

# Modelización avanzada de columnas de destilación de operación discontinua

Memoria de Tesis Doctoral  
presentada por  
Arndt Mehlhorn  
para optar al grado de  
Doctor Ingeniero Industrial  
por la Universitat Politècnica de Catalunya

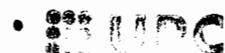
Barcelona, Octubre 1998

Departament d'Enginyeria Química  
Escola Tècnica Superior d'Enginyers Industrials de Barcelona  
Universitat Politècnica de Catalunya

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA  
Biblioteca



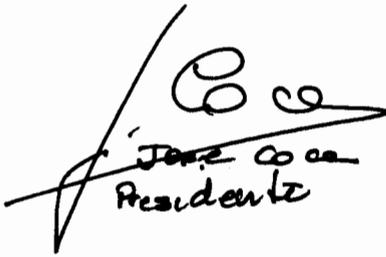
1400336631



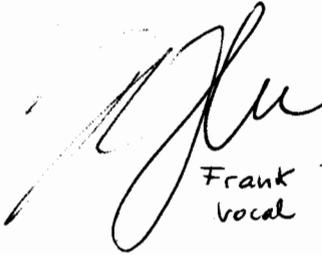
BIBLIOTECA RECTOR GABRIEL FERRATÉ  
Campus Nord

EXCELUENT COM LAUDE

9- DESEMBRE - 1998

  
Jose Coce Prado  
Presidentz

Hugo Hartmann  
(Hugo Hartmann)  
Vocal

  
Frank Zhu  
Vocal

  
Edward Barberi Mord  
Vocal

  
J. M. S. Ous  
Secretari

Aquesta tesi ha estat enregistrada  
amb el núm. 381

## Agradecimientos

Deseo hacer constar mi agradecimiento a todas las personas e instituciones que directa o indirectamente han contribuido en la elaboración de esta tesis doctoral:

- El trabajo que aquí se refleja se ha realizado bajo la dirección y supervisión del Dr. Ingeniero Industrial Luis Puigjaner Corbella, catedrático de la Universidad Politécnica de Cataluña en el Departamento de Ingeniería Química. Sus sugerencias, sus consejos y su constante empuje han contribuido de forma decisiva a mejorar el nivel de esta tesis. Especialmente le debo agradecer la financiación de la planta piloto, cuyo uso permitió la validación experimental importante de la teoría desarrollada.
- El ambiente de trabajo y colaboración creado por todos mis compañeros del grupo "Tecnología Química General" sin duda ha favorecido la resolución de los problemas que se han planteado durante la elaboración de esta tesis. Merecen una mención especial las aportaciones por parte de la Dra. M<sup>a</sup> Angels Larrayoz y la Dra. Ana M<sup>a</sup> Sastre por resolver dudas en el tema de análisis vía cromatografía y titración. También quiero mencionar las discusiones frecuentes y fructuosas llevados a cabo con los compañeros José M<sup>a</sup> Nougués y Enrique Font.
- Hay algunos estudiantes, que han colaborado en el desarrollo de la tesis. Estos han sido en la parte experimental Margarita Folch, Montserrat Prieto y Carmen Ramírez; en pruebas del programa colaboró Silke Jünemann.
- A la universidad de Dortmund, Alemania, y especialmente a Prof. Dr.-Ing. Andrzej Górak le debo agradecer de haber cedido algunos componentes para la planta piloto y literatura sobre el tema de la transferencia de materia en sistemas multicomponentes.

Sin duda esta lista no está completa, ya que han sido muchas personas que contribuyeron con sus comentarios, críticas y sugerencias. A todos ellos dedico mi agradecimiento.

