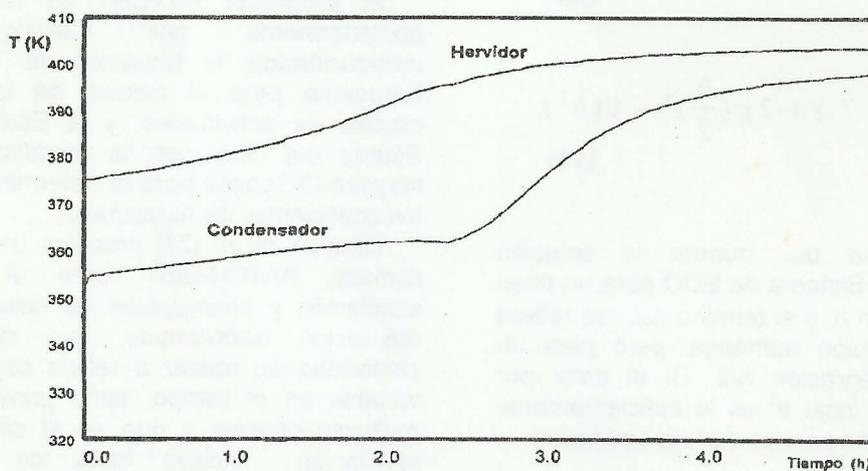


Gráfico 2. Perfiles de temperatura calculado para el Condensador y hervidor para  $R=4$  y  $N=8$

problemas de destilación discontinua multicomponente y de múltiples etapas. Utiliza el método de Euler generalizado implícito para la integración numérica en cada etapa, comparando el mismo con el de Runge-Kutta. Wajge *et al.* [31] utiliza en cambio las técnicas de colocación ortogonal y de diferencias finitas para obtener la solución numérica del modelo diferencial para una columna empacada discontinua. En la aproximación de la colocación ortogonal, la aproximación polinomial a las ecuaciones del modelo, resulta en un sistema de ecuaciones la cual es mucho menor en dimensión.

Recientemente Tomazi [32] en cambio sí incorpora en sus modelos de destilación un conjunto completo de relaciones hidráulicas, balances de energía y eficiencias de platos, pero con modelos más simples basados en una acumulación molar constante o cero acumulación.

#### METODOS PSEUDO ESTACIONARIOS

Los métodos pseudo estacionarios consisten en modelos que describen a la destilación discontinua como una sucesión de eventos discretos de períodos cortos de tiempo, en los cuales el proceso se

comporta igual como una columna de destilación continua.

Los primeros trabajos en este sentido fueron propuestos por Rose en 1979, pero realmente el primer programa de cómputo riguroso desarrollado bajo esta filosofía de trabajo fue reportado en la literatura por Galindez y Fredenslund [34] seis años después con el modelo denominado DISBATCH.

Posteriormente se realiza la simulación de una columna de destilación discontinua de múltiples etapas y multicomponente con el programa UNIDIST, desarrollado por Christiansen et al. [35], el cual usa una modificación del método Naphtali-Sandholm y diferentes modelos de equilibrio de fases. La eficiencia computacional de estos métodos pseudo estacionarios fueron discutidos posteriormente por Galindez [34], mientras que Nad [36] reportó que aplicando este programa a la rectificación discontinua de una mezcla ternaria produjo una reducción considerable del tiempo de computación. Lamentablemente se ha producido una cierta discontinuidad en el estudio de los métodos pseudo estacionarios en la simulación de la destilación *batch*, y de hecho no se ha logrado evaluar los mismos para el tratamiento de mezclas complejas y multicomponentes, lo que propone otra área de interés en la investigación de esta operación de separación.

### Optimización de Políticas de Operación

Sobre la optimización de la operación de la columna de destilación discontinua, entre los primeros trabajos se encuentra que Converse et al. [37] emplea la programación dinámica para determinar el destilado óptimo, es decir, producir la máxima cantidad de destilado de una pureza especificada para un tiempo dado, consiguiendo resultados de pureza de 4 a 5 % sobre la operación convencional. Coward [38] utiliza el principio de máxima de Pontryagin para encontrar el tiempo mínimo, y la correspondiente relación de reflujo, necesaria para lograr una separación dada de dos componentes por destilación discontinua. Robinson [39] también utilizó el principio de máxima de Pontryagin para calcular la ruta óptima a

través de la destilación discontinua bajo diferentes condiciones especificadas de acumulación o hold up en las etapas, y velocidades de vaporización. Posteriormente el mismo Robinson [40] obtuvo políticas de reflujo para la destilación discontinua multicomponente en el cual se fijó la cantidad y pureza del producto.

