

Taller 4 – Operaciones de separación

Nicolas Ariza, Rafael Montagut, Cristian Pineda, Deyver Rivera

Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Calle 44 # 45-67. Bogotá D.C., Colombia.

Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental,

Operaciones de separación.

Enunciado

Se dispone de una corriente 2000 lbmol/h, 20 psig, 30°C, compuesta de propano, metilciclohexano y heptano, 20, 35 y 45% mol, la cual se debe someter a operaciones de separación para obtener corrientes concentradas de cada componente.

Elabore una propuesta argumentada de la secuencia de operaciones. Defina los equipos básicos para las operaciones. Haga una discusión de los criterios técnicos pertinentes de las variables y defina las condiciones de cada operación. Para la condición más favorable, calcule los requerimientos del agente de separación requerido para cada operación.

Planteamiento y desarrollo del problema

Para la solución del taller se ha desarrollado un algoritmo de Matlab que funciona bajo la metodología y con las consideraciones que se consignan en esta sección.

Operaciones posibles y proceso de separación propuesto

Analizando las propiedades que presentan las sustancias involucradas en la mezcla a separar, se puede ver que el metilciclohexano y el heptano tienen puntos de ebullición y calores de evaporación similares, mientras que el propano, en comparación, tenía uno considerablemente menor; por esta razón, se propuso realizar inicialmente una operación de destilación para separar el propano de la mezcla, siendo este la fase liviana. Sin embargo, como la presión con la que venía esta mezcla era de un poco más de 2 atmosferas, se decidió ajustar la presión en vez de la temperatura, con lo cual se empleó una válvula de estrangulación para disminuir la presión por debajo de la presión de vapor del propano, permitiendo la separación.

Para la separación del metilciclohexano y el heptano, se optó por hacer una revisión literaria para tener una ayuda de que posibles métodos de separación pueden usarse, en lo cual se encontró que el procedimiento más acertado para la separación sería una extracción L-L^[1]; para esta operación se encontró como solvente predilecto la Anilina, permitiéndonos establecer como soluto el metilciclohexano, consiguiendo como refinado el heptano.

Por último, para la separación del metilciclohexano y el solvente (anilina), nos aprovechamos de la diferencia de puntos de ebullición para emplear otra operación de destilación. Teniendo en cuenta que el solvente tiene un punto de ebullición mayor al soluto, el metilciclohexano será la fase liviana, mientras que la anilina es la fase pesada, la cual sería recirculada al proceso de extracción. Cabe resaltar que en este caso se elaboró una destilación de varias etapas, con el objetivo de obtener las concentraciones deseadas y necesarias para la recirculación del solvente y la adquisición del extracto concentrado de metilciclohexano.

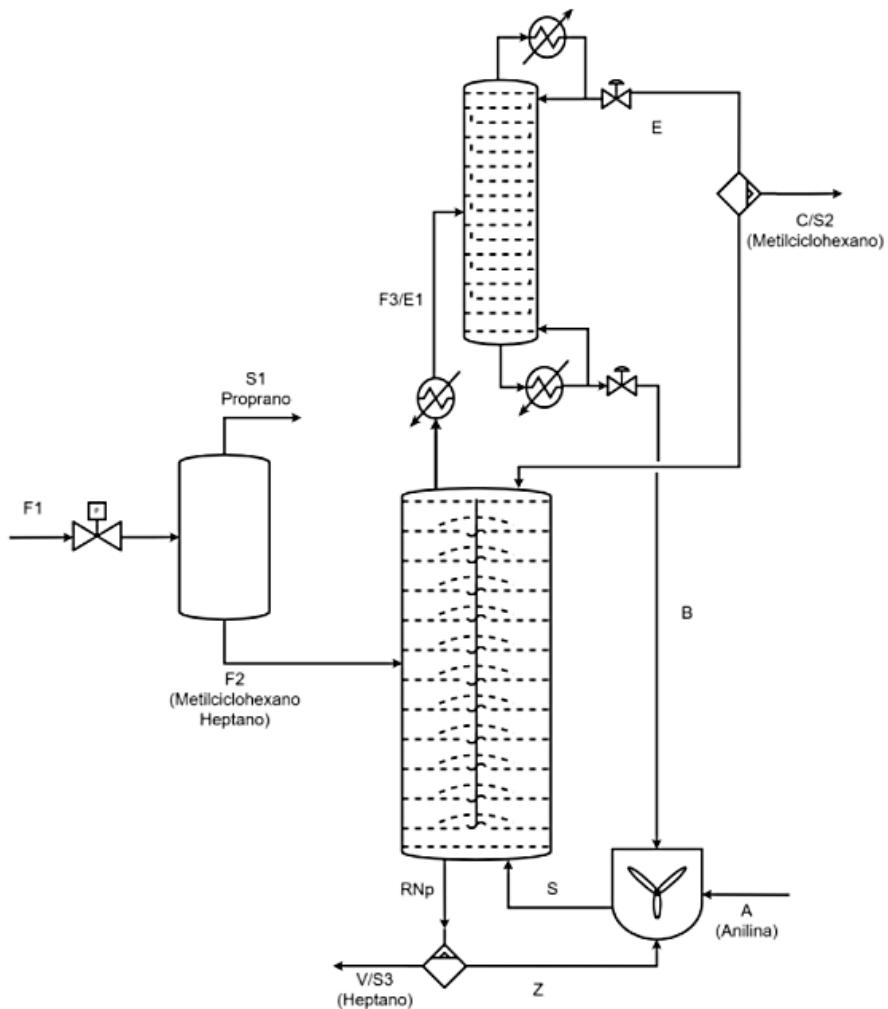


Figura 1. Propuesta proceso de separación Metilciclohexano-Heptano-Propano

Propiedades de los componentes del sistema

Equilibrio L-V para destilación

Debido a la complejidad del sistema y la dificultad para encontrar propiedades de los compuestos presentes en la mezcla, como por ejemplo los coeficientes de distribución de McWilliams (principalmente en el caso del metilciclohexano), se manejó un sistema ideal de la siguiente forma. En el caso de la primera destilación aprovechando la diferencia significativa del punto de ebullición del propano con respecto al heptano y metilciclohexano se optó por la implementación de una destilación simple multicomponente, determinando el equilibrio líquido-vapor con la ley de Raoult:

$$y_i = K_i * x_i \quad K_i = \frac{P_i^{vap}}{P_{total}}$$

Donde las presiones de vapor serán determinadas mediante la ecuación de Antoine que sigue el siguiente modelo:

$$\log_{10}(P^{vap}) = A - \frac{B}{T + C}$$

$$P^{vap} = 10^{\left(A - \frac{B}{T+C}\right)}$$

Para lo cual T se trabaja en °C y la presión de vapor en mmHg. Las constantes de Antoine fueron:

| Compuesto | A | B | C |
|------------------|---------|----------|---------|
| Propano | 6,80398 | 803,81 | 246,99 |
| Heptano | 6,89385 | 1264,37 | 216,636 |
| Metilciclohexano | 6,823 | 1270,763 | 221,416 |

Tabla 1. Constante de Antoine de compuestos en la primera destilación.

Por otro lado, en el caso de la segunda destilación se optó por el uso de una destilación multietapas en la cual se determinó el equilibrio líquido-vapor mediante igualación de fugacidades:

$$f_{vapor} = f_{líquido}$$

Donde la fugacidad de la fase de vapor se aproximará en función de presiones parciales y la fugacidad de la fase líquida a partir de la composición con sus respectivas presiones de vapor, quedando de la siguiente forma:

$$y_i \cdot P = x_i \cdot P_{vap,i}(T)$$

Para lo cual se usa nuevamente la ecuación de Antoine para determinar las presiones de vapor. En este caso las constantes de Antoine fueron:

| Compuesto | A | B | C |
|------------------|--------|----------|---------|
| Anilina | 7,2418 | 1675,3 | 200,01 |
| Metilciclohexano | 6,823 | 1270,763 | 221,416 |

Tabla 2. Constante de Antoine de compuestos en la segunda destilación.

Además, en el cálculo de entalpias se trabajó con calores específicos y deltas de vaporización constantes; teniendo los siguientes valores:

| Compuesto | C_{pliq} (kJ/kmol K) | C_{pvap} (kJ/kmol K) | ΔH_{vap} (kJ/kmol K) |
|------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------------|
| Anilina | 200 | 149,06 | 46720 |
| Heptano | 224,721 | 191,5 | 36300 |
| Metilciclohexano | 184,84 | 142,7 | 35300 |

Tabla 3. Propiedades de compuestos en la segunda destilación.

Trabajando con temperatura de referencia a 25°C. Más adelante se mostrará más a detalles como se usaron estos equilibrios y propiedades.

Equilibrio L-L para la extracción

Justificación de la elección del solvente (Anilina)

La elección de la anilina para realizar la extracción líquido-líquido está fundamentada inicialmente en la polaridad de este compuesto, puesto que se necesita que este sea no polar para poder formar solución con estos compuestos. Puesto que esta molécula es dipolar, es decir, posee una zona polar y una zona no polar, se puede decir que puede realizar interacciones intermoleculares con el heptano y el metilciclohexano. Además de esto, la temperatura de ebullición de la anilina es aproximadamente 180°C, por lo tanto, es significativamente más grande que las de los dos compuestos a separar, dando como resultado una mayor facilidad de recuperación del disolvente.

Respecto a la selectividad al momento de realizar las dos fases, esto se puede explicar por medio de la fuerza de elución la cual indica la facilidad del disolvente para formar enlaces de hidrógeno con las moléculas, teniendo como referencia el sistema pentano-sílice, esta fuerza depende del momento dipolar. La fuerza eluyente para el heptano es 0.01, para el metilciclohexano está alrededor de 0.04 y para la anilina es 0.62, por lo tanto, el hecho de que la anilina y el metilciclohexano sean retirados como solución de la extracción líquido-líquido se debe a su mayor afinidad polar respecto al heptano.

Construcción de los diagramas de equilibrio L-L

Consideremos un sistema ternario constituido por A, B y C, y dos puntos X e Y que representan dos mezclas con composiciones definidas. En este caso X = (0.1 A, 0.7 B, 0.2 C) e Y = (0.7 A, 0.1 B, 0.2 C), respectivamente. Como se puede observar en la figura 1, los puntos están representados simétricamente con respecto a una línea media del diagrama de fases de triángulo equilátero (Figure 1, I-lado izquierdo). Sin embargo, si el diagrama fuera graficado en las coordenadas rectangulares convencionales o coordenadas cartesianas, el diagrama es asimétrico con respecto a la línea que conecta el punto medio (Figura 1, II-lado derecho).

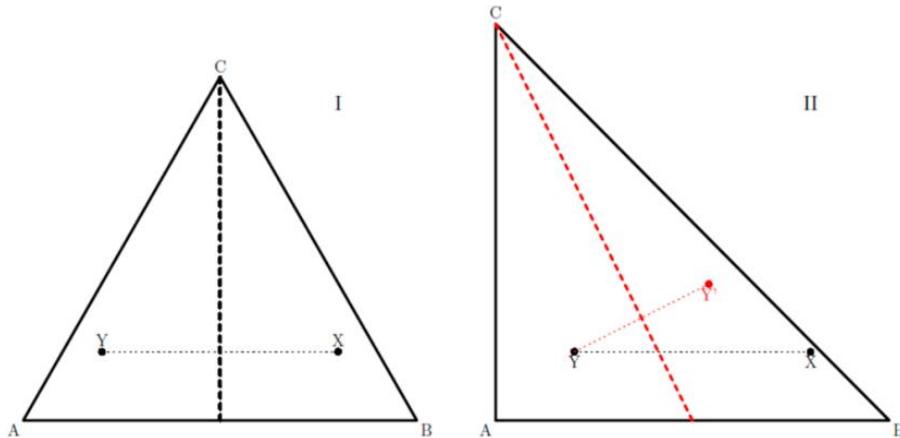


Figura 2. Ilustración de la pérdida de simetría geométrica en el cambio de representación en sistema de coordenadas de Gibbs (I) a cartesianas (II).

La componente Y(X) es diferente comparada con el punto geométricamente simétrico con respecto a la línea media (Punto Y'). Para poder ajustar la relación entre los puntos pertenecientes al triángulo equilátero y el diagrama de coordenadas cartesianas, se realiza una transformación, de tal manera que se pueda escribir cada coordenada del triángulo equilátero (x_G, y_G) y las coordenadas cartesianas (x_C, y_C).

$$\begin{pmatrix} x_G \\ y_G \end{pmatrix} = R \cdot \begin{pmatrix} x_C \\ y_C \end{pmatrix} + T$$

En este caso, R representaría una matriz de deformación y T un vector de traslación, aplicando esta relación simultáneamente para los puntos en las esquinas de cada diagrama, observamos que para el triángulo equilátero (Ángulos internos de $\pi/3$), tendremos la ecuación

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) \\ 0 & 0 & \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \end{pmatrix} = R \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + T$$

Lo cual nos lleva a

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = R \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + T \rightarrow T = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) \\ 0 & \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \end{pmatrix} = R \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + T \rightarrow R = \begin{pmatrix} 1 & \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) \\ 0 & \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \end{pmatrix}$$

Es decir que para realizar una transformación adecuada del diagrama en coordenadas cartesianas a coordenadas del triángulo equilátero tendremos, en el caso de que tengamos datos en vectores fila

$$\bar{x}_G = R \cdot \bar{x}_C$$

Si, por el contrario, los datos están en formato columna, la transformación será

$$\bar{x}_G = \bar{x}_C \cdot R^T$$

Donde el superíndice T , representa la transpuesta de la matriz. Cuya representación de la transformación de los datos se observa en la figura 2.