**Índice:**

<b>1. Introducción</b>	<b>9</b>
1.1. Modelos de simulación para la destilación y estado del arte	12
1.2. Objetivos	15
<b>2. Diseño de planta piloto y construcción</b>	<b>17</b>
2.1. Tipo de columna y material	17
2.2. Instrumentación	18
2.2.1. Termoelementos	20
2.2.2. Sensores de presión	20
2.2.3. Balanza	21
2.2.4. Caudalímetro	21
2.2.5. Captación de señales	22
2.3. Cálculo de los variables de diseño	22
2.3.1. Potencia de calefacción	24
2.3.2. Tamaño del calderín	25
2.3.3. Superficie del condensador	25
2.3.4. Análisis de riesgo de la planta piloto	27
2.4. Símbolos	34
<b>3. Metodología experimental y análisis</b>	<b>36</b>
3.1. Realización de los experimentos	36
3.1.1. La toma de muestra	37
3.1.2. La medición de la temperatura	38
3.2. Análisis de las muestras	39
3.2.1. La mezcla metanol agua	39
3.2.2. La mezcla ciclohexano, tolueno, clorobenceno	44
<b>4. Fundamentos teóricos de transferencia de materia</b>	<b>49</b>
4.1. Fundamentos termodinámicos	50
4.2. Bases de la cinética de transferencia de materia	53
4.2.1. Difusión en general	53
4.2.2. Difusión en mezclas binarias	54
4.2.3. Difusión en mezclas multicomponentes	63
4.2.4. Determinación de coeficientes de difusión en gases	68
4.2.5. Determinación de los coeficientes de difusión en líquidos	69
4.3. Transferencia de materia entre dos fases	70
4.3.1. El coeficiente de transferencia de materia binario	71
4.3.2. Definición del coeficiente de transferencia de materia en un sistema multicomponente	73
4.3.3. El problema del "Bootstrap"	74
4.3.4. Transferencia de materia a través de una interfase	77
4.3.5. Coeficientes de transferencia de materia atravesando la interfase	77
4.4. Modelos hidrodinámicos para la transferencia de masa y calor	79
4.4.1. Teoría de la lamina	80
4.4.2. Otros modelos de interfase	88
4.4.3. Transferencia de calor en la interfase	95
4.5. Símbolos	96
<b>5. Modelos de simulación de destilación discontinua</b>	<b>99</b>

<b>5.1. El modelo abreviado (short cut)</b>	<b>99</b>
5.1.1. Suposiciones del modelo short-cut	100
5.1.2. Las ecuaciones FUG	102
5.1.3. Método short-cut para la destilación discontinua	105
<b>5.2. El modelo del plato de equilibrio</b>	<b>107</b>
5.2.1. Suposiciones del modelo del plato de equilibrio	107
5.2.2. Ecuaciones de modelización para el modelo del plato de equilibrio	110
5.2.3. Cálculo de la eficiencia de plato con correlaciones	112
<b>5.3. El modelo de transferencia de materia</b>	<b>115</b>
5.3.1. Suposiciones del modelo de transferencia de materia	117
5.3.2. Ecuaciones de modelización para el modelo de transferencia de materia	118
<b>5.4. Modelos mixtos</b>	<b>123</b>
5.4.1. El modelo de dos clases de vapor	123
5.4.2. Suposiciones del modelo de dos clases de vapor	124
5.4.3. Ecuaciones de modelización para el modelo de dos clases de vapor	127
5.4.4. Distribución entre las dos clases de vapor	133
5.4.5. El modelo de tres clases de vapor	137
5.4.6. Suposiciones del modelo de tres clases de vapor	138
5.4.7. Formulación de las ecuaciones del modelo de tres clases de vapor	141
<b>5.5. Cálculo de los coeficientes de transferencia de materia</b>	<b>148</b>
5.5.1. Coeficientes de transferencia de materia para el modelo de dos clases de vapor	148
5.5.2. Coeficientes de transferencia de materia para el modelo de tres clases de vapor	150
5.5.3. Cálculo de los coeficientes de transferencia de materia mediante los valores Sherwood	152
<b>5.6. Cálculo de propiedades y de variables de estado</b>	<b>155</b>
5.6.1. Cálculo de la pérdida de presión	155
5.6.2. Conclusiones del capítulo	157
<b>5.7. Símbolos</b>	<b>158</b>
<b>6. Simulación de la destilación discontinua</b>	<b>161</b>
<b>6.1. La simulación con la mezcla de Ciclohexano, Tolueno y Clorobenceno</b>	<b>162</b>
6.1.1. Simulación con el modelo de transferencia de materia según el factor F	162
6.1.2. El modelo de tres clases de vapor y la eficiencia de plato	167
6.1.3. Difusión Maxwell-Stefan frente a difusión Fick en el modelo de tres fases de vapor	173
6.1.4. Comparación con otros modelos	179
<b>6.2. La simulación con la mezcla metanol agua</b>	<b>182</b>
<b>6.3. Conclusiones del capítulo</b>	<b>185</b>
<b>6.4. Símbolos</b>	<b>185</b>
<b>7. Implementación y simulación</b>	<b>187</b>
<b>7.1. El entorno Speedup</b>	<b>187</b>
7.1.1. Solución del sistema de ecuaciones	189
7.1.2. Estructura de secciones en Speedup	190
<b>7.2. División de ecuaciones en sub-modelos</b>	<b>191</b>
7.2.1. Estructura de los modelos	192
<b>7.3. Inicialización del sistema de ecuaciones diferenciales</b>	<b>192</b>
7.3.1. Estimaciones iniciales de las variables	193
7.3.2. Problemas de alto índice, DAE	194
7.3.3. Problemas de división por cero	196
<b>8. Conclusiones</b>	<b>198</b>

