

6. Simulación de la destilación discontinua

El capítulo anterior presenta diversos modelos matemáticos utilizados en la simulación del proceso de destilación discontinua. Cada uno de estos modelos tiene determinadas características, que serán objeto de estudio comparativo en el presente capítulo, además se analiza ampliamente el nuevo modelo desarrollado y su coherencia con los resultados experimentales obtenidos.

Todos los modelos se analizan especialmente con respecto a su capacidad de reproducir los perfiles de concentración, que previamente fueron obtenidos experimentalmente. Como cabe esperar, cuanto más detallado que es el modelo, mejor es el ajuste de los perfiles calculados a los experimentales. Desgraciadamente cada mejora en precisión de cálculo conlleva un aumento considerable de tiempo de cálculo, ya que el sistema de ecuaciones es mayor. Este aumento de tiempo de cálculo (simular la destilación de una carga puede llevar algunos segundos usando el modelo short-cut y más de una hora con el modelo de transferencia de materia con tres fases de vapor) hace que los modelos simplificados mantengan su utilidad, ya que existen ciertos aspectos que requieren un cálculo aproximado rápido. Un de tales aspectos es la optimización de la relación de reflujo, la cual precisa del cálculo repetido de todo el proceso.

Los distintos modelos tienen por consiguiente una utilidad específica en todo el proceso de diseño, optimización y control de una planta; se entienden como partes de una familia de modelos, que se usan según necesidades concretas. Cuando existe muy poca información acerca del comportamiento de la mezcla y se trata de una mezcla multicomponente, lo más recomendable es el uso del modelo de tres fases de vapor que se desarrolla en este trabajo. En cambio, cuando existen correlaciones fiables para las eficiencias de plato de una mezcla, se puede usar el modelo convencional del plato de equilibrio. El modelo short-cut por su parte, tiene una utilidad muy reducida, ya que no incorpora el cálculo riguroso del equilibrio vapor líquido. Por lo tanto su utilidad en el campo de la destilación discontinua es cuestionable, porque son justamente mezclas de solventes residuales procedentes de la industria farmacéutica o productos especiales, que se separan habitualmente por cargas (Ahmad, 1996).

Para cada experimento que se llevó a cabo en la columna experimental, se efectuaron simulaciones usando el modelo short-cut, el modelo del plato de equilibrio con una eficiencia de plato variable según el método AIChE (véase apartado 5.2.3) y el modelo de transferencia de materia en tres configuraciones distintas. Estas tres configuraciones se caracterizan por tres diferentes formas del contacto líquido vapor:

- Interfase líquido-vapor formada por burbujas pequeñas y grandes.
- Interfase formada solamente por canales de vapor.
- Interfase formada por burbujas y canales de vapor.

Como referencia se encuentran en el anejo todos los experimentos realizados en forma de ficha. En el presente capítulo se analiza una parte significativa del total de los experimentos llevados a cabo.

6.1. La simulación con la mezcla de Ciclohexano, Tolueno y Clorobenceno

La mezcla de ciclohexano, tolueno y clorobenceno es una mezcla ideal cuyas propiedades se han presentado en detalle en el capítulo 2. Con esta mezcla se llevó a cabo un total de ocho experimentos, usando cuatro diferentes relaciones de reflujo y dos diferentes potencias de calefacción, formando así el total de ocho experimentos. El estudio comparativa que nos ocupa se refiere al perfil de concentración del destilado, ya que es junto con la concentración del residuo en el calderín la concentración más importante.

6.1.1. Simulación con el modelo de transferencia de materia según el factor F

Como ya se ha especificado anteriormente, la razón más importante para la incorporación de una tercera clase de vapor en forma de canales, es la restricción del modelo de dos clases de vapor a un rango de trabajo por debajo del 60% de la carga máxima de vapor. La carga de vapor - que se expresa en función del factor F - determina

la clase de contacto vapor-líquido para los orificios. Cuanto más alta es la carga de vapor más orificios entran en un régimen de contacto, formándose canales de vapor en lugar de burbujas. Este cambio en la forma del contacto vapor líquido no solo cambia la geometría de la interfase, sino también su tamaño. Otro efecto del cambio de la forma de contacto es el cambio de la correlación de transferencia entre vapor y líquido; en lugar de la solución elaborada por Voigtländer para burbujas se usa la solución de Sherwood para canales de vapor (véase apartado 5.5). Este cambio afecta directamente en el cálculo del perfil de concentraciones en la columna como se puede observar en la Figura 25, Figura 26 y Figura 27.

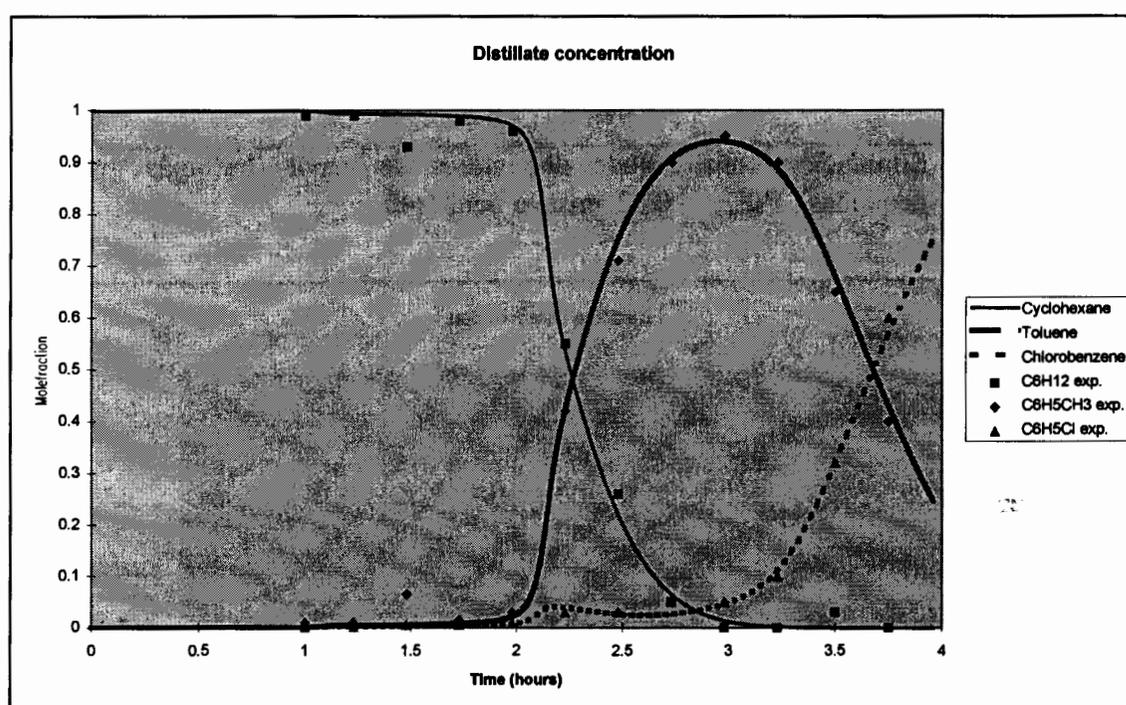


Figura 25: Simulación considerando tres clases de vapor (burbujas grandes y pequeñas, canales de vapor), $F/F_{\max} = 0.82$, ensayo bq681r40

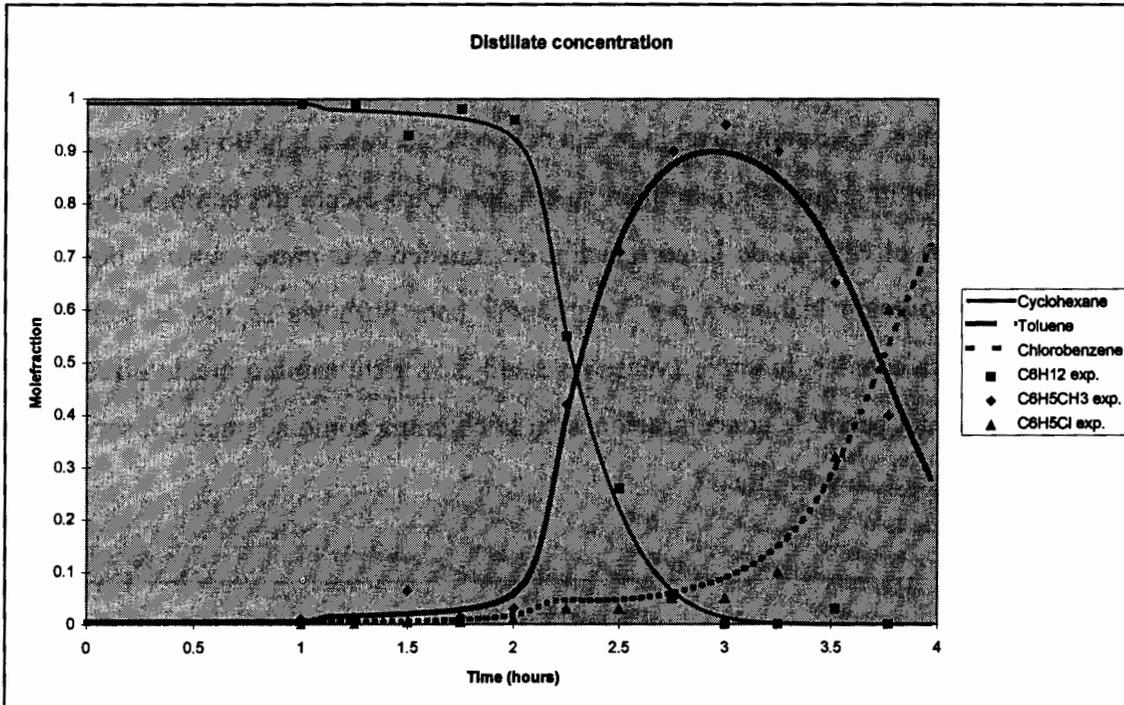


Figura 26: Simulación considerando dos clases de vapor (burbujas grandes y pequeñas), $F/F_{\max} = 0.82$, ensayo bq681r40

