

SIMULACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN DISCONTINUA PARA MEZCLAS MULTICOMPONENTES UTILIZANDO MÉTODOS CORTOS

P. Romero¹, M. Otiniano C.²

RESUMEN

Se presenta un método corto para simular el comportamiento en una columna de destilación discontinua con rectificación de una mezcla ideal de multicomponentes a reflujo constante. El método se basa en considerar el comportamiento de la columna discontinua como la operación de una columna de destilación continua en cortos períodos de tiempo y utilizar el método de Fenske-Underwood-Gilliland (FUG) para estimar las composiciones del destilado.

Palabras clave: Destilación discontinua, simulación, mezclas multicomponentes, reflujo constante.

SIMULATION OF THE BEHAVIOR OF A DISCONTINUOUS DISTILLATION COLUMN FOR MULTICOMPONENT MIXTURES USING SHORT METHODS

ABSTRACT

It presents a shortcut method for to simulate the behaviour in a batch distillation column with rectification of ideal multicomponent mixture a constant reflux. The method is based to consider the behaviour of batch column how the operation of continuous distillation column in short time period and using Fenske-Underwood- Gilliland method (FUG) for to estimate the distilled compositions.

Keywords: Batch distillation, simulation, multicomponent mixtures, constant reflux.

I. INTRODUCCIÓN

La destilación discontinua es la operación unitaria más antigua utilizada para la separación de mezclas líquidas. Los historiadores sugieren que fue inventada en Alejandría en la primera centuria. Posteriormente fue utilizada por los alquimistas árabes 700 años después del nacimiento de Jesucristo para concentrar alcohol. Europa la adoptó en los años 1500 cuando se publica el primer libro sobre destilación titulado *Liber de arte distillandi*, publicado en latín.

Hoy en día es muy utilizada para la producción de bebidas alcohólicas, aceites esenciales, perfumes, productos farmacéuticos, química fina y productos especiales.

Para simular el comportamiento de una columna de destilación discontinua convencional con rectificación se dispone de una serie de paquetes comerciales como CHEMCAD, SuperPro Designer, Aspen, etc., que tienen en sus respectivos paquetes un módulo integrado para simular el comportamiento de dichas columnas. Lo que hace necesario comprar todo el paquete comercial para poder trabajar con dicho módulo, y por otro lado no existen paquetes que se dediquen a simular solo el comportamiento de dichas columnas. Por lo que se hace necesario desarrollar paquetes que se puedan utilizar para tales fines y que nos permitan predecir los resultados que se puedan obtener con diversas mezclas líquidas.

1 pedroromero@yahoo.es, Departamento de Análisis y Diseño de Procesos, FQIQ-UNMSM.

2 motiniano@unmsm.edu.pe, Departamento de Operaciones Unitarias, FQIQ-UNMSM.

Una alternativa es realizar la simulación rigurosa de la columna de destilación discontinua pero eso implica desarrollar todo un paquete que pueda sobre todo resolver e integrar todo el sistema de ecuaciones diferenciales, con los cuales se describe el comportamiento de la columna de destilación discontinua. La otra alternativa es utilizar los llamados "métodos cortos" que permiten una simulación del comportamiento de la columna sobre la base de ciertos supuestos, lo cual permite tener resultados rápidos y concretos de las mezclas líquidas que estén siendo separadas.

En el presente trabajo se implementa un método corto para simular el comportamiento de la columna de destilación discontinua convencional con rectificación utilizando un método corto que se basa en considerar la operación de la columna de destilación discontinua como una operación de una columna de destilación continua de corta duración y utilizar el método FUG, utilizado para destilación continua multicomponente, para estimar las variaciones de las composiciones del destilado y residuo en el rehervidor. La finalidad es tener un método simple y sencillo para estudiar el comportamiento de las mezclas líquidas que se deseen separar en una columna de destilación discontinua a reflujo constante.