<b>9. Anexo</b>	<b>201</b>
<b>9.1. Sintaxis de Speedup</b>	<b>201</b>
9.1.1. Sección opciones	201
9.1.2. Sección de declaración	201
9.1.3. Sección de modelo	202
9.1.4. Sección de "flowsheet"	203
9.1.5. Sección de estimación	204
9.1.6.	204
9.1.7. Sección de unidad	204
9.1.8. Sección de macro	204
9.1.9.	205
9.1.10. Sección de condiciones	205
9.1.11. Sección de operación	206
<b>9.2. Referencia de los experimentos realizados</b>	<b>207</b>
9.2.1. Experimentos con la mezcla ciclohexano, tolueno y clorobenceno	207
9.2.2. Experimentos con la mezcla metanol - agua	224
<b>9.3. Bibliografía</b>	<b>233</b>
<b>9.4. Símbolos</b>	<b>239</b>

**Índice de figuras:**

Figura 1: Instrumentación de la planta piloto .....	19
Figura 2 : Limites de operación de una columna (cualitativo) .....	23
Figura 3 : Adaptador para toma de muestra y termoelemento .....	37
Figura 4: Calibración de FID .....	41
Figura 5 : Diagrama de distribución de la mezcla metanol agua .....	44
Figura 6 : Diagrama de distribución de la mezcla ciclohexano tolueno .....	47
Figura 7 : Diagrama de distribución de la mezcla ciclohexano clorobenceno.....	47
Figura 8 : Diagrama de distribución de la mezcla tolueno clorobenceno .....	48
Figura 9 : Construcción experimental de Duncan y Toor y curso de concentración en las esferas A y B con los gases hidrógeno (1), nitrógeno (2) y dióxido de carbono (3). .....	57
Figura 10: Figura de los efectos de interacción. ....	59
Figura 11 : .....Equilibrio de fuerza entre fuerza motriz y fricción para una mezcla binaria .....	61
Figura 12 : Equilibrio entre fuerza motriz y fricción para una mezcla ternaria .....	64
Figura 13 : Perfiles de concentración en la interfase durante el proceso de transferencia .....	71
Figura 14 : Diagrama de equilibrio y perfil de concentración en la interfase.....	78
Figura 15 : Modelo de la película .....	81
Figura 16: Modelo general de renovación de superficie.....	89
Figura 17: Diferentes distribuciones de edad de superficie. ....	90
Figura 18: Lámina y penetración como un efecto unido .....	91
Figura 19: Operación típica de la destilación discontinua .....	102
Figura 20: Variables en un plato para el modelo del plato teórico .....	110
Figura 21: Variables y su número en el modelo del plato teórico. ....	112
Figura 22: Variables en un plato para el modelo de la transferencia de materia .....	118
Figura 23: Esquema del modelo de dos clases de vapor.....	128
Figura 24: Distribución de fases y variables usando tres clases de vapor .....	139
Figura 25: Simulación considerando tres clases de vapor (burbujas grandes y pequeñas, canales de vapor), $F/F_{\max} = 0.82$ , ensayo bq681r40.....	163
Figura 26: Simulación considerando dos clases de vapor (burbujas grandes y pequeñas), $F/F_{\max} = 0.82$ , ensayo bq681r40 .....	164
Figura 27: Simulación considerando una clase de vapor (solo canales de vapor), $F/F_{\max} = 0.82$ , ensayo bq681r40 .....	164