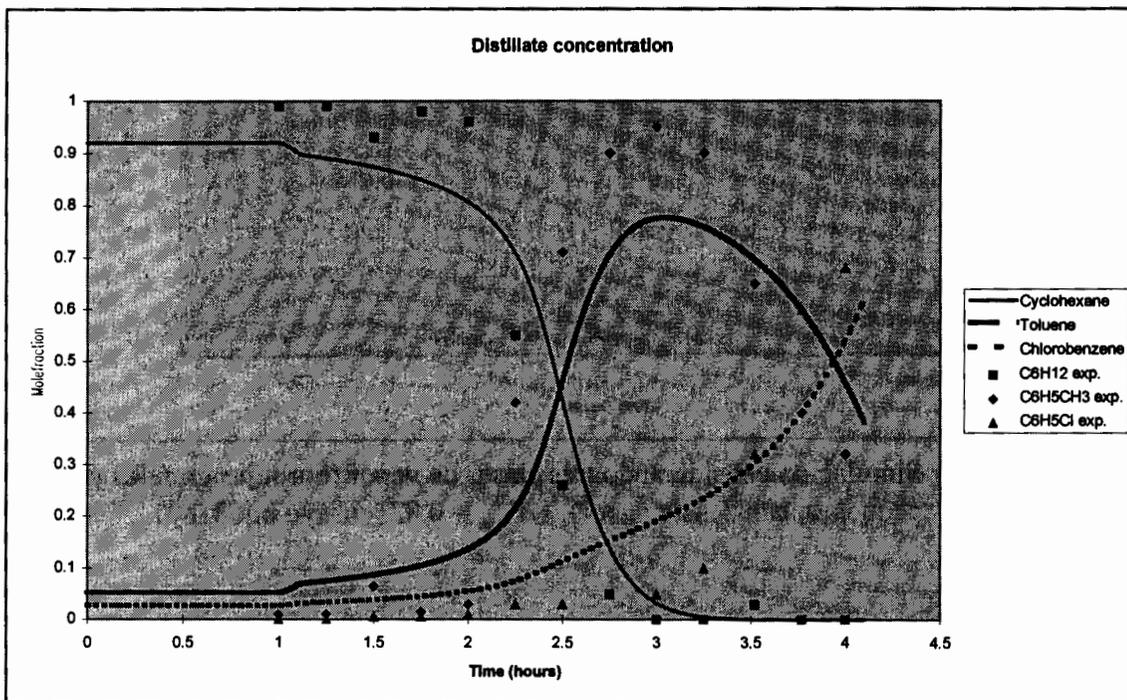


Figura 27: Simulación considerando una clase de vapor (solo canales de vapor), $F/F_{\max} = 0.82$, ensayo bq681r40

La comparación de la Figura 25 con la Figura 26 y Figura 27 demuestra, que el mejor ajuste del perfil de la concentración del destilado se obtiene con el modelo de transferencia de materia que utiliza las clases de vapor. En caso de utilizar dos clases de

vapor el ajuste es todavía razonable, mientras que el uso de una sola clase de vapor en forma de canales de vapor es muy desfavorable (véase Figura 27). El cálculo del estado estacionario con canales de vapor ya es en si mismo muy inexacto, alcanzando la concentración de ciclohexano solamente el 92 %. La apariencia de las trayectorias que aparecen en las Figuras es la de un proceso con menor relación de reflujo, ya que en todo momento las concentraciones de todos los componentes son más bajas. En realidad este efecto se debe a la escasa superficie para la transferencia de materia, porque los canales de vapor ofrecen menos superficie de intercambio en comparación a las burbujas y el coeficiente de transferencia en este tipo de contacto es mucho más elevado en el caso de las burbujas.

La ventaja del uso de una tercera clase de vapor se demuestra especialmente para cargas altas de vapor como es el caso del ensayo bq681r40 ('b' simboliza la mezcla ciclohexano, tolueno y clorobenceno y 'a' la mezcla metanol, agua; 'q681' representa la potencia de calefacción en vatios y 'r40' el reflujo en tanto por ciento), en el cual la carga de vapor equivale al 82 % de la carga máxima teórica. Otro ensayo con una carga más baja de vapor demuestra esta relación.

En Figura 28 y Figura 29 se puede observar el perfil de concentración del destilado en función del tiempo para un ensayo llevado a cabo con una carga media de vapor, equivalente al 56% de la carga máxima teórica. Para esta carga de vapor el porcentaje de orificios formando canales de vapor solamente es del 28 % ($F = 1,4 \sqrt{kg/ms^2}$), mientras que en el ensayo bq681r40 (Figura 25, Figura 26 e Figura 27) este valor asciende al 70 % ($F = 2,1 \sqrt{kg/ms^2}$). En consecuencia, las diferencias en los perfiles obtenidos en cada experimento son menores en el caso de poca carga de vapor (Figura 28 e Figura 29) que en el de alta carga de vapor (Figura 25 y Figura 26).

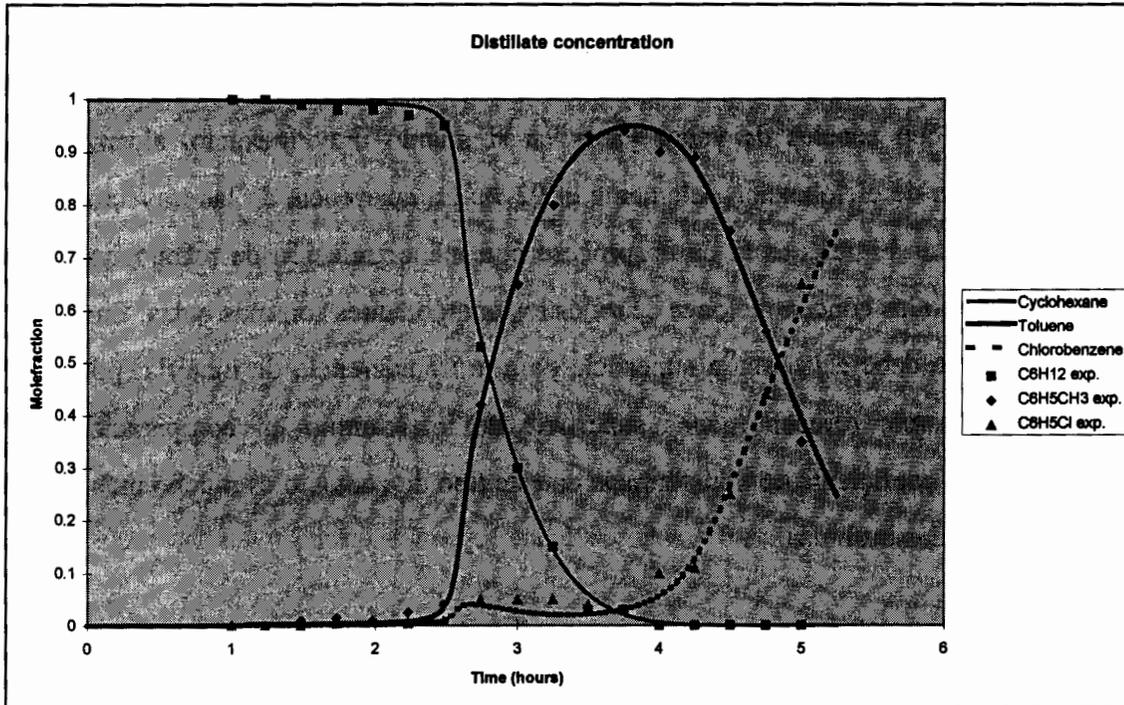


Figura 28: Simulación considerando tres clases de vapor (burbujas grandes y pequeñas, canales de vapor), $F/F_{\max} = 0.56$, ensayo bq466r40

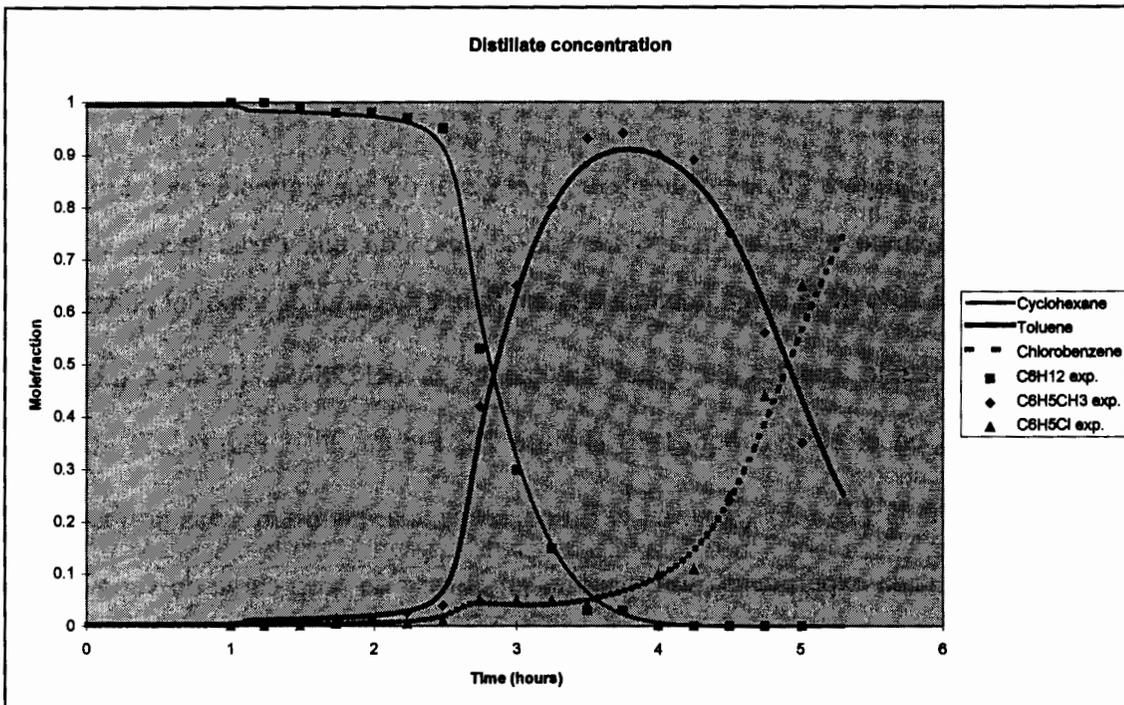


Figura 29: Simulación considerando dos clases de vapor (burbujas grandes y pequeñas), $F/F_{\max} = 0.56$, ensayo bq466r40

Obviamente esto es así, porque la simulación de la Figura 28 se basa en el modelo de tres clases de vapor en un caso de operación con pocos orificios en régimen de contacto

de canales (28 %), lo que hace la simulación casi equivalente a la mostrada en la Figura 29, la cual solamente contempla dos clases de vapor. Esta diferencia entre los dos modelos de dos y de tres clases de vapor es mayor para el experimento de alta carga de vapor, ya que allí aparece una mayor cantidad de orificios en régimen de canales de vapor.

