

Capítulo 5

Destilación

5.1 Planteamiento

Se dispone de una columna de destilación binaria (Figura 5.1) de la cual se quiere estudiar su comportamiento en cuanto al balance de materia. La columna consta de 41 platos y la alimentación se sitúa en el plato número 21. Se sabe que la columna opera con un caudal de reflujo de 2,706 kmol/s y que el caudal de vapor que se reintroduce por el fondo de la columna es de 3,206 kmol/s.

La alimentación tiene un caudal de 1 kmol/s y entra con unas condiciones correspondientes a líquido saturado. La alimentación tiene una composición

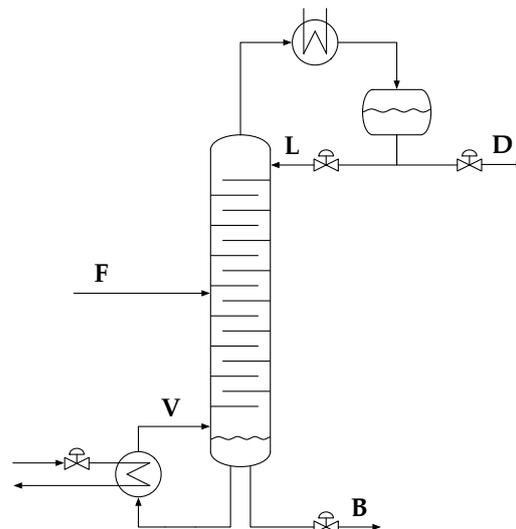


Figura 5.1: Columna de destilación binaria.

del 50% de cada uno de los dos componentes A y B. La volatilidad relativa —empleada para la ecuación que establece un equilibrio L-V ideal entre los componentes— es de $\alpha = 1,5$.

Para el cálculo de equilibrio considérese la ecuación:

$$y_i = \frac{\alpha \cdot x_i}{1 + (\alpha - 1) \cdot x_i} \quad (5.1)$$

La cantidad que se acumula en cada plato se considera constante siendo los valores obtenidos:

- En el condensador: 5 kmol
- En cada uno de los platos de la torre: 0,5 kmol
- En el rehervidor: 5 kmol

Considérese una composición inicial en cada uno de los platos de 0,2.

Objetivos

1. Realizar un modelo del sistema que incluya las ecuaciones del mismo y las suposiciones realizadas.
2. Realizar la simulación y un breve análisis de los resultados de la misma.
3. Recoger las dificultades encontradas (ecuaciones del modelo, método numérico empleado de Matlab o cualquier otra cosa).

5.2 Modelo matemático

Leyenda

F : Caudal de alimentación (kmol/s).

V_r : Caudal de vapor en la sección de rectificación (kmol/s).

V_s : Caudal de vapor en la sección de stripping (kmol/s).

V : Caudal de vapor reintroducido en la columna (kmol/s).

L_r : Caudal de líquido en la sección de rectificación (kmol/s).

L_s : Caudal de líquido en la sección de stripping (kmol/s).

L : Caudal de reflujo (kmol/s).

D : Caudal de destilado (kmol/s).

B : Caudal de fondo (kmol/s).

N_i : Moles del componente A en el plato i -ésimo (kmol).

x_i : Fracción molar de A en el líquido de la etapa i -ésima.

y_i : Fracción molar de A en el vapor de la etapa i -ésima.

z_f : Fracción molar de A en la alimentación.

q_f : Fracción de líquido de la alimentación.

α : Volatilidad relativa.

m_d : Moles acumulados en el condensador (kmol).

m_t : Moles acumulados en cada uno de los platos (kmol).

m_b : Moles acumulados en el rehervidor (kmol).

n_f : Etapa de alimentación.

T : Número total de etapas.

