



CONTRIBUCION AL ESTUDIO DE LA OPERACION

DE DESTILACION DISCONTINUA MEDIANTE

SIMULACION

T 01150
1400354341

BIBLIOTECA DEPARTAMENT D'ENGINYERIA QUÍMICA
UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

Memoria de Tesis Doctoral

presentada por

Anna Bonsfills Pedrós

para optar al grado de Doctora en Ciencias (Químicas)

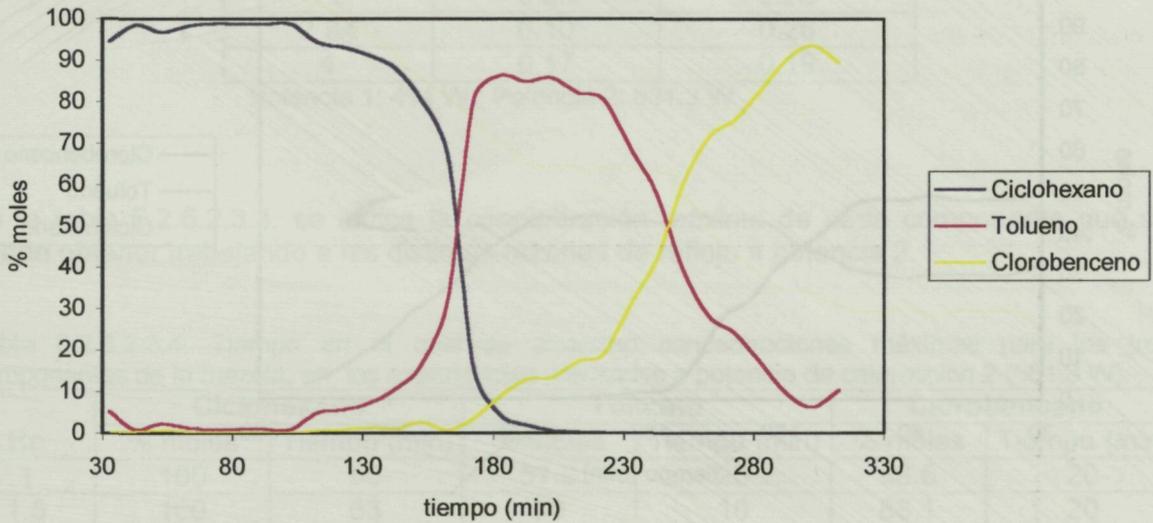
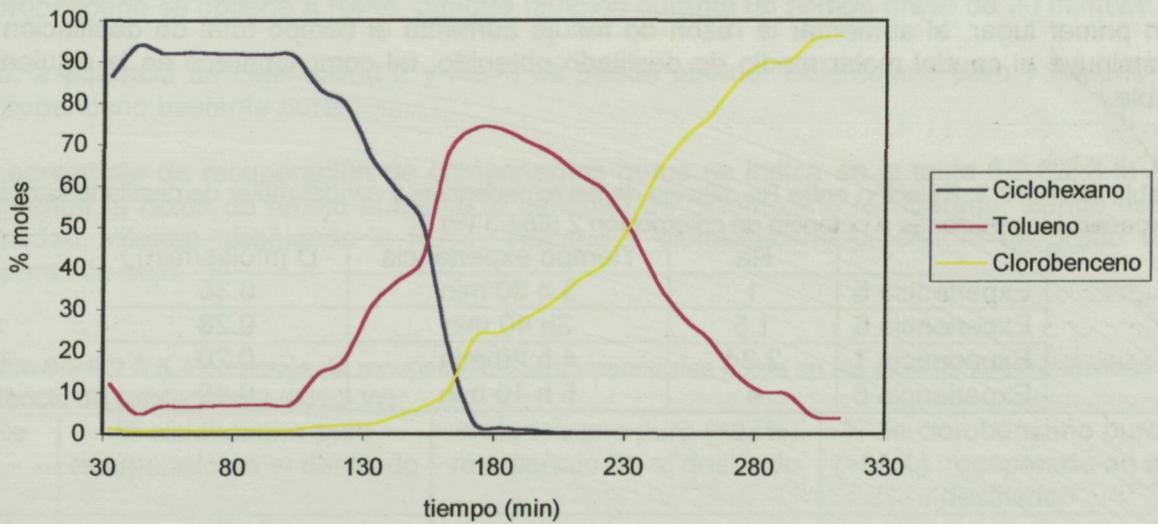
Barcelona, Septiembre de 2001

Director de la Tesis: Dr. Lluís Puigjaner Corbella

Departament d'Enginyeria Química

Escola Tècnica Superior d'Enginyers Industrials de Barcelona

Universitat Politècnica de Catalunya

• **Plato 5****Experiencia N° 8**Figura 6.2.6.2.3.2. Perfil de concentraciones en el plato 5. Potencia de calefacción 2, $Re = 4$.• **Plato 10****Experiencia N° 8**Figura 6.2.6.2.3.3. Perfil de concentraciones en el plato 10. Potencia de calefacción 2, $Re = 4$.

•Plato 15

Experiencia N° 8

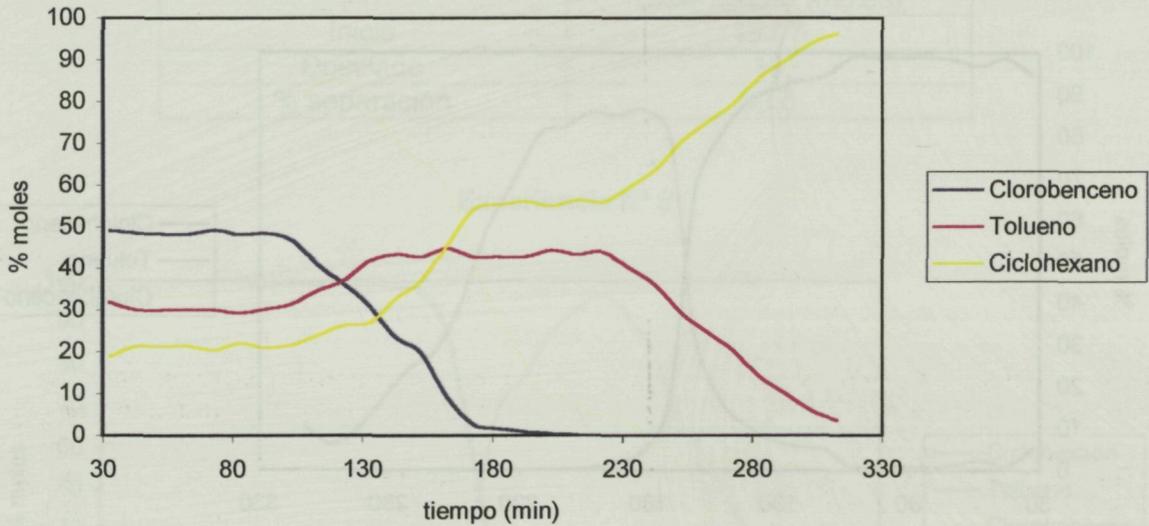


Figura 6.2.6.2.3.4. Perfil de concentraciones en el plato 15. Potencia de calefacción 2, $Re = 4$.

A potencia de calefacción 2 (681.3 W), se han realizado dos experiencias más, la experiencia 6 a $Re=1.5$ y la experiencia 7 a $Re=2.34$. En ambas experiencias se han obtenido los perfiles de temperatura, de concentración y de caudal molar de destilado. A continuación se comentan los resultados más significativos de todas las experiencias realizadas a potencia de calefacción 2. Estos resultados se indican en las tablas 6.2.6.2.3.2., 6.2.6.2.3.3., 6.2.6.2.3.4. y 6.2.6.2.3.5.

En primer lugar, al aumentar la razón de reflujo aumenta el tiempo total de destilación y disminuye el caudal molar medio de destilado obtenido, tal como aparece en la siguiente tabla.

Tabla 6.2.6.2.3.2. Relación entre Re , tiempo de las experiencias y caudal molar de destilado para las experiencias realizadas a potencia de calefacción 2 (681.3 W).

	Re	Tiempo experiencia	D (moles/min)
Experiencia 5	1	3 h 30 min	0.35
Experiencia 6	1.5	3h 40 min	0.28
Experiencia 7	2.34	4 h 20 min	0.26
Experiencia 8	4	5 h 10 min	0.19

Comparando la potencia calefactora (tabla 6.2.6.2.3.3.), se observa que para una misma razón de reflujo, la experiencia realizada a una potencia de calefacción 2, presenta un caudal molar medio superior al obtenido a potencia de calefacción 1.

Tabla 6.2.6.2.3.3. Caudal molar medio de destilado a potencia 1 y potencia 2.

Re	Potencia 1	Potencia 2
	D(moles/min)	D (moles/min)
1	0.30	0.35
1.5	0.20	0.28
2.34	0.19	0.26
4	0.17	0.19

Potencia 1: 414 W ; Potencia 2: 681.3 W

En la tabla 6.2.6.2.3.4. se indica la concentración máxima de cada componente que se puede obtener trabajando a las distintas razones de reflujo a potencia 2.

Tabla 6.2.6.2.3.4. Tiempo en el cual se alcanzan concentraciones máximas para los tres componentes de la mezcla, en las experiencias realizadas a potencia de calefacción 2 (681.3 W).