La Figura 30 demuestra la simulación usando como régimen de contacto exclusivamente los canales de vapor. Como en el caso anterior (Figura 27) se observa un desajuste notable respecto a los datos experimentales debido a una estimación muy baja del poder separador de la columna, especialmente apreciable las concentraciones calculadas en el estado estacionario (período de 0 a 1 horas)

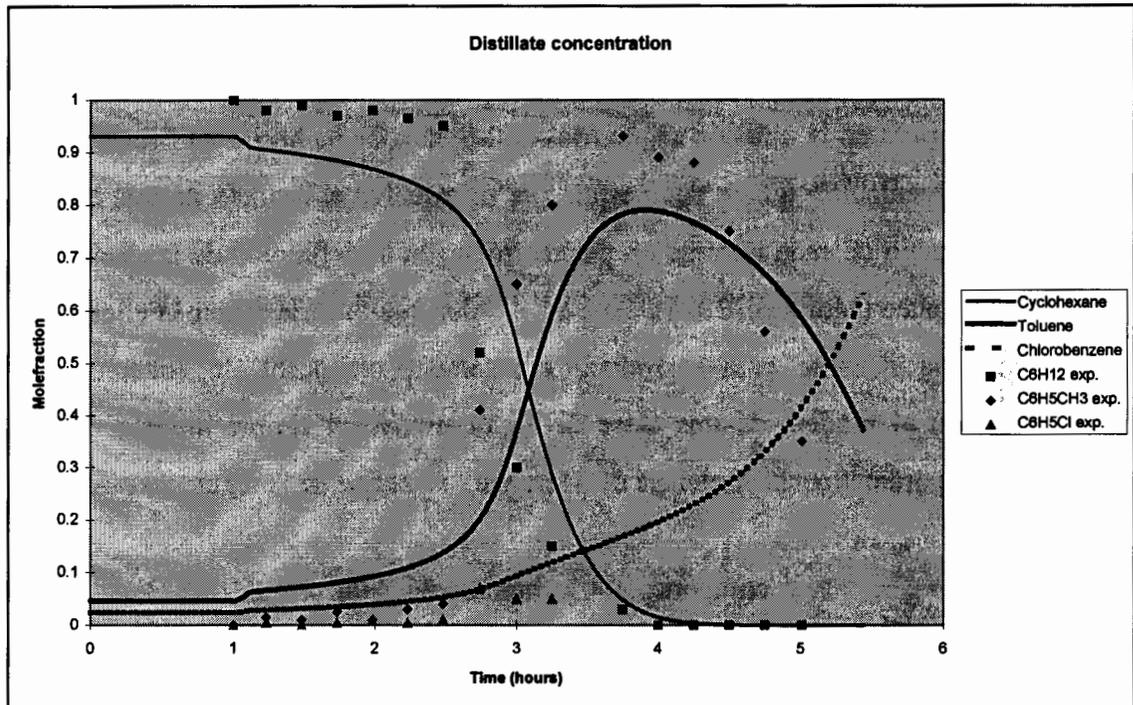


Figura 30: Simulación considerando una clase de vapor (solo canales de vapor), $F/F_{\max} = 0.56$, ensayo bq466r40

6.1.2. El modelo de tres clases de vapor y la eficiencia de plato

Como ya se ha mencionado en la introducción, el uso de la eficiencia de plato es una aproximación satisfactoria a falta de conocimiento acerca del proceso físico real. Se

trata de la típica solución del ingeniero de resumir todos los efectos desconocidos en un solo parámetro, que debe ser determinado por vía experimental. De hecho algo similar se usa también en la difusión según Fick, donde el flujo difusivo siempre es proporcional al gradiente de concentración y el parámetro que representa la incertidumbre del proceso es el coeficiente de difusión.

Explicar la destilación con la difusión según Fick resulta entonces semejante a la utilización de eficiencias de plato, porque la incertidumbre del proceso se traslada simplemente del factor de eficiencia al coeficiente de difusión. Para no caer en esta falacia, se ha usado en este trabajo la difusión según la definición de Maxwell-Stefan, como se ha explicado en el capítulo 4.

Para dar una idea de cómo debería resultar la eficiencia del plato, si se quisieran contemplar todos los efectos que se pueden contemplar con un modelo de transferencia de materia basado en la difusión según Maxwell-Stefan, se ha hecho un “recálculo” de la misma. “Recálculo” quiere decir aquí, que se resuelve el modelo de tres clases de vapor, calculando en cada instante un parámetro según la definición de la eficiencia de plato de Murphee (Murphee, 1925). Este es el valor que debería tomar la eficiencia de plato en cada instante para reproducir exactamente el perfil de concentraciones calculado con el modelo de tres clase de vapor usando el simple modelo del plato teórico. Este parámetro - la eficiencia de Murphee - se define de la siguiente manera:

$$\eta_{i,k} = \frac{y_{i,k}^{OUT} - y_{i,k+1}^{IN}}{y_{i,k}^e - y_{i,k+1}^{IN}} \quad \text{i: componente; k: numero de plato} \quad (318)$$

En realidad la eficiencia de Murphee no distingue los distintos componentes, pero en el proceso de “recálculo” aparecen los distintos valores de eficiencia para cada componente según se puede observar en la Figura 31.

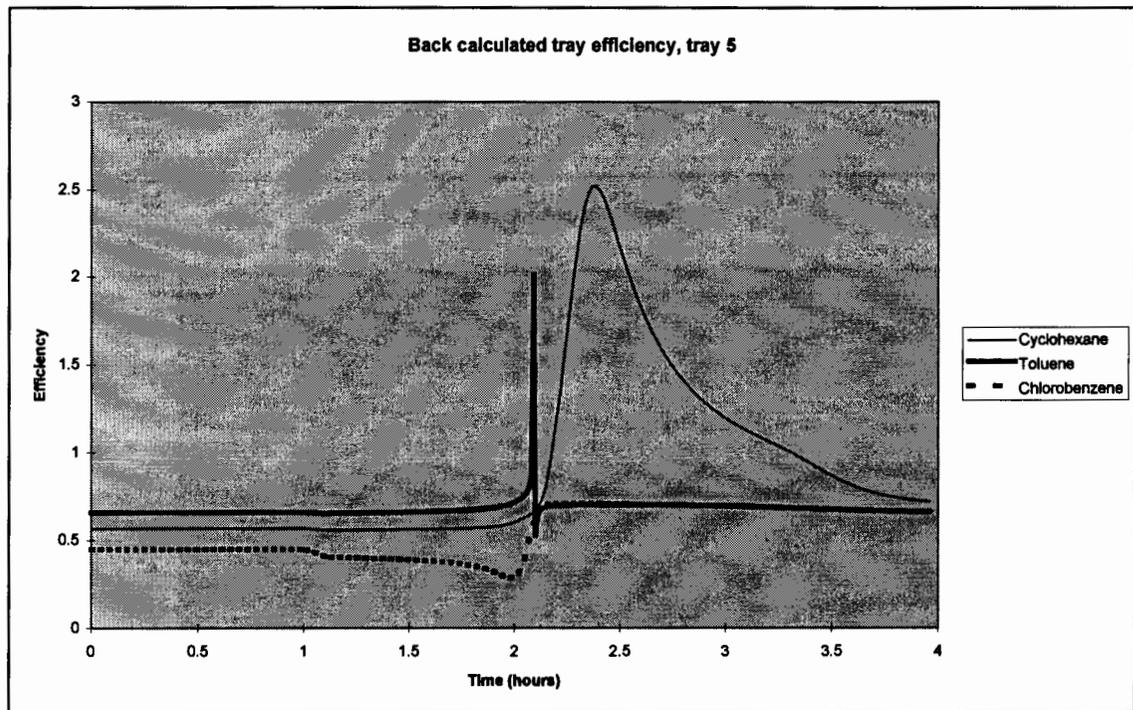


Figura 31: Eficiencias de componente en el quinto plato, recalculadas según la definición de Murphee; modelo de tres clases de vapor, ensayo bq681r40

A parte de los tres distintos valores para la eficiencia de plato, que se ven en el intervalo de estado estacionario (de 0 a 1 hora), también se observa una trayectoria pronunciada en el valor de la eficiencia de plato a partir de las 2 horas. Especialmente notable es el hecho, que la eficiencia suba por encima de uno y su rápido ascenso y descenso al tiempo $t = 2.1$ h. Estos hechos se pueden explicar, sabiendo que las concentraciones (y con ello la eficiencia) se originan exclusivamente en los caudales de transferencia por la interfase. Observando la Figura 32, se nota que el caudal molar de transferencia de tolueno pasa por cero justamente en el instante de tiempo $t = 2.1$ h. Antes de este instante de tiempo, el tolueno se va condensando en la fase de vapor y pasa al líquido, lo que fue definido en el modelo como un flujo negativo. Después el tolueno pasa a ser el componente más volátil en el plato y se evapora pasando a la fase vapor, lo que resulta en un flujo positivo.

El pico pronunciado en la eficiencia de plato aparece, porque la definición de la eficiencia de plato se basa en la comparación con el equilibrio vapor-líquido. De acuerdo con la teoría expuesta en el capítulo 5, se explica que el valor de la eficiencia

puede llegar a tener valores por encima de uno, ya que se trata de un valor “recalculado”, cuyo resultado solamente depende de la termodinámica de transferencia.

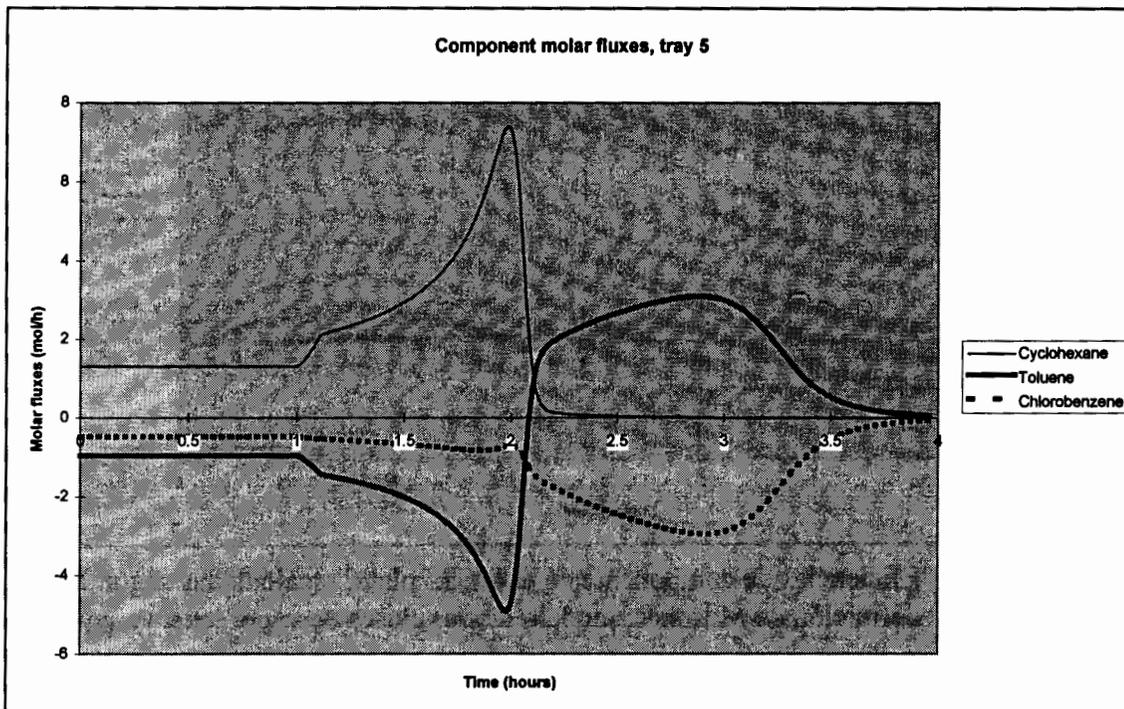


Figura 32: Caudales molares de transferencia en el quinto plato; modelo de tres clases de vapor, ensayo bq681r40

Además hay que tener en cuenta que se trata de una solución numérica. Por pequeños que sean los intervalos de integración (el intervalo de integración principal ha sido de 0.01 horas, modificándose en caso de residuales demasiado grandes), los resultados siempre son discretos y no continuos. Por lo tanto hay que interpretar el salto en la eficiencia también como el resultado de la discretización numérica.

Una situación parecida sucede en cualquier otro plato durante el mismo proceso de simulación en instantes de tiempo diferentes. La Figura 33 muestra el curso de la eficiencia de plato “recalculada” en el plato número 10 de la columna, con los platos enumerados de arriba hacia abajo. Se observa que el cambio brusco en la eficiencia según Murphee del tolueno tiene lugar en el tiempo $t = 2.33h$, unas 0.23 horas (13 min y 48 segundos) más tarde que en el plato 5, donde la fase de vapor ya se ha enriquecido antes con tolueno.