Hipótesis asumidas

1. El caudal de líquido y de vapor en la sección de rectificación es constante en todos los platos, siendo el caudal de vapor el procedente del plato de alimentación y el caudal de líquido el procedente del condensador introducido como reflujo.
2. El caudal de líquido y de vapor en la sección de stripping es constante en todos los platos, siendo el caudal de vapor el reintroducido en la columna desde el rehervidor y el de líquido el procedente del plato de alimentación.
3. Se considerará un equilibrio líquido–vapor ideal, siendo la relación entre las composiciones de ambas fases la dada por la ecuación (5.1).
4. Se considerará que el número de moles acumulado tanto en el rehervidor como en el condensador y en cada uno de los platos de la columna es constante y, por tanto, no varía a lo largo del tiempo.

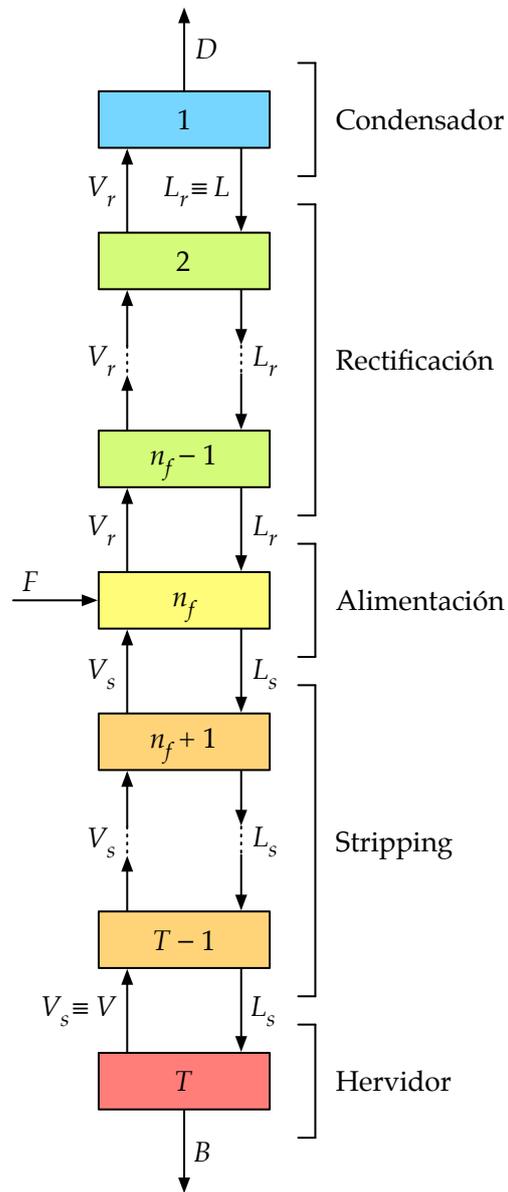


Figura 5.2: Esquema de la columna.

Balances de materia

Para la realización de los balances de materia a la columna y a cada uno de los platos, se utilizará el esquema mostrado en la Figura 5.2. En dicho esquema se muestran cinco zonas bien diferenciadas en la columna: (i) condensador, (ii) rectificación, (iii) alimentación, (iv) stripping y (v) hervidor.

Puesto que la configuración de las etapas en cada una de las zonas de la columna es diferente, los balances en cada una de ellas también tendrán diferente forma.

(i) Condensador.

Si se realiza un balance de materia global al condensador, se tiene que

$$\frac{dm_d}{dt} = V_r - D - L_r \quad (5.2)$$

No obstante, puesto que los moles acumulados en el condensador no varían, su derivada es nula, por lo que

$$\frac{dm_d}{dt} = 0 \implies V_r - D - L_r = 0 \quad (5.3)$$

Además, el líquido que sale del condensador es el reflujo de la columna, por lo que

$$L_r = L \quad (5.4)$$

Si, en cambio, se realiza un balance de materia al componente A

$$\frac{dN_1}{dt} = V_r \cdot y_2 - L_r \cdot x_1 - D \cdot x_1 \quad (5.5)$$

Sin embargo, puesto que los moles acumulados son constantes

$$N_1 = m_d \cdot x_1 \implies \frac{dN_1}{dt} = \frac{d}{dt}(m_d \cdot x_1) = m_d \cdot \frac{dx_1}{dt} \quad (5.6)$$

se llega a

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{1}{m_d}(V_r \cdot y_2 - L_r \cdot x_1 - D \cdot x_1) \quad (5.7)$$

(ii) Rectificación.