Re	Ciclohexano		Tolueno		Clorobenceno	
	% moles	Tiempo (min)	% moles	Tiempo (min)	% moles	Tiempo (min)
1	100	50	57.9	20	86.5	20
1.5	100	63	70	10	86.1	20
2.34	100	70	76.8	20	84.6	10
4	100	100	93.9	20	91.1	20

Tal como ya habíamos visto al comparar las experiencias a $Re=1$ y $Re=4$, al aumentar la razón de reflujo se obtiene ciclohexano puro durante más tiempo. Al aumentar la razón de reflujo aumenta la concentración de tolueno obtenida. Esta concentración es máxima a $Re=4$, aunque sólo es posible obtenerla durante 20 minutos. La concentración máxima de clorobenceno se obtiene a $Re=4$, aunque también durante un tiempo breve de 20 minutos.

Así, a potencia de calefacción 2 y $Re=4$ se puede obtener ciclohexano puro y tolueno y clorobenceno bastante puros.

El porcentaje de recuperación de componentes puros se indica en la tabla 6.2.6.2.3.5. Al aumentar la razón de reflujo aumenta la cantidad de ciclohexano recuperado, siendo esta cantidad máxima trabajando a $Re=4$. Tolueno y clorobenceno presentan un grado de separación bajo.

Tabla 6.2.6.2.3.5. Porcentaje de recuperación de componentes puros en las experiencias realizadas a potencia de calefacción 2 (681.3 W).

Re	% ciclohexano puro recuperado en el destilado	% de tolueno puro (>93%) recuperado en el destilado	% de clorobenceno puro (>91%) recuperado en el destilado
1	91.8	-	-
1.5	92.5	-	-
2.34	95.4	-	-
4	99.6	18.7	18.2

6.2.6.3. CONCLUSIONES

- El tiempo de estabilización de la columna trabajando con una potencia de calefacción de 681.3 W es de 30 minutos.
- En ninguna de las experiencias realizadas a 681.3 W (potencia 2), ha sido posible recuperar totalmente cada componente con una pureza máxima.
- De las experiencias realizadas a potencia 2, la realizada a $Re=4$ permite obtener ciclohexano totalmente puro con una recuperación del 99.6% en moles. Se puede recuperar el 18.7% de tolueno con una concentración del 93.9% en moles y el 18.2% de clorobenceno con una concentración del 91.1 % en moles.
- La experiencia a $Re=4$ y potencia 2 es la que permite la más alta recuperación de ciclohexano.
- El tolueno con una pureza del 93.9% en moles sólo se puede obtener a potencia 2 y $Re=4$, aunque no recuperamos todo el tolueno inicial.
- Puede recuperarse el 18.2% en moles de clorobenceno con una pureza del 91.1% en moles. Si el clorobenceno se quiere obtener más puro, se puede trabajar a potencia 1 y $Re=4$, con lo cual se recupera el 51.9% en moles de clorobenceno con una concentración del 97.1% en moles (tabla 6.2.5.2.3.4).
- Al aumentar la razón de reflujo aumenta el tiempo total de destilación y disminuye el caudal molar medio de destilado obtenido.
- Para una misma razón de reflujo, al aumentar la potencia de calefacción, aumenta el caudal molar medio de destilado obtenido.
- Para simular la separación de la mezcla ternaria a potencia 2, debería utilizarse el valor experimental del tiempo de estabilización (30 min) de la planta piloto.
- Los perfiles de concentración y los perfiles de caudal molar obtenidos a potencia 1 y 2 respectivamente, podrían presentar ligeras variaciones respecto a los valores presentados, si las muestras de la columna y los pesos de destilado se hubieran obtenido en continuo.

6.3. COMPARACION DE LAS SIMULACIONES CON EL SIMULADOR BATCHSIM

El objetivo de este apartado es comparar las simulaciones realizadas con los programas propios, con el simulador Batchsim, a fin de poder conocer si el modelo utilizado se aproxima al más riguroso de Batchsim, de utilización comercial, que está basado en los balances de materia y energía y en las relaciones de equilibrio líquido-vapor. Se van a comparar por un lado los perfiles de concentración y por otro los de temperatura, a la potencia de calefacción de 414 W (potencia 1).

Los datos introducidos en Batchsim son:

Componente 1: ciclohexano

Componente 2: tolueno

Componente 3: clorobenceno

Fracción molar componente 1: 0.321 ⁽¹⁾ 0.360 ⁽²⁾

Fracción molar componente 2: 0.316 ⁽¹⁾ 0.330 ⁽²⁾

Fracción molar componente 3: 0.363 ⁽¹⁾ 0.310 ⁽²⁾

⁽¹⁾ para Re=1

⁽²⁾ para Re=2.34

Carga inicial: 57.21 moles

Modelo termodinámico: NRTL/Virial

Nº de platos: 15

Presión cabeza de columna: 1.013 bar

Presión cola de columna: 1.013 bar

Holdup en los platos: 0.036 moles

Holdup en el condensador: 0.036 moles

Temperatura aproximada de ebullición de la mezcla: 109.5°C

Paso inicial de integración: 0.05 min

Paso máximo de integración: 0.1 min

Error de integración tolerado: 0.001

6.3.1. PERFILES DE CONCENTRACION

Las simulaciones que se comparan con Batchsim son las indicadas en el apartado 6.1.4. y se indican en la tabla 6.3.1.1.

Tabla 6.3.1.1. Simulaciones para comparar los perfiles de concentración del modelo presentado y el modelo de Batchsim.

Nº simulación	Fracción molar inicial de ciclohexano	Fracción molar inicial de tolueno	Fracción molar inicial de clorobenceno	Re	Potencia de calefacción (W)	Tiempo a reflujo total (min)	Tiempo de destilación (TFIN)	Caudal de destilado D (moles/min)
3	0.321	0.316	0.363	1	414	60	290	0.30
4	0.360	0.330	0.310	2.34	414	60	375	0.15

El TFIN de la simulación 4 es un tiempo intermedio.

En cada simulación se comparan los perfiles de concentración en:

- El destilado (simulación a).
- El plato intermedio 5 (simulación b).
- El plato intermedio 10 (simulación c).

• Simulación N° 3

$x_{\text{ciclohexano inicial}} = 0.321$; $x_{\text{tolueno inicial}} = 0.316$; $x_{\text{clorobenceno inicial}} = 0.363$; $Re = 1.0$;

Tiempo a reflujo total = 60 min ; $P = 414$ W ; $TFIN = 290$ min ; $D = 0.30$ moles / min

En la figura 6.3.1.1. se comparan los perfiles de concentración en el destilado, obtenidos con el modelo de Batchsim y con el modelo sencillo de α constante.

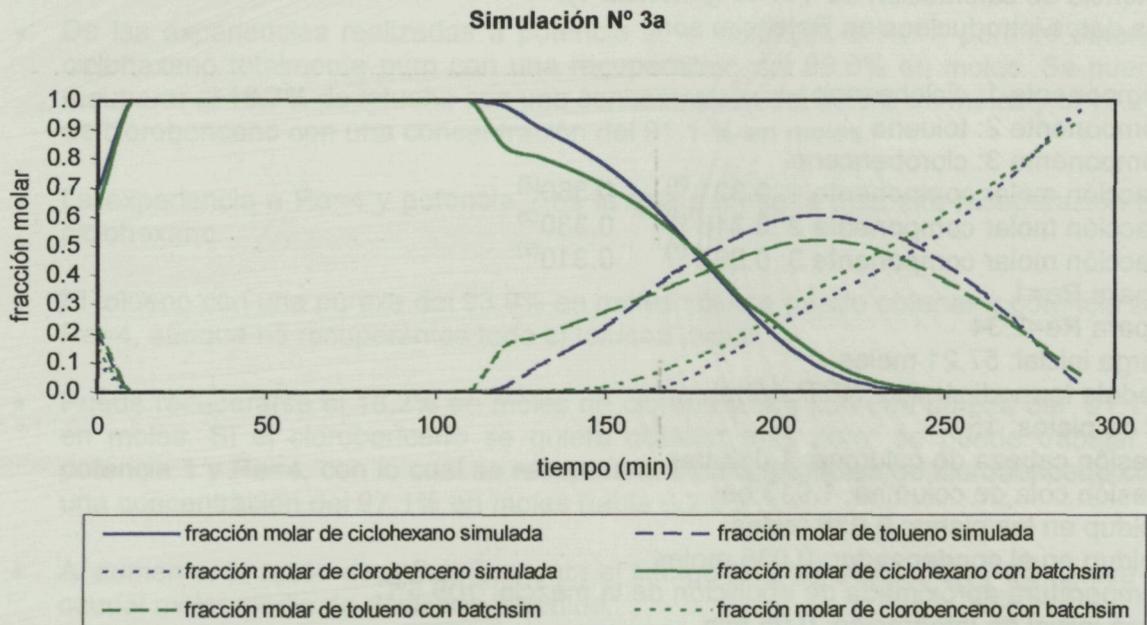


Figura 6.3.1.1. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$.