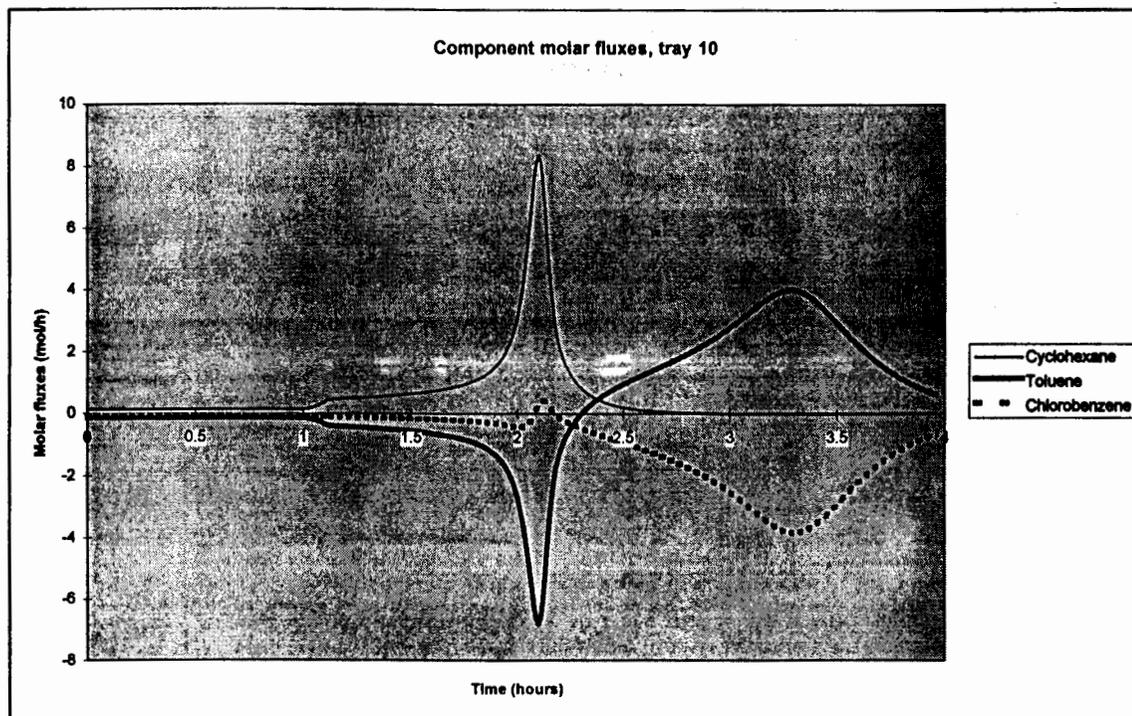


Figura 34: Caudales molares de transferencia en el décimo plato; modelo de tres clases de vapor, ensayo bq681r40

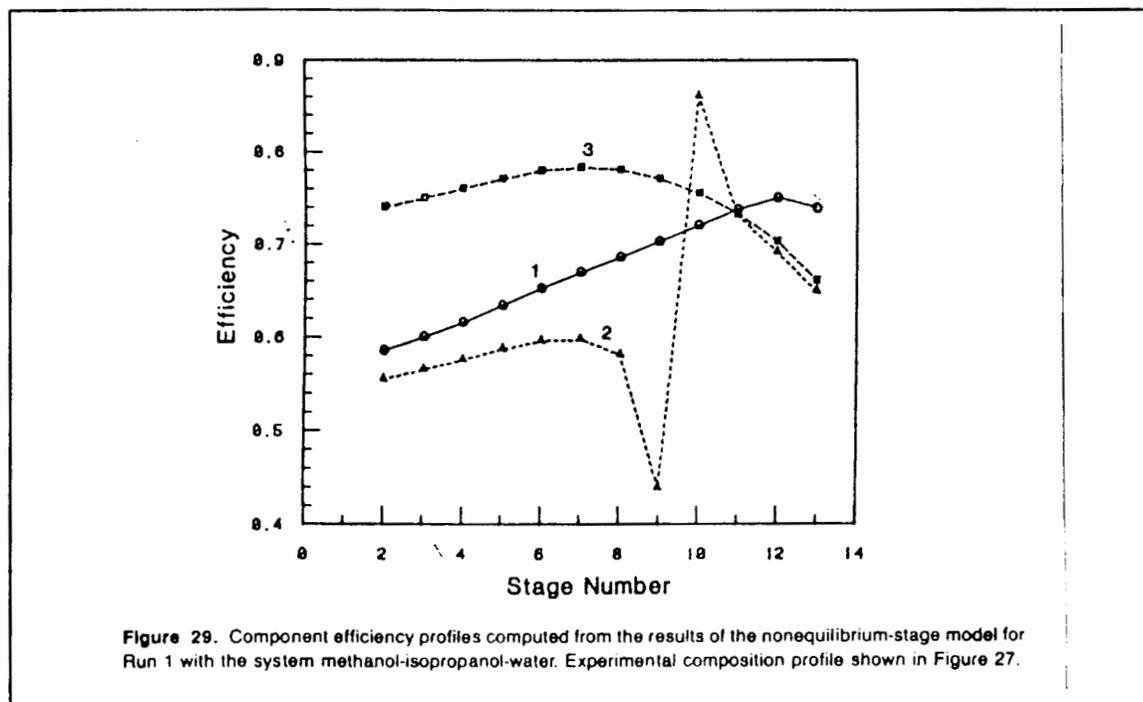


Figura 35: Perfil de la eficiencia de plato "recalculada" para una columna continua según Krishna y Taylor (Taylor, 1993)

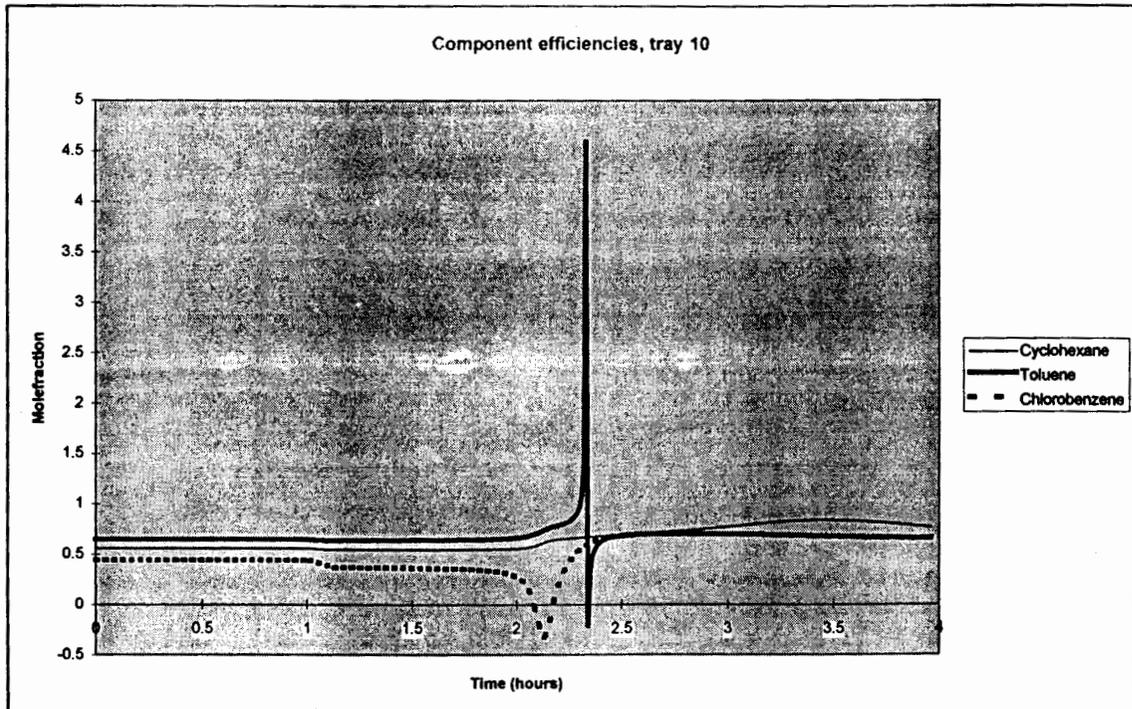


Figura 33: Eficiencias de componente en el décimo plato, recalculadas según la definición de Murphee; modelo de tres clases de vapor, ensayo bq681r40

También ocurre que, como en el caso del quinto plato, en el momento del cambio brusco de la eficiencia de componente para tolueno el caudal molar de este componente pasa por cero como se puede observar en la Figura 34.

Esta evolución de la eficiencia de plato en función del tiempo, con un pico cuando llega el segundo componente como componente ligero al plato, también fue observado por Taylor y Krishna en una forma similar para una columna continua (Taylor, 1993). Lo que se produce en una columna discontinua en un lugar fijo a lo largo del tiempo es lo que sucede en una columna continua a lo largo de su altura. Como se puede observar en la Figura 35, aparece el típico perfil de subida y bajada de la eficiencia del segundo componente mirando de derecha hacia a la izquierda; o sea de abajo de la columna hacia arriba. En esta dirección se llega de componente más pesado hacia componente más ligero, tal como en el eje de tiempo de la columna discontinua, que lleva para un determinado plato de una concentración alta en componente pesado a una concentración alta en componente ligero.

Según los cálculos realizados por Taylor, aparecen también eficiencias de plato “recalculadas” negativas y más grandes que uno, lo que se puede observar en otro ejemplo dado por Taylor en la Figura 36.