Diwekar et al. [22] en un artículo describe un procedimiento para obtener el reflujo óptimo o política de destilación óptima para columnas de destilación *batch* multicomponente utilizando el principio de máxima de Pontryagin. Para aplicación a sistemas multicomponentes, un modelo de orden reducido es utilizado como un procedimiento corto desarrollado específicamente para análisis y diseño de columnas discontinuas. Wu et al. [21] también ha propuesto un método para la optimización de la destilación de mezclas multicomponentes en el cual las relaciones de reflujo y el número de platos son determinados secuencialmente a partir de una operación de etapa en etapa a diferencia de la simultaneidad para todas las etapas como en los métodos convencionales. Diwekar et al. [23] en un trabajo posterior propone un método corto de optimización para el diseño de columnas de simple y múltiples fracciones operando bajo condiciones de reflujo constante y variable.

Quintero-Mármol et al. [41] explora varias alternativas para una estrategia óptima para el reciclado de los cortes de los productos en la destilación discontinua multicomponente. El resultado muestra que se logra un incremento de un 30 al 40 % en el factor de capacidad de la instalación, mediante la segregación de los cortes logrados.

Mujtaba et al. [42] propone una estrategia de procesamiento de reciclado de cortes para mezclas multicomponentes. Para esto se propone un modelo dinámico de la columna y las políticas óptimas generadas por descomposición del problema total en una secuencia de problemas de control óptimo pseudo binarios aplicado anteriormente a mezclas binarias. La estrategia obtiene ahorros de más del 45 % en cuanto a tiempo de procesamiento y superiores al 67 % en productividad.

Sorensen et al. [43] presenta los resultados de la operación óptima de diferentes separaciones tomando en consideración el tiempo de arranque, el cual

es significativo en comparación con el tiempo total de operación para separaciones difíciles y cuando la acumulación combinada entre la columna y el condensador es grande.

Mujtaba y Macchietto [44] proponen la optimización dinámica de la destilación discontinua donde la reacción química y la separación tiene lugar simultáneamente. El objetivo es maximizar la conversión del reactante limitante. Este método puede ser fácilmente extendido a la destilación discontinua no reactiva y a columnas de destilación discontinua no convencional.

Li y otros [45] optimizan un proceso de destilación discontinuo a nivel industrial con reacción química en el hervidor, con el objeto de minimizar el tiempo de la operación discontinua. Se emplea un modelo dinámico detallado para describir el proceso, el cual se incorpora en el problema de optimización, siendo finalmente validado con los datos medidos del experimento directamente en el sitio industrial. Se logra un ahorro arriba del 30 % del tiempo de operación con las políticas óptimas desarrolladas en comparación a la operación convencional.

Wajge *et al.* [46] estudia la optimización de una campaña entera de lotes, preferiblemente antes de hacerlo para un simple corte. Esta noción de optimización de campaña es particularmente relevante en la destilación discontinua con reacción reversible la cual

produce cantidades significativas de cortes. El reprocesamiento de estos cortes se hace sobre la base de la consideración de que un simple lote puede conducir no solamente a velocidades de producción ineficientes sino también a una utilización ineficiente de los reactantes. Lo que se propone finalmente es una estrategia general para decidir la estructura óptima de la campaña.

### Diseño de Columnas de Destilación Discontinua

Houtman y Husain [47] revisan la literatura sobre la destilación discontinua en cuanto al diseño, relación de reflujo, combinación de platos etc. Fair [48] presenta los métodos de diseño en destilación continua y discontinua, ya sea para mezclas binarias como multicomponente.

Luyben [49] estudia varios diseños y políticas de operación para columnas de destilación batch binaria con el objetivo de lograr una máxima producción, logrando incrementos significativos en la capacidad debido al diseño óptimo de la columna. En este trabajo se llega a realizar la simulación del sistema de ecuaciones lo que permite el estudio de un rango de condiciones para la destilación batch binaria.