La correlación matemática da unos buenos resultados al comparar estos perfiles de concentración.

ciclohexano: $x_{1, \text{simulada}} = 1.025 x_{1, \text{batchsim}}$ $r = 0.996$

tolueno: $x_{2, \text{simulada}} = 1.095 x_{2, \text{batchsim}}$ $r = 0.981$

clorobenceno: $x_{3, \text{simulada}} = 0.956 x_{3, \text{batchsim}}$ $r = 0.996$

Cuando se comparan los perfiles en el plato 5 (figura 6.3.1.2.), la correlación sigue siendo buena, aunque para el tolueno desciende ligeramente.

ciclohexano: $x_{1, \text{simulada}} = 1.006 x_{1, \text{batchsim}}$ $r = 0.998$

tolueno: $x_{2, \text{simulada}} = 1.185 x_{2, \text{batchsim}}$ $r = 0.975$

clorobenceno: $x_{3, \text{simulada}} = 0.936 x_{3, \text{batchsim}}$ $r = 0.985$

Simulación N° 3b

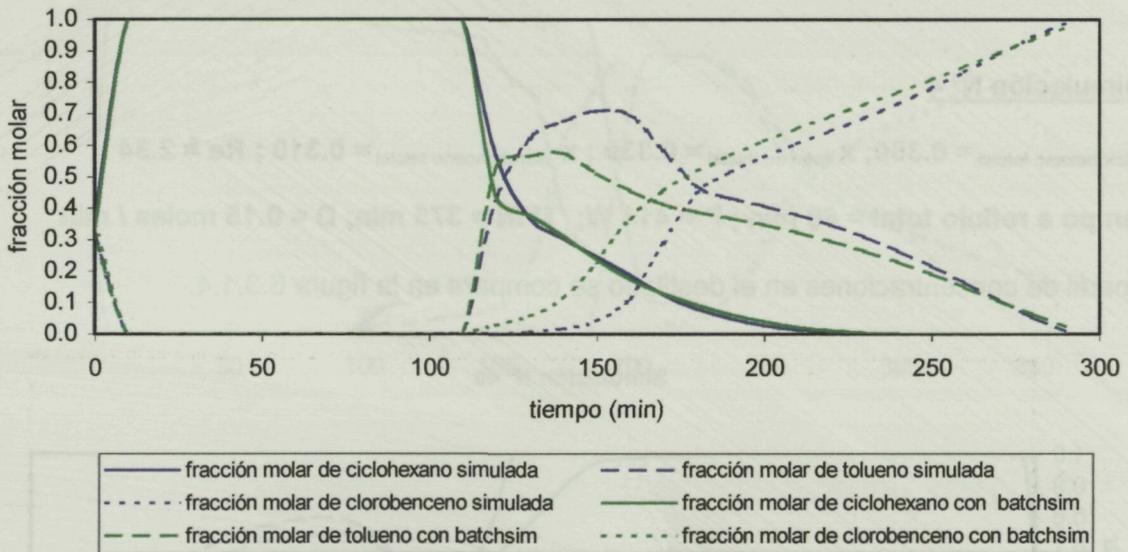


Figura 6.3.1.2. Perfil de concentraciones en el **plato 5**. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$.

La comparación de los perfiles para el plato 10 se indica en la figura 6.3.1.3., donde se puede apreciar una ligera desviación para el tolueno, entre el modelo simulado con α constante y el modelo de Batchsim.

Simulación N° 3c

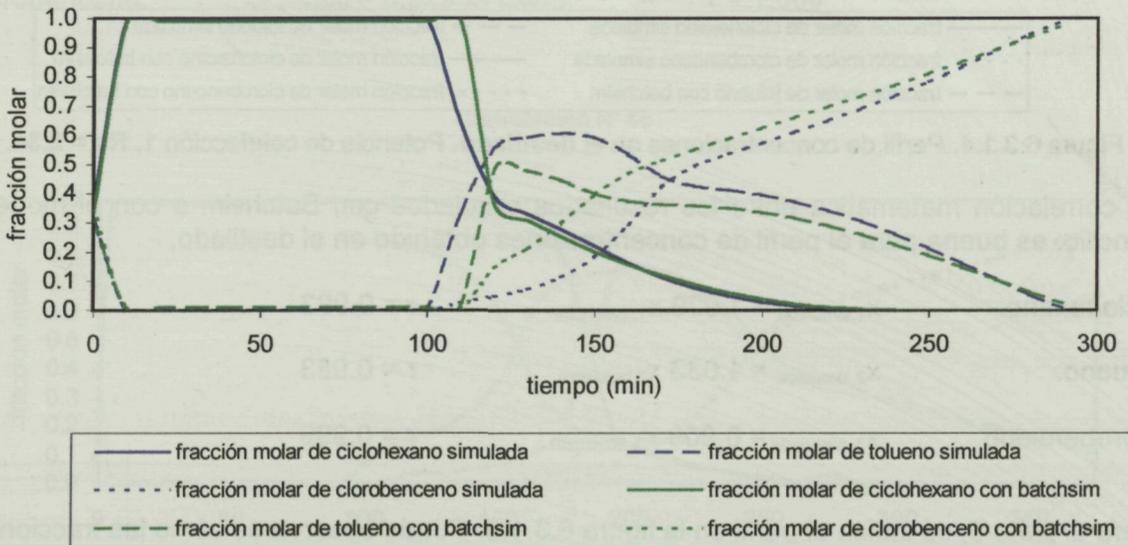


Figura 6.3.1.3. Perfil de concentraciones en el **plato 10**. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$.

ciclohexano:	$x_{1, simulada} = 0.981 x_{1, batchsim}$	$r = 0.989$
tolueno:	$x_{2, simulada} = 1.242 x_{2, batchsim}$	$r = 0.954$
clorobenceno:	$x_{3, simulada} = 0.930 x_{3, batchsim}$	$r = 0.985$

El ciclohexano y el clorobenceno ofrecen una buena correlación.

Así, para una $Re=1$, el modelo matemático sencillo con α constante, ofrece una buena correlación, al ser comparado con el modelo más riguroso de Batchsim.

• Simulación N° 4

$x_{\text{ciclohexano inicial}} = 0.360$; $x_{\text{tolueno inicial}} = 0.330$; $x_{\text{clorobenceno inicial}} = 0.310$; $Re = 2.34$;

Tiempo a reflujo total = 60 min ; $P = 414$ W; $TFIN = 375$ min; $D = 0.15$ moles / min

El perfil de concentraciones en el destilado se compara en la figura 6.3.1.4.

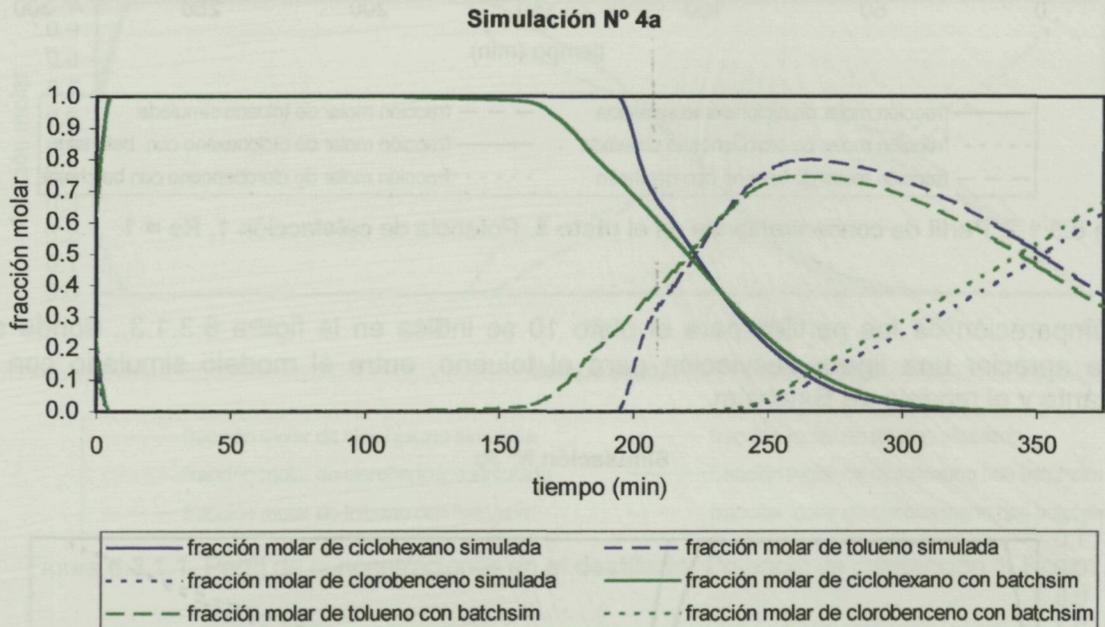


Figura 6.3.1.4. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.34$.