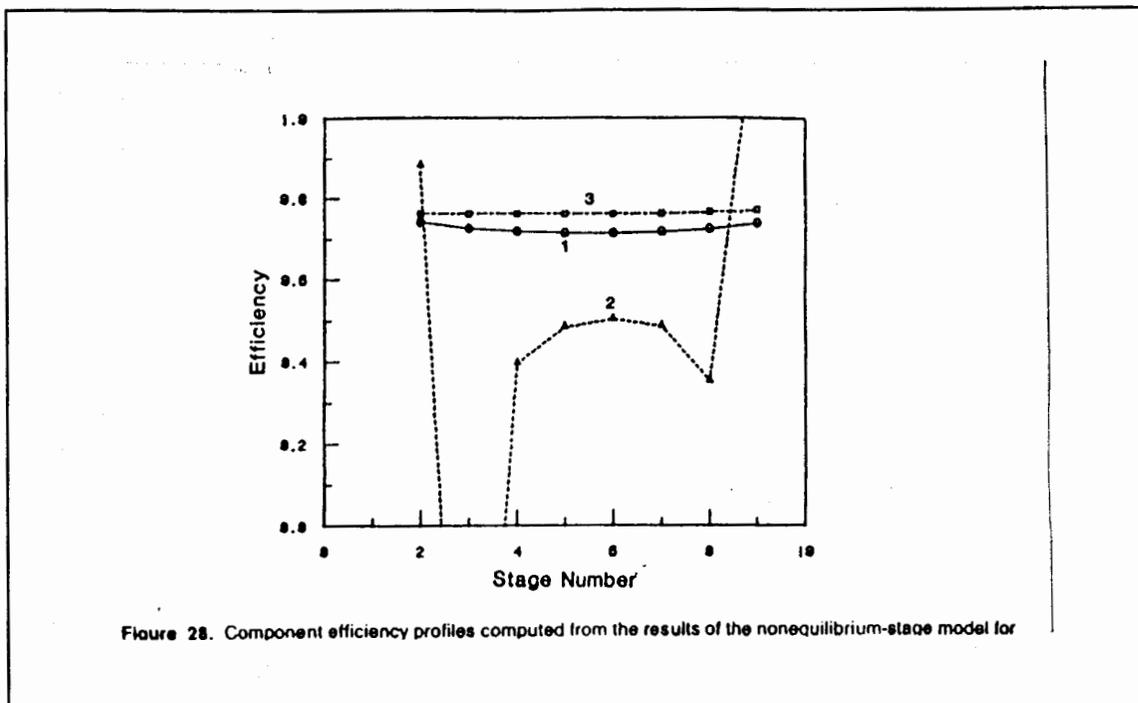


Figura 36: Perfil de la eficiencia de plato “recalculada” para una columna continua mostrando valores negativos y mayores que 1 según Krishna y Taylor (Taylor, 1993)

6.1.3. Difusión Maxwell-Stefan frente a difusión Fick en el modelo de tres fases de vapor

En el capítulo 4 se explican los fundamentos teóricos de la difusión en mezclas multicomponentes y la formulación de la difusión según Maxwell y Stefan. El experimento realizado por Duncan y Toor, que se explica en el capítulo 4.2.2, demuestra las desventajas de la definición de la difusión según Fick, ya que el coeficiente de difusión de Fick debería tomar valores negativos hasta infinito para poder explicar los efectos de cruce que aparecen durante el experimento. La explicación de la difusión hecha por Maxwell y Stefan se muestra superior a la difusión de Fick, ya que los coeficientes de difusión usados por Maxwell y Stefan contienen la definición de un coeficiente inverso de fricción entre los componentes. Estos coeficientes dependen

mucho menos de la concentración que los coeficientes de Fick y siempre tienen un valor finito (véase la Figura 40).

Uno de los efectos sorprendentes que aparece durante el experimento de Duncan y Toor es el efecto de la difusión inversa. Difusión inversa quiere decir que el componente en cuestión se difunde en dirección contraria al gradiente de concentración expresado matemáticamente por:

$$\frac{J_2}{-\nabla x_2} > 0 \quad (319)$$

Este efecto, que se puede observar en un experimento específico a escala de laboratorio, ¿se puede observar también en un proceso real como el de la destilación?

Para contestar a esta pregunta se ha efectuado un “recálculo” de los coeficientes de difusión, similar al “recálculo” que se efectuó para las eficiencias de plato. El “recálculo” indica cuál es el valor que debería tomar el coeficiente de difusión en la definición hecha por Fick para que el caudal difusivo, determinando según la difusión de Maxwell-Stefan, corresponda al calculado por esta última definición. En concreto se resuelven las dos ecuaciones adicionales siguientes para determinar los coeficientes de difusión de Fick “recalculados” $D_{Fick,1}$ y $D_{Fick,2}$:

$$D_{Fick,1} = -\frac{J_1 \delta}{c (y_1^e - y_1)} \quad (320)$$

$$D_{Fick,2} = -\frac{J_2 \delta}{c (y_2^e - y_2)} \quad (321)$$

De esta manera se pueden identificar fácilmente zonas de difusión inversa ($D_{Fick} < 0$) y situaciones en las que rige la difusión osmótica ($D_{Fick} \rightarrow \infty$) o una barrera de difusión ($D_{Fick} = 0$) (véase el apartado 4.2.2). La Figura 37 muestra que existe un período de tiempo de difusión inversa entre $t = 2.3$ h y $t = 2.5$ h en el cual el coeficiente de difusión de Fick es negativo. Asimismo existen dos puntos de barrera de difusión en los

cuales el flujo difusivo es igual a cero aunque la fuerza motriz (diferencia de concentración) no es igual a cero.

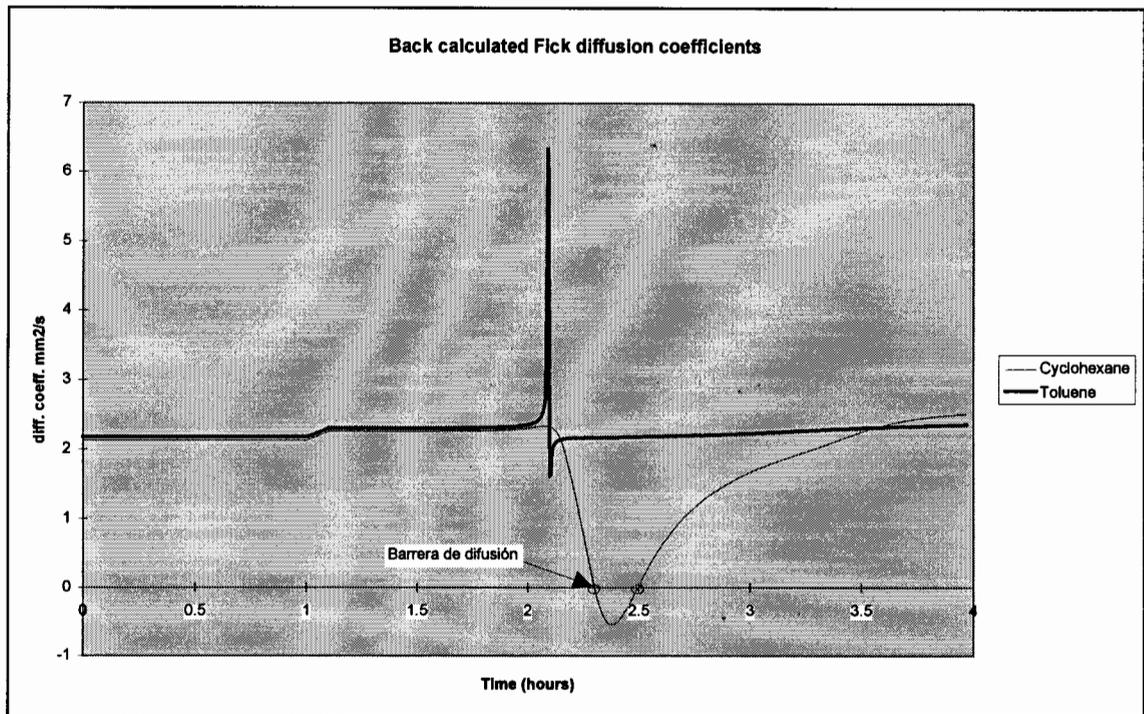


Figura 37: Coeficientes de difusión "recalculados" con la definición de Fick en el décimo plato, ensayo bq681r40

Este comportamiento se hace más evidente al observar el propio caudal difusivo y la diferencia de concentración, ya que son estos dos valores los que forman el coeficiente de difusión "recalculado" (ecuaciones (320) y (321)). La Figura 38 muestra que el flujo difusivo pasa a ser negativo en el intervalo de tiempo $2.3\text{h} < t < 2.5\text{h}$ que es el mismo intervalo analizado para el coeficiente de difusión "recalculado" (Figura 37). Es de restar que la diferencia de concentración como fuerza motriz de la difusión es positiva en todo el intervalo contemplado lo que se manifiesta examinando el perfil de la diferencia de concentración (Figura 39).

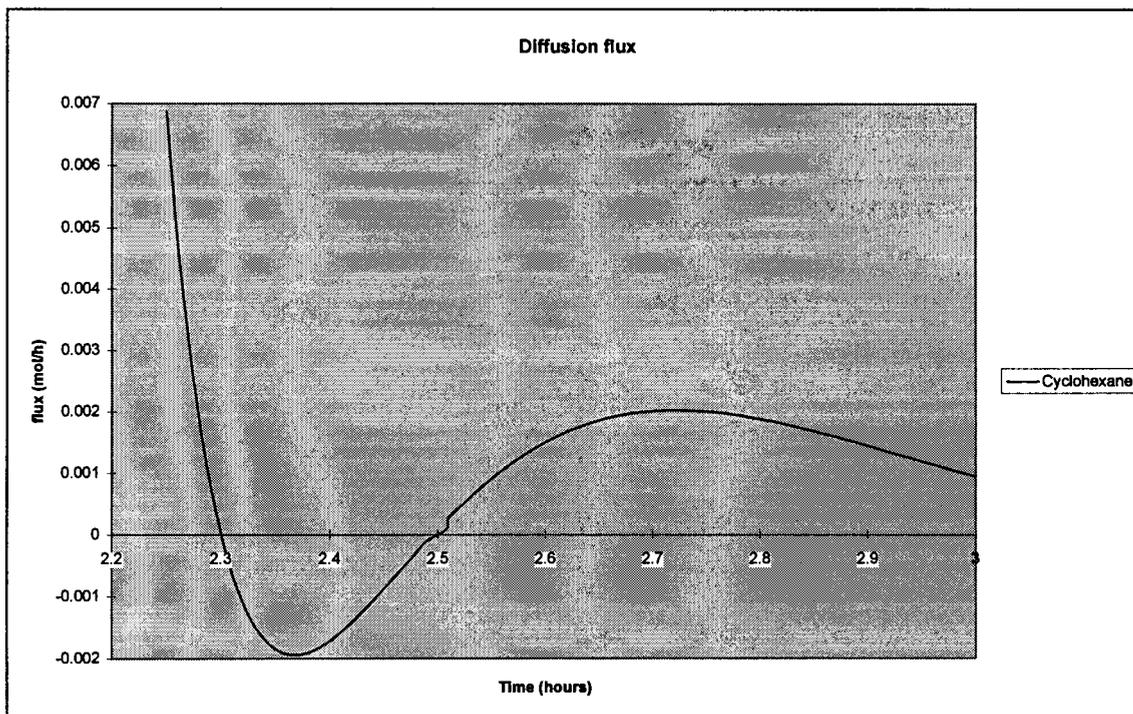


Figura 38: Caudal difusivo entre $t = 2.3$ y $t = 3$ para ciclohexano, décimo plato, ensayo bq681r40