COLUMNA DE DESTILACIÓN DISCONTINUA

Una columna de destilación discontinua con rectificación convencional consiste de un rehervidor, un condensador total y una columna de platos que están numerados del 1 al N. La mezcla líquida a ser separada es cargada en el rehervidor, donde se le adiciona calor, con lo cual se produce el cambio de fase de la mezcla. El vapor va subiendo por la columna de platos, llega al tope de la columna y pasa por el condensador total. Luego, del 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 más volátil de la mezcla alimentada. El otro flujo conocido como reflujo retorna a la columna y es puesto en contacto con el vapor que va subiendo por la columna. El flujo líquido retorna nuevamente al rehervidor pero conforme va bajando por la columna se empobrece cada vez más del componente más volátil. Mientras que el vapor conforme va subiendo por la columna se enriquece del componente más volátil hasta llegar al tope de la columna. Por lo tanto, la composición de la mezcla líquida en el rehervidor va cambiando con el tiempo, con lo que se va empobreciendo del componente más volátil hasta llegar a eliminar todo o parte del componente más volátil.

Un esquema completo de una columna de destilación discontinua convencional con rectificación se puede ver en la Figura N.º 1.

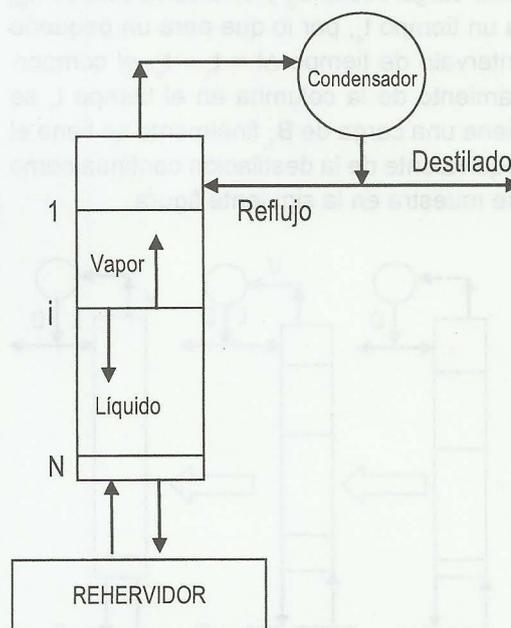


Fig. N.º 1. Esquema de una columna de destilación discontinua convencional.

Para simular el comportamiento de la columna de destilación discontinua convencional con rectificación para mezclas multicomponentes se utilizarán los siguientes supuestos.

- a) Volatilidad relativa constante.
- b) Flujo equimolar en toda la columna.
- c) Acumulación despreciable en cada plato.
- d) Equilibrio termodinámico entre el vapor y el líquido que sale de cada plato.
- e) Acumulación despreciable de vapor y líquido en el condensador total.

El método corto se basa en asumir que la operación de la destilación discontinua puede ser representada por una serie de operaciones de destilación continua de corta duración y empleando el método corto de Fenske - Underwood-Gilliland¹ (FUG) que es utilizado en los cálculos en destilación multicomponente continua, para estimar las composiciones del destilado. Para lo cual se utiliza el esquema que propone Galíndez y Fredenslund^[2], donde se empieza con una carga inicial B_0 y una composición x_{B_0} a un tiempo t_0 , por lo que para un pequeño intervalo de tiempo $\Delta t = t_1 - t_0$, el comportamiento de la columna en el tiempo t_1 se tiene una carga de B_1 , finalmente se tiene el equivalente de la destilación continua como se muestra en la siguiente figura.

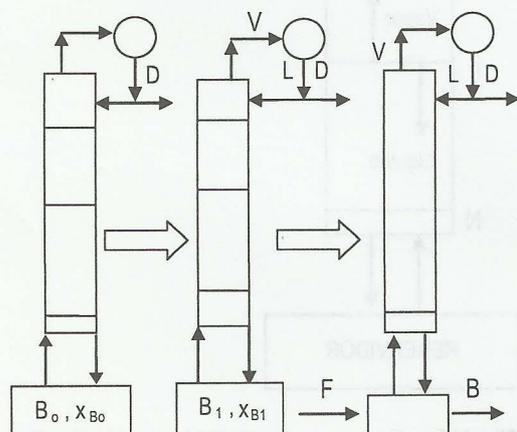


Fig. N.º 2. Esquema de operación de la columna destilación continua.