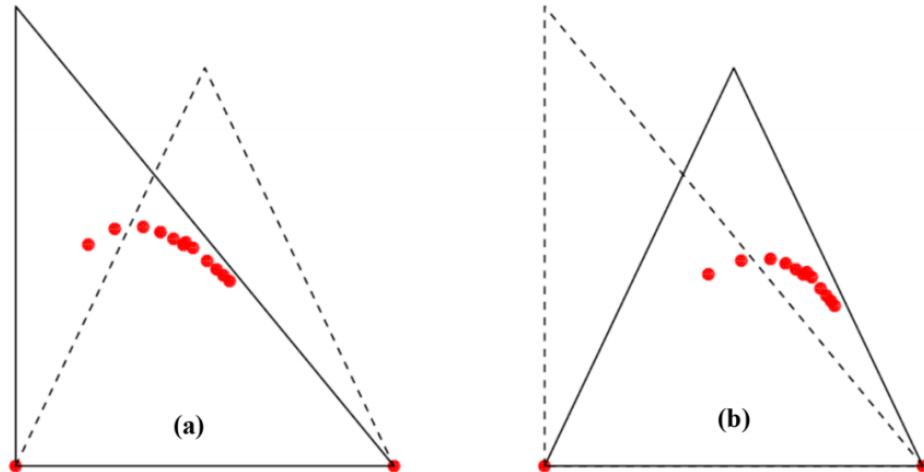


Figura 3. Ilustración de datos dentro del sistema coordenado de cartesianas (a) y Gibbs (b).

Con los datos del equilibrio recopilados para el equilibrio ternario L-L de metilciclohexano, heptano y anilina obtenemos

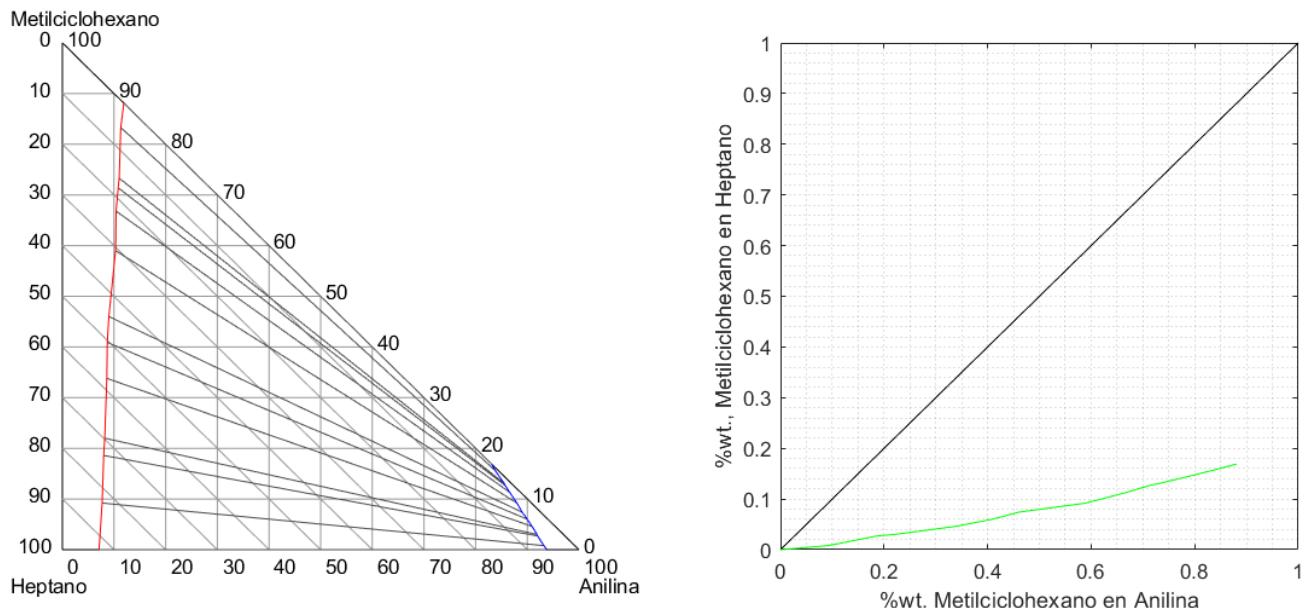


Figura 4. Diagrama de equilibrio L-L, Heptano, Anilina y Metilciclohexano en coordenadas cartesianas.

Y Aplicando la transformación podemos visualizar la conversión del gráfico del diagrama ternario en la siguiente imagen

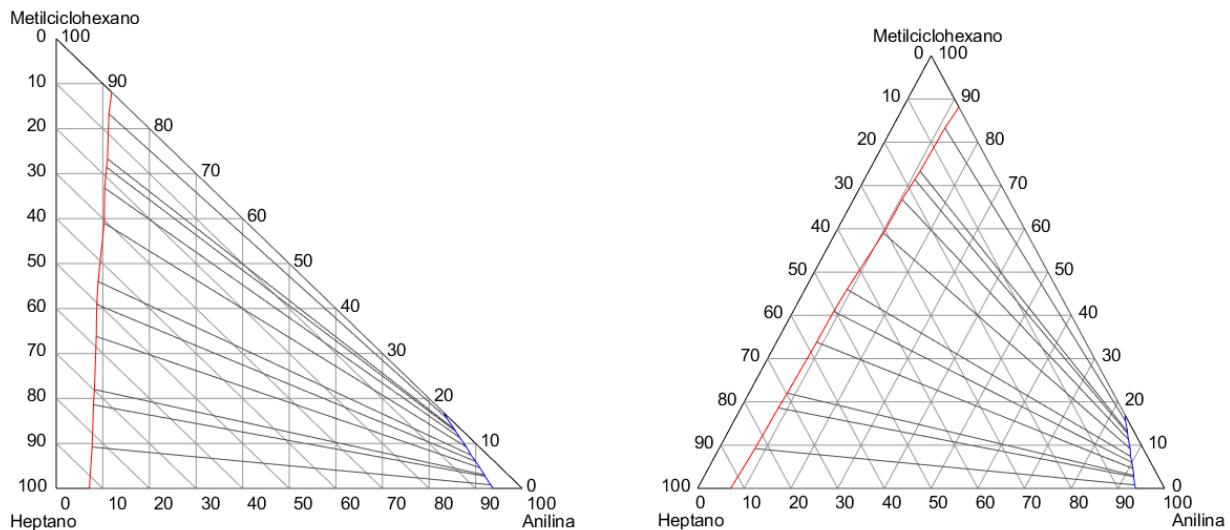


Figura 5. Transformación del diagrama de equilibrio L-L, Heptano, Anilina y Metilciclohexano de coordenadas cartesianas al triángulo equilátero.

Primera destilación

Para la primer destilación, en la cual se realiza la separación del propano respecto al metilciclohexano y el heptano, se utiliza una despresurización como agente de separación debido a que en este compuesto tiene un punto de ebullición significativamente menor comparados con el metilciclohexano y el heptano, cuya temperaturas de ebullición son aproximadamente -40 °C y 100 °C (tanto para el metilciclohexano y el heptano) respectivamente, además de que el flujo de alimentación se encuentra a una presión alta, por lo tanto, el proceso a seguir sería llevar el sistema a presión menor a la atmosférica, con el fin de asegurar una mayor separación del propano.

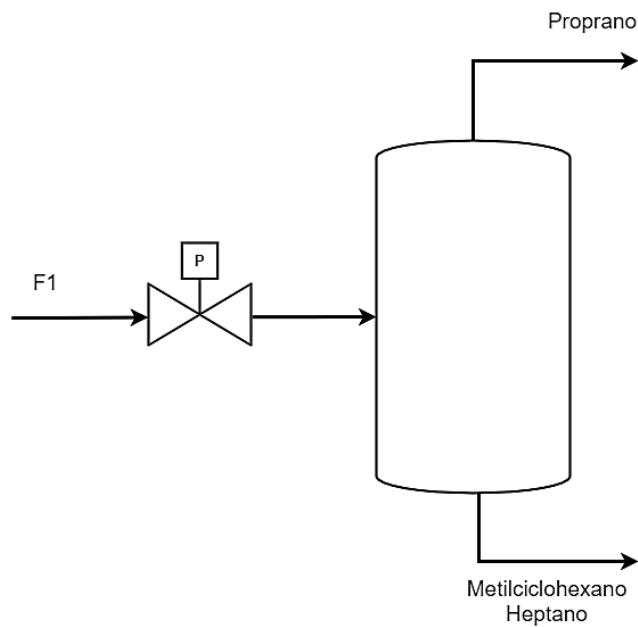


Figura 6. Diagrama primera destilación instantánea.

Como se mencionó anteriormente los puntos de ebullición son bastante distantes, además de que el propano a presión menor o igual a la atmosférica se encuentra en estado gaseoso, a diferencia de los otros dos compuestos los cuales se encuentran en estado líquido. Basándose en lo anterior, se decidió usar una destilación instantánea.

Para el caso de la destilación instantánea multicomponente, este se fundamenta en la ley termodinámica de la conversación de la materia.

$$\sum y - \sum x = 0$$

Así mismo, se dice que el sistema está en equilibrio, por lo tanto, se usa esta información para hallar una relación entre x y y . Para este caso se supuso idealidad respecto a este sistema, por lo tanto, la constante K_i estará determinada por la ley de Raoult.

$$y_i = K_i * x_i \quad K_i = \frac{P_i^{vap}}{P_{total}}$$

Realizando los balances de flujos y de componente, además de la relación de equilibrio se llega a las siguientes expresiones para x y y .

$$y = \frac{K_i * z_i}{\psi(K_i - 1) + 1} \quad x = \frac{z_i}{\psi(K_i - 1) + 1}$$

Una vez se ubican estas expresiones en la ecuación referente a la conservación de la materia se obtiene la siguiente expresión.

$$\sum \frac{z_i(K_i * 1)}{\psi(K_i - 1) + 1} = 0 \quad \psi = \frac{V}{F}$$

De esta forma se obtiene la relación entre el flujo de vapor y el flujo de entrada representado por ψ , de esta forma, se calculan las composiciones x y y .

Extracción

Extracción en contracorriente sin reflujo

En el caso en el que tengamos un sistema en contra corriente convencional, se pueden representar las etapas como

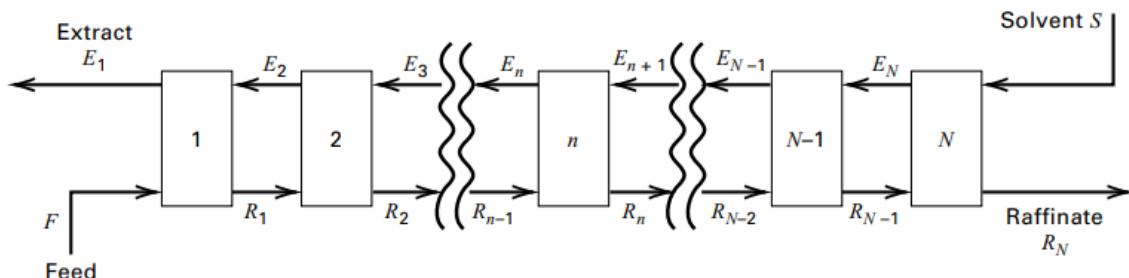


Figura 7. Representación esquemática de las etapas para una operación de extracción L-L en contracorriente.

Donde

E_n = Flujo másico del extracto que deja la etapa n

R_n = Flujo másico del refinado que deja la etapa n

$(y_i)_n$ = Fracción másica de la especie i del extracto que deja la etapa n

$(x_i)_n$ = Fracción másica de la especie i del refinado que deja la etapa n

Realizando un balance global, podemos encontrar que

$$F + S = E_1 + R_N = M$$

Para un balance de metilciclohexano y anilina

$$\begin{aligned} F \cdot w_{F,i} + S \cdot w_{S,i} &= M \cdot w_{M,i} \\ F \cdot w_{F,i} + S \cdot w_{S,i} &= (F + S) \cdot w_{M,i} \\ \frac{S}{F} &= \frac{w_{M,i} - w_{F,i}}{w_{S,i} - w_{M,i}} \end{aligned}$$

Luego

$$\begin{aligned} \frac{w_{M,A} - w_{F,A}}{w_{S,A} - w_{M,A}} &= \frac{w_{M,M} - w_{F,M}}{w_{S,M} - w_{M,M}} \\ \rightarrow \frac{w_{S,M} - w_{M,M}}{w_{S,A} - w_{M,A}} &= \frac{w_{M,M} - w_{F,M}}{w_{M,A} - w_{F,A}} \end{aligned}$$

Este resultado sugiere que el punto asociado a las composiciones de alimentación mezcla y solvente se encuentran sobre una misma línea recta, conectándolos entre sí. De manera análoga se encuentra el mismo resultado para las corrientes del extracto y refinado

$$\begin{aligned} E_1 \cdot y_1 + R_N \cdot x_N &= M \cdot w_{M,i} \\ E_1 \cdot y_1 + R_N \cdot x_N &= (F + S) \cdot w_{M,i} \\ \frac{R_N}{E_1} &= \frac{w_{M,A} - y_{1,A}}{x_{N,A} - w_{M,A}} = \frac{w_{M,M} - y_{1,M}}{x_{N,M} - w_{M,M}} \\ \rightarrow \frac{x_{N,M} - w_{M,M}}{x_{N,A} - w_{M,A}} &= \frac{w_{M,M} - y_{1,M}}{w_{M,A} - y_{1,A}} \end{aligned}$$

Si definimos ΔR como el flujo neto que sale de la etapa $N - 1$ y que entra a la etapa N . Entonces

$$\Delta R = R_N - S = F - E_1$$

El balance para cada metilciclohexano y anilina será

$$\Delta R \cdot w_{\Delta R,i} = R_N \cdot x_{N,i} - S \cdot w_{S,i} = F \cdot w_{F,i} - E_1 \cdot y_{1,i}$$

Reemplazando el balance global

$$\begin{aligned} (R_N - S) \cdot w_{\Delta R,A} &= R_N \cdot x_A - S \cdot w_{S,A} \\ \frac{R_N}{S} &= \frac{w_{\Delta R,A} - w_{S,A}}{w_{\Delta R,A} - x_A} = \frac{w_{\Delta R,M} - w_{S,M}}{w_{\Delta R,M} - x_M} \end{aligned}$$

Y de manera análoga se obtiene que

$$\frac{F}{E_1} = \frac{w_{\Delta R,A} - y_{1,A}}{w_{\Delta R,A} - w_{F,A}} = \frac{w_{\Delta R,M} - y_{1,M}}{w_{\Delta R,M} - w_{F,M}}$$