El balance de materia global a cada uno de los platos de la zona de rectificación quedaría de la forma

$$\frac{dm_t}{dt} = V_r + L_r - V_r - L_r = 0 \quad (5.8)$$

como, en efecto, ya se sabía puesto que la masa acumulada en cada uno de los platos m_t es constante a lo largo del tiempo.

En cambio, si se realiza un balance de materia al componente A en cada uno de los platos

$$\frac{dN_i}{dt} = V_r \cdot y_{i+1} + L_r \cdot x_{i-1} - V_r \cdot y_i - L_r \cdot x_i \quad (5.9)$$

en donde, puesto que los moles acumulados son constantes

$$N_i = m_t \cdot x_i \quad \Rightarrow \quad \frac{dN_i}{dt} = \frac{d}{dt}(m_t \cdot x_i) = m_t \cdot \frac{dx_i}{dt} \quad (5.10)$$

se llega a

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{m_t} (V_r \cdot y_{i+1} + L_r \cdot x_{i-1} - V_r \cdot y_i - L_r \cdot x_i) \quad (5.11)$$

en donde $i = 2, 3, \dots, n_f - 1$

(iii) Alimentación.

Si se realiza un balance global de líquido en el plato de alimentación, puesto que no hay acumulación, el líquido que sale de dicho plato será la suma del procedente del plato anterior y del introducido a través de la alimentación

$$L_s = L_r + F \cdot q_f \quad (5.12)$$

Del mismo modo, el vapor saliente del plato de alimentación es el correspondiente a la suma del vapor procedente del plato inferior más la contribución de la alimentación, por lo que

$$V_r = V_s + F \cdot (1 - q_f) \quad (5.13)$$

Realizando un balance de materia del componente A en el plato de alimentación —teniendo en cuenta que la alimentación se introduce como líquido saturado— se tiene que

$$\frac{dN_{n_f}}{dt} = F \cdot z_f + V_s \cdot y_{n_f+1} + L_r \cdot x_{n_f-1} - V_s \cdot y_{n_f} - L_s \cdot x_{n_f} \quad (5.14)$$

pero, dado que los moles acumulados son constantes

$$N_{n_f} = m_t \cdot x_{n_f} \quad \Rightarrow \quad \frac{dN_{n_f}}{dt} = \frac{d}{dt}(m_t \cdot x_{n_f}) = m_t \cdot \frac{dx_{n_f}}{dt} \quad (5.15)$$

se tiene que

$$\frac{dx_{n_f}}{dt} = \frac{1}{m_t} (F \cdot z_f + V_s \cdot y_{n_f+1} + L_r \cdot x_{n_f-1} - V_s \cdot y_{n_f} - L_s \cdot x_{n_f}) \quad (5.16)$$

(iv) Stripping.

El balance de materia global a cada uno de los platos de la zona de stripping quedaría de la forma

$$\frac{dm_t}{dt} = V_s + L_s - V_s - L_s = 0 \quad (5.17)$$

como, en efecto, ya se sabía puesto que la masa acumulada en cada uno de los platos m_t es constante a lo largo del tiempo.

En cambio, realizando un balance de materia del componente A en cada uno de los platos de la zona de rectificación se tiene que

$$\frac{dN_i}{dt} = V_s \cdot y_{i+1} + L_s \cdot x_{i-1} - V_s \cdot y_i - L_s \cdot x_i \quad (5.18)$$

además, puesto que los moles acumulados no cambian a lo largo del tiempo

$$N_i = m_t \cdot x_i \quad \implies \quad \frac{dN_i}{dt} = \frac{d}{dt}(m_t \cdot x_i) = m_t \cdot \frac{dx_i}{dt} \quad (5.19)$$

se llega finalmente a

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{m_t}(V_s \cdot y_{i+1} + L_s \cdot x_{i-1} - V_s \cdot y_i - L_s \cdot x_i) \quad (5.20)$$

en donde $i = n_f + 1, n_f + 2, \dots, T - 1$

(v) Hervidor.