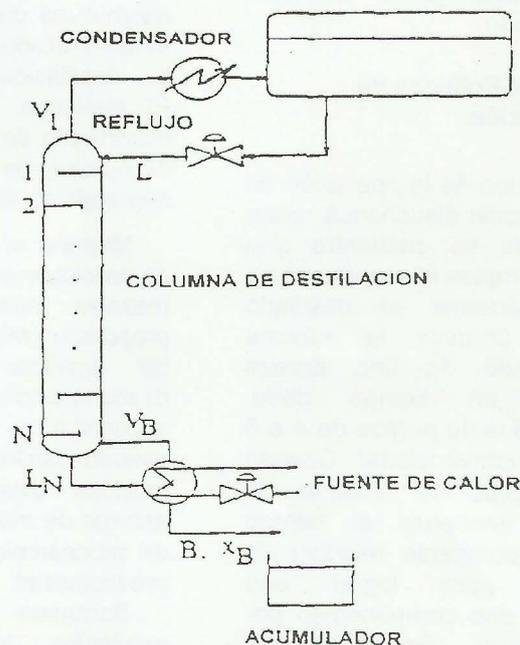


Figura 2. Esquema de una columna de destilación discontinua convencional

Stewart *et al.* [50] presenta un estudio teórico y experimental del efecto de ciertas variables de diseño, como la acumulación total, la relación de reflujo y el número de platos, en el grado de separación obtenible en la destilación batch multicomponente. Mientras que Frank [51] propone una serie de métodos cortos tanto para la destilación continua y como para la batch, así como recomendaciones prácticas para fijar el número de etapas de equilibrio, las condiciones de operación, tamaño de la columna y materiales para la construcción de la misma. En 1994 Mujtaba *et al.* [52] presenta un programa llamado ALAMBIC que es un paquete desarrollado en entorno Windows, interactivo y de fácil uso, preparado para optimizar el diseño y operación de columnas de destilación discontinua, permitiendo el trabajo con mezclas multicomponentes, e incluso para destilación discontinua reactiva. Posteriormente Mujtaba *et al.* [53] propone otro método para la optimización del diseño de la columna de destilación discontinua para operaciones de separación simples o con requerimientos complejos, e involucrando mezclas multicomponentes. Salomone *et al.* [54] presenta un procedimiento sencillo para el diseño de destilaciones batch, el

cual es equivalente al procedimiento de Fenske-Underwood-Gilliland para destilaciones continuas. Dada una tarea de separación, se propone computar el número mínimo de etapas y la relación de reflujo mínima requerida para realizar la destilación batch. Estos parámetros son algo diferentes de los parámetros continuos de  $N_{\min}$  y  $R_{\min}$  para la misma tarea de separación, debido a la diferencia en la forma de los balances de materia (estado estacionario en continuo pero los balances de masa diferenciales integrados en el caso del batch).

### Sistemas Complejos y Nuevas Configuraciones para la Destilación Discontinua.

Para mejorar la productividad de la destilación discontinua una de las estrategias recientemente desarrolladas y discutidas en la literatura [55], es la de columna invertida, propuesta originalmente por Robinson y Gilliland en 1950 [72]. En este tipo de operación la alimentación es cargada en el condensador en vez del hervidor como en las columnas convencionales, y es continuamente introducida por el tope de la columna (Figura No. 2).