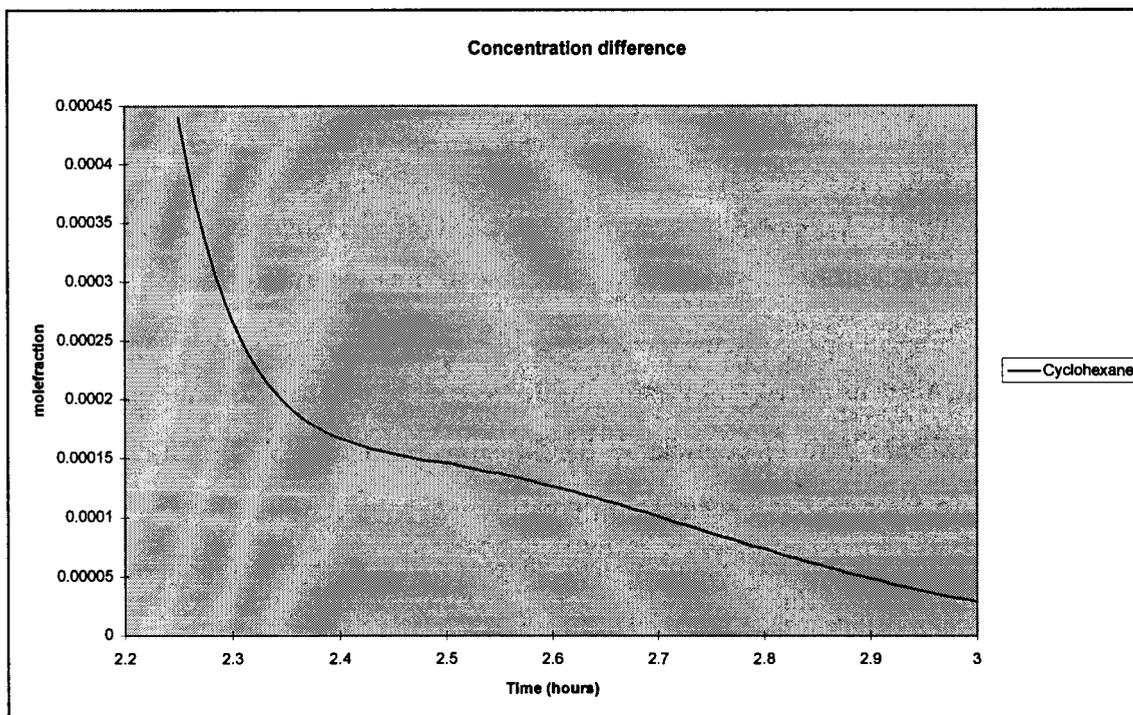


Figura 39: Diferencia de concentración entre $t = 2.3$ y $t = 3$ para ciclohexano, décimo plato, ensayo bq681r40

En la Figura 37, que muestra los coeficientes de difusión “recalculados” según la definición de Fick., se observa que existe una variación importante del valor de los

coeficientes en función del tiempo y por consiguiente en función de la concentración (se puede apreciar los perfiles de concentración de vapor del plato en cuestión en la Figura 41). Esta dependencia del coeficiente de difusión de la concentración es una de las mayores desventajas de la formulación de Fick. La Figura 40 en cambio muestra la menor dependencia de los coeficientes de difusión de la matriz $[D']$. Tal como se espera, los coeficientes cruzados D_{12} y D_{21} son menores a los coeficientes de la diagonal D_{11} y D_{22} . Esto se explica teniendo en cuenta el cálculo de los caudales de difusión según la ecuación (50) del capítulo 4, la cual conste:

$$\dot{J}_1 = -c_1 D_{11} \nabla x_1 - c_1 D_{12} \nabla x_2 \quad \text{y} \quad \dot{J}_2 = -c_1 D_{21} \nabla x_1 - c_1 D_{22} \nabla x_2 \quad (322)$$

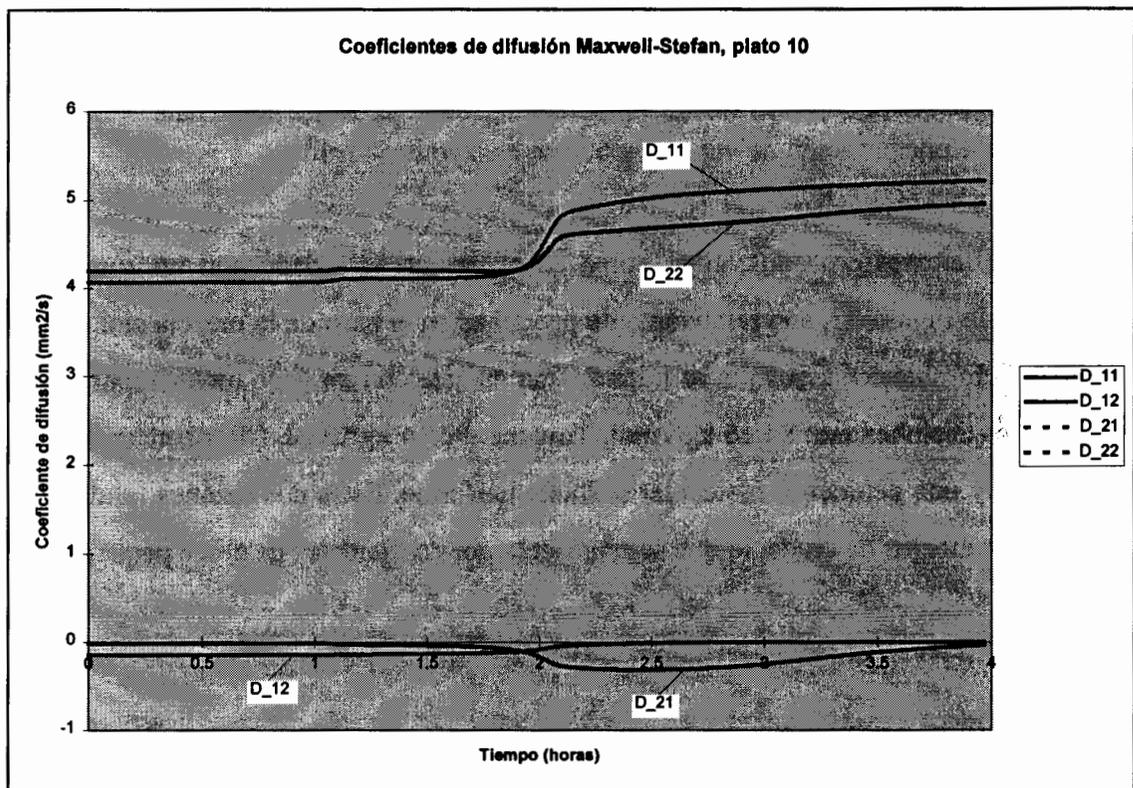


Figura 40: Coeficientes de difusión de la matriz $[D]$ en función del tiempo, ensayo bq681r40

Se ve que son los coeficientes cruzados D_{12} y D_{21} que provocan un flujo difusivo de componente 1 por el gradiente de componente 2, provocado por el término $(-c_1 D_{12} \nabla x_2)$, y un flujo de componente 2 por el gradiente en 1 provocado por el término $(-c_1 D_{21} \nabla x_1)$.

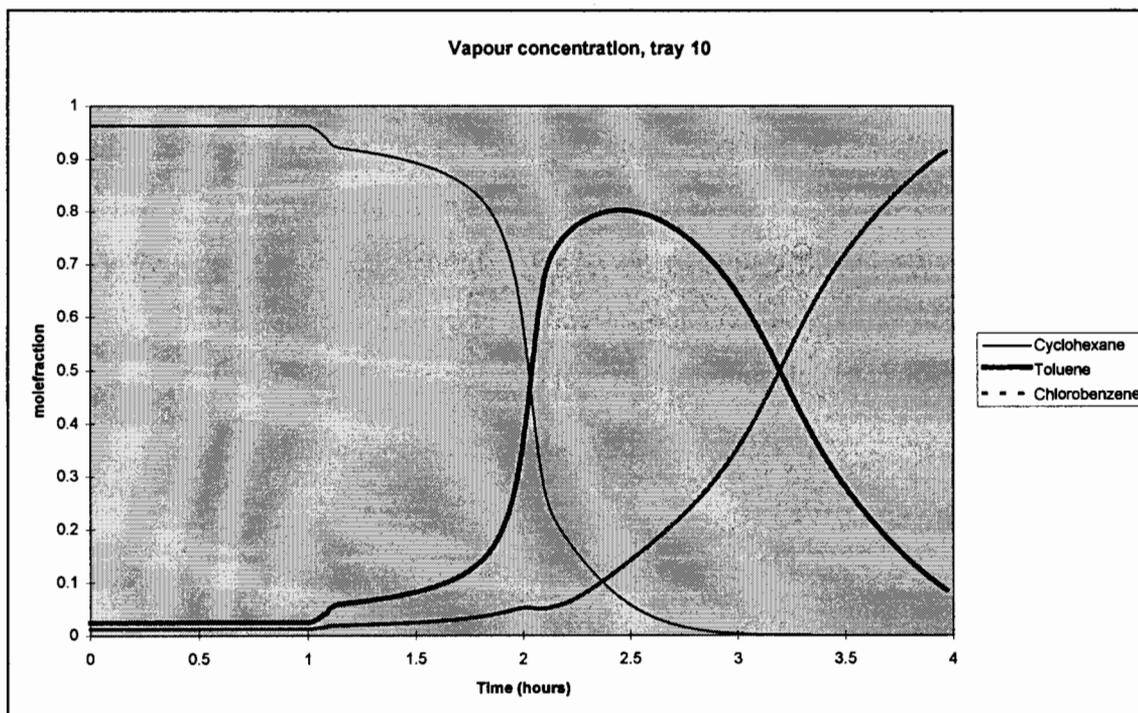


Figura 41: Concentración de vapor plato diez, ensayo bq681r40

Estos coeficientes cruzados, cuyo curso en el tiempo está dado con un aumento de escala en la Figura 42, son relativamente pequeños en el caso de la mezcla ciclohexano, tolueno, clorobenceno, porque se trata de una mezcla con un peso molar relativamente uniforme (Ciclohexano: 84,16 kg/kmol, Toluene: 92,14 kg/kmol, Clorobenceno: 112.56 kg/kmol) y una geometría molecular bastante uniforme. Estas dos razones no dan lugar a mayores efectos de cruce, lo que se representa por coeficientes de cruce pequeños.

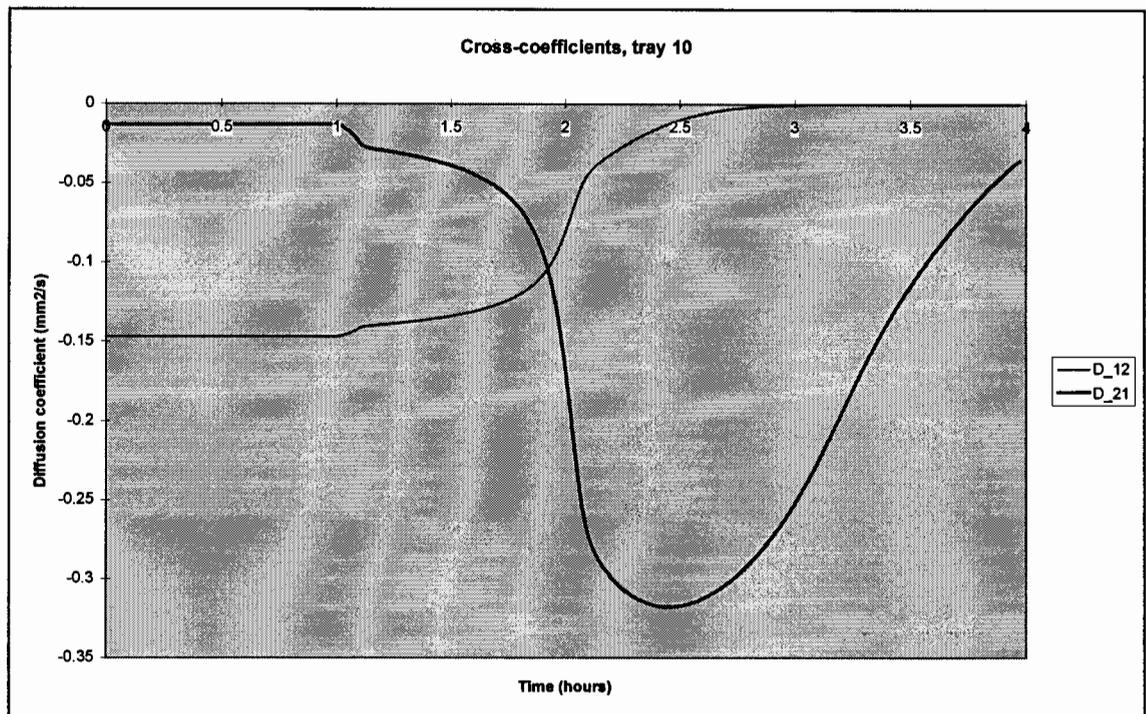


Figura 42: Ampliación de escala para los coeficientes de difusión cruzados en el plato diez, ensayo bq681r40

6.1.4. Comparación con otros modelos

En el apartado 6.1.1 se compararon distintos aspectos del modelo de transferencia de materia, habiéndose justificado el modelo con tres clases de vapor como el más apto para obtener con mayor precisión el perfil de concentración del destilado, especialmente para cargas altas de vapor. Como comprobación de la metodología de cálculo empleada se han tomado las mediciones de los experimentos hechos en la columna de laboratorio. Estas mediciones se comparan aquí con los resultados obtenidos por simulación con el modelo del plato de equilibrio y el modelo short-cut.