Si se realiza un balance de materia global, se tiene que

$$\frac{dm_b}{dt} = L_s - B - V_s \quad (5.21)$$

No obstante, puesto que los moles acumulados en el rehervidor no varían en el tiempo, se tiene que

$$\frac{dm_b}{dt} = 0 \quad \implies \quad L_s - B - V_s = 0 \quad (5.22)$$

Además, el vapor que sale del rehervidor es el vapor reintroducido a la columna, por lo que

$$V_s = V \quad (5.23)$$

Por otro lado, si se realiza un balance de materia al componente A

$$\frac{dN_T}{dt} = L_s \cdot x_{T-1} - V_s \cdot y_T - B \cdot x_T \quad (5.24)$$

Sin embargo, puesto que los moles acumulados son constantes

$$N_T = m_b \cdot x_T \quad \implies \quad \frac{dN_T}{dt} = \frac{d}{dt}(m_b \cdot x_T) = m_b \cdot \frac{dx_T}{dt} \quad (5.25)$$

se llega a

$$\frac{dx_T}{dt} = \frac{1}{m_b}(L_s \cdot x_{T-1} - V_s \cdot y_T - B \cdot x_T) \quad (5.26)$$

Ecuaciones auxiliares

En cada etapa se considerará que existe equilibrio líquido–vapor ideal, por lo que se utilizará la ecuación que relaciona las composiciones de ambas fases a través de la volatilidad relativa α , esto es

$$y_i = \frac{\alpha \cdot x_i}{1 + (\alpha - 1) \cdot x_i} \quad (5.27)$$

en donde $i = 1, 2, \dots, T$

5.3 Simulación

De acuerdo con el modelo desarrollado en el apartado anterior y con los datos del enunciado se puede simular el comportamiento de la columna de destilación en lo relativo a los balances de materia. Se realiza la integración del modelo desde el instante inicial hasta que han transcurrido 800 segundos.

Para ilustrar el comportamiento del sistema se representan tanto la evolución de las concentraciones en el líquido acumulado en algunos platos (Figura 5.3). A modo de ejemplo se ha tomado el condensador, un plato de la sección de rectificación, el plato de alimentación, un plato de la sección de stripping y el rehervidor de fondo.

Adicionalmente, se ha representado también el perfil de composiciones en la columna en el instante final de la simulación (Figura 5.4). Dicho perfil se corresponde con las composiciones del líquido en cada una de las etapas de la columna; se obtendría un perfil similar si lo que se representa es la composición del vapor en equilibrio con el líquido en cada etapa.

Se observa cómo las composiciones evolucionan desde su valor inicial — igual para todas las etapas ($x_i(0) = 0,2$)— hasta su valor en régimen permanente, obteniéndose un perfil de composiciones de A en el que se observa cómo la concentración en el fondo es muy cercana a la unidad, mientras que en la cabeza es prácticamente nula.

Este comportamiento es el esperado y el deseable en una columna de destilación, ya que se pretende separar y, por tanto, se desea que en cabeza sólo haya uno de los componentes y por fondo el otro como, en efecto, ocurre.