Figura 28: Simulación considerando tres clases de vapor (burbujas grandes y pequeñas, canales de vapor), $F/F_{\max} = 0.56$ , ensayo bq466r40.....	166
Figura 29: Simulación considerando dos clases de vapor (burbujas grandes y pequeñas), $F/F_{\max} = 0.56$ , ensayo bq466r40 .....	166
Figura 30: Simulación considerando una clase de vapor (solo canales de vapor), $F/F_{\max} = 0.56$ , ensayo bq466r40 .....	167
Figura 31: Eficiencias de componente en el quinto plato, recalculadas según la definición de Murphee; modelo de tres clases de vapor, ensayo bq681r40.....	169
Figura 32: Caudales molares de transferencia en el quinto plato; modelo de tres clases de vapor, ensayo bq681r40.....	170
Figura 33: Eficiencias de componente en el décimo plato, recalculadas según la definición de Murphee; modelo de tres clases de vapor, ensayo bq681r40.....	171
Figura 34: Caudales molares de transferencia en el décimo plato; modelo de tres clases de vapor, ensayo bq681r40.....	172
Figura 35: Perfil de la eficiencia de plato “recalculada” para una columna continua según Krishna y Taylor (Taylor, 1993).....	172
Figura 36: Perfil de la eficiencia de plato “recalculada” para una columna continua mostrando valores negativos y mayores que 1 según Krishna y Taylor (Taylor, 1993) .....	173
Figura 37: Coeficientes de difusión “recalculados” con la definición de Fick en el décimo plato, ensayo bq681r40 .....	175
Figura 38: Caudal difusivo entre $t = 2.3$ y $t = 3$ para ciclohexano, décimo plato, ensayo bq681r40 .....	176
Figura 39: Diferencia de concentración entre $t = 2.3$ y $t = 3$ para ciclohexano, décimo plato, ensayo bq681r40 .....	176
Figura 40: Coeficientes de difusión de la matriz $[D]$ en función del tiempo, ensayo bq681r40 .....	177
Figura 41: Concentración de vapor plato diez, ensayo bq681r40 .....	178
Figura 42: Ampliación de escala para los coeficientes de difusión cruzados en el plato diez, ensayo bq681r40.....	179
Figura 43: Simulación con el modelo del plato de equilibrio con eficiencias de plato según ampliación del método AIChE, ensayo bq681r40.....	180
Figura 44: Eficiencias de plato calculados para el modelo del plato de equilibrio a dos distintas alturas de la columna, ensayo bq681r40 .....	181
Figura 45: Simulación con el modelo short-cut, volatilidades relativas 4.7:1; 1.81:1; 1:1; ensayo bq681r40.....	182
Figura 46: Simulación con el modelo del plato de equilibrio con eficiencias de plato según el método AIChE, ensayo aq932r25 .....	183
Figura 47: Simulación con el modelo short-cut, volatilidades relativas 3.9:1; 1:1, ensayo aq932r25.....	184