Las simulaciones con el modelo de plato de equilibrio se efectuaron con una eficiencia de plato, que se calcula con el método ampliado presentado en el apartado 5.2.3. Este método se basa en la correlación correspondiente del "Bubble Tray Design Manual" (véase el apartado 5.2.3). Estas simulaciones, de las cuales se presenta un ejemplo en la Figura 43, manifiestan una buena coincidencia con las mediciones.

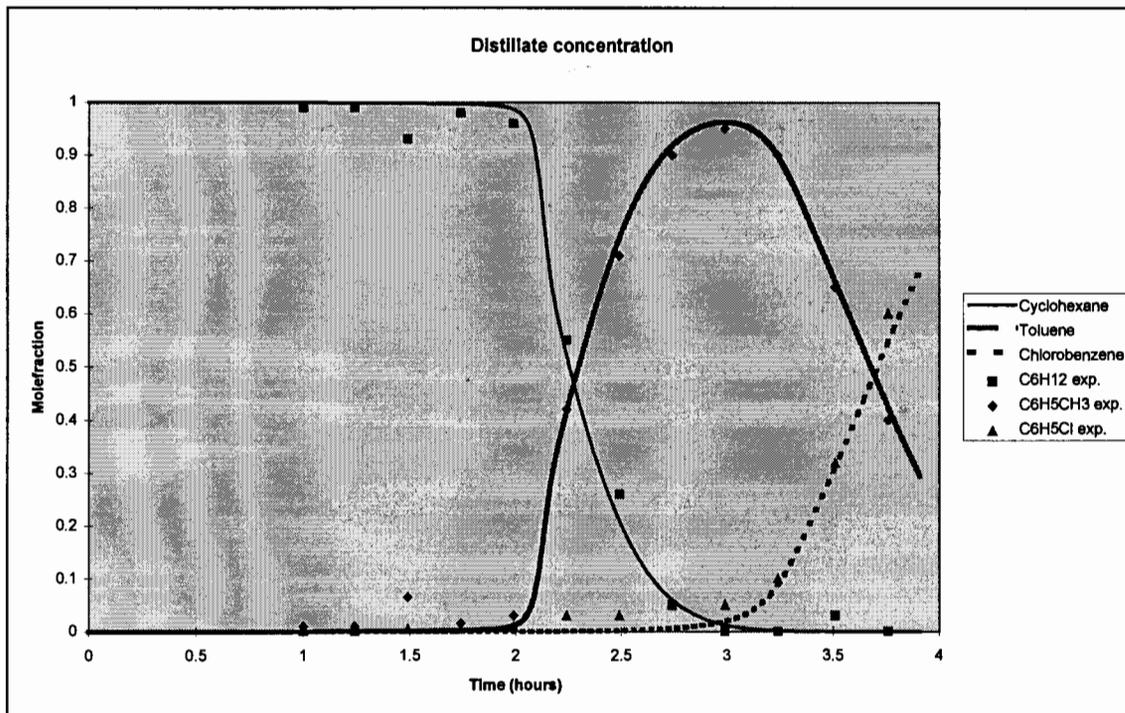


Figura 43: Simulación con el modelo del plato de equilibrio con eficiencias de plato según ampliación del método AIChE, ensayo bq681r40

Contemplando la Figura 43 con más detalle, se advierte que la separación simulada parece más “abrupta”, más pronunciada, que la obtenida anteriormente con el modelo de transferencia de materia. Por una parte, en el intervalo de tiempo entre una y dos horas la concentración de ciclohexano se mantiene constante a 100%, aunque la realidad experimental indica un descenso progresivo; por otra parte la concentración de clorobenceno en el intervalo de tiempo entre dos y tres horas se mantiene prácticamente constante en 0%, aunque en realidad sube ligeramente hasta el 5%. En ambos casos las simulaciones hechas con el modelo de transferencia de materia reflejan una mayor reproducibilidad del fenómeno real

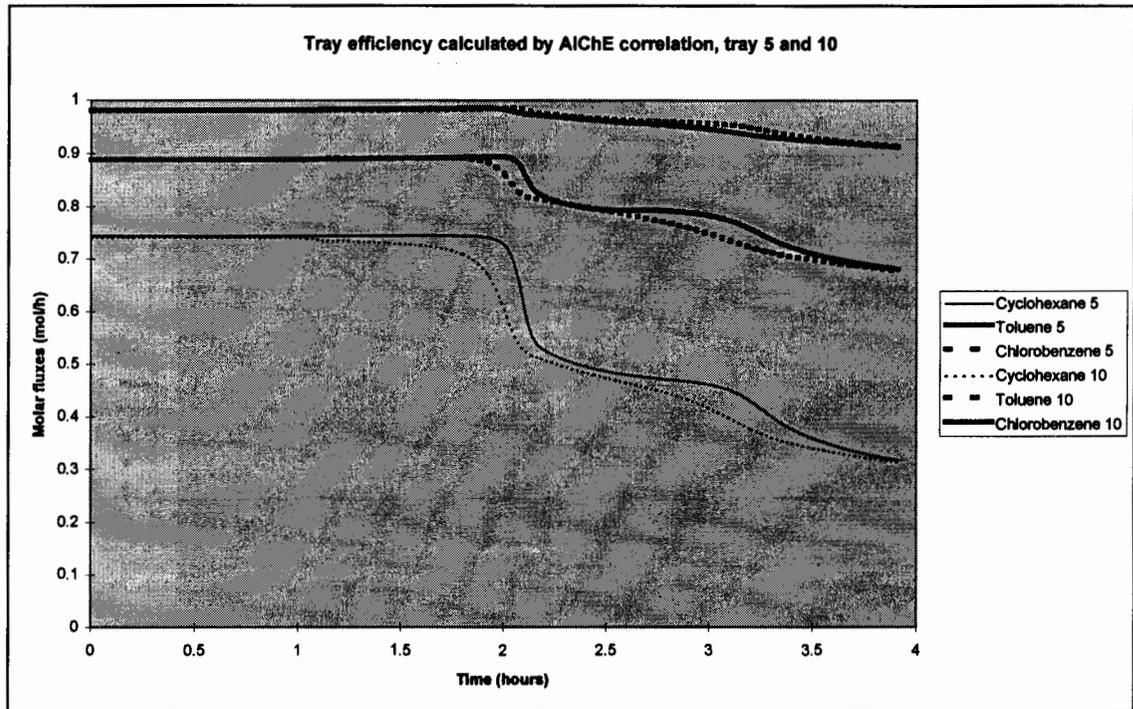


Figura 44: Eficiencias de plato calculados para el modelo del plato de equilibrio a dos distintas alturas de la columna, ensayo bq681r40

La simulación de la Figura 43 se basa en las eficiencias de plato que aparecen dibujadas en la Figura 44. Hay que recordar, que en realidad el concepto de la eficiencia de plato, es un concepto desarrollado para una separación binaria y la correlación usada para el cálculo de las eficiencias está pensada para una separación binaria. Solamente con la ampliación desarrollada en el apartado 5.2.3 es posible calcular eficiencias de plato individuales para cada componente. Este desarrollo no es absolutamente precisa, porque trata de reducir la mezcla multicomponente a una pseudo-mezcla binaria no existente; no obstante los resultados obtenidos son razonablemente satisfactorios.

Otro modelo que se ha empleado como referencia comparativa es el modelo short-cut. Este modelo solamente puede dar un resultado razonable, cuando se calcula la separación de una mezcla no azeotrópica, ya que la aproximación de volatilidades relativas constantes es absolutamente inválida cuando la mezcla se acerca a su punto azeotrópico. De hecho el resultado de una simulación con el modelo short-cut depende en gran parte de la elección de las volatilidades relativas. Para llegar a un resultado óptimo, se ha elegido un promedio aritmético de la volatilidad relativa de cada componente sobre todo el rango de concentración.

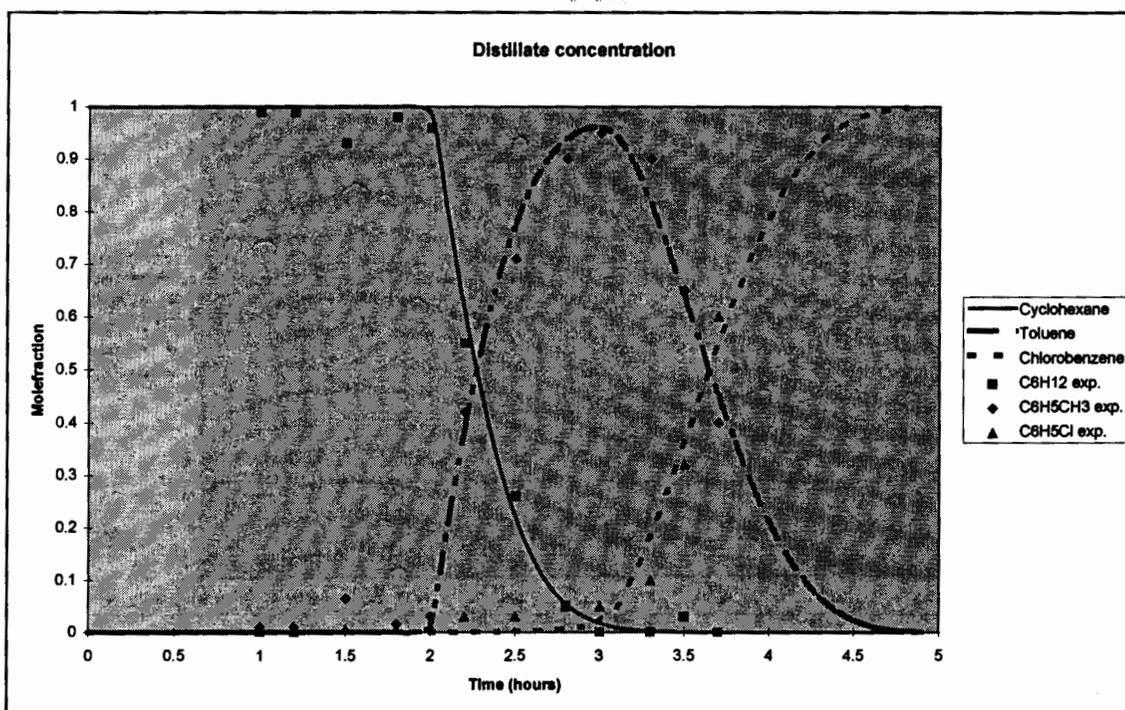


Figura 45: Simulación con el modelo short-cut, volatilidades relativas 4.7:1; 1.81:1; 1:1; ensayo bq681r40

Los perfiles de concentraciones que se observan en la Figura 45 son más pronunciados aún que los obtenidos anteriormente con el modelo del plato de equilibrio (Figura 43). La presencia de tolueno en el destilado es muy brusca y lo mismo sucede con el descenso de la concentración de ciclohexano. La reproducción del perfil de concentración es bastante menos exacta que en los modelos más complejos. El hecho de que se reproduzca el perfil cualitativamente bien solo se debe al comportamiento termodinámico ideal de la mezcla.

