

## Diseño columna de destilación

Deyver Esteban Rivera Rodriguez

Grupo 2  
Junio 03, 2022

### Enunciado

Se desea destilar una mezcla **Líquido Subenfriado** de **Ciclohexano** y **Tolueno** en una torre de destilación que operará a una presión total de 1 atmósfera empleando un condensador y reboiler totales. La alimentación es de 150 moles por hora y su composición es 45% mol de **Ciclohexano** y 55% mol de **Tolueno**. Se desea obtener un destilado que contenga 96% mol del componente más ligero y un residuo con el 96% mol del componente más pesado. Reflujo de 1.4 veces el mínimo. Suposiciones Volatilidad relativa constante y flujo molar constante.

### Elaboración de los diagramas de equilibrio

Cuando tenemos un equilibrio de fases los potenciales químicos de las sustancias en cada una de las fases deben ser iguales

$$\mu_{i(T,P)}^{vap} = \mu_{i(T,P)}^{liq} \rightarrow f_{i(T,P)}^{vap} = f_{i(T,P)}^{liq}$$

Por lo general la fase condensada tiene una alta probabilidad de presentar fuerzas intermoleculares de atracción y/o repulsión, generando en algunos casos una desviación de la mezcla ideal que no contempla estos enlaces secundarios. Por esta razón, lo más apropiado para describir la fugacidad del líquido es mediante la corrección de la mezcla ideal (Ley de Raoult) con la multiplicación por un parámetro de actividad ( $\gamma_i$ )

$$f_{i(T,P)}^{liq} = x_i \gamma_i P_{i(T)}^{sat}$$

Donde  $\gamma_i$  es el coeficiente de actividad y

$P_i^{sat}$  es la presión de vapor a la temperatura  $T$ .

Sin embargo, en la fase gaseosa vemos que la distancia entre moléculas será mayor, y el movimiento relativo de cada una de ellas impedirían o harían complicados la interacción previamente mencionada, razón por la cual es posible asumirla como mezcla de gases ideales. Es decir que las fugacidades de la especie en la fase gaseosa serán similares a su presión parcial en la fase gaseosa

$$f_{i(T,P)}^{vap} = P_i = y_i P$$

Y, por lo tanto, el equilibrio de fases para cada sustancia y para la mezcla serán, respectivamente

$$y_i P = x_i \gamma_i P_{i(T)}^{sat}$$

$$\sum_{i=0}^n y_i P = P = \sum_{i=0}^n x_i \gamma_i P_{i(T)}^{sat}$$

Como tenemos una mezcla binaria, el equilibrio se simplifica a,

$$P = x_1 \gamma_1 P_{1,(T)}^{sat} + x_2 \gamma_2 P_{2,(T)}^{sat}$$

Como tenemos una mezcla de hidrocarburos donde no hay elementos con pares de electrones no enlazantes o de alta electronegatividad, no habrá una deslocalización de electrones tan fuerte como para tratarlas como sustancias polares haciendo que gran parte de las fuerzas secundarias (diferentes de los enlaces covalentes) tengan una menor repercusión. Con base en esto, como una primera aproximación previa a la simulación en Aspen, se supondrá la fase líquida también como una mezcla ideal, y por tanto

$$y_i P = x_i \gamma_i P_{i,(T)}^{sat}$$

$$P = x_1 P_{1,(T)}^{sat} + x_2 P_{2,(T)}^{sat}$$

La sustancia de menor punto de ebullición es el ciclohexano (1) y la de mayor será el tolueno (2), cuyas presiones de saturación se calcularán con la expresión de Antoine

$$\log P_{i,(T)}^{sat} = A_i - \frac{B_i}{T + C_i}, \quad P^{sat} \text{ en bar y } T \text{ en } ^\circ\text{C}$$

	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>
<b>1-Tolueno</b>	4.05004	1327.62	217.625
<b>2-Ciclohexano</b>	3.93002	1182.774	220.618

Tabla 2. Parámetros de Antoine para Tolueno y Ciclohexano. Perrys Chemical Engineering Handbook 8 ed.