---

Figura 48: Estructura general de Speedup .....	188
Figura 49: Secciones en Speedup.....	191
Figura 50: Estrategia de simulación.....	193

## 1. Introducción

Sin duda, la destilación como proceso de separación de mezclas líquidas con volatilidad diferente, es el proceso de separación más usado en la práctica industrial. Su posición de supremacía entre los procesos unitarios de la ingeniería química se mantiene, aunque emergieron muchas nuevas técnicas de separación en los últimos años como por ejemplo la separación con membranas. Con la flexibilidad añadida que ofrece el uso discontinuo por lotes de la destilación ('batch distillation') el interés en simulación del proceso discontinuo y su modelización es aún más elevado.

Dada la importancia del proceso de destilación, el cálculo exacto del perfil axial de concentración dentro de una columna de destilación, o el del cálculo de la concentración variable del destilado en la destilación discontinua, es de interés fundamental. El cálculo de este proceso de separación complicado y multivariable se revolucionó en el año 1925 con el método de McCabe y Thiele (McCabe, 1925). El método desarrollado por estos autores es por su simplicidad y plausibilidad tan eficaz que se sigue usando casi exclusivamente hasta hoy en día para mezclas binarias. Aunque, por ejemplo en columnas de relleno, aparecen cambios continuos de todos los parámetros de proceso como temperatura, presión o concentración, el modelo discreto del plato teórico fue simplemente adaptado para su uso en caso de rellenos continuos. Por parte de los productores de relleno, se desarrollaron correlaciones, de las cuales se puede obtener la información sobre cuál es la altura de relleno, que equivale a un plato teórico. Este valor, el valor HETP (Height Equivalent to the Theoretical Plate) depende entre otras de las condiciones hidrodinámicas.

El uso de valores HETP es equivalente a la utilización de eficiencias de plato para columnas con platos. Hay numerosas definiciones de eficiencia del plato de las cuales la definición propuesta por Murphee es la más usada (Murphee, 1925). La eficiencia de plato incluye toda la incertidumbre acerca de la transferencia de materia a través de la interfase vapor líquido y tiene que ser determinada por experimentos. Se realizaron numerosas investigaciones respecto a la determinación de eficiencias de plato, que están resumidas en trabajos como el de Lockett (Lockett, 1986).

Un paso intermedio entre el modelo del plato teórico, sin o con eficiencia, es el del modelo HTU/NTU, que supone una transferencia de materia continua y así sirve para el cálculo de torres de relleno (Chilton, 1935). El concepto HTU/NTU (Height of Transfer Unit / Number of Transfer Units) permite una modelización más exacta del proceso de transferencia de materia suponiendo, que el flujo de materia de una fase a otra depende del tamaño de la infase, del coeficiente de transferencia y del gradiente de concentración. La desventaja del concepto HTU/NTU es la complicada determinación de las variables clave para la transferencia de materia (coeficiente de transferencia de materia y tamaño de infase). Para el cálculo de transferencia de materia, es necesario el conocimiento completo de todas las relaciones teóricas existentes para su descripción completa.