Donde nuevamente vemos que sobre la línea que conecta el refinado en la etapa N y el solvente, estará ubicado el punto de diferencia ΔR , además de que la línea que conecta la alimentación y el extracto también estará conectada con el punto de diferencia. En la ecuación de R_N/S es explícito que la cantidad de solvente mínimo se adquiere encontrando la ubicación mínima para el punto ΔR , es decir, que está ubicado más a la izquierda y abajo en el

diagrama ternario. Adicionalmente, por la definición del punto de diferencia, este se puede escribir para cada etapa como

$$\Delta R = R_{n-1} - E_n$$

$$\Delta R \cdot w_{\Delta R,i} = (R_{n-1} - E_n) \cdot w_{\Delta R,i} = R_{n-1} \cdot x_{n,i} - E_n \cdot y_{n,i}$$

$$\rightarrow \frac{R_{n-1}}{E_n} = \frac{w_{\Delta R,i} - y_{n,i}}{w_{\Delta R,i} - x_{n,i}}$$

Como este punto delta R además conecta con las composiciones que están en operación, y como máximo podremos conseguir en operación composiciones que estén en equilibrio, para ubicar el punto ΔR trazamos líneas que conecten composiciones en equilibrio y que intercepten la línea $R_N - S$, hasta ubicar el punto mínimo. Para el equilibrio de nuestro caso, podemos observar que la extensión de los datos de equilibrio nos lleva a

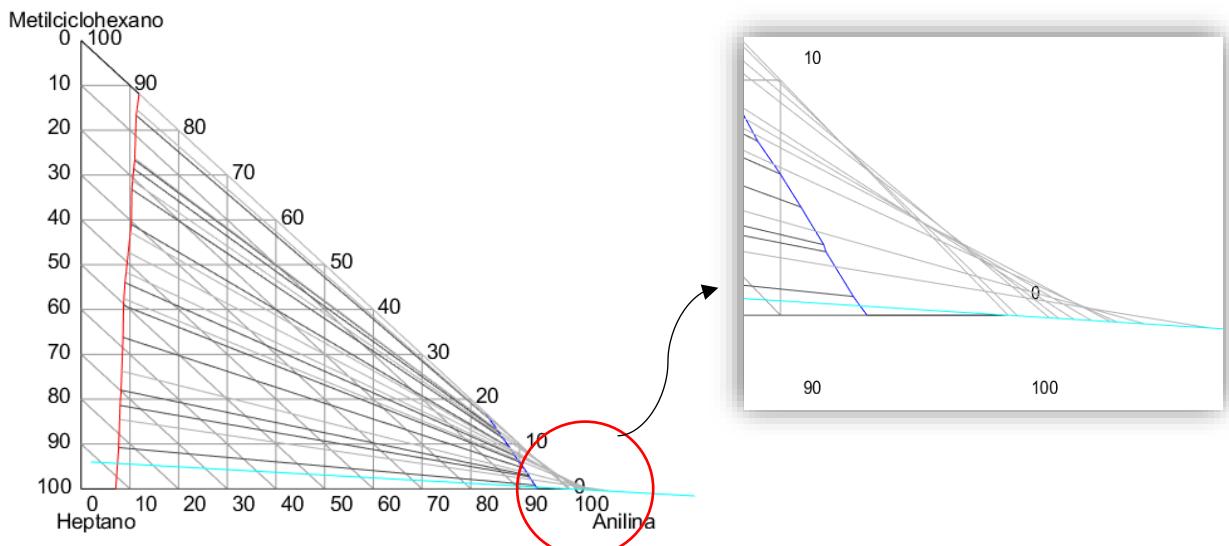


Figura 8. Representación gráfica de la adquisición del punto ΔR_m .

Donde vemos que la composición de la anilina en la intercepción de cada curva tiene el siguiente comportamiento

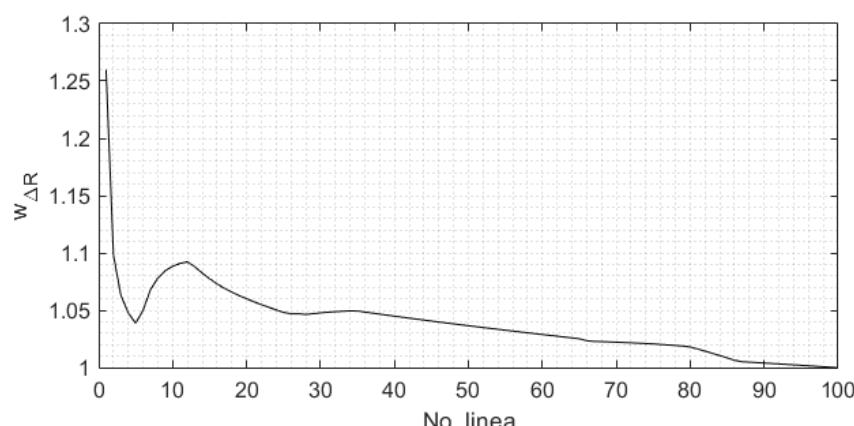


Figura 9. Comportamiento de la magnitud de la coordenada $w_{\Delta R_m,A}$ para cada línea extrapolada de los datos del equilibrio.

Donde se puede ver con toda seguridad que la intercepción mínima se obtiene para los datos de equilibrios más próximos al 0% de heptano. Recordando la relación que tiene este punto de diferencia mínima, podemos encontrar las concentraciones máximas del extracto ($E_{1,max}$), que estaría ubicado sobre la línea que conecta ΔR y F . Como de la separación inicial esperamos tener una mezcla casi equimolar de metilciclohexano y heptano, asumiremos $w_{F,M} = 0.5$. Con lo cual obtendremos los siguientes resultados aproximados

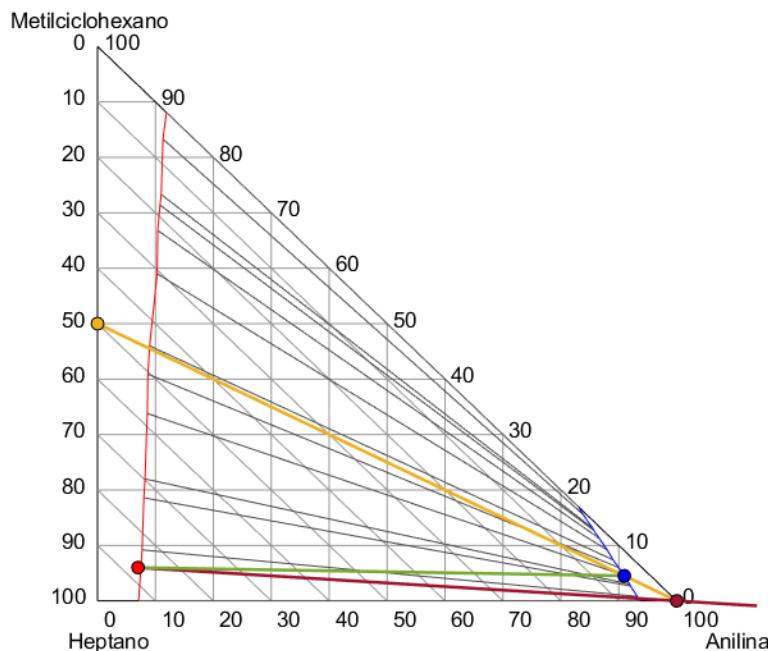


Figura 10. Representación gráfica de los datos supuestos para estimar composición de extracto máxima (azul), con la alimentación (amarillo), solvente (Vinotinto) y refinado (Rojo).

Donde se comprueba la poca separación que se consigue para el extracto (punto azul) en una operación de extracción en contracorriente sin reflujo, por lo que este tipo de extracción no es la adecuada para lo buscado.

Extracción en contracorriente con reflujo de extracto

Ante la baja composición posible del extracto al realizar una extracción a contracorriente sin reflujos, como primera alternativa se ha optado por añadir un reflujo de extracto al sistema. Esta extracción se caracteriza porque el extracto que se logra luego se pasa a un separador para obtener una corriente concentrada en el solvente y otra concentrada en el soluto. Esta última corriente es dividida y una fracción se recircula al extractor, mientras que otra se obtiene como extracto final.

Por el otro lado del equipo de extracción el arreglo es idéntico al caso de flujo contracorriente sin reflujo, ya que el último refinado es el refinado final y se suministra el solvente concentrado. De esta manera, esta extracción se representa según el sistema que se muestra en la figura 11.

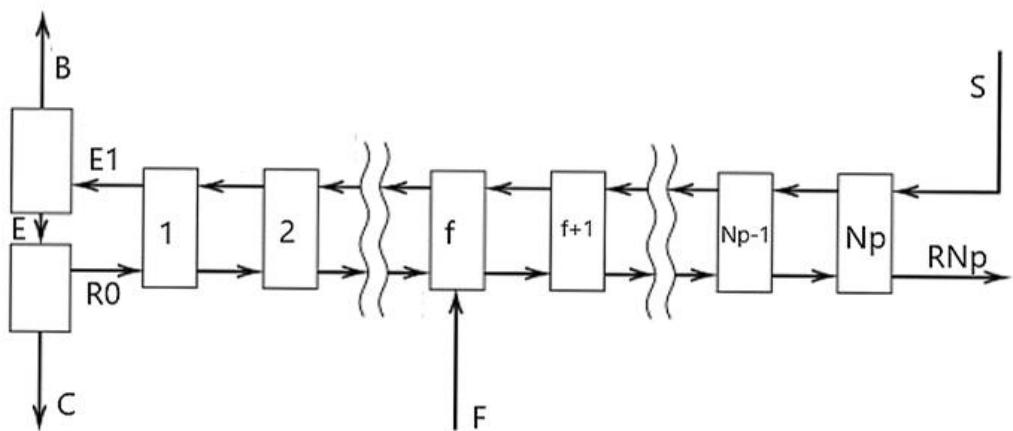


Figura 11. Extracción a contracorriente con reflujo de extracto.

Nota: el desarrollo de las ecuaciones de manera detallada se presentará en la siguiente sección. Esta sección se realiza con el fin de analizar la viabilidad de una extracción contracorriente con reflujo de extracto.

De la figura a se puede determinar que el flujo neto de salida en la zona de enriquecimiento se puede hallar como:

$$\Delta E' = C' + B'$$

Tras un desarrollo del balance de estas corrientes y sus composiciones en base libre de solvente (que se mostrará a detalle en la siguiente sección), se puede determinar que se debe cumplir la regla de la palanca entre estas tres corrientes en el diagrama N-X, Y.

Igualmente, con un balance global y una determinación de la expresión del flujo neto de salida en la zona de despojamiento, se pueden determinar las siguientes dos expresiones:

$$\Delta R' = R'_{Np} - S'$$

$$F' = \Delta E' + \Delta R'$$

Para trazar la línea de operación y calcular el número de etapas, antes es necesario calcular la relación de reflujo mínima, para lo cual antes debe ubicarse el punto de diferencia E mínimo.

Para esto, inicialmente es necesario fijar las composiciones X y N para la salida del equipo de separación de solvente. En ambas corrientes se puede esperar un X muy alto, ya que tras la salida E1 del equipo de extracción se tiene una cantidad mucho mayor de soluto (metilciclohexano) que de portador (heptano). Además, es importante señalar que en la corriente B, además de un X alto, se debe tener un N alto, ya que esta corriente sale concentrada en el solvente (anilina). Con estas consideraciones se puede dar una suposición para la composición de E y B. Cabe destacar que las composiciones de C y R₀ son iguales a las de E puesto que provienen de su división.

Es de destacar que el solvente que ingresa a la columna es resultado de la mezcla de B con una corriente A de Anilina pura que se suministra para compensar la anilina que sale en los productos de las separaciones. Sin embargo, el hecho de que A no contenga heptano ni metilciclohexano significa que la corriente S tiene el mismo X que B (ya que todo su soluto y portador viene de B). Adicionalmente, por la mezcla de B con A, también se espera que N_S sea alto, más que N_B. Con estas consideraciones se puede dar una suposición para la composición de S.

Ahora, suponiendo la composición del refinado final (R_{Np}), que debe estar sobre la curva del refinado en el equilibrio L-L y que debe ser rica en heptano. Con estas consideraciones se puede dar una suposición para la composición de R_{Np}.

Adicionalmente, el alimento es la corriente inferior del anterior separador flash, por lo que ya se tienen todas las coordenadas N-X, Y necesarias para determinar la ubicación de los puntos de diferencias mínimos con las ecuaciones anteriormente mostradas. Esto se realiza trasladando la composición del alimento con un equilibrio

hasta la línea entre C y B hasta hallar el equilibrio que alcanza el mayor valor de $N_{\Delta E}$. Con estas consideraciones, se encontró lo siguiente:

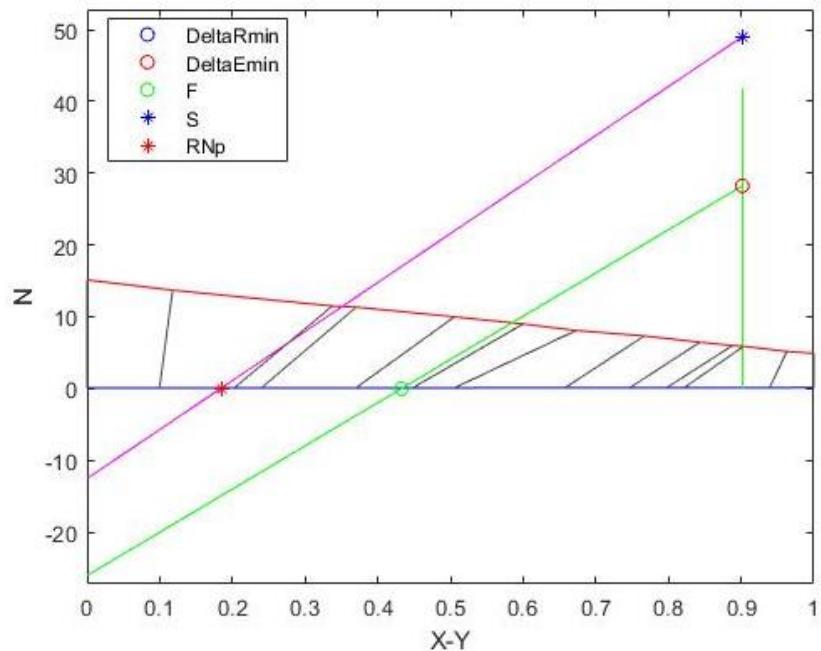


Figura 12. Sistema para determinar la relación de reflujo mínima.

