

SIMULACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE UNA MEZCLA DE MULTICOMPONENTES EN LA DESTILACIÓN DISCONTINUA SIMPLE

M. Otiniano C.¹

RESUMEN

Se ha desarrollado un modelo matemático para simular el comportamiento de mezclas multicomponentes en la destilación discontinua simple utilizando la ecuación de Rayleigh que permite observar el comportamiento de los componentes en el destilado y en el residuo.

Palabras Claves: Destilación simple, mezclas multicomponentes, Ecuación de Rayleigh.

SIMULATION OF THE BEHAVIOR OF A MULTICOMPONENT MIXTURE IN SIMPLE BATCH DISTILLATION

ABSTRACT

We have developed a mathematical model for simulating the behavior of multicomponent mixtures on the single batch distillation using Rayleigh equation which can observe the behavior of components in the distillate and residue.

Keywords: Simple Distillation, Multicomponents mixtures, Rayleigh equation.

I. INTRODUCCIÓN

La destilación batch o discontinua es quizás la más antigua operación utilizada para la separación de mezclas líquidas. Los más antiguos antecedentes sobre su uso provienen de Alejandría, Egipto en el primer Siglo de nuestra Era. En el onceavo siglo en el norte de Italia ya se le utilizaba para la producción de bebidas alcohólicas. En 1597 Libavius describió un equipo de destilación discontinua utilizado para destilar alcohol en su libro "The Alchemy of Andres Libavius"^[1]. Por siglos y aún hoy día, ha sido ampliamente utilizada para la producción de productos químicos finos y productos especializados como las bebidas alcohólicas, aceites esenciales, perfumes y productos

derivados del petróleo. Es una importante operación unitaria frecuentemente utilizada en procesos por lotes para la producción a escala reducida y en los laboratorios.

En la mayor parte de los casos el objetivo de la destilación discontinua es recuperar el componente más volátil de una mezcla alimentada con un alto grado de pureza, dejando a los componentes más pesados en el rehervidor.

La destilación batch o discontinua es preferida cuando:

- Se requiera separar pequeñas mezclas;
- Exista mucha variabilidad en la composición de la carga inicial a separar;

¹ meotiniano@yahoo.com; D. A. de Operaciones Unitarias, Facultad de Química e Ingeniería Química, Universidad Nacional Mayor de San Marcos.

- Las especificaciones del producto cambian durante el tiempo de operación;
- Se requiere alta pureza de un determinado compuesto;
- El seguimiento de la producción de un determinado producto es lo más importante;
- La carga alimentada tiene sólidos, esto es partículas muy pequeñas en la solución cargada al rehervidor.

Las siguientes son las ventajas que presenta utilizar la destilación discontinua:

- Es muy flexible para adaptarse a diferentes cargas y composiciones de la alimentación;
- Implementación precisa de una receta bajo mecanismos de control y/o seguimiento del proceso;
- Se separan varios componentes usando una sola columna;
- Requiere menos capital que otros procesos que efectúen la misma separación requerida.

La destilación simple también llamada destilación diferencial o destilación de una sola etapa es el caso más simple de la destilación discontinua y fue estudiada por Lord Rayleigh en 1902. Como se muestra en la figura N.º 1 consiste de un rehervidor, un condensador y un tanque para coleccionar el destilado obtenido. Se carga un lote de una mezcla líquida con dos o más componentes a separar, en el rehervidor, el cual está equipado con un dispositivo de calentamiento. La carga líquida se hierve lentamente y los vapores formados se descargan en un condensador tan pronto como se forman, luego el condensado llamado destilado se almacena en el tanque colector. La primera porción del condensando o destilado estará enriquecido del componente más volátil de la mezcla líquida inicial y conforme continúa la destilación el destilado se va empobreciendo del componente más volátil.

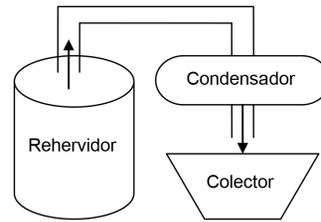


Figura N.º 1. Destilación discontinua simple.

El destilado se puede recolectar en varios lotes separados, llamados fracciones, obteniéndose una serie de productos destilados de diferente pureza. En cambio en el rehervidor se quedarán los componentes menos volátiles de la mezcla inicial. Si por ejemplo, se tiene una mezcla ternaria que contiene una pequeña cantidad del componente más volátil A, un segundo componente B de volatilidad intermedia y un tercer componente C de baja volatilidad y en pequeña cantidad. Se formará una primera fracción, que será pequeña, pero que contendrá la mayor parte del componente más volátil A, una segunda fracción contendrá la mayor parte del componente B, pero con algo de A y C y en el rehervidor quedará un residuo con la mayor parte del componente C, el menos volátil.