De acuerdo con la figura en el equivalente a la columna de destilación continua, teniendo a la alimentación F al rehervidor como la carga inicial B_0 , el producto destilado D y el producto del rehervidor que sería B_1 .

Un balance de materia en el condensador de la columna como se ve en la Figura 3 se tendrá:

$$V = L + D \quad (1)$$

La relación de reflujo R es definida por:

$$R = \frac{L}{D} \quad (2)$$

Por lo que finalmente:

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

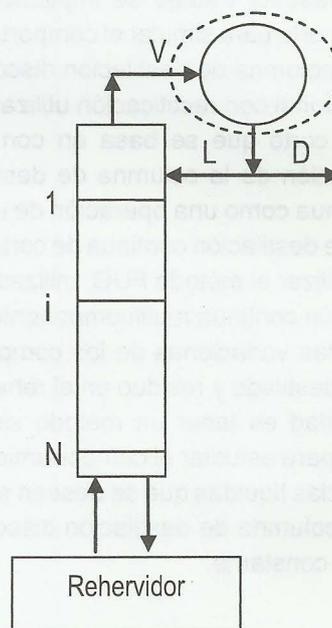


Fig. N.º 3. Balance de materia en el condensador total.

Para la operación de destilación continua equivalente un balance de materia para un Δt :

$$F = B + D \quad (3)$$

Un balance por componente:

$$F x_{F_i} = B x_{B_i} + D x_{D_i} \quad (4)$$

Se halla el nuevo valor de x_B :

$$x_{B_i \text{ nuevo}} = \frac{F x_{F_i} - D x_{D_i}}{B} \quad (5)$$

A tiempo $t = 0$ entonces:

$$x_{F_i} = x_{B_{0i}}$$

Para los restantes tiempos $x_{B_{i+1}}$ de la actual etapa de destilación será el nuevo valor de x_{F_i} en la siguiente etapa de la destilación. Las composiciones del destilado iniciales se calculan a reflujo total.

Se tiene la ecuación de Fenske para número mínimo de etapas:

$$N_{\min} = \frac{\text{Log} \left[\left(\frac{x_{D_i}}{x_{W_i}} \right) \left(\frac{x_{W_r}}{x_{D_r}} \right) \right]}{\text{Log} (\alpha_{i,r})} \quad (6)$$

Lo cual se resuelve:

$$x_{D_i} = x_{B_i} \left(\frac{x_{D_r}}{x_{B_r}} \right) \alpha_{i,r}^{N_{\min}} \quad (7)$$

Donde i se refiere al componente de la carga inicial y r es el componente de referencia, por lo general, el menos volátil de la mezcla. Luego:

$$\sum_{i=1}^n x_{D_i} = 1.0 \quad (8)$$

Luego n es el número de componentes de la carga inicial. Sustituyendo la ecuación (7) en (8) da:

$$x_{D_r} = \frac{x_{B_r}}{\sum_{i=1}^n x_{B_i} \alpha_{i,r}^{N_{\min}}} \quad (9)$$

Las composiciones iniciales del destilado a reflujo total se calculan con la ecuación (9) y luego las restantes composiciones del destilado se harán con la ecuación (7).