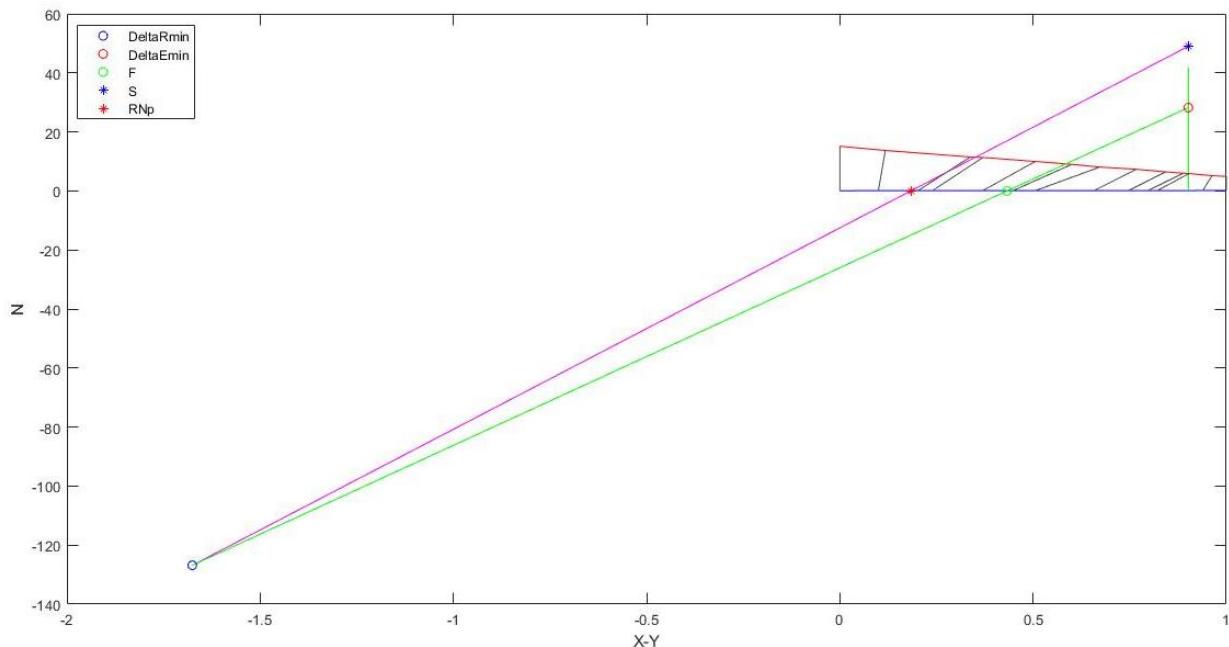


Figura 13. Sistema para determinar la relación de reflujo mínima.

Como se puede observar en las figuras 12 y 13, la línea entre S y R_{NP} y la línea entre Δ_{Emin} y F (que deben cortarse en la ubicación de Δ_{Rmin}) tienen pendientes muy similares, por lo que el punto Δ_{Rmin} se debe ubicar en un X negativo y muy bajo, junto a un N negativo muy grande, lo cual complica en gran medida el cálculo de las etapas (haciendo que este cálculo no se pueda realizar en muchos casos). Adicionalmente, la baja pendiente de la línea entre S y R_{NP} y el alta pendiente de las líneas de equilibrio cuando X toma bajos valores imposibilita la obtención de concentraciones altas de heptano en el refinado, ya que la operatoria cruzaría el equilibrio.

Se puede notar que la mayoría de las dificultades encontradas se evitarían si la pendiente de la línea entre S y R_{NP} fuese mayor. Para lograr que esta pendiente sea mayor, la opción más viable es disminuir X_S . Sin embargo, para disminuir X_S hay que aumentar la cantidad de heptano con respecto a la cantidad de metilciclohexano presente, lo cual no se puede lograr al depender de B. Debido a esto, se determina que la mejor manera de lograr esto consiste en el suministro de una fracción de la corriente R_{NP} (con alta concentración de heptano) y suministrárla con el solvente, lo que disminuiría X_S . En conclusión, se determina que la mejor manera de desarrollar la extracción es con reflujo de extracto y a su vez, con reflujo de refinado.

Sistema de extracción

Como se mencionó anteriormente, el sistema adecuado para realizar la extracción deseada requiere del reflujo de extracto y del reflujo de refinado. Este sistema se ilustra en la siguiente figura:

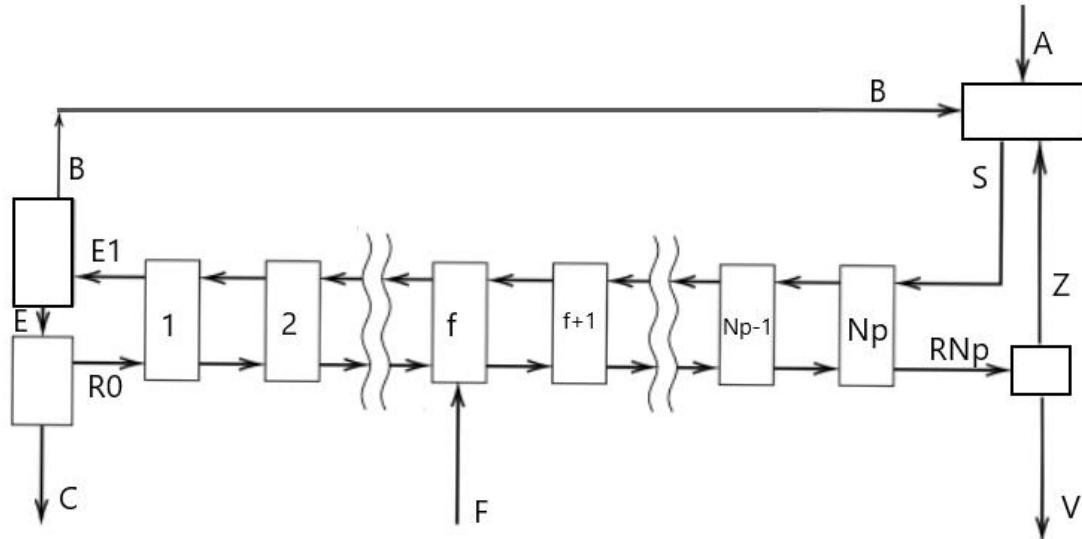


Figura 14. Extracción a contracorriente con reflujo de extracto y de refinado.

Inicialmente, se puede realizar un balance en base libre del flujo neto de salida en la zona de enriquecimiento:

$$\Delta E' = C' + B'$$

$$\Delta E' * X_{\Delta E} = C' * X_C + B' * X_B$$

$$\Delta E' * N_{\Delta E} = C' * N_C + B' * N_B$$

Al dejar todo en términos de los flujos en base libre de C y B se tiene:

$$(C' + B') * X_{\Delta E} = C' * X_C + B' * X_B$$

$$(C' + B') * N_{\Delta E} = C' * N_C + B' * N_B$$

$$\frac{C'}{B'} = \frac{X_B - X_{\Delta E}}{X_{\Delta E} - X_C} = \frac{N_B - N_{\Delta E}}{N_{\Delta E} - N_C}$$

Con lo cual se puede obtener la expresión de la regla de la palanca para determinar la composición N-X de ΔE :

$$\frac{X_B - X_{\Delta E}}{N_B - N_{\Delta E}} = \frac{X_{\Delta E} - X_C}{N_{\Delta E} - N_C}$$

De la misma manera, se puede realizar un balance en base libre del flujo neto de salida en la zona de despojamiento:

$$\Delta R' = R'_{Np} - S'$$

$$\Delta R' * X_{\Delta R} = R'_{Np} * X_{Np} - S' * X_S,$$

$$\Delta R' * N_{\Delta R} = R'_{Np} * N_{R.Np} - S' * N_{E.S},$$

Al dejar todo en términos de los flujos en base libre de S y R_{Np} se tiene:

$$(R'_{Np} - S') * X_{\Delta R} = R'_{Np} * X_{Np} - S' * X_S,$$

$$(R'_{Np} - S') * N_{\Delta R} = R'_{Np} * N_{R.Np} - S' * N_{E.S},$$

$$\frac{R'_{Np}}{S'} = \frac{X_{\Delta R} - X_S}{X_{\Delta R} - X_{Np}} = \frac{N_{\Delta R} - N_{E.S}}{N_{\Delta R} - N_{R.Np}}$$

Con lo cual se puede obtener la expresión de la regla de la palanca para determinar la composición N-X de ΔR:

$$\frac{X_B - X_{\Delta E}}{N_B - N_{\Delta E}} = \frac{X_{\Delta E} - X_C}{N_{\Delta E} - N_C}$$

En cada una de las dos expresiones determinadas anteriormente para la regla de la palanca se tienen dos variables por determinar (N y X), por lo que se debe añadir una expresión más. Esta expresión se puede obtener con un balance global del equipo de extracción en base libre:

$$S' + F' = P' + R'_{Np} + B'$$

$$F' = R'_{Np} - S' + B' + P'$$

$$F' = \Delta R' + \Delta E'$$

$$F' * X_F = \Delta E' * X_{\Delta E} + \Delta R' * X_{\Delta R}$$

$$F' * N_F = \Delta E' * N_{\Delta E} + \Delta R' * N_{\Delta R}$$

Con algunas operaciones netamente algebraicas sobre estas ecuaciones se puede determinar que también es posible apoyarse en la regla de la palanca entre el alimento y los deltas.

El sistema planteado con estas tres ecuaciones posee cuatro incógnitas ($X_{\Delta E}$, $N_{\Delta E}$, $X_{\Delta R}$ y $N_{\Delta R}$), por lo que aún es necesario el uso de otra expresión.

De esta manera, se plantea ahora un balance en el equipo de separación de solvente:

$$E'_1 = R'_0 + C' + B'$$

Recordando que $\Delta E' = C' + B'$:

$$(R'_0 + C' + B') * N_{E1} = R'_0 * N_{R0} + (C' + B') * N_{\Delta E}$$

A partir de esta expresión se puede determinar la expresión de la relación de reflujo:

$$RR = \frac{R'_0}{C' + B'} = \frac{R'_0}{\Delta E'} = \frac{N_{\Delta E} - N_{E1}}{N_{E1} - N_{R0}}$$

En donde se nota que también es necesario disponer de las composiciones de E_1 . Debido a esto, ahora se plantea un balance en el equipo de separación del solvente (columna de destilación):

$$E'_1 = E' + B'$$

$$E'_1 * Y_1 = E' * X_E + B' * X_B$$

$$E'_1 * N_{E1} = E' * N_E + B' * N_B$$

De estas expresiones es igualmente posible plantear la regla de la palanca entre E_1 , B y E . Además, dado a que E_1 sale del equipo de extracción, su composición $N-Y$ debe estar sobre la línea de N para el extracto. De esta manera, este punto puede ser determinado.

Con el sistema de ecuaciones anterior (que puede ser resuelto sistemáticamente) es posible ubicar los puntos de diferencia para una relación de reflujo dada, además de que se puede hallar la relación de reflujo mínima.

Ahora, para determinar las líneas de operación, las etapas, los flujos y sus composiciones, se realizan los siguientes balances en base libre:

Para una etapa e cualquiera en la zona de enriquecimiento:

$$E'_{e+1} = \Delta E' + R'_e$$

$$E'_{e+1} * Y_{e+1} = \Delta E' * X_{\Delta E} + R'_e * X_e$$

$$E'_{e+1} * N_{E.e+1} = \Delta E' * N_{\Delta E} + R'_e * N_{R.e}$$

Dejando la expresión en términos de E y R :

$$E'_{e+1} * Y_{e+1} = (E'_{e+1} - R'_e) * X_{\Delta E} + R'_e * X_e$$

$$E'_{e+1} * N_{E.e+1} = (E'_{e+1} - R'_e) * N_{\Delta E} + R'_e * N_{R.e}$$

Se puede obtener la expresión para la curva de operación de enriquecimiento:

$$\frac{R'_e}{E'_{e+1}} = \frac{N_{\Delta E} - N_{E.e+1}}{N_{\Delta E} - N_{R.e}} = \frac{X_{\Delta E} - Y_{e+1}}{X_{\Delta E} - X_e}$$

De la misma manera, para una etapa s cualquiera en la zona de despojamiento:

$$R'_{s-1} + S' = R'_{Np} + E'_s$$

$$\Delta R' * X_{\Delta R} = R'_{s-1} * X_{s-1} - E'_s * Y_s$$

$$\Delta R' * N_{\Delta R} = R'_{s-1} * N_{E.s-1} - E'_s * N_{E.s}$$

Dejando la expresión en términos de E y R :

$$(R'_{s-1} - E'_s) * X_{\Delta R} = R'_{s-1} * X_{s-1} - E'_s * Y_s$$

$$(R'_{s-1} - E'_s) * N_{\Delta R} = R'_{s-1} * N_{R.s-1} - E'_s * N_{E.s}$$

Se puede obtener la expresión para la curva de operación de despojamiento:

$$\frac{R'_{s-1}}{E'_s} = \frac{N_{E.s} - N_{\Delta R}}{N_{R.s-1} - N_{\Delta R}} = \frac{Y_s - X_{\Delta R}}{X_{s-1} - X_{\Delta R}}$$

Secuencia de cálculos para la extracción

Es de señalar, que se supone que el propano que entra al equipo de extracción no interfiere en el equilibrio L-L y que, dado a su baja solubilidad en la anilina, todo este flujo sale por la corriente de refinado, por lo que no será tenido en cuenta en los cálculos internos en la extracción.

Inicialmente se debe calcular la composición y el flujo de entrada en base libre al equipo de extracción (omitiendo del cálculo la presencia de propano). Con esto, se obtiene:

$$F_2 = 70483 \text{ kg/h}$$

$$X_{F2} = 0.4325$$

$$N_{F2} = 0$$

Se trabajará mediante la suposición de que, en la columna de destilación siguiente, la relación de la fracción másica de metilciclohexano y heptano es la misma para el destilado E y el producto de fondos B (dado a su similar volatilidad y a la baja concentración de heptano que no justifica el cálculo con una columna multicomponente). Adicionalmente, dado a que B y D provienen de E₁, E₁ también debe tener esta relación entre la fracción de estos dos componentes. Esta relación entre la fracción másica se ha fijado como 13.1 g de metilciclohexano por cada 1.4 g de heptano siguiendo un valor que se logra sobre la línea de extracto (ya que E₁ debe estar sobre esa línea).