La complejidad elevada de estas relaciones conlleva la necesidad de realizar simplificaciones, que pueden ser no válidas según el entorno. Además hay determinados efectos reales como la maldistribución, que carecen de la posibilidad de medición y de descripción teórica por su carácter estocástico. Aunque estos problemas fueron resueltos por simplificaciones adecuadas, no necesariamente se obtienen siempre mejores resultados usando el modelo de transferencia de materia. Sucede más bien al contrario, porque en la práctica industrial el modelo del plato teórico se ha mostrado más flexible y mucho más fácil de manejar que el modelo de transferencia de materia. De esta manera se ha abierto una gran brecha entre la práctica y la investigación. Mientras que por una parte se hacen estudios muy detallados acerca de la forma de la infase vapor líquido (Prado, 1990, Voigtländer, 1995) o de la maldistribución (Potthoff, 1994), por otra parte los ingenieros en la práctica usan curvas características de los fabricantes de columnas y contemplan posibles problemas con factores de seguridad. Esta discrepancia provoca, que por parte de los usuarios industriales el respaldo de investigación en este área no sea muy grande. Entre otras cosas, el trabajo presentado quiere contribuir a eliminar la separación que se presenta entre teoría y práctica y pretende demostrar, que el uso del modelo de transferencia de materia no está tan alejado de un uso práctico.

Para ello se ha intentado de comprobar los cálculos realizados con la mayor parte de experimentos posibles usando mezclas que aparecen frecuentemente en la industria química. Además se ha optado por una instalación de destilación discontinua de uso frecuente, usando una columna con platos perforados, que solamente tiene una parte de enriquecimiento en contraste a las configuraciones con el tanque intermedio, que recientemente concentran cierto interés de investigación (Safrit, 1997; Barolo, 1996). Se ha desarrollado un modelo que permite su uso en un rango amplio de trabajo, ampliando el modelo propuesto por Voigtländer (Voigtländer, 1995) para el rango de trabajo completo de una columna de destilación. El método propuesto permite el cálculo de transferencia de materia para platos perforados sin necesidad de correlaciones del producto de coeficiente de transferencia de materia y superficie de transferencia para pares binarios. Esto es posible, porque la superficie de transferencia y el coeficiente de transferencia pueden ser calculados por separado presumiendo una geometría concreta para el intercambio de materia.

Se puede contemplar el modelo desarrollado como un modelo detallado, especialmente apto para el diseño, dentro de una familia de modelos de un grado de detalle variable, que sirve para los numerosos pasos necesarios en diseño, recálculo y control de una planta. Dentro de una familia de modelos cada uno tiene su utilidad especial, que se determina por parámetros de exactitud y esfuerzo de cálculo. Así, por ejemplo, el modelo Short-Cut puede tener su justificación para la optimización de procesos con mezclas ideales (Diwekar, 1994) mientras que modelos más complejos con balances de energía se justifican para primeras estimaciones en el diseño para mezclas no ideales (Bernot, 1993).

La tendencia actual de la integración de modelos puede resultar en la desaparición del concepto de operaciones unitarias como típicamente conocidas dejando lugar a "efectos unitarios", ya que por ejemplo los procesos absorción, destilación y extracción se rigen todos solo por la transferencia de materia entre dos fases y así pueden ser descritos de una manera muy parecida.

El modelo desarrollado y comprobado mediante experimentos en una columna de destilación discontinua se caracteriza por ser un modelo de transferencia de materia usando tres diferentes clases de vapor calculando explícitamente los flujos de transferencia de energía y de materia; el modelo está descrito ampliamente en el capítulo 5.4.

### **1.1. Modelos de simulación para la destilación y estado del arte**

De los múltiples modelos de destilación, que se discuten más ampliamente en los capítulos 5.1 a 5.4, aquí se quiere dar una breve introducción del estado actual de la investigación en modelos de transferencia de materia o modelos de "desequilibrio".

Los así llamados modelos de "desequilibrio" (la denominación viene de la comparación con el modelo de equilibrio, que supone equilibrio de vapor y líquido entre las fases de vapor y líquido) fueron por primera vez objeto de investigación a mediados de los ochenta (Górak, 1987), (Krishnamurthy, 1985).