El equipo utilizado para la destilación discontinua simple es en realidad una réplica a gran escala del equipo de destilación ordinario de laboratorio. El balón ha sido reemplazado por el rehervidor y se utiliza como condensador el refrigerante de laboratorio, así como un matraz para recolectar el destilado como se puede ver en la figura N.º 2.

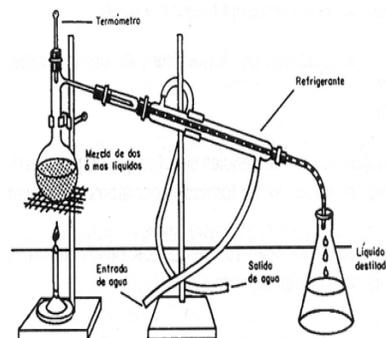


Figura N.º 2. Equipo de destilación de laboratorio.

II. ANTECEDENTES

Para el estudio del comportamiento de las mezclas multicomponentes para la destilación simple utilizando la ecuación de Rayleigh se han hecho propuestas por parte de Fair^[1], Treybal^[2] y Seader ^[3] las cuales no son fáciles de aplicar para poder observar los perfiles de las concentraciones de los componentes en el destilado y en el residuo a diferentes relaciones de destilado a alimentación. Kim^[4] presentó un modelo matemático basado en la ecuación de Rayleigh pero utilizando el concepto de la vaporización fraccional de cada componente en cada instante. Si bien este modelo está dentro de un modelo más completo para la simulación de la destilación discontinua en columna de platos a reflujo total, dicho modelo propuesto se puede aplicar a la destilación discontinua simple. Liu^[5] presentó un modelo matemático basado en la Ecuación de Rayleigh que fue implementado en un programa de Microsoft Excel Visual Basic el cual permite el cálculo de las composiciones del destilado y del residuo.

III. MODELO TEÓRICO

La destilación diferencial o destilación discontinua simple presenta las siguientes características:

- No hay reflujo.
- En cualquier instante, el vapor que deja el rehervidor con una composición basado en el componente más volátil y_D se asume que está en equilibrio con la carga líquida perfectamente mezclada que está en el rehervidor.
- La composición del destilado recolectado varía con el tiempo.
- La composición del producto destilado es un promedio de los componentes recolectados.
- La composición del residuo que queda en el rehervidor varía con el tiempo.
- La temperatura del rehervidor varía con el tiempo.
- Hay una sola etapa de equilibrio que se da en el rehervidor.
- Mezcla perfecta para ambas fases líquida y vapor.
- Un tanque colector de destilado inicialmente vacío.
- Una velocidad constante de ebullición.

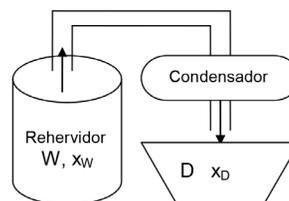


Figura N.º 3. .Esquema de la destilación simple.

Se carga una mezcla inicial F en moles de composición x_F en el rehervidor. Se comienza a calentar la mezcla la cual se va vaporizando, el vapor que sale del rehervidor tiene una composición y_D . El vapor se condensa al pasar por el condensador y se recolecta el destilado líquido D en moles con una composición x_D . En el rehervidor va quedando la mezcla líquida W en moles con una composición x_W .

Para cualquier componente en la mezcla la velocidad instantánea de salida o de destilado es igual a la velocidad de agotamiento en el rehervidor por lo que un balance de materia en cualquier instante en el sistema:

$$\frac{d}{dt}(Wx_w) = -Dy_D$$

Esta es la llamada Ecuación de Rayleigh que se aplica a la destilación discontinua simple. Si esta ecuación se aplica a dos componentes cualesquiera, "i" y "j", de una mezcla multicomponente y además M_i son las moles de "i" en el rehervidor:

$$W_i = Wx_{w_i}$$

$$\frac{dW_i}{dt} = \frac{d(Wx_{W_i})}{dt} = -Dy_{D_i}$$

Lo mismo para el componente "j":

$$\frac{dW_j}{dt} = \frac{d(Wx_{W_j})}{dt} = -Dy_{D_j}$$

Luego:

$$\frac{dW_i}{dW_j} = \frac{y_{D_i}}{y_{D_j}} \quad (A)$$

Si consideramos volatilidad relativa constante:

$$\alpha_{i,j} = \frac{y_{D_i} x_{W_j}}{y_{D_j} x_{W_i}}$$

Reemplazamos volatilidad relativa en la ecuación (A) tendremos:

$$\frac{dW_i}{dW_j} = \frac{y_{D_i}}{y_{D_j}} = \alpha_{i,j} \left(\frac{x_{W_i}}{x_{W_j}} \right) \quad (B)$$