Con esta relación se pueden suponer las fracciones másicas y calcular las composiciones en base libre de B y E. En nuestro caso, se trabajó con las siguientes fracciones como objetivos de la destilación del solvente:

En el fondo de la columna (B) se tienen las fracciones másicas de 0.9799 para la anilina, 0.0021 para el heptano y 0.0200 para el metilciclohexano. Las composiciones molares entonces son de 0.9790 para la anilina, 0.0020 para el heptano y 0.0190 para el metilciclohexano. Con las composiciones másicas se obtiene:

$$X_B = 0.9034$$

$$N_B = 44.1724$$

En el destilado de la columna (E) se tienen las fracciones másicas de 0.0038 para la anilina, 0.0962 para el heptano y 0.90 para el metilciclohexano. Las composiciones molares entonces son de 0.0040 para la anilina, 0.0944 para el heptano y 0.9016 para el metilciclohexano. Con las composiciones másicas se obtiene:

$$X_E = X_C = X_{R0} = 0.9034$$

$$N_E = N_C = N_{R0} = 0.0038$$

Por otro lado, con la palanca que surge del balance en el equipo de separación del solvente (columna de destilación) se puede obtener:

$$X_{E1} = 0.9034$$

$$N_{E1} = 5.8966$$

Adicionalmente, se busca una fracción másica de 0.82 en el refinado final, por lo que para R_{Np} se obtiene:

$$X_{RNp} = 0.1087$$

$$N_{RNp} = 0.0870$$

Y, para el solvente se ha establecido un 95% en masa de anilina, 4.4% de heptano y 0.6% de metilciclohexano, por lo que se tiene:

$$X_S = 0.12$$

$$N_S = 19$$

Para determinar la relación de reflujo mínima se ha extendido un equilibrio que toca el punto de la alimentación hasta cortar la vertical de $X_{\Delta E}$. Cabe destacar que el valor de $X_{\Delta E}$ ya se conoce debido a que $\Delta E' = C' + B'$ y las composiciones de C y B en base libre son iguales.

Con esto, se obtiene:

$$X_{\Delta E} = 0.9034$$

$$N_{\Delta E, \min} = 28.3124$$

Con la palanca entre los deltas y el alimento y la palanca entre S y R_{NP} con ΔR se obtiene:

$$X_{\Delta R} = 0.0966$$

$$N_{\Delta R, \min} = -20.1941$$

El sistema descrito se presenta en la figura 15.

Con los valores que se tienen se puede hallar la relación de reflujo mínima, hallando:

$$RR_{\min} = \frac{N_{\Delta E, \min} - N_{E1}}{N_{E1} - N_{R0}} = 3.8040$$

Ahora, se multiplica esta relación de reflujo mínima por un valor superior a 1 (se usó 1.2) y se obtiene la relación de reflujo de operación.

Con la nueva relación de reflujo se puede determinar el nuevo $N_{\Delta E}$ y con la regla de la palanca se obtienen las coordenadas de ΔR .

Sobre el diagrama N-X, Y las curvas de operación se construyeron trazando múltiples rectas desde los puntos de diferencia hasta cortar una composición en base libre de extracto y una de refinado, agrupando estas parejas (X, Y) se puede obtener el comportamiento de la curva de operación. Estas líneas se representan en la figura 15.

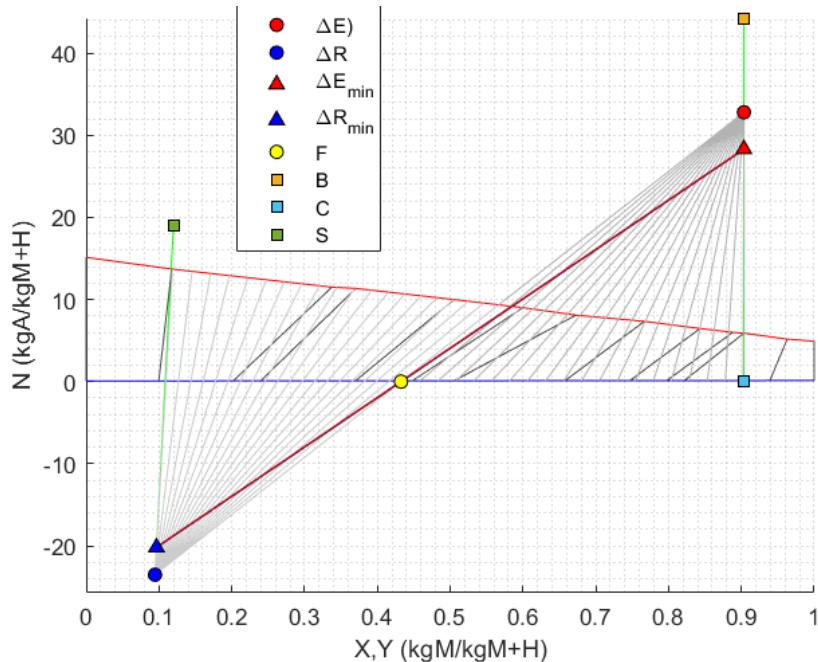


Figura 15. Representación de el sistema para el reflujo mínimo y de las operatorias para 1.2 veces el reflujo mínimo.

Con las parejas (X, Y) obtenidas, se puede trazar la operatoria en el diagrama X-Y y calcular el número de etapas ideales utilizando el método gráfico. Iniciamos desde la curva operatoria de enriquecimiento en su punto (X_{R0}, Y_{E1}), luego trazamos una línea horizontal hacia la izquierda hasta que toque la curva de equilibrio, para determinar este punto en la curva de equilibrio se tiene que los Y son iguales y para determinar el X usamos la ecuación del equilibrio para calcular el X que está en equilibrio con el valor de Y.

Después desde este punto trazamos una línea vertical hacia abajo, hasta que toque la curva de operación de la fase de enriquecimiento, para este nuevo punto tenemos que los X son iguales y su respectivo valor de Y se determina con ayuda de su ecuación de la curva operatoria de enriquecimiento.

Lo siguiente es repetir el procedimiento hasta llegar un punto en el equilibrio donde $X < X_{RNp}$, cuando sucede esto se detiene el proceso y el número de figuras que se formaran representan el número de etapas ideales que tendrá la columna de destilación, también se incluye esta última a pesar de que no se completara la figura (no se realice el trazo vertical porque ya no toca la operatoria). Un detalle para tener en cuenta es que cuando se tenga un punto en el equilibrio con $X < X_{corte}$, ya no se usará la curva operatoria de enriquecimiento, sino la curva operatoria de agotamiento.

Ahora que se conoce el número de etapas y sus composiciones, que prosigue a calcular los flujos. Inicialmente, con el sistema que se muestra a continuación se pueden calcular los flujos netos de salida en base libre ($\Delta E'$ y $\Delta R'$), ya que todas las composiciones y el flujo de entrada son conocidos.

$$F' = \Delta E' + \Delta R'$$

$$F' * N_F = \Delta E' * N_{\Delta E} + \Delta R' * N_{\Delta R}$$

Adicionalmente, se puede obtener:

$$R'_0 = Rel. Reflux * \Delta E'$$

$$E_1 = \Delta E' + R'_0$$

Y se pueden obtener los flujos de S y R_{NP} como:

$$S' = \frac{\Delta R'}{\frac{N_{\Delta R} - N_{E,S'}}{N_{\Delta R} - N_{R,Np}} - 1}$$

$$R'_{NP} = \Delta R' + S'$$

Tras un manejo algebraico de las expresiones para las operatorias, para la zona de enriquecimiento se pueden calcular los flujos como:

$$E'_{e+1} = \frac{\Delta E'}{1 - \frac{N_{\Delta E} - N_{E,e+1}}{N_{\Delta E} - N_{R,e}}}$$

$$R'_e = E'_{e+1} - \Delta E'$$

Y para la zona de despojamiento:

$$E'_s = \frac{\Delta R'}{\frac{N_{E,s} - N_{\Delta R}}{N_{R,s-1} - N_{\Delta R}} - 1}$$

$$R'_{s-1} = E'_s + \Delta R'$$

Finalmente se calculan los flujos de las demás corrientes. Para este fin, inicialmente se calcula el flujo en base libre de las corrientes B y E que salen de la columna de destilación de la siguiente manera:

$$B' = E'_1 * \frac{N_{E1} - N_E}{N_B - N_E}$$

$$E' = E'_1 - B'$$

Adicionalmente:

$$C' = E' - R'_0$$

Luego, con un balance en base libre en el mezclador se obtiene el flujo de refinado recirculado Z y el flujo de refinado que sale del sistema V:

$$Z' = S' - B'$$

$$V' = R'_{Np} - Z'$$

Finalmente, con un balance global de anilina se obtiene la corriente A:

$$A = C' * N_C + V' * N_{RNp}$$

Segunda destilación

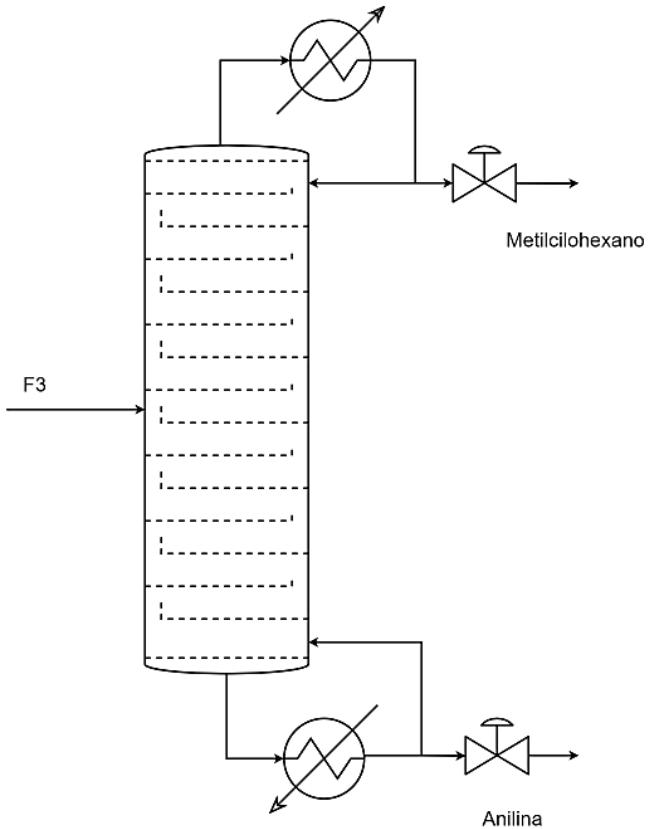


Figura 16. Diagrama segunda torre de destilación

Para este caso, se espera que la relación entre metilciclohexano y heptano en la corriente de salida tenga al menos un valor de 10, debido a la dilución del heptano en esta corriente y teniendo en cuenta los deltas de vaporización y la presión de vapor de estas dos sustancias tiene un comportamiento similar, se trabajará esta mezcla como si fuera una sola sustancia.

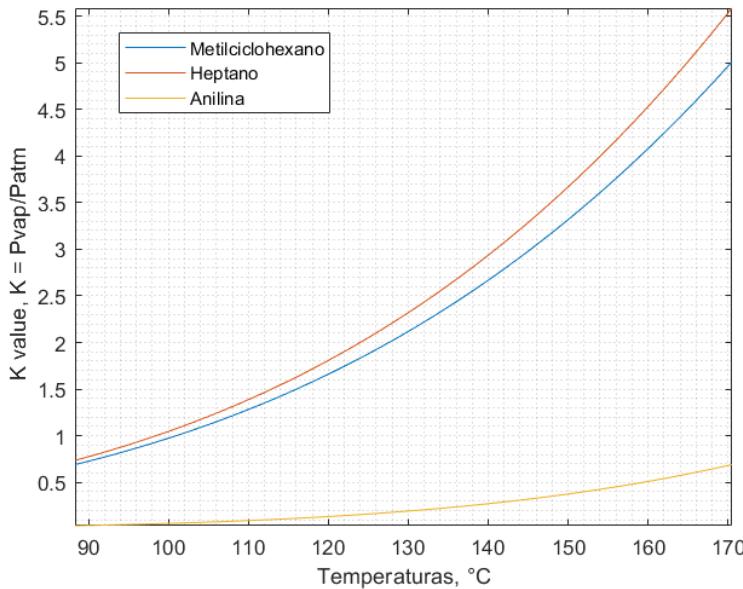


Figura 17. Valores K para metilciclohexano, heptano y anilina.

Cuyas propiedades serán

$$Cp_{mch}^* = \frac{\alpha \cdot Cp_{mch}(T) + Cp_h(T)}{\alpha + 1}, \quad \lambda_{mch}^* = \frac{\alpha \cdot \lambda_{mch}(T) + \lambda_h(T)}{\alpha + 1}$$

Donde, Cp_{mch} y Cp_h : Capacidad calorífica metilciclohexano y heptano, respectivamente.

λ_{mch} y λ_h : Capacidad calorífica metilciclohexano y heptano, respectivamente.

Cp_{mch}^* : Capacidad calorífica metilciclohexano empleado en destilación

λ_{mch}^* : Capacidad calorífica metilciclohexano en destilación

Si el metilciclohexano es la sustancia con el índice (1) y la anilina es (2), el equilibrio L-V trabajando la mezcla como ideal, será

$$y_i \cdot P = x_i \cdot P_{vap,i}(T)$$

$$P = x_1 \cdot P_{vap,1}(T) + (1 - x_1) \cdot P_{vap,2}(T)$$

Estableciendo composiciones de x_1 comprendidos en el intervalo [0,1], se obtiene la temperatura de bulbo húmedo y con estos datos, se obtiene la composición de la fase de vapor en equilibrio

$$y_1 = x_1 \cdot \frac{P_{vap,1}(T)}{P}$$

Así mismo, para el equilibrio en el diagrama de entalpía vs composición se plantea la entalpía para el líquido y vapor saturado, de la siguiente forma

$$\Delta H_v = y_1 \cdot [\lambda_{1,(T_{ref})} + C_{p1}^{vap} \cdot (T_{Dew} - T_{ref})] + (1 - y_1) \cdot [\lambda_{2,(T_{ref})} + C_{p2}^{vap} \cdot (T_{Dew} - T_{ref})]$$

$$\Delta H_l = x_1 \cdot C_{p1}^{liq} \cdot (T_{Bulb} - T_{ref}) + (1 - x_1) \cdot C_{p2}^{liq} \cdot (T_{Bulb} - T_{ref}) + \Delta H^E$$

Donde ΔH^E representa la entalpía en exceso o desviación de la solución ideal para la mezcla líquida y λ es el calor de vaporización a la temperatura de referencia.