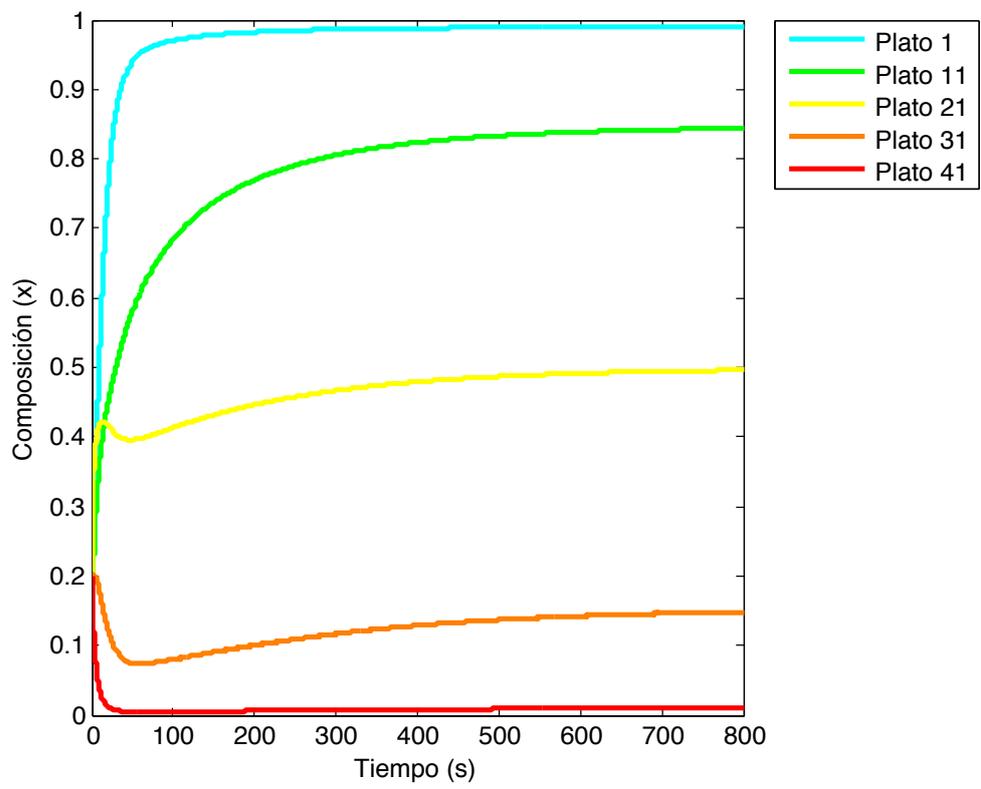


Figura 5.3: Evolución de la composición.

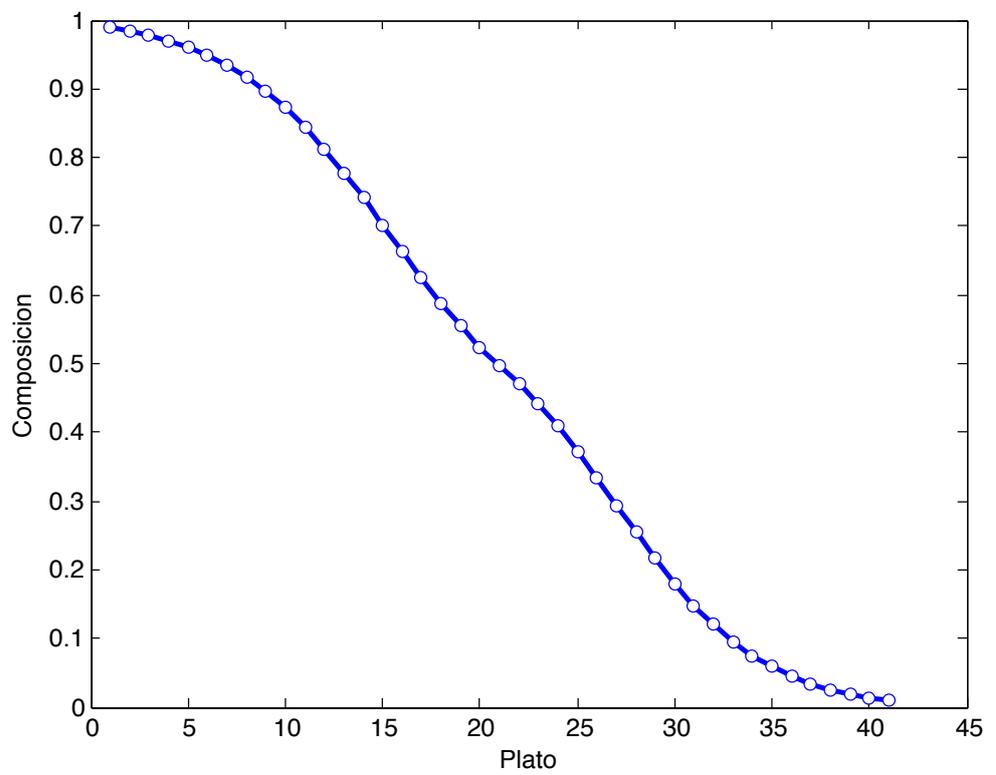


Figura 5.4: Perfil de composiciones.