Una ecuación conveniente que relaciona el N_{\min} con el número real de etapas es la ecuación propuesta por Eduljee:

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 0.751 - \left[\left(\frac{R - R_{\min}}{R + 1} \right)^{0.5668} \right] \quad (10)$$

Por lo que será necesario el valor de reflujo mínimo R_{\min} , para lo cual se utiliza la ecuación de Underwood, asumiendo que todos los componentes de la carga se distribuyen entre los dos productos.

$$R_{\min} = \frac{\left(\frac{x_{D_{LK}}}{x_{B_{LK}}} \right) - \alpha_{LK, HK} \left(\frac{x_{D_{HK}}}{x_{B_{HK}}} \right)}{\alpha_{LK, HK} - 1} \quad (11)$$

Donde LK es el componente más volátil y HK es el componente más pesado de la carga inicial. Luego la ecuación (7) y (9) se reemplazan en (11), teniendo en cuenta $r = HK$:

$$R_{\min} = \frac{\alpha_{LK, HK}^{N_{\min}} - \alpha_{LK, HK}}{(\alpha_{LK, HK} - 1) \sum_{i=1}^n x_{B_i} \alpha_{i, HK}^{N_{\min}}} \quad (12)$$

Finalmente, el procedimiento será que para una carga inicial de concentración conocida, se realiza una operación inicial a reflujo total para calcular los valores de destilado iniciales utilizando la ecuación (7). Se dan valores especificados de número de etapas N y relación de reflujo R con lo cual se halla R_{\min} y N_{\min} simultáneamente por un proceso iterativo con las ecuaciones (10) y (12). Como los valores de N_{\min} y R_{\min} cambian con el tiempo, se pueden hallar los valores de destilado con el N_{\min} hallado reemplazando en la ecuación (7). Con la ecuación (5) se halla los nuevos valores de x_B , en la siguiente etapa de destilación esos valores de x_B reemplazarán a x_F . Este método se utiliza para la modalidad de operación de una columna de destilación a reflujo constante.

EJEMPLO^[5]

Una carga inicial (F) de 100 kmoles de una mezcla ternaria de composición 33% molar de A, 33% molar de B y 34% molar de C son destilados en una columna de destilación discontinua de tres etapas, incluyendo el rehevador, con una relación de reflujo de 10 y V = 110 kmoles/h. Estimar la variación en el rehevador, las composiciones del destilado instantáneo y el destilado acumulado como función del tiempo, previamente se realiza una operación inicial a reflujo total. Utilice $\alpha_{AC} = 2.0$ y $\alpha_{BC} = 1.5$.

Para el período inicial a reflujo constante se utiliza la ecuación (9) con N = 3.

$$x_{Dc} = \frac{0.34}{0.33(2)^3 + 0.33(1.5)^3 + 0.34(1)^3} = 0.0831$$

Luego se utiliza la ecuación (7):

$$x_{DA} = 0.33 \left(\frac{0.0831}{0.34} \right) 2^3 = 0.6449$$

$$x_{DB} = 0.33 \left(\frac{0.0831}{0.34} \right) 1.5^3 = 0.2720$$

Para $\Delta t = 0.5$ h

$$B = F - D = F - \left(\frac{V}{R + 1} \right) \Delta t = 95$$

Las nuevas composiciones de x_B se hallan con la ecuación (5).

$$x_{BA} = \frac{(100)(0.33) - (0.6449)(5)}{95} = 0.3134$$

$$x_{BB} = \frac{(100)(0.33) - (0.2721)(5)}{95} = 0.3330$$

$$x_{BC} = \frac{(100)(0.34) - (0.0831)(5)}{95} = 0.3535$$

Con la ecuación (10):

$$\frac{3 - N_{\min}}{3 + 1} = 0.75 \left[1 - \left(\frac{10 - R_{\min}}{10 + 1} \right)^{0.5668} \right]$$

Y la ecuación (12):

$$R_{\min} = \frac{2^{N_{\min}} - 2}{(2-1) [0.3134(2)^{N_{\min}} + 0.333(1.5)^{N_{\min}} + 0.3535(1)^{N_{\min}}]}$$

Se resuelve ambas ecuaciones encontrando $N_{\min} = 2.6292$ y $R_{\min} = 1.2845$ para hallar los nuevos valores de destilado:

$$x_{Dc} = \frac{0.3535}{0.3134(2)^3 + 0.333(1.5)^3 + 0.3535(1)^3} = 0.1085$$

$$x_{DA} = 0.3134 \left(\frac{0.1085}{0.3535} \right) 2^3 = 0.5949$$

$$x_{DB} = 0.3330 \left(\frac{0.1085}{0.3535} \right) 1.5^3 = 0.2967$$

Los resultados completos se presentan a continuación. En la Tabla N.º 1 se presentan los resultados obtenidos para el proceso iterativo, con lo cual se obtienen los resultados de N_{\min} y R_{\min} para cada tiempo.