La correlación matemática entre los resultados simulados con Batchsim o con el modelo sencillo, es buena para el perfil de concentraciones obtenido en el destilado.

ciclohexano: $x_{1, \text{simulada}} = 1.029 x_{1, \text{batchsim}}$ $r = 0.993$

tolueno: $x_{2, \text{simulada}} = 1.033 x_{2, \text{batchsim}}$ $r = 0.983$

clorobenceno: $x_{3, \text{simulada}} = 0.909 x_{3, \text{batchsim}}$ $r = 0.999$

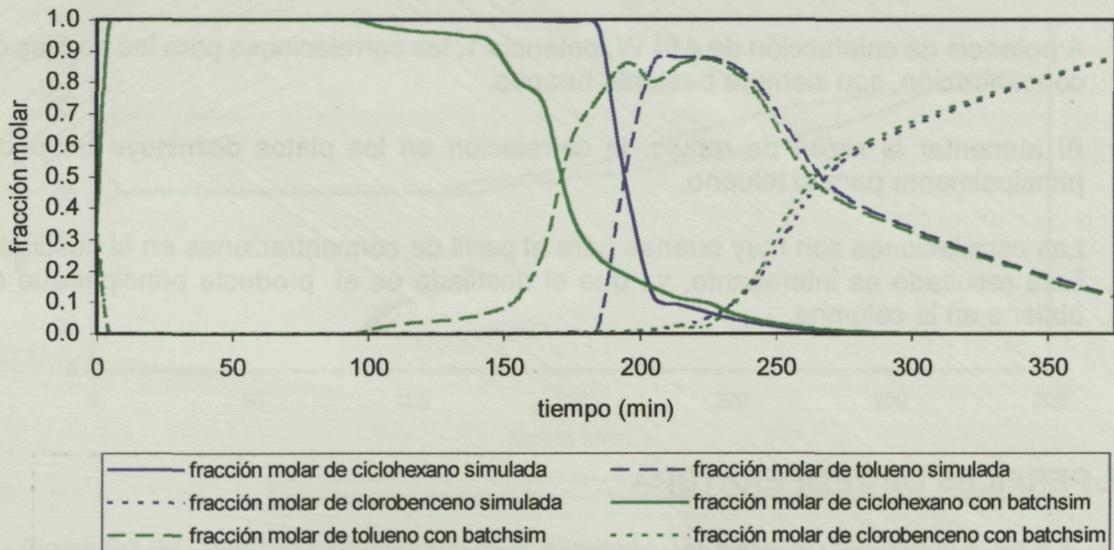
Para el plato 5, se indica el perfil en la figura 6.3.1.5. Puede observarse cómo las fracciones molares de ciclohexano y tolueno simuladas presentan un ligero desfase respecto a las fracciones obtenidas con Batchsim. Para el clorobenceno este desfase es prácticamente nulo. La correlación matemática da buenos resultados para el clorobenceno, pero no tan buenos para el tolueno y el ciclohexano.

ciclohexano: $x_{1, \text{simulada}} = 1.063 x_{1, \text{batchsim}}$ $r = 0.942$

tolueno: $x_{2, \text{simulada}} = 0.834 x_{2, \text{batchsim}}$ $r = 0.850$

clorobenceno: $x_{3, \text{simulada}} = 0.982 x_{3, \text{batchsim}}$ $r = 0.999$

Simulación N° 4b

Figura 6.3.1.5. Perfil de concentraciones en el **plato 5**. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.34$.

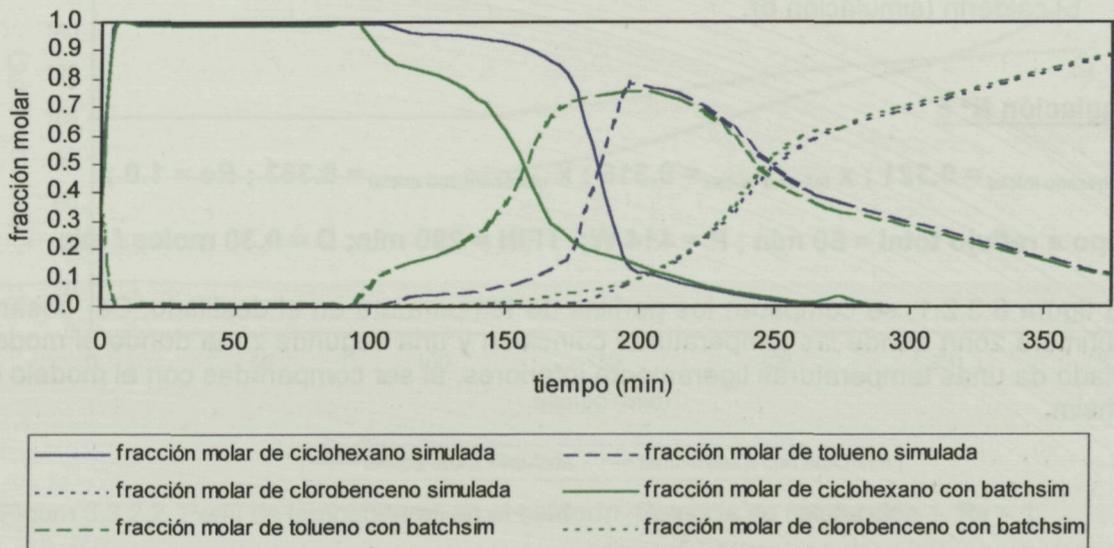
Para el plato 10 (figura 6.3.1.6.), la correlación matemática es:

ciclohexano: $X_{1,simulada} = 1.093 X_{1,batchsim}$ $r = 0.950$

tolueno: $X_{2,simulada} = 0.809 X_{2,batchsim}$ $r = 0.837$

clorobenceno: $X_{3,simulada} = 0.979 X_{3,batchsim}$ $r = 1.000$

Simulación N° 4c

Figura 6.3.1.6. Perfil de concentraciones en el **plato 10**. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.34$.

El tolueno es el que presenta una correlación más baja, al igual que ocurría en el plato 5.

La comparación de los perfiles de concentración obtenidos mediante el modelo sencillo con α constante y el modelo de Batchsim permite afirmar que:

- A potencia de calefacción de 414 W, potencia 1, las correlaciones para los perfiles de concentración, son siempre bastante buenas.
- Al aumentar la razón de reflujo, la correlación en los platos disminuye un poco, principalmente para el tolueno.
- Las correlaciones son muy buenas para el perfil de concentraciones en el destilado. Este resultado es interesante, ya que el destilado es el producto principal que se obtiene en la columna.

6.3.2. PERFILES DE TEMPERATURA

Se han realizado distintas simulaciones con el modelo sencillo de α constante. En este apartado se comparan algunas de estas simulaciones con el simulador Batchsim.

Tabla 6.3.2.1. Simulaciones para comparar los perfiles de temperatura del modelo presentado y el modelo de Batchsim.

Nº simulación	Fración molar inicial de ciclohexano	Fración molar inicial de tolueno	Fración molar inicial de clorobenceno	Re	Potencia de calefacción (W)	Tiempo a reflujo total (min)	Tiempo de destilación (TFIN)	Caudal de destilado D (moles/min)
5	0.321	0.316	0.363	1	414	60	290	0.30
6	0.360	0.330	0.310	2.34	414	60	375	0.15

El TFIN de la simulación 6 es un tiempo intermedio.

En cada simulación se comparan los perfiles de temperatura en:

- El destilado (simulación a).
- El calderín (simulación b).

• Simulación Nº 5

$x_{\text{ciclohexano Inicial}} = 0.321$; $x_{\text{tolueno Inicial}} = 0.316$; $x_{\text{clorobenceno Inicial}} = 0.363$; $Re = 1.0$;

Tiempo a reflujo total = 60 min ; $P = 414$ W; TFIN = 290 min; $D = 0.30$ moles / min

En la figura 6.3.2.1. se comparan los perfiles de temperatura en el destilado. Se observa una primera zona donde las temperaturas coinciden y una segunda zona donde el modelo simulado da unas temperaturas ligeramente inferiores, al ser comparadas con el modelo de Batchsim.

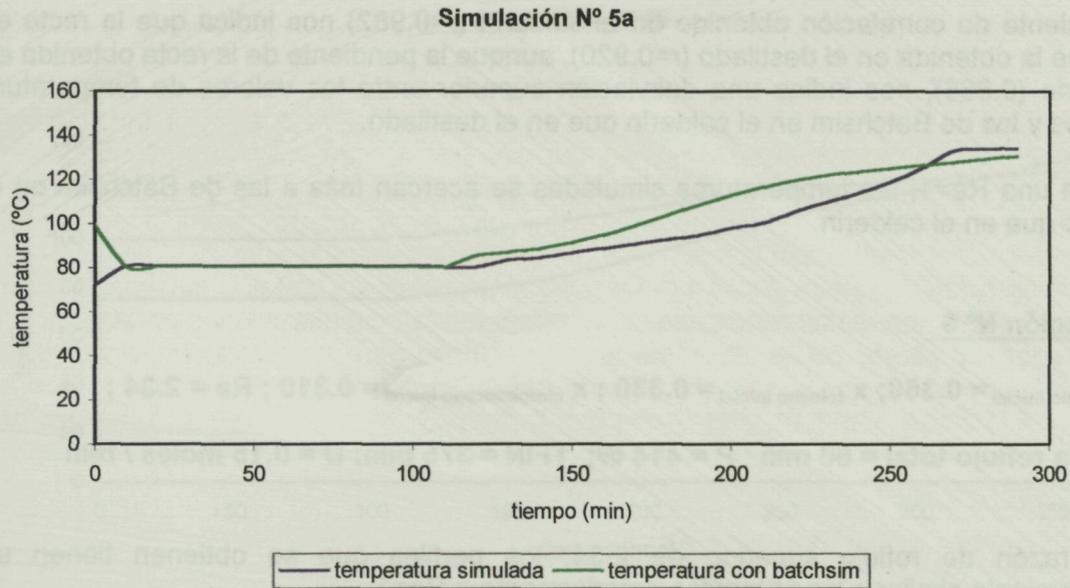


Figura 6.3.2.1. Perfil de temperaturas en el **destilado**. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$.