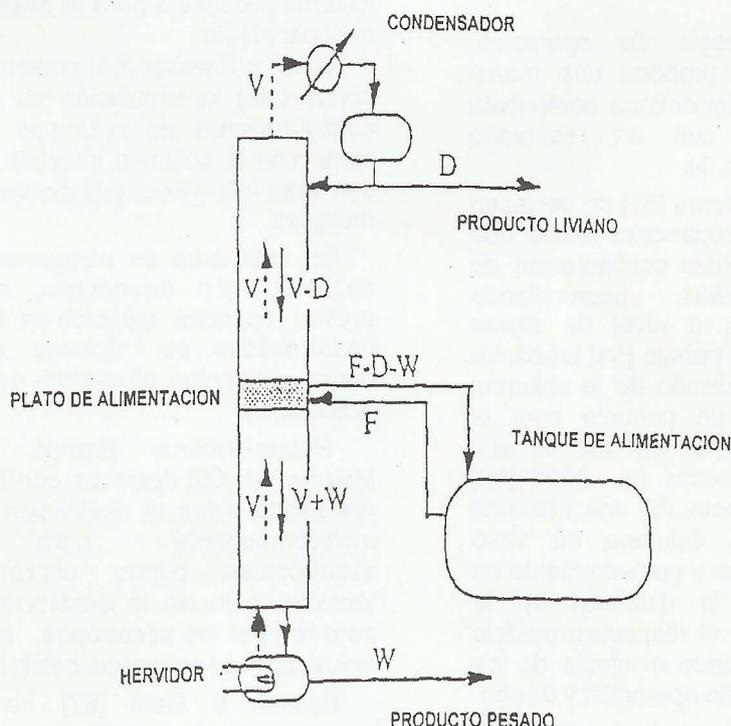


Figura 3. Esquema de una columna de destilación discontinua con vaso intermedio

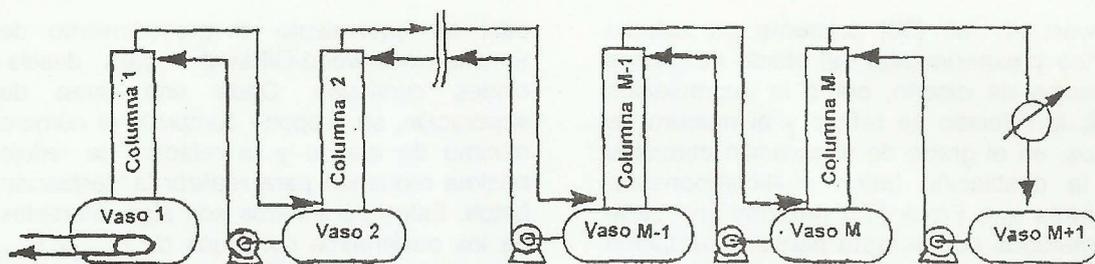


Figura 4. Esquema del sistema de destilación discontinua de múltiples efectos

En este trabajo, los autores reportaron que la columna invertida comparada con la convencional es mejor en términos de menor tiempo de operación cuando los componentes livianos están presentes en pequeñas cantidades. De igual forma se desarrolla todo un estudio sobre la conveniencia de emplear la destilación batch convencional o la invertida para lograr la separación de una mezcla dada, sobre lo cual falta aun mucho por investigar y discutir.

Otra de las variantes propuestas desde 1950 por Robinson y Gilliland [72] para mejorar el comportamiento de la operación de destilación discontinua, y que está recibiendo actualmente gran atención por parte de los investigadores en esta rama, es la columna batch con reservorios intermedios.

Bajo esta estrategia de operación, Davydian *et al.* [56] propone una nueva columna destilación discontinua compuesta de dos secciones con un reservorio intermedio (**Figura No. 3**).

Barolo y colaboradores [57] se destacan por sus recientes publicaciones en la que realizan aportes con esta configuración de reservorios intermedios, desarrollando incluso experimentos a nivel de planta piloto. En un posterior trabajo [58] proponen modificaciones en el diseño de la columna así como proponen un paquete para la simulación de la misma. En uno de sus últimos trabajos publicados en 1997 [59] comparan el rendimiento de una columna convencional con la columna de vaso intermedio a reflujo total y posteriormente en 1998 [60] estudian la dinámica de la columna, proponiendo el respectivo modelo matemático, investigando el efecto de los diferentes parámetros de operación y diseño.

Wittgens *et al.* [63] estudio la operación a reflujo total de la destilación discontinua

de vasos múltiples, realizando corridas experimentales con el esquema propuesto, las cuales son contrastadas con los resultados de las simulaciones correspondientes.

En 1995 Hasebe *et al.* [61] propone un nuevo tipo de sistema de destilación discontinua al cual denomina destilación múltiple efecto, y que logra separar los diferentes componentes de forma simultánea. El principio del sistema es que el suministro de energía se supe al hervidor sólo en la primera columna y un condensador de una columna es integrado calóricamente con el hervidor de la siguiente columna, como se muestra en la **Figura 4**. Posteriormente Noda *et al.* [62] realizan estudios para obtener las políticas de operación óptima para este tipo de sistema propuesto para la destilación batch múltiple efecto.