Tabla N.º 1. Resultados obtenidos de N_{\min} y R_{\min}

t	B	N_{\min}	R_{\min}
0	100		
0.5	95	2.6292	1.2845
1.0	90	2.6244	1.3124
1.5	85	2.6191	1.3435
2.0	80	2.6131	1.3785
2.5	75	2.6062	1.4186
3.0	70	2.5987	1.4619
3.5	65	2.5900	1.5119
4.0	60	2.5801	1.5694
4.5	55	2.5685	1.6359
5.0	50	2.5551	1.7130

En la Tabla N.º 2 se muestran los resultados de la composición del destilado en el tiempo para los tres componentes.

Tabla N.º 2. Resultados obtenidos para la variación de la composición del destilado en el tiempo para los componentes A, B y C.

t	B	A	B	C
0	100	0.3300	0.3300	0.3400
0.5	95	0.3134	0.3330	0.3535
1.0	90	0.2978	0.3351	0.3671
1.5	85	0.2813	0.3368	0.3819
2.0	80	0.2638	0.3381	0.3981
2.5	75	0.2454	0.3389	0.4157
3.0	70	0.2259	0.3389	0.4351
3.5	65	0.2054	0.3381	0.4565
4.0	60	0.1838	0.3360	0.4803
4.5	55	0.1611	0.332	0.5067
5.0	50	0.1374	0.3263	0.5363

En la Tabla N.º 3 se muestran los resultados de la composición del rehervidor con respecto al tiempo para los tres componentes de la mezcla A, B y C.

Tabla N.º 3. Resultados obtenidos para la variación de la composición en el rehervidor para los componentes A, B y C.

t	B	A	B	C
0	100	0.6449	0.2721	0.0831
0.5	95	0.5949	0.2967	0.1085
1.0	90	0.5784	0.3059	0.1157
1.5	85	0.5603	0.3158	0.1238
2.0	80	0.5403	0.3265	0.1332
2.5	75	0.5180	0.3379	0.1441
3.0	70	0.4930	0.3502	0.1567
3.5	65	0.4650	0.3633	0.1717
4.0	60	0.4334	0.3772	0.1894
4.5	55	0.3975	0.3916	0.2108
5.0	50	0.3568	0.4062	0.2369

En la Tabla N.º 4 se muestran los resultados de la composición promedio del destilado acumulado para los tres componentes lo cual se calcula con la siguiente fórmula.

$$X_{D_{promedio}} = \frac{B_{0_i} X_{B_{0_i}} - B_i X_{B_i}}{D}$$

Lo que indica es la concentración promedio en el destilado en la medida que se acumule el destilado en un recipiente.

Tabla N.º 4. Variación de la composición del destilado acumulado para los tres componentes.

t	B	A	B	C
0	100			
0.5	95	0.6449	0.2721	0.0831
1.0	90	0.6199	0.2844	0.0958
1.5	85	0.6061	0.2916	0.1024
2.0	80	0.5946	0.2976	0.1077
2.5	75	0.5838	0.3034	0.1128
3.0	70	0.5728	0.3091	0.1181
3.5	65	0.5614	0.3150	0.1236
4.0	60	0.5494	0.3211	0.1296
4.5	55	0.5365	0.3273	0.1362
5.0	50	0.5226	0.3337	0.1437

En la Figura N.º 4 se puede ver en la gráfica el comportamiento de los tres componentes del destilado con respecto al tiempo, donde se notará que la composición de A va bajando en tanto que B y C suben en el tiempo.