La correlación entre los resultados es:

$$t_{\text{simulada}} = 0.950 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.920$$

El perfil de temperaturas en el calderín se indica en la figura 6.3.2.2. Aquí se observa que prácticamente durante todo el tiempo el modelo simulado da temperaturas inferiores al modelo de Batchsim.

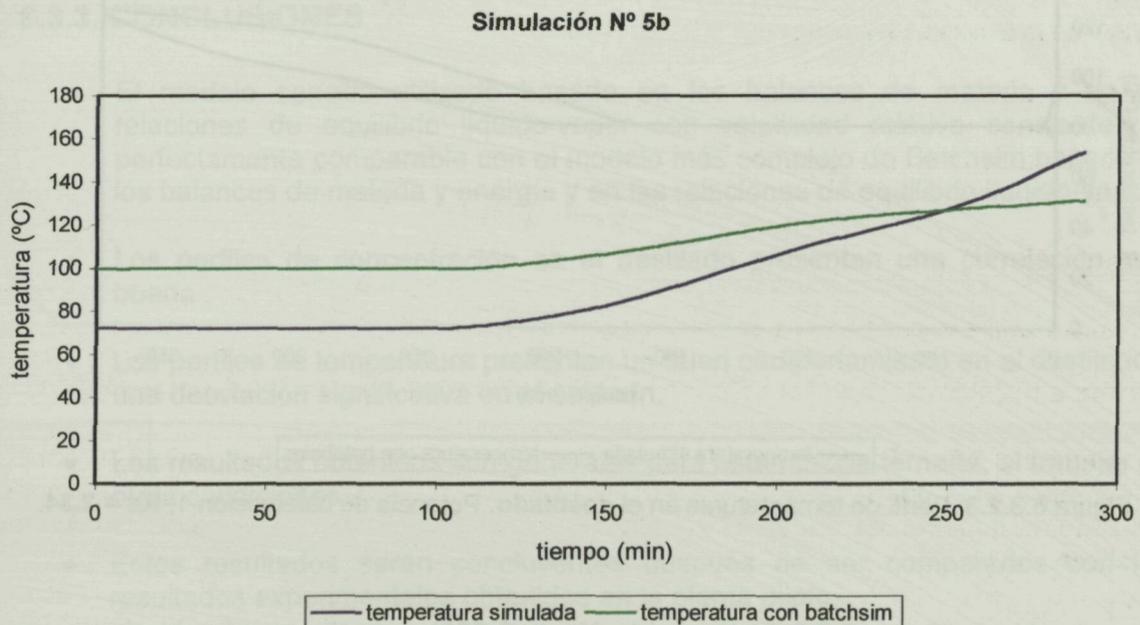


Figura 6.3.2.2. Perfil de temperaturas en el **calderín**. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$.

Ahora la correlación matemática es:

$$t_{\text{simulada}} = 0.866 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.982$$

El coeficiente de correlación obtenido en el calderín ($r=0.982$) nos indica que la recta es mejor que la obtenida en el destilado ($r=0.920$), aunque la pendiente de la recta obtenida en el calderín (0.866), nos indica una desviación superior entre los valores de temperatura simulados y los de Batchsim en el calderín que en el destilado.

Así, para una $Re=1$, las temperaturas simuladas se acercan más a las de Batchsim en el destilado que en el calderín.

• Simulación N° 6

$x_{\text{ciclohexano inicial}} = 0.360$; $x_{\text{tolueno inicial}} = 0.330$; $x_{\text{clorobenceno inicial}} = 0.310$; $Re = 2.34$;

Tiempo a reflujo total = 60 min ; $P = 414$ W; $TFIN = 375$ min; $D = 0.15$ moles / min

A una razón de reflujo superior, de 2.34, los perfiles que se obtienen tienen un comportamiento similar a los obtenidos anteriormente a $Re=1$.

En la figura 6.3.2.3. se indica el perfil de temperaturas en el destilado, que presenta la misma correlación matemática que a $Re=1$:

$$t_{\text{simulada}} = 0.920 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.920$$

Simulación N° 6a

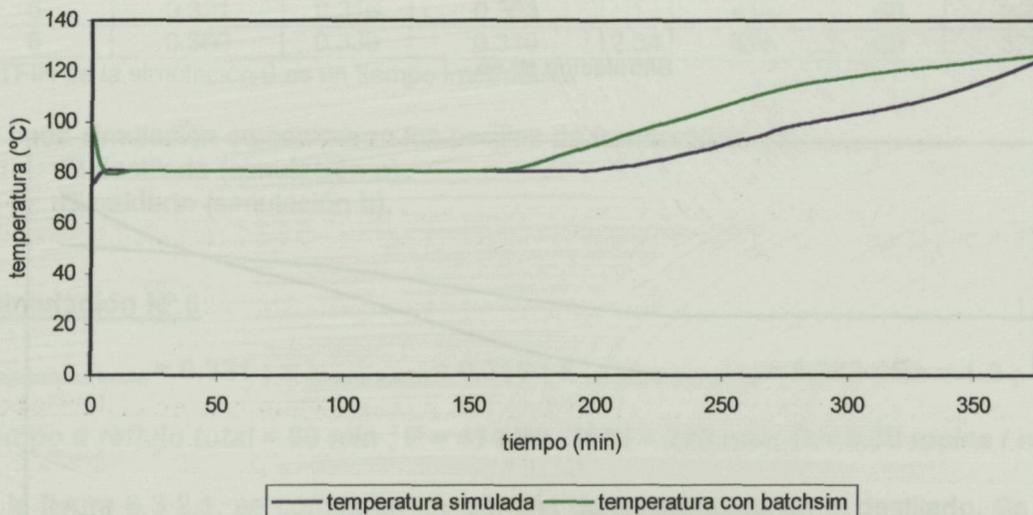


Figura 6.3.2.3. Perfil de temperaturas en el destilado. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.34$.

Para el calderín (figura 6.3.2.4.) la correlación ($r=0.988$) es mejor en el calderín que en el destilado ($r=0.920$), aunque los valores simulados y los de Batchsim presentan más desviación en el calderín que en el destilado, al igual que sucedía a $Re=1$.

$$t_{\text{simulada}} = 0.872 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.988$$

Simulación N° 6b

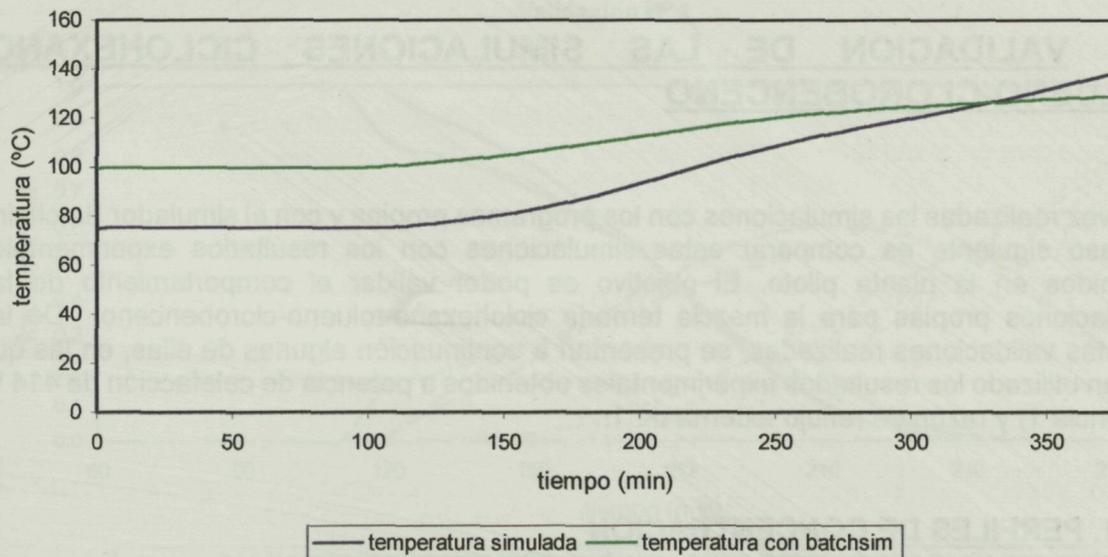


Figura 6.3.2.4. Perfil de temperaturas en el calderín. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.34$.

Así, en los perfiles de temperatura a $Re=1$ y $Re=2.34$, trabajando a una potencia de calefacción de 414 W (potencia 1), las temperaturas simuladas y las obtenidas por Batchsim presentan un mejor comportamiento en el destilado que en el calderín, donde se aprecia una desviación significativa.

6.3.3. CONCLUSIONES

- El modelo sencillo utilizado basado en los balances de materia y en las relaciones de equilibrio líquido-vapor con volatilidad relativa constante, es perfectamente comparable con el modelo más complejo de Batchsim basado en los balances de materia y energía y en las relaciones de equilibrio líquido-vapor.
- Los perfiles de concentración en el destilado presentan una correlación muy buena .
- Los perfiles de temperatura presentan un buen comportamiento en el destilado y una desviación significativa en el calderín.
- Los resultados obtenidos son generales para esta mezcla ternaria, al trabajar en otras condiciones.
- Estos resultados serán concluyentes después de ser comparados con los resultados experimentales obtenidos en la planta piloto.