5.4 m-file

```

function destilacion

close all;
clear all;

T = 41; % Numero total de etapas
nf = 21; % Etapa de alimentacion

for i = 1:T
    x0(i,1) = 0.2; % Fraccion molar inicial
end

x_initial(1:T)=0.2;
t_start = 0; % Tiempo inicial en s
t_final = 800; % Tiempo final en s
tspan = [t_start t_final];
[t,x] = ode45(@columna,tspan,x_initial);

figure
plot(t,x(:,1),'c','LineWidth',2)
hold on
plot(t,x(:,round(nf/2)),'g','LineWidth',2)
plot(t,x(:,nf),'y','LineWidth',2)
plot(t,x(:,round(nf+(T-nf)/2)),'Color',[1 .5 0],'LineWidth',2)
plot(t,x(:,T),'r','LineWidth',2)
hold off
xlabel('Tiempo (s)'),
ylabel('Composición (x)')
legend(['Plato 1'],...
        ['Plato ',num2str(round(nf/2))],...
        ['Plato ',num2str(nf)],...
        ['Plato ',num2str(round(nf+(T-nf)/2))],...
        ['Plato ',num2str(T)],-1)

figure
plot(x(length(x),1:41),'b','LineWidth',2)
hold on
plot(x(length(x),1:41),'bo',...
      'MarkerEdgeColor','b',...
      'MarkerFaceColor','w')
hold off
xlabel('Plato')
ylabel('Composicion')

function c = columna(t,x)

% PARAMETROS Y DATOS

nf = 21; % Etapa de alimentacion
T = 41; % Numero total de etapas

```

Simulación dinámica

```
L = 2.706; % Caudal de reflujo en kmol/s
V = 3.206; % Caudal de vapor por el fondo en kmol/s
F = 1; % Caudal de alimentacion en kmol/s
qf = 1; % Fraccion de liquido de la alimentacion
zf = 0.5; % Fraccion molar de la alimentacion
md = 5; % Acumulacion en el condensador en kmol
mb = 5; % Acumulacion en el rehervidor en kmol
mt = 0.5; % Acumulacion en los platos en kmol
alpha = 1.5; % Volatilidad relativa

% CALCULOS PREVIOS

for i = 1:T
    y(i) = alpha*x(i)/(1+(alpha-1)*x(i));
end

Lr = L; % Caudal liquido rectificacion (kmol/s)
Vs = V; % Caudal vapor stripping (kmol/s)
Vr = Vs + F*(1-qf); % Caudal vapor rectificacion (kmol/s)
Ls = Lr + F*qf; % Caudal liquido stripping (kmol/s)
D = Vr - Lr; % Caudal destilado (kmol/s)
B = Ls - Vs; % Caudal fondo (kmol/s)

% DERIVADAS DEL MODELO

c(1,1) = (Vr*y(2) - Lr*x(1) - D*x(1))/md;

for i = 2:nf-1
    c(i,1) = (Vr*y(i+1) + Lr*x(i-1) - Vr*y(i) - Lr*x(i))/mt;
end

c(nf,1) = (F*zf + Vs*y(nf+1) + Lr*x(nf-1) - Vs*y(nf) - Ls*x(nf))/mt;

for i = nf+1:T-1
    c(i,1) = (Vs*y(i+1) + Ls*x(i-1) - Vs*y(i) - Ls*x(i))/mt;
end

c(T,1) = (Ls*x(T-1) - Vs*y(T) - B*x(T))/mb;
```