Respecto a los modelos de transferencia de materia o modelos de desequilibrio hay que distinguir entre los modelos diferenciales y los modelos discretos. Los modelos diferenciales contemplan los balances de energía, materia y masa para un elemento de altura diferencial en la torre de destilación mientras que los modelos discretos trabajan con balances discretos para un elemento discreto de la torre (e.g. un plato). En el primer caso el modelo resulta ser un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias mientras que el modelo por bloques discretos resulta en un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales. El modelo diferencial (Górak, 1987) parece idóneo para torres de relleno y el modelo discreto (Krishnamurthy, 1985) para torres con platos. No obstante el modelo discreto de Krishnamurthy es el más usado para ambos casos por ser más fácilmente manejable, ya que resulta más simple introducir puntos de alimentación, de tomas laterales o bien de calentamiento adicional.

Alrededor del modelo de Krishnamurthy surgieron muchas mejoras que pretenden introducir efectos reales de las columnas teniendo cada una un enfoque distinto. Entre estos trabajos destacan los trabajos de Taylor (Taylor, 1996, 1994, 1993). Uno de los efectos reales, que se pretenden contemplar, es por ejemplo el arrastre (“entrainment”) de líquido en el vapor y de vapor en líquido. Este modelo se basa en la consideración hidráulica del plato en una columna de destilación, en la cual siempre se observa una determinada cantidad de líquido disperso en el vapor y de vapor disperso en el líquido (Taylor, 1994). Otro aspecto fundamental es el del cálculo correcto del líquido sostenido en cada plato (“hold-up”). Su cálculo es esencial para una correcta simulación del comportamiento dinámico de una columna. Para alcanzar este objetivo Taylor y Kooijman aplican otro modelo especial, que contempla también, a parte del hold-up de líquido en el plato, el hold-up de líquido en el derramadero (Kooijman and Taylor, 1995).

Una variación muy interesante del modelo de Krishnamurthy representa el desarrollo hecho por Voigtländer (Voigtländer, 1995). El modelo aplicado es una mezcla del modelo de equilibrio y del modelo de transferencia de materia, que se basa en observaciones de la hidrodinámica de platos perforados hechos en estudios básicos con equipos especiales (p. ej. Prado, 1990; Kaltenbacher, 1982 y Porter 1967). Lo más destacable del modelo es la posibilidad de poder calcular los flujos de componente por la infase sin necesidad de conocer ninguna correlación para el producto de coeficiente de transferencia de materia y de la superficie de intercambio. Esto es posible, porque se supone, que cualquier intercambio por la infase solo aparece entre burbujas de vapor, suponiendo que el único régimen de contacto fuera el burbujeo. Diferentes fuentes señalan, que se trata de una suposición válida solo hasta una carga de vapor que equivale al 60% de la carga máxima del plato (Prado, 1990; Kaltenbacher, 1982).

La mayoría de ejemplos que procede del sector y que utiliza el modelo de transferencia de materia, se refieren a la simulación de la destilación continua, ya que aquí el grado de madurez de conocimiento es más elevado que en el caso de la simulación de destilación discontinua. El uso de modelos de desequilibrio es muy poco frecuente a escala industrial; hace algunos años existe una iniciativa por parte de J.A. Wesselingh de la

universidad de Groningen en Holanda para extender su uso mediante el programa nombrado "Rate-Pro" que tiene una finalidad exclusivamente docente para pasar a ser en futuras versiones una herramienta de cálculo de uso sencillo (Wesselingh, 1995).

Mientras que el desarrollo de modelos para la destilación continua ha evolucionado hasta el uso del modelo de transferencia de materia, para la simulación de la destilación discontinua generalmente se usan modelos muy reducidos como el "cálculo abreviado", en inglés "short-cut". Esto, evidentemente, se debe al enfoque de los trabajos de destilación discontinua hacia la optimización de la relación de reflujo bajo determinados criterios, que requieren un tiempo de cálculo alrededor de cien veces menor que la utilización de un modelo riguroso sencillo en lugar de las ecuaciones del 'short-cut' (Safrit, 1997; Mujtaba, 1994; Bernot, 1993; Sundaram, 1993; Logsdon, 1993). Lo mismo es válido para los trabajos en los cuales se pretende mejorar no solo un lote sino el juego de varios lotes (Bonny, 1995, 1994) o bien el control de columnas discontinuas (Hansen, 1995).