6.4. VALIDACION DE LAS SIMULACIONES CICLOHEXANO-TOLUENO-CLOROBENCENO

Una vez realizadas las simulaciones con los programas propios y con el simulador Batchsim, el paso siguiente es comparar estas simulaciones con los resultados experimentales obtenidos en la planta piloto. El objetivo es poder validar el comportamiento de las simulaciones propias para la mezcla ternaria ciclohexano-tolueno-clorobenceno. De las distintas validaciones realizadas, se presentan a continuación algunas de ellas, en las que se han utilizado los resultados experimentales obtenidos a potencia de calefacción de 414 W (potencia 1) y razón de reflujo externa de 1.

6.4.1. PERFILES DE CONCENTRACION

• VALIDACION Nº1

En esta primera validación se comparan los perfiles de concentración en el destilado para las siguientes condiciones iniciales:

Fracción molar inicial de ciclohexano (1):	0.321
Fracción molar inicial de tolueno (2):	0.316
Fracción molar inicial de clorobenceno (3):	0.363
Razón de reflujo:	1
Potencia calefacción (potencia 1)	414 W

Las experiencias y simulaciones comparadas en esta primera validación son:

Experiencias

- Experiencia Nº 1, a potencia de calefacción 1, $Re=1$. (apartado 6.2.5.1.3.)

Simulaciones propias

- Simulación Nº 1a, $Re=1$. (apartado 6.1.4.)

Simulaciones con Batchsim

- Simulación Nº 3a, $Re=1$. (apartado 6.3.1.)

La validación del perfil de concentraciones en el destilado se indica en la figura 6.4.1.1.

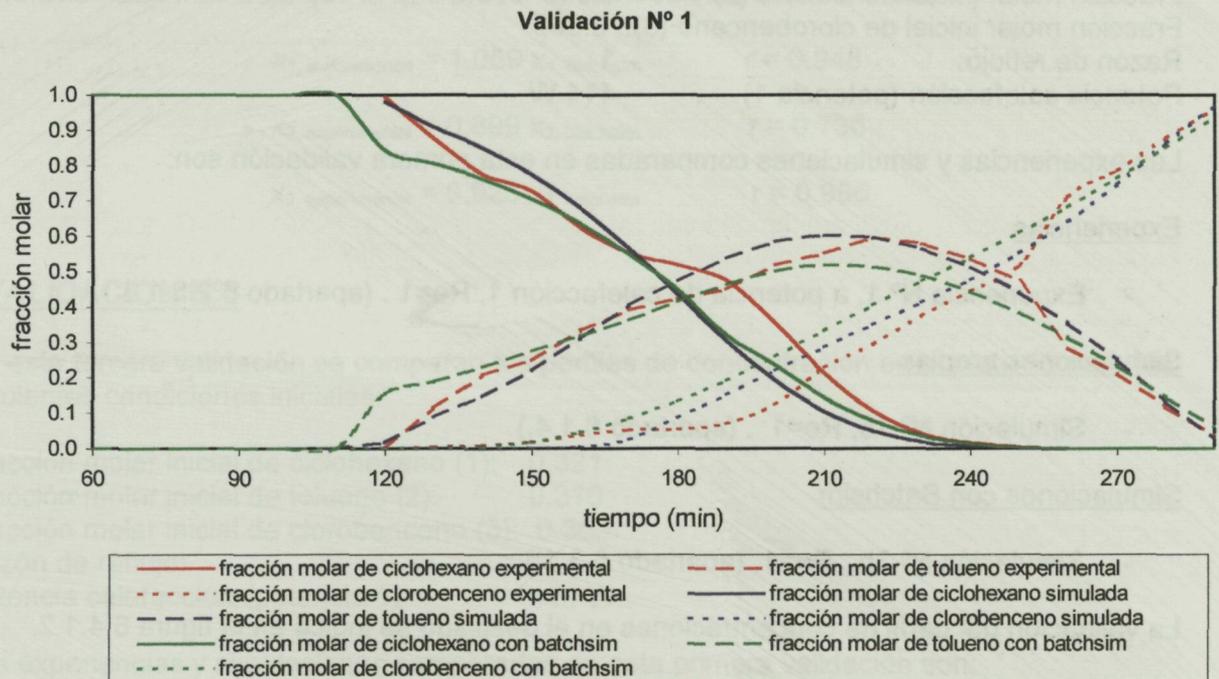


Figura 6.4.1.1. Perfil de concentraciones en el destilado. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$.

La correlación matemática entre los resultados simulados con el modelo sencillo y los resultados experimentales es:

$$x_{1, \text{ simulada}} = 0.994 x_{1, \text{ experimental}} \quad r = 0.991$$

$$x_{2, \text{ simulada}} = 1.035 x_{2, \text{ experimental}} \quad r = 0.989$$

$$x_{3, \text{ simulada}} = 1.002 x_{3, \text{ experimental}} \quad r = 0.993$$

Para los tres componentes la correlación es buena, lo cual confirma que el modelo sencillo es buen modelo para simular los perfiles de concentración en el destilado a $Re=1$.

Si se comparan los resultados experimentales con los resultados obtenidos por simulación con Batchsim se obtiene la siguiente correlación:

$$x_{1, \text{ experimental}} = 1.093 x_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.993$$

$$x_{2, \text{ experimental}} = 1.058 x_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.977$$

$$x_{3, \text{ experimental}} = 0.943 x_{3, \text{ batchsim}} \quad r = 0.985$$

La correlación también es buena, aunque baja ligeramente para el tolueno y el clorobenceno.

• VALIDACION N°2

En esta segunda validación se comparan los perfiles de concentración en el plato 5 para las siguientes condiciones iniciales:

Fracción molar inicial de ciclohexano (1): 0.321
 Fracción molar inicial de tolueno (2): 0.316
 Fracción molar inicial de clorobenceno (3): 0.363
 Razón de reflujo: 1
 Potencia calefacción (potencia 1) 414 W

Las experiencias y simulaciones comparadas en esta primera validación son:

Experiencias

- Experiencia N° 1, a potencia de calefacción 1, $Re=1$. (apartado 6.2.5.1.3.)

Simulaciones propias

- Simulación N° 1b, $Re=1$. (apartado 6.1.4.)

Simulaciones con Batchsim

- Simulación N° 3b, $Re=1$. (apartado 6.3.1.)

La validación del perfil de concentraciones en el destilado se indica en la figura 6.4.1.2.

Validación N° 2

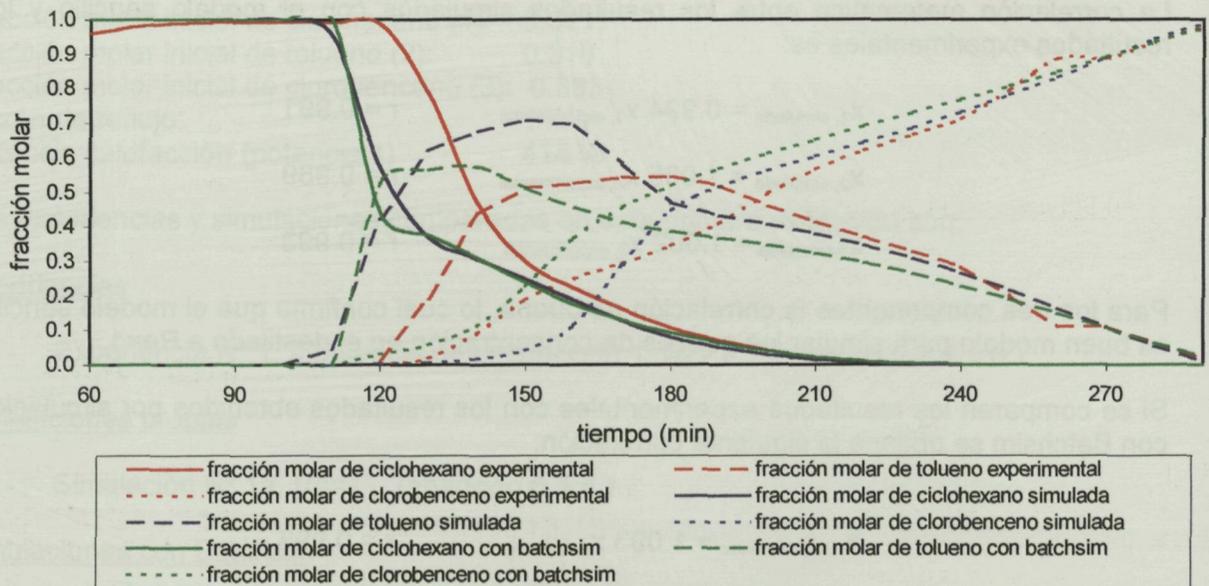


Figura 6.4.1.2. Perfil de concentraciones en el plato 5. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$.