Sustituimos :

$$W_i = Wx_{W_i}$$

$$W_j = Wx_{W_j}$$

$$\frac{dW_i}{W_i} = \alpha_{i,j} \frac{dW_j}{W_j}$$

Que integrando desde una carga inicial "0" dará:

$$\ln\left(\frac{W_i}{F_i}\right) = \alpha_{i,j} \ln\left(\frac{W_j}{F_j}\right)$$

Pero:

$$F_i = Fx_{F_i}$$

$$F_j = Fx_{F_j}$$

Reemplazando:

$$\ln\left(\frac{Wx_{W_i}}{Fx_{F_i}}\right) = \alpha_{i,j} \ln\left(\frac{Wx_{W_j}}{Fx_{F_j}}\right)$$

Esta ecuación relaciona las concentraciones de la alimentación inicial de los componentes "i" y "j" con las concentraciones de los mismos componentes en el rehervidor conforme se avance en la destilación.

Si consideramos al componente "k" como el componente más pesado de una mezcla multicomponente se reemplaza por "j" se tendrá:

$$\ln\left(\frac{Wx_{W_i}}{Fx_{F_i}}\right) = \alpha_{i,k} \ln\left(\frac{Wx_{W_k}}{Fx_{F_k}}\right)$$

$$\left(\frac{W_i}{F_i}\right)^{1/\alpha_{i,k}} = \left(\frac{W_k}{F_k}\right)$$

Donde i= A,B,C,D,...

Para resolver este modelo se propone una fracción de residuo que queda en el rehervidor para el componente "i":

$$\phi_i = \frac{W_i}{F_i}$$

Para el componente más pesado "k":

$$\phi_k = \frac{W_k}{F_k}$$

En función de esta fracción de residuo del más pesado se puede resolver la ecuación para cada componente:

$$\left(\frac{W_i}{F_i}\right) = \left(\frac{W_k}{F_k}\right)^{\alpha_{i,k}}$$

$$(\phi_i) = (\phi_k)^{\alpha_{i,k}}$$

$$W_i = F_i(\phi_k)^{\alpha_{i,k}}$$

Podemos determinar la cantidad total de moles que queda en el residuo ya que la cantidad de moles alimentados inicialmente se conoce:

$$W = \sum_{i=1}^n W_i$$

Donde i= A,B,C,D,...

Se puede determinar las concentraciones de cada componente en el residuo:

$$x_{W_i} = \frac{W_i}{W}$$

Cumpliendo la restricción que:

$$\sum_{i=1}^n x_{D_i} = 1$$

Las concentraciones del destilado en cualquier momento se calculan con las siguientes ecuaciones:

$$D_i = F_i - W_i$$

$$D = \sum_{i=1}^n D_i$$

$$x_{D_i} = \frac{D_i}{D}$$

IV. EJEMPLO DE APLICACIÓN:

Se propone una alimentación F de 100 moles compuesta de cuatro componentes donde el componente D es el componente más pesado (k):

Tabla N.º 1. Composición mezcla de alimentación

Comp. i	F _i	α _{i,D}
A	25	10
B	25	3
C	25	2
D	25	1
Total	100	

$$\phi_D = \frac{W_D}{F_D} = 0.75$$

Para el componente A:

$$W_A = F_A(\phi_D)^{\alpha_{A,D}}$$

$$W_A = 25(0.75)^{10}$$

Para el componente B:

$$W_B = F_B(\phi_D)^{\alpha_{B,D}}$$

$$W_B = 25(0.75)^3$$

Para el componente C:

$$W_C = F_C(\phi_D)^{\alpha_{C,D}}$$

$$W_C = 25(0.75)^2$$

Los resultados para la composición del residuo en el rehervidor y del destilado obtenido se muestran en la Tabla N.º 2 y N.º 3:

Tabla N.º 2. Composición del residuo en el rehervidor

Comp. i	W _i	X _{wi}
A	1.408	0.031
B	10.547	0.236
C	14.063	0.314
D	18.750	0.419
Total	44.767	1.000

Tabla N.º 3. Composición del destilado

Comp. i	F _i	X _{Di}
A	23.592	0.427
B	14.453	0.262
C	10.938	0.198
D	6.250	0.113
Total	55.233	1.000

Se encuentra los valores de:

$$\frac{W}{F} = \frac{44.767}{100} = 0.447$$

$$\frac{D}{F} = 1 - 0.447 = 0.553$$

Podemos obtener los valores para distintas relaciones D/F el comportamiento de los componentes que quedan en el rehervidor como se muestra en la Tabla N.º 4 y en la Figura N.º 4.