Por una parte es razonable usar estos modelos reducidos, ya que la ganancia en tiempo de cálculo es substancial, pero por otra parte el margen de aplicación de dichos modelos es muy limitado y descarta muchos aspectos que inciden de forma especial en la destilación discontinua. Así, por ejemplo, los modelos reducidos a base de volatilidades constantes son incapaces de describir la separación de una mezcla azeotrópica. Justamente, mezclas de este tipo (mezclas de solventes residuales procedentes de la industria farmacéutica o de especialidades) son las que se separan habitualmente por lotes (Ahmad, 1996). Además, la destilación discontinua es ideal para obtener productos de muy alta pureza donde el cálculo de separaciones de muy alta pureza con los modelos simplificados tiende a ser erróneo.

Por consiguiente, existen numerosas razones para el uso de modelos avanzados también en la destilación discontinua con la dificultad añadida de contemplar una amplia variedad de sustancias, que habitualmente se separan por destilación discontinua. Se trata de una desventaja, porque el uso del modelo de intercambio de materia exige experimentos para todos los pares binarios para la medición del coeficiente de

transferencia de materia. Este inconveniente evita un modelo de transferencia de materia con especial atención a la hidrodinámica como es el modelo desarrollado en este trabajo y presentado en el capítulo 5.4.

El modelo de transferencia de materia es necesario, porque evita por el contrario al modelo del plato teórico (capítulo 5.2), el uso de eficiencias de plato. Las eficiencias de plato carecen de explicación física y tienen básicamente dos grandes desventajas:

1. Las eficiencias de plato en la destilación multicomponente son generalmente diferentes de un componente a otro, como ya concluyeron Walter y Sherwood en 1941 (Walter, 1941). Esto también se ha demostrado en este trabajo y está expuesto en el capítulo 6. Asumiendo eficiencias iguales para todos los componentes y descuidando efectos de cruce, es posible que se subdimensione substancialmente una columna de destilación. Esto fue demostrado en un estudio teórico de Toor y Burchard, que revelaron para un determinado caso la necesidad de hasta 117 platos teniendo en cuenta efectos de cruce entre los componentes y solo 84 platos descartando estos efectos (Toor, 1960).
2. El concepto de eficiencia de punto (en inglés "point efficiency") y de plato desarrollado para mezclas binarias carece de sentido usándolo en sistemas multicomponentes. En general, parece mejor prescindir de dichos conceptos y modelizar la columna de destilación resolviendo simultáneamente los balances de energía y de materia conociendo sus respectivas transferencias.

## 1.2. Objetivos

El principal objetivo del trabajo es el desarrollo de una herramienta que permite la simulación de la destilación discontinua usando una columna con platos perforados para un amplio rango de operación y su comprobación experimental.

Para lograr este objetivo es necesario realizar un modelo basado en transferencia de materia, porque no solo permite la simulación con mezclas azeotrópicas sino que también evita el uso de eficiencias de plato. Como punto de partida para este desarrollo, existe el trabajo de Voigtländer (Voigtländer, 1995), que tiene que ser ampliado para el rango entero de trabajo de una columna de destilación, que contempla un régimen adicional de trabajo representado por una clase adicional de vapor.

El nuevo modelo desarrollado se implementa en software de soporte para estudios de simulación por ordenador, que permite visualizar los distintos parámetros de la planta simulada a lo largo del tiempo de operación.

Para la posterior validación del modelo es preciso construir una columna como planta piloto que permite la observación continua de su estado, y verificación de los perfiles de concentración, de temperatura y de presión. La geometría de los platos debe tener un comportamiento hidráulicamente estable para aumento de escala posterior.