6.2. La simulación con la mezcla metanol agua

La mezcla de metanol - agua es una mezcla ideal cuyas propiedades se han presentado en detalle en el capítulo 2. Con esta mezcla se llevó a cabo un total de ocho experimentos, usando cuatro diferentes relaciones de reflujo y dos diferentes potencias de calefacción, formando así el total de ocho experimentos. El estudio comparativa que

nos ocupa se refiere al perfil de concentración del destilado, ya que es junto con la concentración del residuo en el calderín la concentración más importante.

Los experimentos con esta mezcla se efectuaron como los primeros ensayos después de la construcción de la planta piloto. Ambos componentes de la mezcla son de acceso fácil y como se trata de una mezcla binaria se obtenía una manera relativamente simple de averiguar y confirmar el buen funcionamiento de la columna y del método experimental. A parte de esto, los experimentos permitieron también comprobar el método analítico.

Por el hecho de que se trataba de unos experimentos “de prueba”, no se llevará a cabo un análisis muy profundo de ellos. Especialmente el uso del modelo de transferencia de materia a base de las ecuaciones Maxwell-Stefan, carece de sentido para una mezcla binaria, ya que su gran ventaja de poder contemplar efectos de cruce en la difusión no se puede demostrar para una mezcla binaria. El análisis de los experimentos queda entonces restringido a una comparación con el modelo abreviado (“short-cut”) y el modelo del plato teórico.

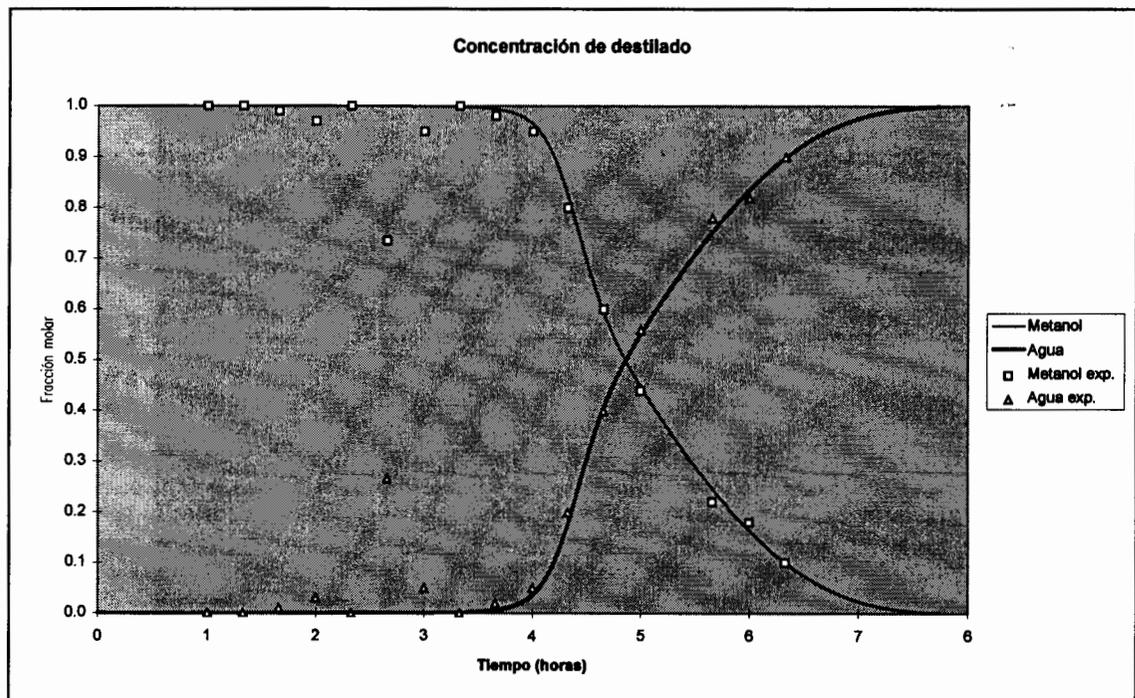


Figura 46: Simulación con el modelo del plato de equilibrio con eficiencias de plato según el método AIChE, ensayo aq932r25

La dos Figuras (Figura 46 y Figura 47) muestran la tendencia, que se puede observar en todas las simulaciones efectuadas con la mezcla metanol agua. Esa tendencia es la de encontrar siempre una adaptación muy razonable del modelo del plato de equilibrio a los valores experimentales y un desajuste de tiempo en el caso del modelo abreviado. Este desajuste siempre tiene la misma dirección, quiere decir que siempre la destilación se acaba más pronto en la simulación con el modelo abreviado que en la simulación con el modelo del plato teórico. Se trata de un efecto, que no se puede observar en la simulación de la mezcla ternaria, la cual se compone de unos compuestos relativamente uniformes y con calores latentes también uniformes.

Esto no es el caso para la mezcla metanol - agua, ya que allí los calores latentes son menos parecidos. Como el modelo abreviado usado para la simulación de la mezcla binaria trabaja con un caudal de vapor constante (y no con una potencia calefactora constante) es más probable que exista un diferencia entre el caudal realmente evaporado y la constante puesta cuando los compuestos de la mezcla tienen calores latentes más dispares. Una diferencia en el caudal de vapor se traduce después en una variación en el eje de tiempo.

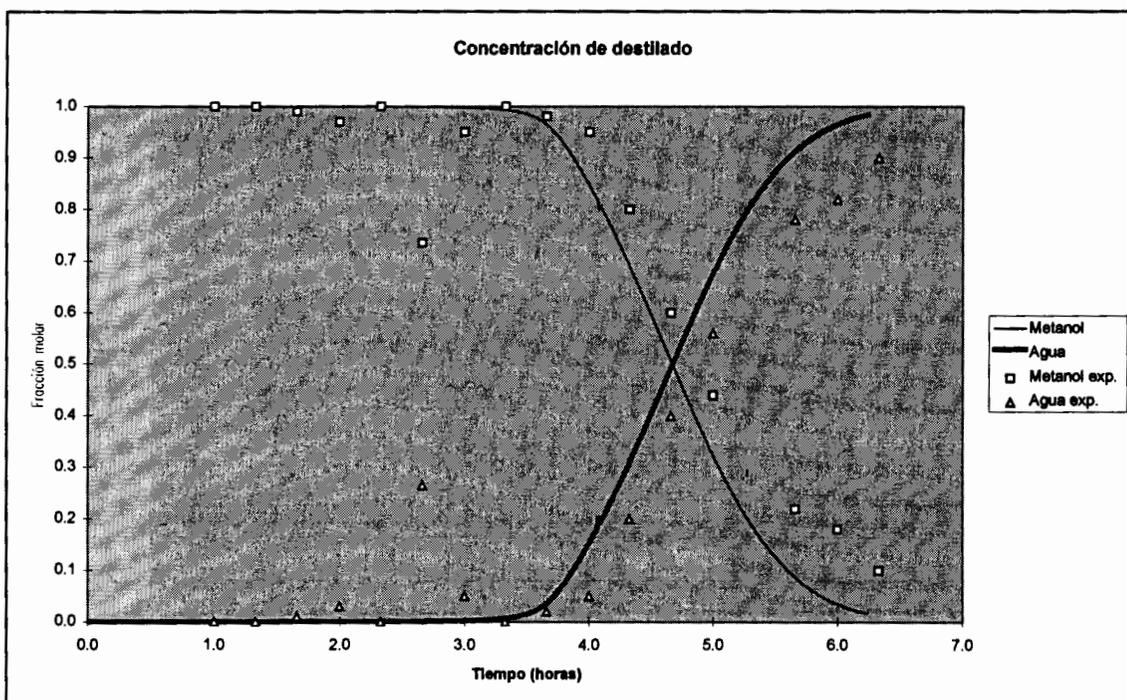


Figura 47: Simulación con el modelo short-cut, volatilidades relativas 3.9:1; 1:1, ensayo aq932r25

6.3. Conclusiones del capítulo

El capítulo presente compara los distintos modelos que se explican en el capítulo 5 con el nuevo modelo desarrollado y explica las características y ventajas del mismo. Adicionalmente se exponen algunas características del nuevo modelo a base de ciertos valores clave.

La comparación efectuada entre los distintos modelos demuestra, que el nuevo modelo desarrollado, ofrece la mejor adaptación entre el perfil de concentración medido por experimento y el perfil obtenido por simulación. Este hecho se manifiesta especialmente para cargas altas de vapor, ya que bajo esta condición aparece una tercera clase de vapor. Para cargas bajas de vapor el modelo de dos clases de vapor ya demuestra una adaptación buena a los perfiles de concentración experimentales. No obstante hay que mencionar, que las columnas operan generalmente en un régimen de carga alta para aumentar la productividad.

Con el uso de valores "recalculados", o sea valores que resultan de una definición diferente a la que se usa realmente para la simulación, era posible de demostrar la superioridad de la definición de la difusión según Maxwell y Stefan y la superioridad del modelo de transferencia de materia. Estos valores "recalculados" - como la eficiencia de plato o el coeficiente de difusión según la definición de Fick - pueden llegar a tener unos valores extraños, fuera del margen de definición original. Así, por ejemplo, un coeficiente de difusión de Fick negativo indica zona de difusión inversa.

6.4. Símbolos

<i>Letra</i>	<i>Descripción</i>	<i>Unidad</i>
<i>c</i>	concentración molar	kmol/ m ³
<i>D</i>	coeficiente de difusión de Fick	m ² /s
<i>D'</i>	coeficiente de difusión de Maxwell-Stefan	m ² /s

F	factor-F (carga de vapor)	$\sqrt{\text{kg} / \text{ms}^2}$
\dot{J}	caudal difusivo por superficie	kmol/s m^2
k	número de plato	-

Símbolos griegos

<i>Letra</i>	<i>Descripción</i>	<i>Unidad</i>
δ	espesor	mm
η	eficiencia de plato de Murphee	-

Subíndices

i	número de componente (de 1 hasta M)
t	total

Superíndices

OUT	salida
IN	entrada
I	en la interfase
e	equilibrio