La temperatura de bulbo húmedo y la de rocío fueron obtenidas de la expresión de equilibrio y, como estamos asumiendo comportamiento de mezcla ideal, la entalpía en exceso para la fase líquida es cero. Con lo cual se obtienen los siguientes gráficos representativos del equilibrio.

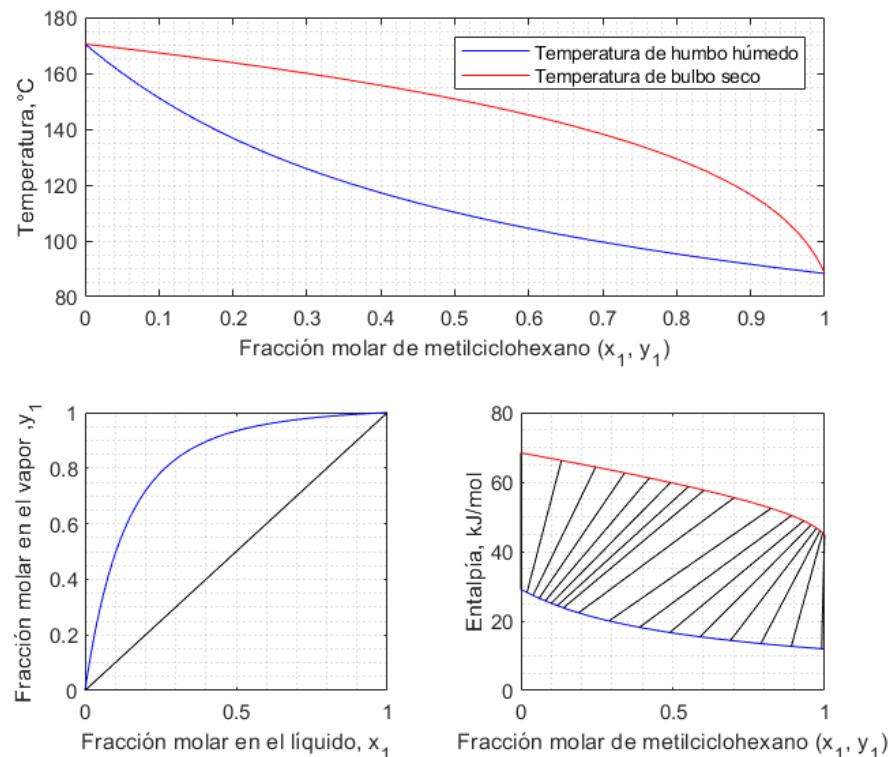


Figura 18. Diagramas representativos del equilibrio L-V entre metilciclohexano y anilina.

Una vez establecidos estos datos es posible determinar los puntos de diferencia mínimos, que se encontrarían teniendo en cuenta la condición límite del equilibrio, es decir, que se buscaría la línea de equilibrio en los diagramas de entalpía, de tal manera que se extrapole y pase por el punto donde se encuentra ubicada la alimentación. En este caso, como estamos ingresando la mezcla en su punto de bulbo húmedo, la línea con la cual adquirir el punto de diferencia mínimo es en el que se encuentra el punto de entrada, con lo cual podemos encontrar los puntos de diferencia con la intersección con las líneas de x_D , x_W .

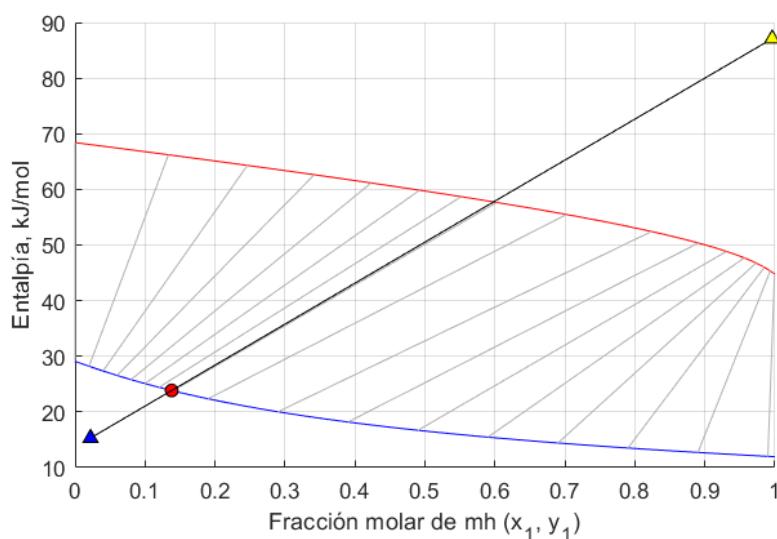


Figura 19. Líneas de operación con el reflujo mínimo.

Obteniendo los datos de

$$H_{\Delta D-min} = 87.0 \text{ kJ/mol}$$

$$H_{\Delta W-min} = 15.2 \text{ kJ/mol}$$

Con la cual calcular la relación de reflujo mínima:

$$R_{min} = \frac{H_{\Delta D-min} - H_{x_D}}{H_{x_D} - h_{x_D}} = 1.2640$$

Las curvas de operación se construyeron trazando múltiples rectas desde los puntos de diferencia hasta cortar una composición de líquido saturado y una de vapor saturado, agrupando estas parejas (x, y) se puede obtener el comportamiento de la curva de operación representado en el diagrama de la derecha.

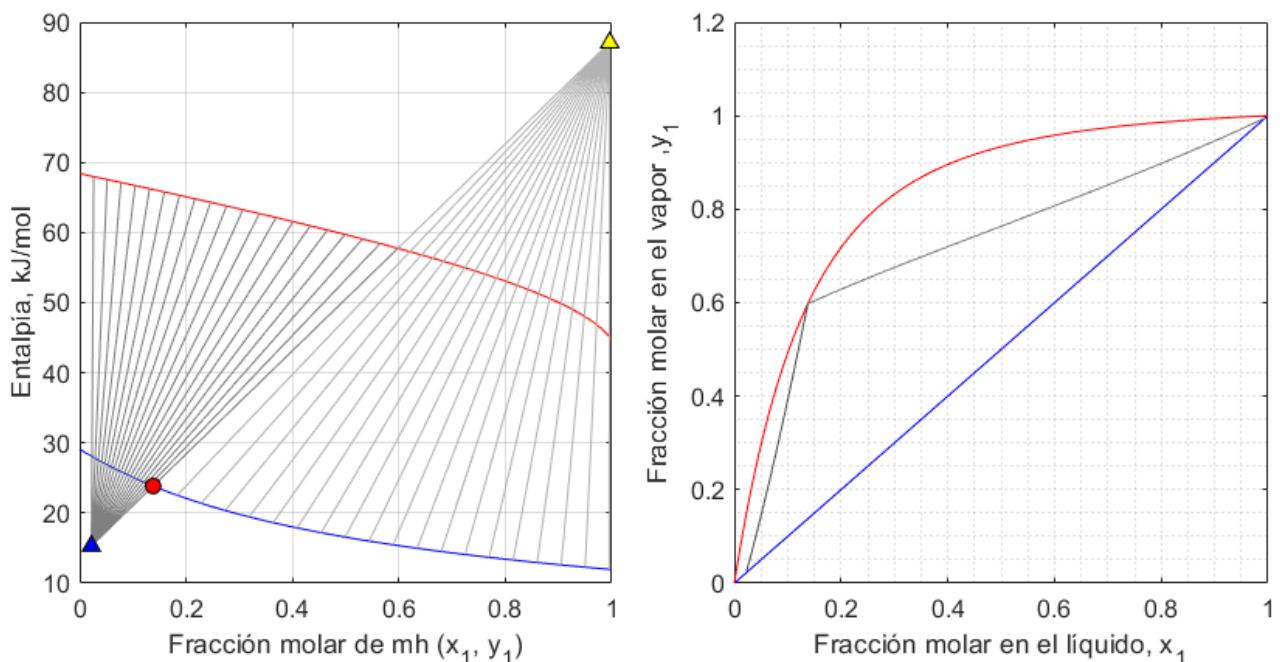


Figura 20. Líneas de operación con el reflujo mínimo.

De manera gráfica, es posible determinar el número de etapas implementando el diagrama x-y, en el cual ya se encuentra graficada la curva de operación. Iniciamos desde la curva operatoria de enriquecimiento en su punto (x_D, x_D) que serán nuestros (x_1, y_1), luego trazamos una línea horizontal hacia la izquierda hasta que toque la curva de equilibrio, para determinar este punto en la curva de equilibrio se tiene que $y_2=y_1$ y para determinar x_2 usamos la ecuación del equilibrio para calcular el x que está en equilibrio con y_2 .

Después desde este punto trazamos una línea vertical hacia abajo, hasta que toque la curva de operación de la fase enriquecimiento, para este nuevo punto tenemos que $x_3=x_2$ y su respectivo valor y_3 se determina con ayuda de su ecuación de la curva operatoria de enriquecimiento.

Lo siguiente es repetir el procedimiento desde el punto (x_3, y_3) y así sucesivamente, hasta llegar un punto en el equilibrio donde $x_F < x_W$, cuando sucede esto se detiene el proceso y el número de figuras que se formaran representan el número de etapas reales que tendrá la columna de destilación, también se incluye esta última a pesar de que no se completara la figura (no se realice el trazo vertical porque ya no toca la operatoria). Un detalle para tener en cuenta es que cuando se tenga un punto en el equilibrio con $x_C < x_{corte}$, ya no se usará la curva operatoria de enriquecimiento, sino la curva operatoria de agotamiento.

Sin embargo, este procedimiento tiene un fundamento en el balance de materia y energía. Realizando un balance de materia global en la zona de enriquecimiento y despojamiento, obtenemos:

$$D + L_n = G_{n+1} \rightarrow D = G_{n+1} - L_n$$

$$W + G_{m+1} = L_m \rightarrow W = L_m - G_{m+1}$$

Así mismo, se puede hacer por especie,

$$Dz_D = G_{n+1}y_{n+1} - L_nx_n$$

$$Wz_W = L_mx_m - G_{m+1}y_{m+1}$$

Y, reemplazando los flujos D, W del balance global en los específicos, encontramos

$$(G_{n+1} - L_n) \cdot z_D = G_{n+1}y_{n+1} - L_nx_n \rightarrow \frac{G_{n+1}}{L_n} = \frac{x_n - z_D}{y_{n+1} - z_D}$$

$$(L_m - G_{m+1}) \cdot z_W = L_mx_m - G_{m+1}y_{m+1} \rightarrow \frac{G_{m+1}}{L_m} = \frac{x_m - z_W}{y_{m+1} - z_W}$$

De manera análoga, podemos plantear el balance de energía

$$D \cdot H_{\Delta D} = D \left(\frac{Q_c}{D} + H_D \right) = G_{n+1}H_{G,n+1} - L_nH_{L,n}$$

$$W \cdot H_{\Delta W} = W \cdot \left(H_W - \frac{Q_r}{W} \right) = L_mH_{L,m} - G_{m+1}H_{G,m+1}$$

Luego,

$$\frac{G_{n+1}}{L_n} = \frac{H_n - H_{\Delta D}}{H_{G,n+1} - H_{\Delta D}}$$

$$\frac{G_{m+1}}{L_m} = \frac{H_m - H_{\Delta W}}{H_{G,m+1} - H_{\Delta W}}$$

Y, por lo tanto,

$$\rightarrow \frac{H_{G,n+1} - H_{\Delta D}}{y_{n+1} - z_D} = \frac{H_n - H_{\Delta D}}{x_n - z_D}$$

$$\rightarrow \frac{H_{G,m+1} - H_{\Delta W}}{y_{m+1} - z_W} = \frac{H_m - H_{\Delta W}}{x_m - z_W}$$

Este resultado nos sugiere que sobre la línea que conecta el punto de líquido saturado en la etapa n , $(x_n, H_{L,n})$ y el punto de diferencial en la etapa de enriquecimiento $(z_D, H_{\Delta D})$, se encuentra el punto asociado al flujo de vapor proveniente de la etapa siguiente (y_{n+1}, H_{n+1}) , procedimiento que también se verifica para las composiciones y entalpias de las etapas m y el punto de diferencia para la zona de despojamiento $(z_W, H_{\Delta W})$. Teniendo en cuenta que los efluentes de cada etapa (L_n, G_n) estarán en equilibrio,

$$y_n = \frac{\gamma_1 P_{1,(T)}^{sat}}{P} \cdot x_n$$

Dato que también se cumple para la zona de despojamiento. Debido a que tenemos un condensador total, entonces

$$y_1 = x_0 = z_D$$

Luego, vemos que

$$x_1 = \frac{P}{\gamma_1 P_{1,(T)}^{sat}} \cdot y_1$$

Y, por lo tanto, se puede obtener la composición del vapor de la siguiente etapa a partir de

$$\frac{H_{G,2} - H_{\Delta D}}{y_2 - z_D} = \frac{H_1 - H_{\Delta D}}{x_1 - z_D}$$

Teniendo en cuenta que $H_{G,n} = \varphi_D(y_n)$, entonces encontramos una ecuación de la cual despejar la composición de la siguiente etapa,

$$f_D(y_2) = \frac{H_{G,2} - H_{\Delta D}}{y_2 - z_D} - \frac{H_1 - H_{\Delta D}}{x_1 - z_D} = 0$$

Una vez despejada esta composición, sabemos que el líquido en esa etapa volverá a estar en equilibrio con y_2 , y así sucesivamente se obtienen las composiciones de las etapas para la zona de enriquecimiento. Cabe resaltar que este procedimiento se hace hasta si $x_n < x_f$, donde x_f corresponde a la composición del líquido saturado que está sobre la línea recta conecta los puntos F , D y W , debido a que a partir de esa composición se empezaría la zona de despojamiento, y el cálculo se empezaría a hacer con la diferencial ΔW .

$$x_m = \frac{P}{\gamma_1 P_{1,(T)}^{sat}} \cdot y_m$$

$$f_W(y_{m+1}) = \frac{H_{G,m+1} - H_{\Delta W}}{y_{m+1} - z_W} - \frac{H_m - H_{\Delta W}}{x_m - z_W} = 0$$

Para determinar los flujos se realiza los balances de flujos y de componentes, partiendo de que se conocen las concentraciones en la entrada y en las salidas de la torre, además del flujo en la alimentación, siendo estos datos suministrados por el enunciado del problema.

$$F - D = W$$

$$F \cdot z_F = D \cdot x_D + W \cdot x_W \rightarrow F \cdot z_F = D \cdot x_D + (F - D) \cdot x_W \rightarrow D = F \cdot \frac{z_F - x_D}{x_W - x_D}$$

De acuerdo con las ecuaciones anteriormente planteadas, se puede obtener entonces los valores para los flujos de destilado y de residuo.