Lotter y Diwekar [64] presentan métodos cortos para la simulación de las diversas configuraciones de columnas discontinuas como son la columna invertida, la columna con vaso intermedio y la columna de vasos múltiples.

En esta área de esquemas complejos de destilación discontinua, se le debe prestar especial atención a los trabajos desarrollados por Doherty y colaboradores, referentes al estudio de destilación azeotrópica.

Posteriormente Bernot, Doherty y Malone [65, 66] destacan con sus estudios realizados sobre la destilación discontinua multicomponente para mezclas azeotrópicas donde utilizan diversas técnicas inclusive la destilación extractiva para romper los azeotrópos, a partir de la operación con columnas batch invertidas.

Bossen y Gani [67] han realizado trabajos para la simulación y diseño para columnas de destilación azeotrópicas

continuas y discontinuas, de mezclas binarias y ternarias.

En cuanto a la destilación discontinua extractiva los mayores aportes provienen de Safrin y Westerberg [68] que han hecho investigaciones con la finalidad de modificar la columna de destilación convencional. Así proponen una columna similar a la continua con secciones de rectificación y agotamiento, con un vaso intermedio para realizar la extracción. En un posterior trabajo dichos investigadores [69] utilizan la configuración de la columna anteriormente propuesta y examinan el uso de un agente extractivo de flujo continuo que facilite la separación de mezclas azeotrópicas.

### CONCLUSIONES

El desarrollo histórico que ha sufrido la operación de destilación discontinua, tanto en su propia concepción como operación de separación, como en la simulación, diseño y optimización de la misma ha sido notable. La configuración clásica de la columna batch aun sigue significando un reto para la tarea de simulación matemática de la misma. La solución rigurosa del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que describe esta operación, continúa siendo un procedimiento numérico que consume un gran tiempo de cómputo, sobre todo para la simulación de separaciones de mezclas complejas y multicomponentes. El nivel de complejidad y la ejecución excesivamente lenta de estas técnicas numéricas cuando se aplican a casos de comportamiento termodinámico real, ha determinado que en muchos casos se siga tratando el estudio de esta operación para sistemas binarios o ternarios, restringiéndolos a la consideración de un comportamiento ideal, lo cual continua limitando el nivel de aplicación de muchos de los simuladores propuestos.

Estas dificultades en la labor de simulación matemática de la destilación discontinua constituyen un reto en el estudio de esta operación, para lo cual se le deberá prestar especial atención a la introducción y desarrollo de métodos numéricos mas eficaces para estos fines. De igual forma se requiere la asimilación rápida de los diferentes modelos

termodinámicos para la descripción del comportamiento de las fases, a partir de las ecuaciones de avanzada para el calculo de los coeficientes de actividad y fugacidad.

A estas limitaciones en la simulación en la configuración clásica, se le contraponen una variada gama de alternativas, que aunque en algunos casos tienen casi medio siglo de propuestas, recién se han convertido en el centro de atención de los especialistas. Alternativas como la columna de destilación invertida, la columna con vasos intermedios o la configuración de la columna múltiples efectos, posibilidades de trabajo que recientemente se están combinando con la destilación batch extractiva, son variantes sobre las que aún se tendría mucho que discutir e investigar, tanto con respecto a la forma optima de operar las mismas, como en la simulación, diseño y control de lo que pudiera estar representando toda una reingeniería en la destilación discontinua.

### REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Smoker E. H., Rose A. : *Trans. AICHE*, **36**, 285(1940).
- [2] Rose A., Welshans L.M.: *Ind. Eng. Chem.*, **32**, 668(1940)
- [3] Cichelli M.T., Weatherford W.D., Bowan J.R. : *Ind. Eng. Chem.*, **42**, 2502(1950)
- [4] Rose A., Welshans L.M., Long H.H. : *Ind. Eng. Chem.*, **32**, 673(1940)
- [5] Rose A. : *Ind. Eng. Chem.*, **32**, 675(1940)
- [6] Colburn A.P., Stearns R.F.: *Trans AICHE*, **37**, 291(1941)
- [7] Rose A., Johnson C., Williams T. : *Ind. Eng. Chem.*, **42**, 2145(1950)
- [8] Rose A., Johnson C., Williams T. : *Ind. Eng. Chem.*, **43**, 2459(1951)
- [9] Rose A., Johnson C. : *Chem. Eng. Prog.*, **49**, 15(1953)
- [10] Huckaba C.E., Danly D.E. : *AICHE J.*, **6**, 335(1960)
- [11] Meadows E.L. : *Chem. Eng. Prog. Sympos. Ser-Process Systems Engineering*, **59**(46), 48(1963)
- [12] Distefano G.P. : *AICHE J.*, **14**, 191(1968)
- [13] Robinson E.R. : *Chem. Eng. Sci.*, **25**, 921(1970)

- [14] Goldman M.R. : *Brit. Chem. Eng.*, **15**, 1450(1970)
- [15] Keith F.M., Brunte J. : *Canad. J. Chem. Sci.*, **49**, 291(1971)
- [16] Domenech S., Enjalbert M. : *Chem. Eng. Sci.*, **29**, 1519(1974)
- [17] Domenech S., Enjalbert M. : *Comput. Chem. Engng.* **5**, 181(1981)
- [18] Boston J.F., Britt H.I., Jirapongphan S., Shah V.B.: *Found. Comput-Aided Chem. Processes Des.* **2**, 203(1981)
- [19] Sodomoto H., Miyaharak: *K.Kogaku Ronbunshu.*, **7**, 33(1981) *International Chem.Eng.*, **23**, 56(1983)
- [20] Lapacek J. : *Technika v Chemie*, **92**, 23(1987)
- [21] Wu W.H., Chiou T.N. : *Ind. Eng. Chem. Res.*, **28**, 1862(1989)
- [22] Diwekar U.M., Malik R.K., Madhavan K.P. : *Comput. Chem. Eng.*, **11**, 629(1987)
- [23] Diwekar U.M., Madhavan K.P., Sweney R.E.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **28**, 1011(1989)
- [24] Diwekar U.M, Madhavan K.P. : *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**, 713(1991)
- [25] Al-Tuwain M.S., Luyben W.L. : *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**, 507(1991)
- [26] Lombira J. : *PhD Dissertation*, Slovak Technical University of Bratislava, 1992.
- [27] Diwekar U.M, Madhavan K.P. : *Comp. Chem. Eng.*, **15**, 833(1991)
- [28] Bosley J., Edgar T. : *J. Process Control*, **4**, 195(1994)
- [29] Albet, J., Le Mann J.M., Joulia X., Koehret B. : *Chem. Eng. J.*, **54**, 95(1994)
- [30] Mori H., Goto H., Yang Z., Aragaki T., Koh S., Akiba I. : *J. Chem. Eng. Jpn.*, **28**, 576(1995)
- [31] Wajge R.M., Wilson J.M., Pekny J.F., Reklaitis G.V.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 1738(1997)
- [32] Tomazi K.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 4273(1997)
- [33] Villadsen J.: *Selected Aproximation Methods for Chemical Engineering Problems*, Institutet for Kemiteknik, Lingby, Denmark, 1970.
- [34] Galindez H., Fredenslund A. : *Batch Distillation Process Simulation: DISBATCHE. Phase Equilibria and Separation Process*. SEP 8505, Inst. Kemiteknik, Denmarks Tekn. Hojskole, Lungby, 1985.
- [35] Cristiansen L.J., Michelsen M.L., Fredenslund A.: *Comput. Chem. Engng.*, **3**, 535(1979)
- [36] Nad M., Spiegel L. : *Proc. Use Comput. Chem. Engng. EFCE*, 737, 1987.
- [37] Converse A.O. , Gross G.D.: *Ind. Eng. Chem. Fundamentals*, **2**(3), 217(1963)
- [38] Coward I. : *Chem. Eng. Science*, **22**, 503(1967)
- [39] Robinson E.R.: *Chem. Eng. Science*, **24**, 1661(1969)
- [40] Robinson E.R.: *Chem. Eng. Science*, **25**, 921(1970)
- [41] Quintero-Mármol E., Luyben W.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **29**, 1915(1990)
- [42] Mujtaba I.M., Macchietto S.: *Comput. Chem. Eng.*, **16** (Suppl.), S273-S280(1992)
- [43] Soerensen E., Skogestad S.: *Comput. Chem. Eng.*, **20**(Suppl. B, European Symposium on Computer Aided Process Engineering, **6**, (1996), S1257- S1262, (1996)
- [44] Mujtaba I.M., Macchietto S.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 2287(1997)
- [45] Pu Li, Arellano García H., Wozny G., Reuter E.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **37**, 1341(1998)
- [46] Wajge R.M., Reklaitis R.V.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **37**, 1910(1998)
- [47] Houtman A. , Asghar Husain A.: *Chem. Eng. Sci.*, **5**, 178(1956)
- [48] Fair J.R., Bolles W.L.: *Chemical Engineering*, April, 22, 1968.
- [49] Luyben W.: *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, **10** (1) (1971)
- [50] Stewart R., Weisman E., Goodwin B., Speight C.: *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.* **12**, (1973)
- [51] Frank O. : *Chemical Engineering*, pp. 111-128, 14 marzo de 1977.
- [52] Mujtaba I.M., Stuart G., Macchietto S.: *Dyn. Control Chem. React., Distill. Columns Batch Processes*, Postprint Vol. IFAC Symp., 4th, 135-40, 1995.
- [53] Mujtaba I.M, Macchietto S.: *J. Process Control*, **6**(1), 27(1996)
- [54] Salomone H.E., Chiotti O.J., Iribarren O.A.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 130(1997)
- [55] Soerensen E., Skogestad S.: *Chem. Eng. Sci.*, **51**(22), 4949(1996)