Los resultados simulados con el modelo sencillo y los resultados experimentales presentan buena correlación para el ciclohexano y el clorobenceno en el plato 5. La correlación para el tolueno es más baja que la presentada en el destilado.

$$x_{1, \text{ simulada}} = 0.897 x_{1, \text{ experimental}} \quad r = 0.962$$

$$x_{2, \text{ simulada}} = 1.110 x_{2, \text{ experimental}} \quad r = 0.833$$

$$x_{3, \text{ simulada}} = 1.010 x_{3, \text{ experimental}} \quad r = 0.988$$

Al comparar los resultados experimentales con los de Batchsim, el tolueno presenta una correlación aún más baja que la que presenta el modelo sencillo simulado.

$$X_{1, \text{ experimental}} = 1.059 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.948$$

$$X_{2, \text{ experimental}} = 0.899 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.736$$

$$X_{3, \text{ experimental}} = 0.925 X_{3, \text{ batchsim}} \quad r = 0.986$$

• VALIDACION N°3

En esta tercera validación se comparan los perfiles de concentración en el plato 10 para las siguientes condiciones iniciales:

Fracción molar inicial de ciclohexano (1):	0.321
Fracción molar inicial de tolueno (2):	0.316
Fracción molar inicial de clorobenceno (3):	0.363
Razón de reflujo:	1
Potencia calefacción (potencia 1)	414 W

Las experiencias y simulaciones comparadas en esta primera validación son:

Experiencias

- Experiencia N° 1, a potencia de calefacción 1, $Re=1$. (apartado 6.2.5.1.3.)

Simulaciones propias

- Simulación N° 1c, $Re=1$. (apartado 6.1.4.)

Simulaciones con Batchsim

- Simulación N° 3c, $Re=1$. (apartado 6.3.1.)

La validación del perfil de concentraciones en el destilado se indica en la figura 6.4.1.3.

La correlación entre los resultados simulados y los experimentales para el plato 10, presenta una correlación similar a la del plato 5, siendo el tolueno el que presenta más divergencia.

$$X_{1, \text{ simulada}} = 0.905 X_{1, \text{ experimental}} \quad r = 0.941$$

$$X_{2, \text{ simulada}} = 1.173 X_{2, \text{ experimental}} \quad r = 0.800$$

$$X_{3, \text{ simulada}} = 0.959 X_{3, \text{ experimental}} \quad r = 0.992$$

Validación N° 3

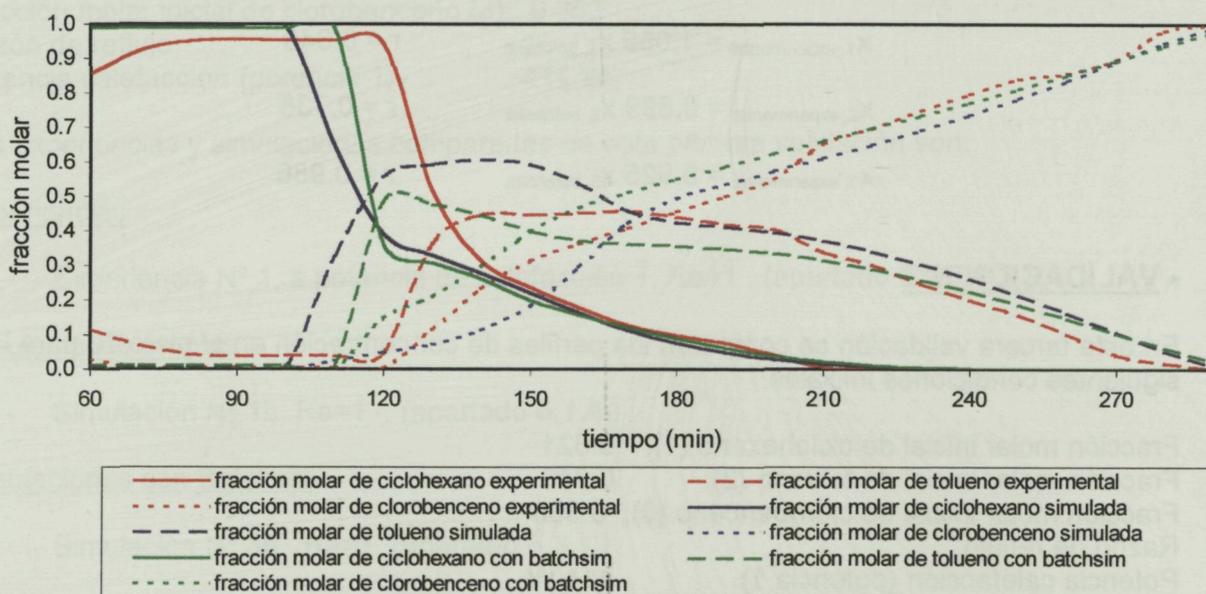


Figura 6.4.1.3. Perfil de concentraciones en el plato 10. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$.

Al comparar los resultados de Batchsim con los experimentales también es el tolueno el que presenta una correlación más baja.

$$X_{1, \text{experimental}} = 0.996 X_{1, \text{batchsim}} \quad r = 0.948$$

$$X_{2, \text{experimental}} = 0.934 X_{2, \text{batchsim}} \quad r = 0.806$$

$$X_{3, \text{experimental}} = 0.971 X_{3, \text{batchsim}} \quad r = 0.988$$

- Los resultados anteriores nos permiten afirmar que el modelo sencillo con α constante permite estudiar correctamente la separación de la mezcla ternaria ciclohexano-tolueno-clorobenceno a razón de reflujo de 1.
- La validación en otras condiciones lleva a resultados parecidos.
- Los perfiles de concentración en el destilado son los que presentan mejor resultado. En los platos, la correlación entre los datos simulados y experimentales es inferior que en el destilado, debido básicamente al efecto dinámico del hold-up de los platos. El hold-up se ha determinado experimentalmente para el tipo de platos que contiene la columna, midiendo el volumen de líquido acumulado en los platos después de una operación de destilación. Sin embargo, para ser correctos y rigurosos, este hold-up debería medirse de forma continua mientras la columna está trabajando. Esta medida no es posible hacerla en el tipo de columna con la cual trabajamos. Posiblemente con una medida correcta de este hold-up, los perfiles de concentración obtenidos en los platos presentarían una correlación mejor.

6.4.2. PERFILES DE TEMPERATURA

• VALIDACION N°4

En esta validación se comparan los perfiles de temperatura en el destilado para las siguientes condiciones iniciales:

Fracción molar inicial de ciclohexano (1):	0.321
Fracción molar inicial de tolueno (2):	0.316
Fracción molar inicial de clorobenceno (3):	0.363
Razón de reflujo:	1
Potencia calefacción (potencia 1)	414 W

Las simulaciones propias y las de Batchsim (apartado 6.3.2.) se comparan con la experiencia N° 1 a $Re=1$ (apartado 6.2.5.1.1.).

La validación del perfil de temperaturas en el destilado se indica en la figura 6.4.2.1.

Validación N° 4

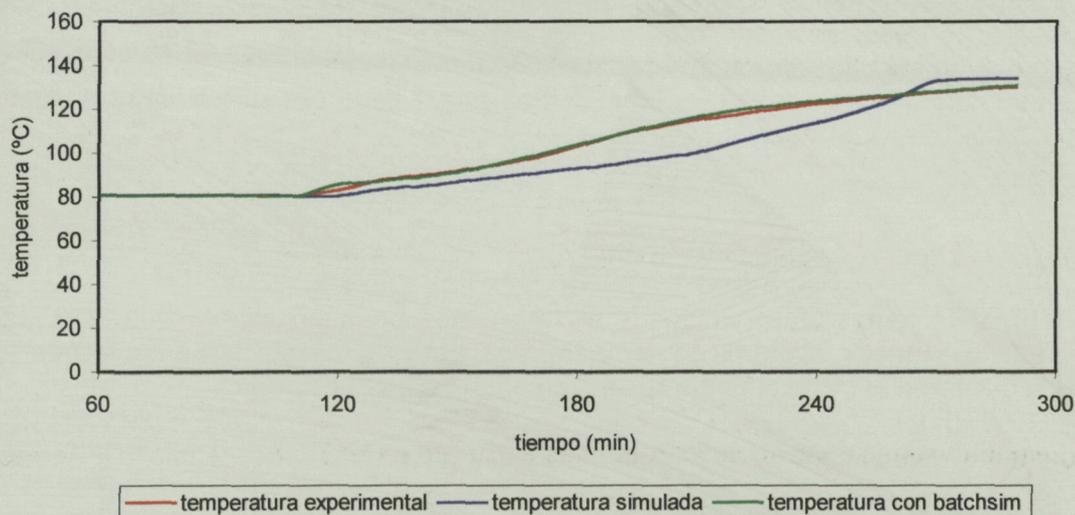


Figura 6.4.2.1. Perfil de temperaturas en el **destilado**. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$.

Para el destilado, los resultados simulados con Batchsim y los experimentales presentan muy buena correlación. Los resultados obtenidos por simulación propia presentan una correlación ligeramente inferior, siendo estos resultados ligeramente inferiores a los experimentales durante gran parte del tiempo de destilación.

$$t_{\text{simulada}} = 0.957 t_{\text{experimental}} \quad r = 0.940$$

$$t_{\text{experimental}} = 0.995 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.999$$

• VALIDACION N°5

En esta validación las condiciones iniciales son las mismas que en la validación N° 4 y se van a comparar los perfiles de temperatura en el calderín de la columna.