Para iniciar el cálculo de los flujos para cada etapa se parte de la idea de que las concentraciones de ambas fases en cada una de las etapas se conocen gracias a el procedimiento realizado en la determinación del número de estas.

Una vez se obtienen estos flujos, se busca calcular los flujos de cada etapa, para esto se divide la columna en las secciones de enriquecimiento y despojamiento, a las cuales se res realiza el balance de flujos y componente respectivo.

Balance en la zona de enriquecimiento:

$$V_{n+1} - L_n = D$$

$$V_{n+1} \cdot y_{n+1} - L_n \cdot x_n = D \cdot x_D$$

Teniendo los balances, se dice que se conocen cada una de las variables menos el flujo de líquido y vapor, por lo tanto, se puede solucionar el sistema de ecuaciones lineales. De esta manera, se despejan las variables.

$$L_n = D \cdot \frac{x_D - y_{n+1}}{y_{n+1} - x_n}$$

$$V_{n+1} = L_n + D$$

De esta forma, se conocen cada uno de los flujos en las etapas de la zona de enriquecimiento.

Balance en la zona de despojamiento:

$$L_m - V_{m+1} = W$$

$$L_m \cdot x_m - V_{m+1} \cdot y_{m+1} = W \cdot x_W$$

Teniendo los balances, se dice que se conocen cada una de las variables menos el flujo de líquido y vapor, por lo tanto, se puede solucionar el sistema de ecuaciones lineales. De esta manera, se despejan las variables.

$$L_m = W \cdot \frac{y_{m+1} - x_W}{y_{m+1} - x_m}$$

$$L_m - W = V_{m+1}$$

De esta forma, se conocen cada uno de los flujos en las etapas de la zona de despojamiento.

Una vez se obtienen cada uno de los flujos, se puede realizar una gráfica que muestre como cambian estos a medida que avanza el número de etapas.

Cálculo de calores en el condensador y rehervidor en la segunda torre de destilación

Se observa el gráfico entalpía contra concentración, en la que se evidencia que el calor del condensador se calcula de la siguiente manera:

$$Q_C = D \cdot (H_{\Delta D} - h_{sat. liq}(x_D))$$

El valor de $H_{\Delta D}$ se obtiene a partir de la relación de reflujo de operación y $h_{sat. liq}$ se calcula como la entalpía del líquido en saturación para la concentración x_D .

Para el caso del calor del rehervidor se realiza el mismo análisis.

$$Q_R = W \cdot (h_{sat. liq}(x_W) - H_{\Delta W})$$

El valor de $H_{\Delta W}$ se obtiene a partir de la regla de la palanca entre la entalpía de alimentación y la entalpía $H_{\Delta D}$ y $h_{sat. liq}$ se calcula como la entalpía del líquido en saturación para la concentración x_W .

Análisis y resultados

Destilación instantánea

Respecto a la destilación instantánea que tiene como objetivo tratar de separar el propano del metilciclohexano y el heptano, por medio de una disminución de presión a 70 kPa, se obtuvieron los siguientes resultados.

| RESULTADOS DESTILACIÓN INSTANTÁNEA | |
|---|----------|
| $F_1(kmol/h)$ | 907.18 |
| $z_{propano}$ | 0.2000 |
| $z_{metilciclohexano}$ | 0.3500 |
| $z_{heptano}$ | 0.4500 |
| $S_1(kmol/h)$ - Destilado | 153.1214 |
| $y_{propano}$ | 0.8950 |
| $y_{metilciclohexano}$ | 0.0460 |
| $y_{heptano}$ | 0.0590 |

| | |
|--|----------|
| $F_2(kmol/h)$ - Fondos | 754.0586 |
| $x_{propano}$ | 0.0589 |
| $x_{metilciclohexano}$ | 0.4117 |
| $x_{heptano}$ | 0.5294 |

Tabla 4. Resultados destilación instantánea

Como es de esperarse, la mayoría del propano que entra a la torre de destilación instantánea sale por la corriente S1, ya que esta sale en forma de gas gracias a su baja presión de vapor, dando como resultado una cantidad significativa de metilciclohexano y heptano en la corriente de despojamiento, cabe resaltar que se obtiene un flujo mayor en la zona de despojamiento puesto que en el flujo de entrada las cantidades de los dos compuestos más pesados son significativamente mayores en proporción respecto al propano, por lo tanto, se puede concluir respecto a esta operación unitaria, que realizar la destilación instantánea fue acertado, ya que la separación que se logra es suficientemente eficiente pues en el flujo S1 la concentración de propano es 0.895 y en el flujo F2 se obtiene 0.0589.

Extracción

Con las condiciones señaladas anteriormente y 1.2 veces la relación de reflujo mínima se ha obtenido lo siguiente:

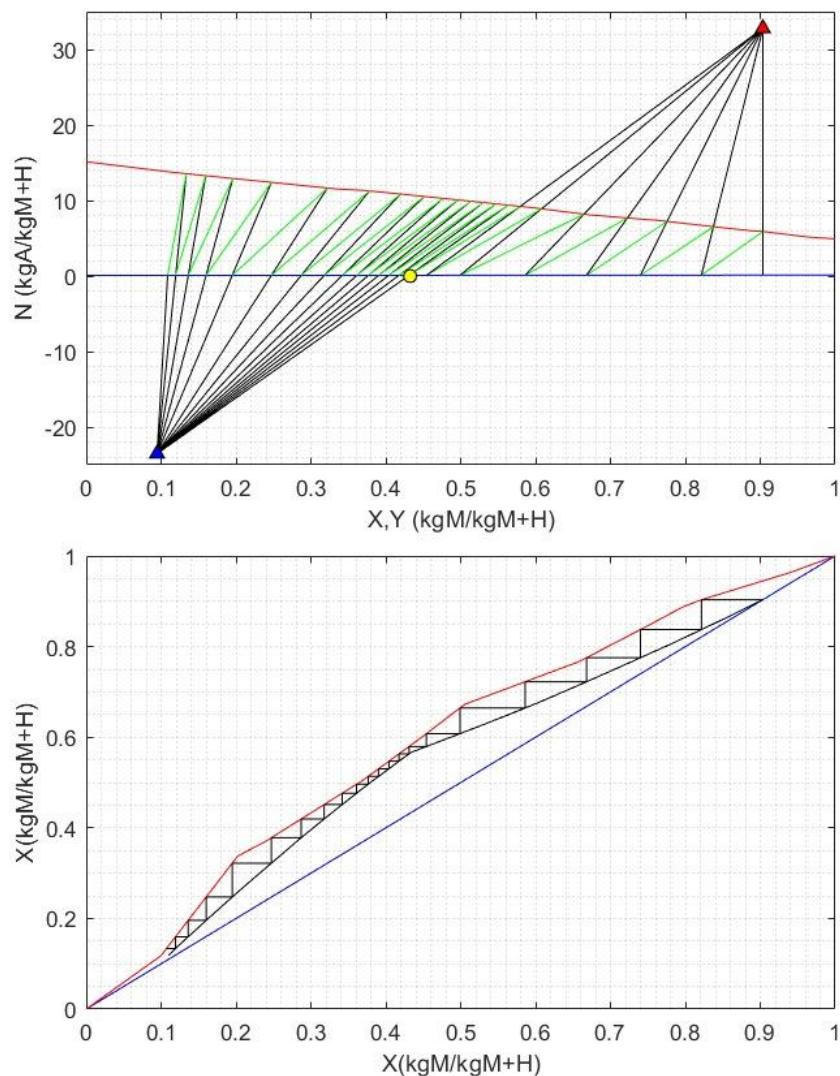


Figura 21. Representación de las etapas necesarias para la extracción en los diagramas X-Y y N-X, Y

Es destacable el gran número de etapas necesarias para la extracción (21), esta elevada cifra se debe a diversos factores. Por un lado, la curva de equilibrio en X-Y no se aleja mucho de la línea de 45°, por lo que inevitablemente la operatoria se ubica muy cerca de ella. Esto se ve incrementado también por la baja relación de reflujo trabajada y por algunas zonas en las que la curva de equilibrio toma una forma recta y no curva.

Es necesario destacar que para la entrada de la extracción se ha supuesto una presión de 1 atm y 25 °C.

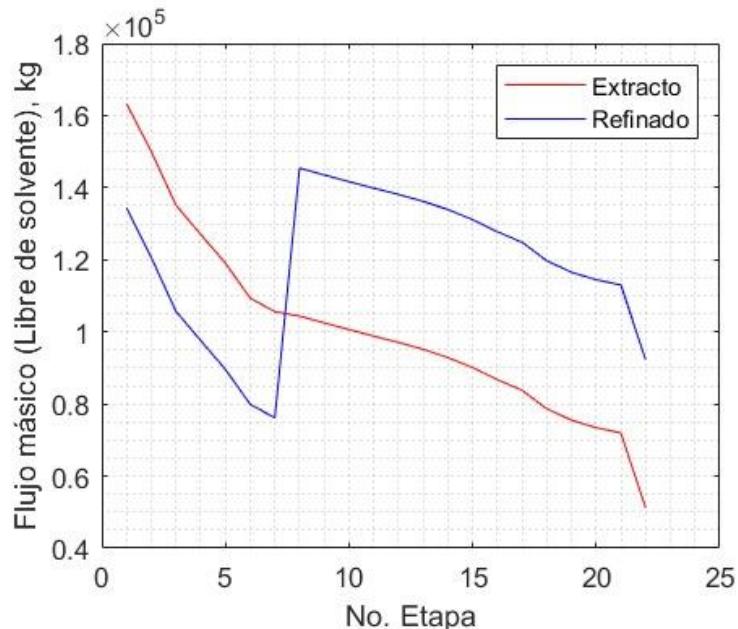


Figura 22. Representación de los flujos másicos en base libre en el equipo de extracción

En la figura 22 se muestran los flujos másicos en base libre a lo largo del equipo. Es de destacar el aumento del flujo del refinado a la altura de la entrada del alimento, el cual se debe igualmente a la incorporación al refinado de gran parte del heptano y una parte considerable del metilciclohexano de la entrada. Igualmente, el flujo de extracto aumenta desde la entrada hacia la izquierda, puesto que a este se ha incorporado gran parte de la entrada (principalmente metilciclohexano).

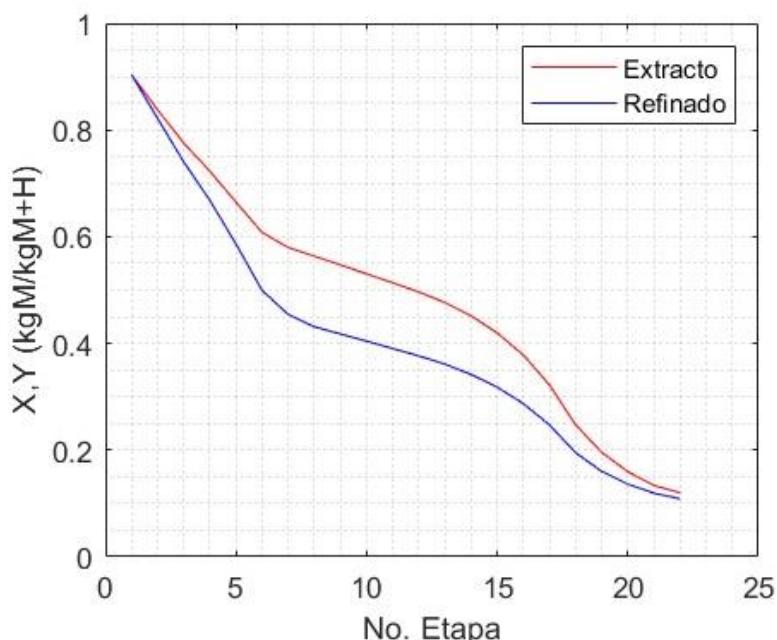


Figura 23. Representación de las composiciones en base libre en el equipo de extracción

Adicionalmente, en la siguiente tabla se presentan los valores de los principales flujos másicos calculados:

| RESULTADOS DESTILACIÓN INSTANTÁNEA | |
|------------------------------------|--------|
| $F_2(\text{ton}/\text{h})$ | 70.48 |
| $S(\text{ton}/\text{h})$ | 1024.9 |
| $A(\text{ton}/\text{h})$ | 5.49 |
| $Z(\text{ton}/\text{h})$ | 32.03 |
| $R_{Np}(\text{ton}/\text{h})$ | 100.31 |
| $E(\text{ton}/\text{h})$ | 142.02 |
| $C(\text{ton}/\text{h})$ | 7.091 |
| $R_0(\text{ton}/\text{h})$ | 151.07 |
| $B(\text{ton}/\text{h})$ | 983.88 |
| $E_1(\text{ton}/\text{h})$ | 1125.9 |
| $V(\text{ton}/\text{h})$ | 68.28 |
| No. etapas | 21 |

Tabla 5. Resultados de algunos flujos

Columna de destilación

En esta operación el número de etapas que se requerirán será relativamente bajo debido a que la corriente a separar será el extracto de salida de la operación de extracción liq-liq, la cual cuenta con una gran proporción de anilina, generando que la curva operatoria en la zona de enriquecimiento se encontré más alejada de la curva de equilibrio, dando como resultado una disminución del número de etapas en comparación de que se hubiera tenido una corriente de alimentación con menor proporción de anilina. La distribución del número de etapas obtenidas se puede ver a continuación junto con las curvas de operación y equilibrio.