- [56] Davydyan A.G., Kiva V.N., Platonov V.M.: *Teor. Osn. Khim. Tekhnol.*, **25**(6), 771(1991)
- [57] Barolo M., Guarise G., Rienzi S., Trotta A., Macchietto S.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **35**(12), 4612(1996)
- [58] Barolo M., Guarise G., Ribon N., Rienzi S., Trotta A., Macchietto S.: *Comput. Chem. Eng.*, **20** (Suppl. A, European Symp. on Computer Aided Process Engineering--6 (1996), S36-S42, (1996)
- [59] Barolo M., Botteon F.: *AIChE J.*, **43**, 2601(1997)
- [60] Barolo M., Guarise G., Rienzi S., Trotta A.: *Computers Chem. Engng.*, **22**, Suppl, p. S37-44(1998)
- [61] Hasebe S., Kurooka T., Hashimoto I.: *Dyn. Control Chem. React., Distill. Columns Batch Processes*, Postprint Vol. IFAC Symp., 4th, p. 2494(1995)
- [62] Noda M., Okuyama T., Hasebe S., Hashimoto I.: *Kagaku Kogaku*, **60**(2), 128(1996)
- [63] Wittgens B., Litto R., Soerensen E., Skogestad S.: *Comput. Chem. Eng.*, **20** (Suppl. B, European Symposium on Computer Aided Process Engineering--6, 1996), S1041-S1046, 1996.
- [64] Lotter A., Diwekar U.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 760(1997)
- [65] Bernot C., Doherty M., Malone M.: *Chem. Eng. Science*, **46**, 1311(1991)
- [66] Bernot C., Doherty M., Malone M.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **32**(2), 293(1993)
- [67] Bossen B., Jorgensen S., Gani R.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **32**, 620(1993)
- [68] Safrit B., Westerberg A., Diwekar U.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **34**(10), 3257(1995)
- [69] Safrit B., Westerberg A.: *Ind. Eng. Chem. Res.*, **36**, 436(1997)
- [70] Lombira J.: "Diseño Preliminar de una Planta Industrial para la obtención de derivados del Aceite de fusel", Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas, UNFV, Lima, 1997
- [71] Castillo A., *Disertación de Tesis de Maestría en Ingeniería Química*, UNT, Trujillo, 1998.
- [72] Robinson C.S., Gilliland E.R., *Elements of Fractional Distillation*, 4<sup>a</sup>. Ed., McGraw-Hill, New York, 1950.