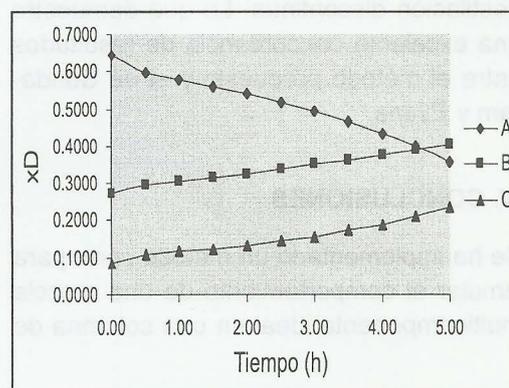


Fig. N.º 4. Comportamiento de la composición del destilado con respecto al tiempo.

En la Figura N.º 5 se puede ver igualmente el comportamiento de la composición del rehervidor en el tiempo, donde A, que es el más volátil disminuye, mientras la composición de B se mantiene casi constante, la de C aumenta.

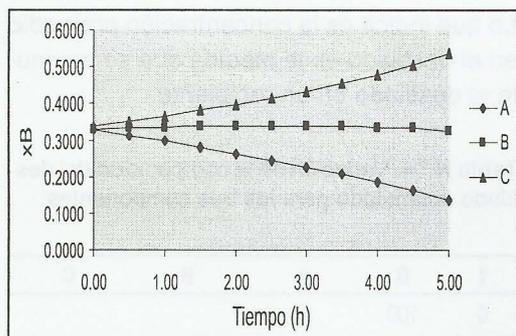


Fig. N.º 5. Comportamiento de la composición del rehervidor con respecto al tiempo.

Finalmente, se hace la comparación de los resultados obtenidos para el componente más volátil A del método propuesto con los resultados que se obtienen con un método corto propuesto por Sundaram y Evans^[3,5], donde se nota que no hay mayores diferencias, como se puede notar en la Figura N.º 6. Se tiene que tener cuenta que los resultados obtenidos por el método propuesto por Sundaram y Evans fueron comparados con resultados de simulaciones con métodos rigurosos dando excelentes resultados^[3]. Por otro lado, dicho método ha sido adoptado por el paquete SuperPro Designer versión 7.0 para hacer los cálculos de destilación discontinua. Lo que demuestra una excelente concordancia de resultados entre el método propuesto y el de Sundaram y Evans.

IV. CONCLUSIONES

Se ha implementado un método corto para simular el comportamiento de una mezcla multicomponente ideal en una columna de

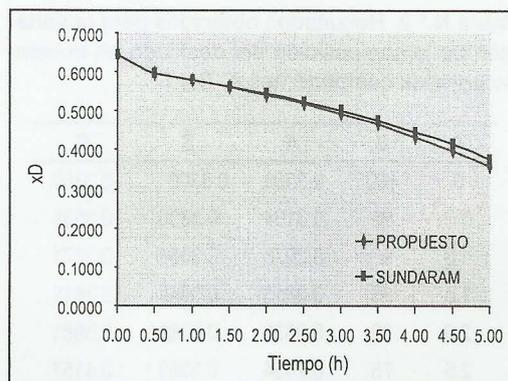


Fig. N.º 6. Comparación de los métodos de Sundaram y Propuesto.

destilación discontinua a reflujo constante con resultados satisfactorios, con lo cual se tiene a disposición un método para simular el comportamiento de diversas mezclas líquidas.

V. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Mujtaba IM. Batch Distillation: Design and Operation. Londres: Imperial College Press, 2004. p. 11.
- [2] Galindez H y Fredenslund A. Comput. Chem. Engng. 1988. Vol. 12, 281-288.
- [3] Sundaram S, Evans L. Ind. Eng. Chem. Res., 1993. Vol 32, 511-518.
- [4] Diwekar U. Batch Distillation: Simulation, optimal design and control. Washington: Taylor & Francis; 1995, p. 15.
- [5] Seader JD, Henley E, Separation process principles, John Wiley & Sons, 2005. p. 469.