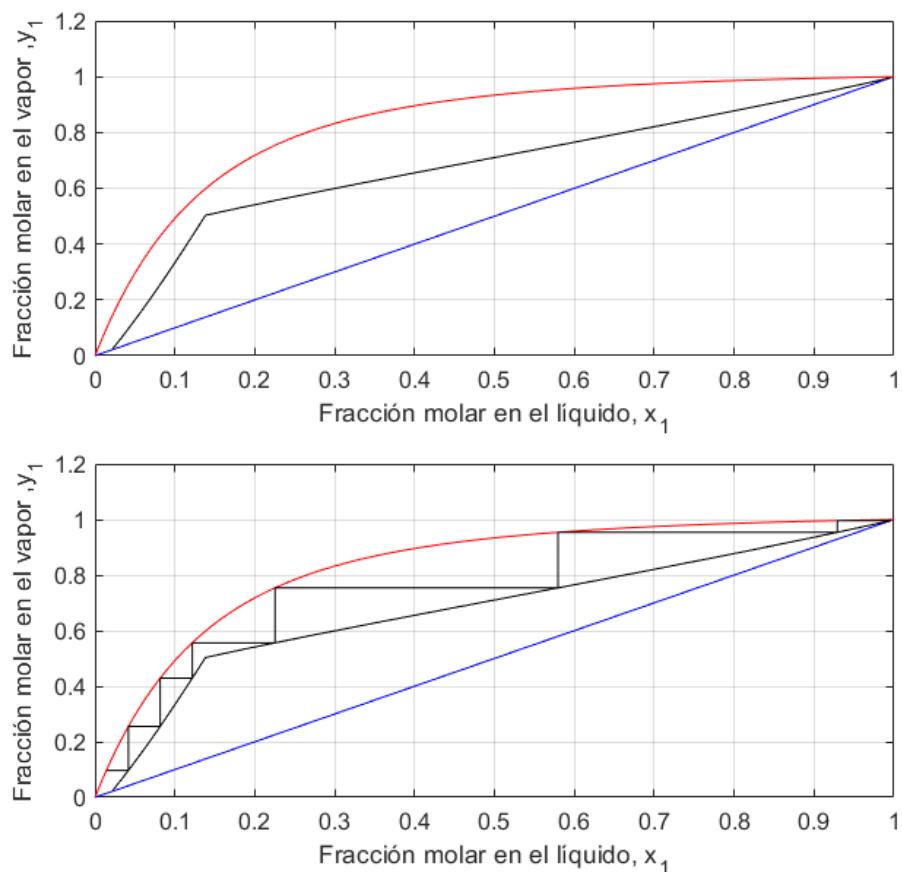


Figura 24. Curva de operación y número de etapas para una relación de 1.5 veces el reflujo mínimo.

Por otra parte, este efecto genera que la zona de enriquecimiento sea más sensible a los cambios en comparación con la de agotamiento, debido a gran diferencia que se presenta entre las etapas. Esto se ven representado también al revisar la representación de estas en el diagrama de entalpias, como se presenta a continuación:

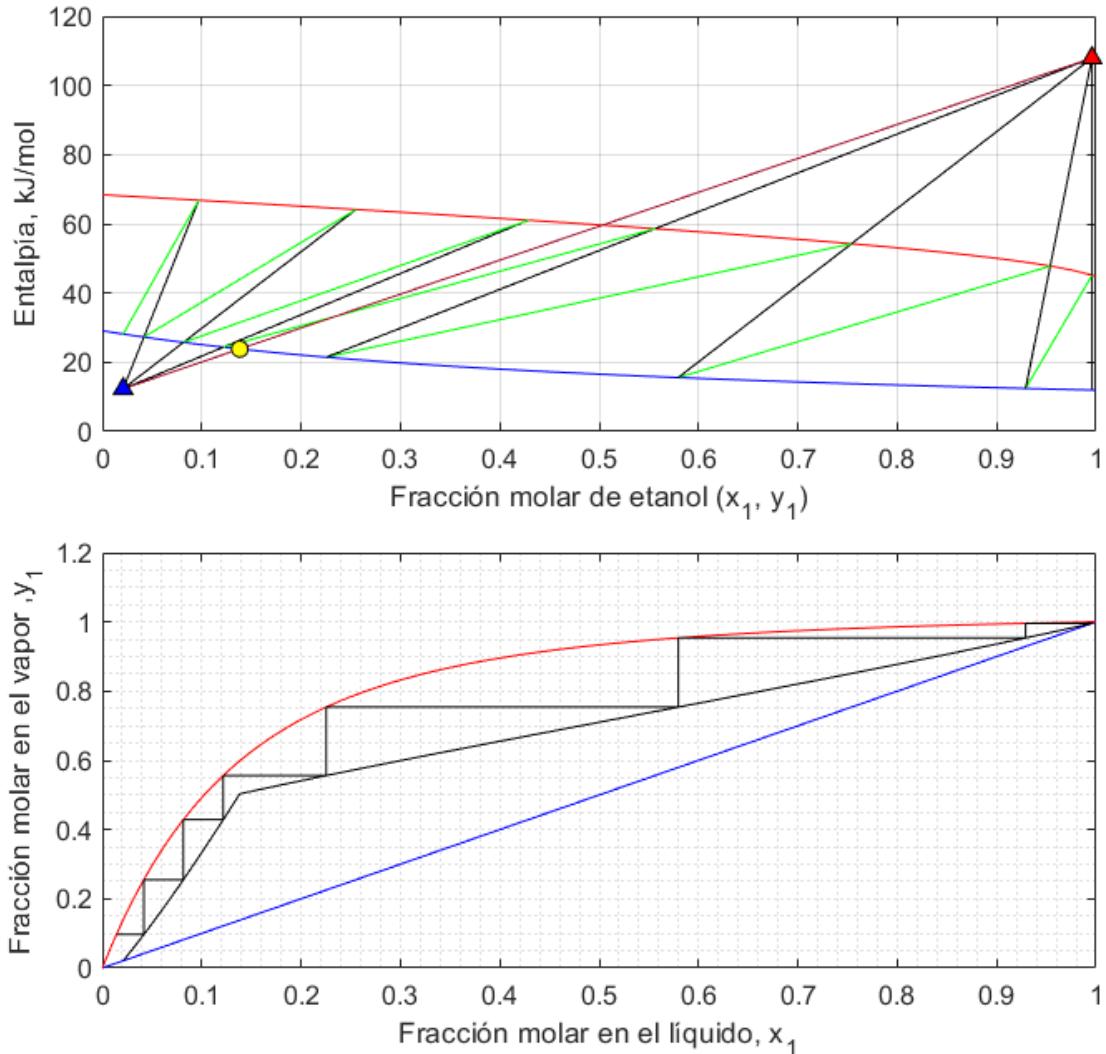


Figura 25. Representación de las etapas en los diagramas H-x,y, x-y.

Además, debido a que la corriente de alimentación está compuesta en gran mayoría por anilina y esta es la fase pesada, significará un gran incremento en flujo de la fase líquida conforme nos acerquemos a la transición entre la zona de enriquecimiento y agotamiento. Además de que también representará el sector donde habrá mayor intercambio de la proporción de metilciclohexano entre las dos fases. Esto está representado mediante las siguientes gráficas:

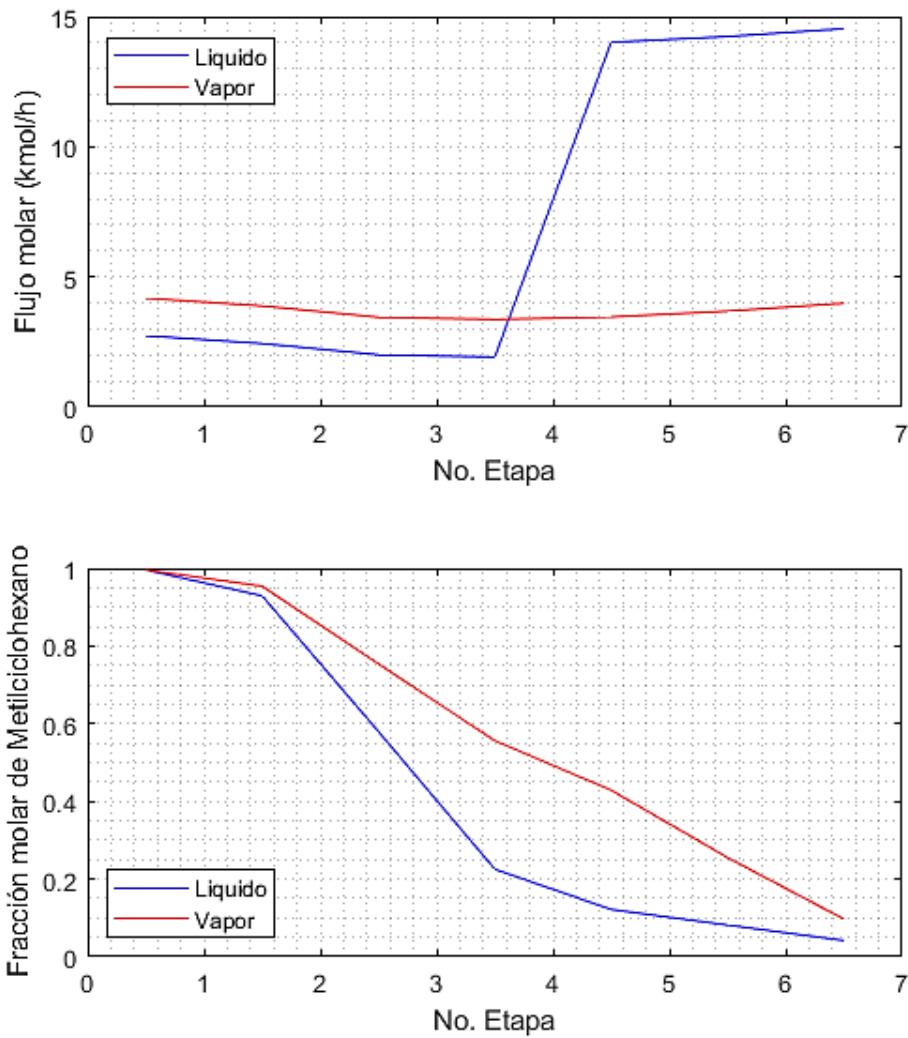


Figura 26. Distribución de flujos y de las fracciones molares en líquido y vapor a través de la torre.

Como se puede ver, la gran proporción de anilina en el alimento causa que en la columna de destilación tenga un sector de cambios bruscos y por ende sea más sensible a la variación de parámetros en esta operación.

Agentes de separación

Para este proceso en cuestión se necesitan tres agentes de separación, para la columna de destilación instantánea sería la caída de presión, que es llevada desde 239.1792 kPa a 70 kPa por medio de una válvula de estrangulación, con la cual se logró separar gran parte del propano. Así mismo, una vez sale el flujo de despojamiento de esta torre, la presión se incrementa la presión a 101.325 kPa, con el fin de realizar la extracción líquido-líquido a presión atmosférica.

El segundo agente de separación usado es la anilina, con la cual se logra separar el metilciclohexano y el heptano. Para este caso en específico se requiere una corriente de 58.9518 kmol/h, puesto que la recuperación de esta para su recirculación no es perfecta, por lo tanto, se requiere de su suministro. Las condiciones de esta corriente de flujo con las condiciones atmosféricas 25 °C y 101.325 kPa.

Por último, el agente de separación en forma de calor es usado en la torre de destilación de platos usada para calcular la cantidad de metilciclohexano separado de la anilina. Para este caso se usaron tres intercambiadores de

calor, uno antes de entrar a la torre, el cual lleva la solución de 25 °C a 145.17 °C, esto con el fin de llevar la solución al punto de burbuja, siendo esta 18885 kJ/h. Segundo, el rehervidor, que tiene como fin otorgar la energía necesaria para realizar la separación y está ubicado en la base de la torre, con una cantidad de energía otorgada de 166960000 kJ/h. El tercero es el condensador ubicado en la cima de la torre, el cual realiza el reflujo hacia la torre, con una cantidad de energía retirada de 138570000 kJ/h.

Salidas

Para el procedimiento planteado se lograron tres salidas, cada una busca obtener la mayor cantidad posible del compuesto a separar. A continuación, se muestra una tabla con sus flujos molares y sus respectivas composiciones molares.

| SALIDAS | | | | | |
|-----------------------|----------|-----------------------|---------|-----------------------|----------|
| $S_1(kmol/h)$ | 153.1214 | $S_2(kmol/h)$ | 72.0985 | $S_3(kmol/h)$ | 731.3841 |
| $x_1 \text{ propano}$ | 0.8950 | $x_2 \text{ propano}$ | - | $x_3 \text{ propano}$ | 0.0607 |
| $x_1 \text{ metil}$ | 0.0460 | $x_2 \text{ metil}$ | 0.8998 | $x_3 \text{ metil}$ | 0.0951 |
| $x_1 \text{ heptano}$ | 0.0590 | $x_2 \text{ heptano}$ | 0.0962 | $x_3 \text{ heptano}$ | 0.7640 |
| $x_1 \text{ anilina}$ | - | $x_2 \text{ anilina}$ | 0.0040 | $x_3 \text{ anilina}$ | 0.0802 |

Tabla 6. Salidas del sistema con sus respectivas composiciones molares.

Conclusiones

Al momento de diseñar un proceso, independientemente si se trata de un proceso de separación o no, se debe tener presente el carácter fundamental de las propiedades químicas y físicas de los compuestos a tratar, puesto que de esto depende los procesos que serán llevados a cabo con el fin de obtener el resultado a necesitar una vez se finaliza el procedimiento. Un claro ejemplo de esto es la destilación instantánea, ya que, al conocer la alta volatilidad del propano, se llegó a la hipótesis de usar este tipo de destilación en vez de una torre con platos, lo cual hubiera sido innecesario, dando como resultado una separación efectiva gracias al conocimiento de esta característica.

En sistemas de equilibrio L-L complejos como este o con solubilidad parcial limitada es imprescindible analizar las distintas posibilidades para el equipo de extracción, ya que esto es clave para determinar la capacidad de separación en el sistema. En este caso, el uso de reflujos tanto de extracto como de refinado fue un factor fundamental para lograr obtener una separación que de otra manera (sin reflujos o con solo reflujo de extracto) no hubiese sido posible.

Referencias

- BROWN, T. F. (1946). Distribution in hydrocarbon-Sovent System. *University of Birmingham, Englan*, 4.
- Fenske, K. V. (1936). The System Methylcyclohexane-Aniline-n-Heptane. *ABSORPTION AND EXTRACTION SYMPOSIUM*, 8.
- Green, D. W. (2019). *Perry's chemical engineers' handbook*. McGraw-Hill Education.
- Radu C. Racovita, A. V. (2019). A Convenient Hybrid Method for Obtaining Liquid-Liquid Equilibrium Data in Ternary Systems. *Journal of chemical & engineering data*.