Tabla N.º 4. Composición del residuo del rehervidor a distintas relaciones D/F

D/F	x _{WA}	x _{WB}	x _{WC}	x _{WD}
0.0	0.25	0.25	0.25	0.25
0.1	0.209	0.255	0.262	0.270
0.2	0.170	0.260	0.277	0.294
0.3	0.127	0.262	0.290	0.322
0.4	0.084	0.258	0.302	0.355
0.5	0.047	0.247	0.312	0.395
0.6	0.020	0.224	0.315	0.444
0.7	0.006	0.185	0.306	0.505
0.8	0.001	0.132	0.279	0.591
0.9	0.000	0.061	0.210	0.720
1.0	0.000	0.000	0.000	0.800

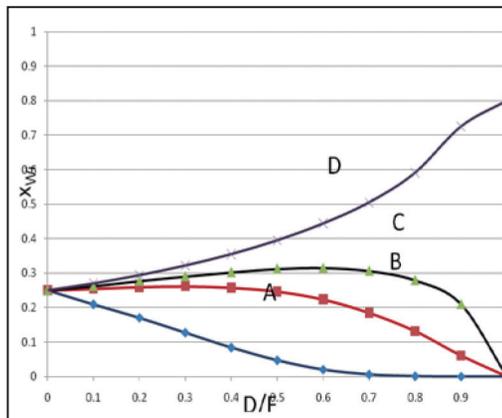


Figura N.º 4. Variación de la composición del residuo a diferentes D/F.

Para distintos valores de D/F obtenemos los valores de los componentes en el destilado y su comportamiento se puede observar en la gráfica 5.

Tabla N.º 5. Composición del destilado a distintas relaciones D/F

D/F	X_{DA}	X_{DB}	X_{DC}	X_{DD}
0.1	0.618	0.204	0.138	0.070
0.2	0.571	0.209	0.144	0.074
0.3	0.538	0.223	0.156	0.082
0.4	0.499	0.238	0.171	0.093
0.5	0.453	0.253	0.188	0.105
0.6	0.403	0.267	0.206	0.121
0.7	0.355	0.278	0.226	0.141
0.8	0.312	0.279	0.243	0.165
0.9	0.278	0.271	0.254	0.197
1.0	0.250	0.250	0.250	0.250

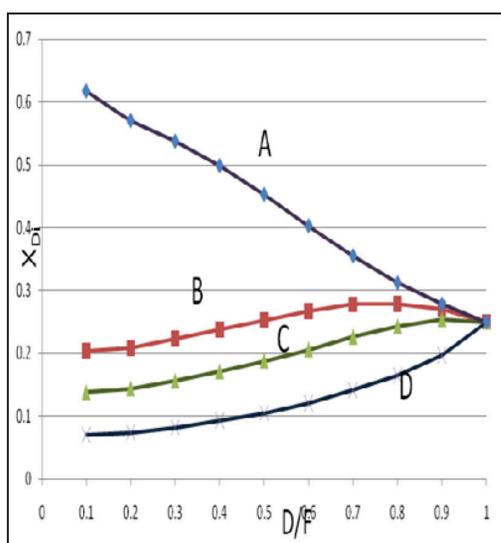


Figura N.º 5. Variación de la composición del destilado a diferentes D/F.

V. CONCLUSIONES

Se ha propuesto un modelo matemático que permite simular el comportamiento de mez-

clas multicomponentes tanto en el destilado como en el residuo para la destilación simple utilizando la ecuación de Rayleigh en base a la fracción del componente más pesado en el residuo que queda en el rehervidor.

VI. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Stichlamir J., Fair J. Distillation. Wiley-VCH, New York, 1998.
- [2] Treybal R. Operaciones de Transferencia de Masa. McGraw-Hill Interamericana de México S.A. de C.V. Segunda Edición. 1988.
- [3] Seader J.D., Henley E. Separation Process Principles, John Wiley & Sons, Tercera edición, New Jersey. 2011.
- [4] Kim, J.K., Ju D.P. Shortcut Procedure for Multicomponent Batch Distillation with Distillate Receiver, Ind. Eng. Chem. Res. 1999; 38; 1024-1031.
- [5] Liu S., Peng M. The Simulation of the simple batch distillation of multiple-component mixtures via Rayleigh's Equation, Computer Applications in Engineering Education; 2007, 15(2); 198-204.
- [6] P. Wankat. Ingeniería de Procesos de Separación. Segunda Edición. Pearson Prentice-Hall, México, 2008.
- [7] Perry R. Manual del Ingeniero Químico, McGraw-Hill Interamericana de España, Séptima edición, Madrid, 1997.