Validación N° 5

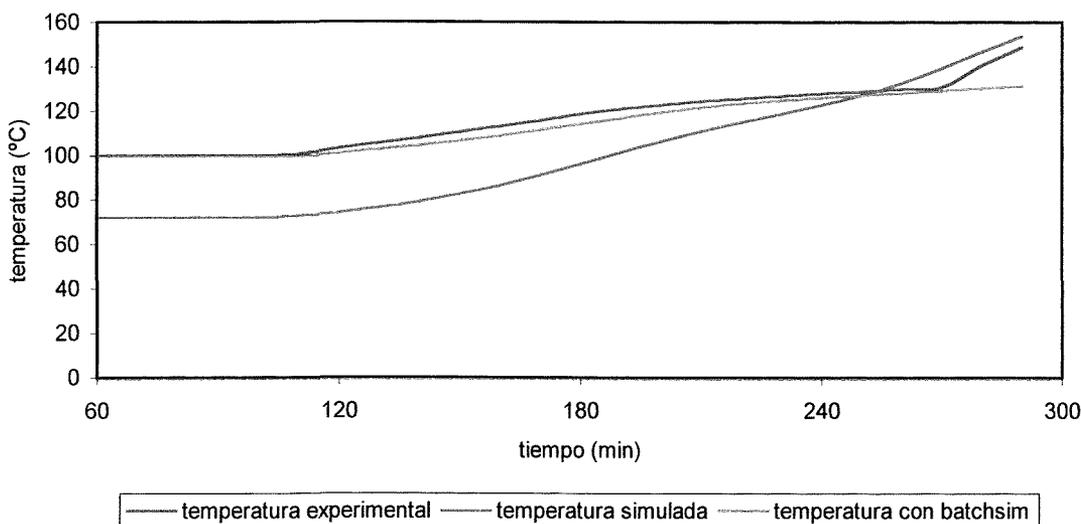


Figura 6.4.2.2. Perfil de temperaturas en el calderín. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$.

La correlación entre los datos obtenidos por simulación con los programas propios y los experimentales ($r=0.980$) es mejor que la obtenida en el destilado ($r=0.940$), aunque la pendiente presenta más desviación en el calderín que en el destilado. Así, las temperaturas simuladas se acercan más a las experimentales en el destilado que en calderín. Batchsim también presenta buena correlación.

$$t_{\text{simulada}} = 0.868 t_{\text{experimental}} \quad r = 0.980$$

$$t_{\text{experimental}} = 1.031 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.974$$

Así, los perfiles de temperatura validados a $Re = 1$, nos permiten afirmar que el modelo utilizado permite predecir el perfil de temperaturas para la mezcla ternaria, siendo los resultados mejores en la parte superior de la columna que en el calderín.

En las siguientes validaciones se validan perfiles similares a $Re=2.34$.

• VALIDACION N°6

En esta validación se comparan los perfiles de temperatura en el destilado para las siguientes condiciones iniciales:

Fracción molar inicial de ciclohexano (1): 0.360
 Fracción molar inicial de tolueno (2): 0.330
 Fracción molar inicial de clorobenceno (3): 0.310
 Razón de reflujo: 2.34
 Potencia calefacción (potencia 1) 414 W

Las simulaciones propias y las de Batchsim (apartado 6.3.2.) se comparan con la experiencia N° 3 a $Re=2.34$ (apartado 6.2.5.3.1.).

La validación del perfil de temperaturas en el destilado se indica en la figura 6.4.2.3.

Validación N° 6

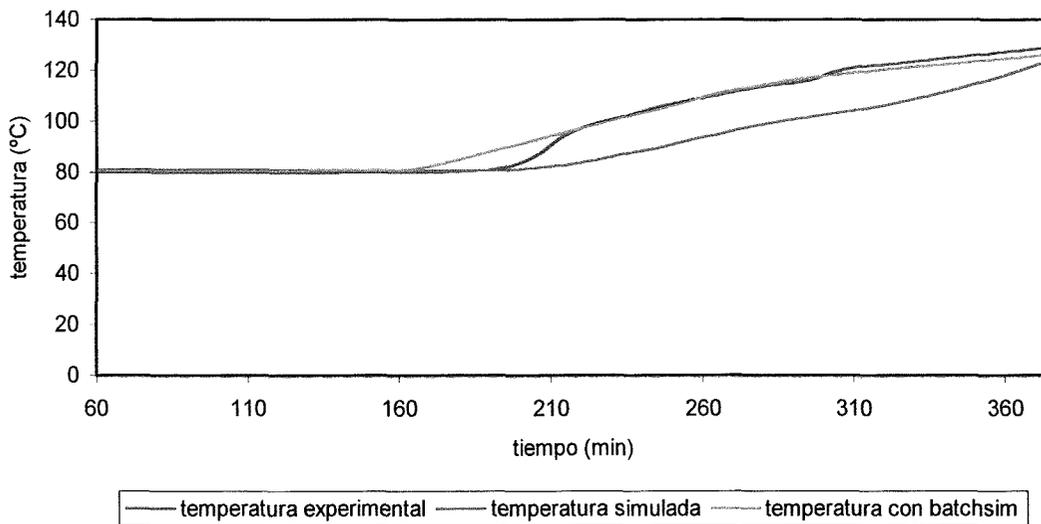


Figura 6.4.2.3. Perfil de temperaturas en el **destilado**. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.34$.

La correlación es buena para Batchsim y ligeramente inferior para el modelo presentado en este trabajo. Este comportamiento es comparable al obtenido a $Re=1$.

$$t_{\text{simulada}} = 0.921 t_{\text{experimental}} \quad r = 0.952$$

$$t_{\text{experimental}} = 0.998 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.995$$

• VALIDACION N°7

En esta validación, las condiciones iniciales son las mismas de la validación N° 6. Aquí se validan los perfiles en el calderín. En la figura 6.4.2.4. se indican los resultados obtenidos.

Validación N° 7

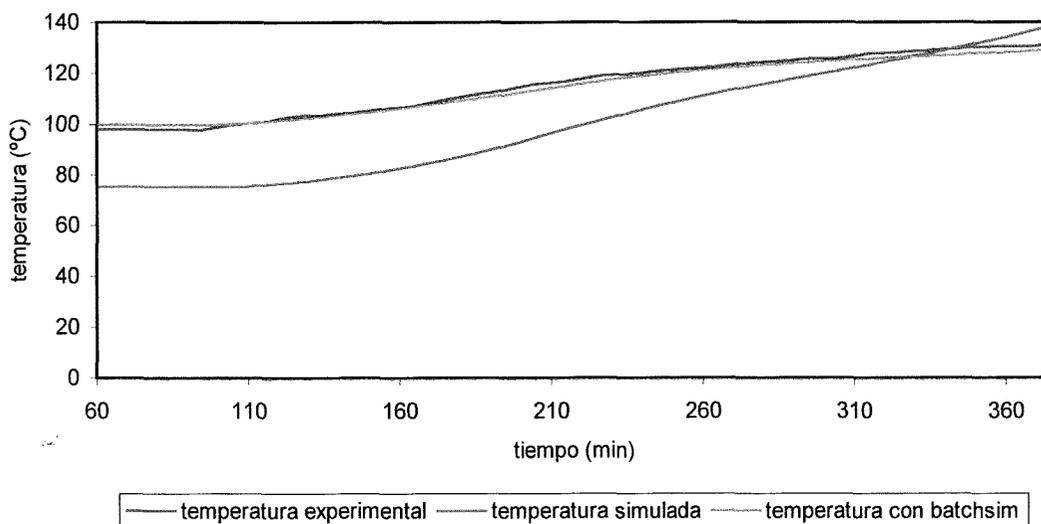


Figura 6.4.2.4. Perfil de temperaturas en el **calderín**. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.34$.

$$t_{\text{simulada}} = 0.880 t_{\text{experimental}} \quad r = 0.979$$

$$t_{\text{experimental}} = 1.010 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.997$$

Los datos simulados con el modelo sencillo presentan buena correlación, al compararlos con los experimentales. Esta correlación ($r=0.979$) es mejor que la obtenida en el destilado ($r=0.952$), aunque las temperaturas simuladas y las experimentales presentan más desviación en el calderín que en el destilado. Así, las temperaturas simuladas se acercan más a las experimentales en el destilado que en el calderín.

Los resultados obtenidos a $Re=2.34$ y los obtenidos a $Re=1$, son perfectamente comparables.

6.4.3. CONCLUSIONES

- El modelo sencillo utilizado en este trabajo basado en los balances de materia y en las relaciones de equilibrio líquido-vapor permite estudiar la separación de la mezcla ternaria ciclohexano-tolueno-clorobenceno.
- Al comparar el modelo sencillo con el más complejo de Batchsim, se ha visto que los resultados se ajustan bastante bien, con lo cual este modelo sencillo es un modelo rápido para estudiar la separación de la mezcla ternaria.
- El modelo permite obtener los perfiles de concentración y de temperatura en los distintos platos de la columna.
- Mezclas multicomponentes, distintas a la estudiada en este apartado, se podrán estudiar de forma similar.
- Los resultados obtenidos permiten proponer este modelo como una herramienta rápida y bastante fiable de lo que puede suceder en el estudio de la separación por destilación batch de mezclas de componentes orgánicos volátiles.
- Es una herramienta que permite colaborar en la reutilización de disolventes y descarga cero en las industrias del sector químico y afines.
- Las características del modelo utilizado lo hacen apropiado para el cálculo de tiempos de operaciones de separación por destilación batch, en programas de secuenciación óptima de operaciones de procesos batch (*scheduling* y *planning*).