Siendo posible calcular la composición de Tolueno a partir de una dato  $T$  e temperatura que cumpla  $T_{eb,CH} < T < T_{eb,T}$  y, posteriormente, la composición del vapor en equilibrio a dicha temperatura mediante las siguientes ecuaciones

$$P = x_1 P_{1,(T)}^{sat} + (1 - x_1) P_{2,(T)}^{sat}$$

$$x_1 = \frac{P - P_{2,(T)}^{sat}}{P_{1,(T)}^{sat} - P_{2,(T)}^{sat}}$$

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

Obteniendo los siguientes diagramas de equilibrio

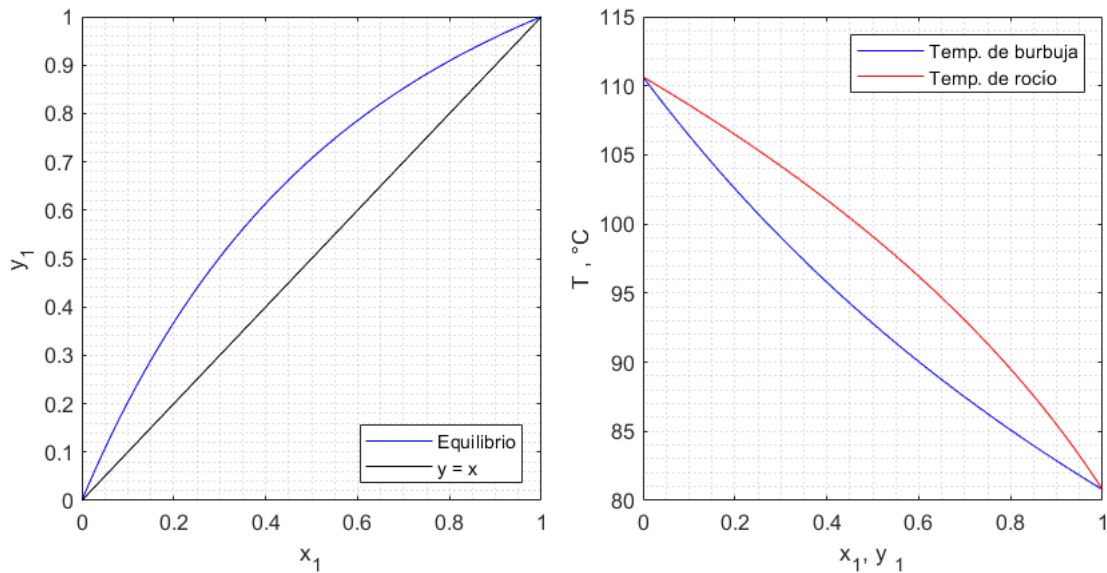


Figura 1. Diagramas de equilibrio contruidos para el tolueno – ciclohexano

### Cálculo del reflujo mínimo ( $R_m$ )

Con las suposiciones realizadas por McCabe-Thiele donde el flujo de vapor y agua permanece prácticamente constante en la sección superior e inferior de la columna, se realiza el balance comprendido en el volumen de control mostrado en la figura #.

Balance global

$$V = L + D$$

Balance por especie

$$V y_{n+1} = L x_n + D x_D$$

$$y_{n+1} = \frac{L}{V} x_n + \frac{D}{V} x_D$$

Relacionamos los dos balances

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= \frac{L}{L+D} x_n + \frac{D}{L+D} x_D \\ &= \frac{\frac{L}{D}}{\frac{L}{D} + 1} x_n + \frac{1}{\frac{L}{D} + 1} x_D \end{aligned}$$

Y, teniendo en cuenta que  $R = \frac{L}{D}$ , entonces

$$\rightarrow y_{n+1} = \frac{R}{R+1} x_n + \frac{1}{R+1} x_D$$

De igual manera también se puede plantear un balance para la zona inferior de la columna de destilación, encontrando

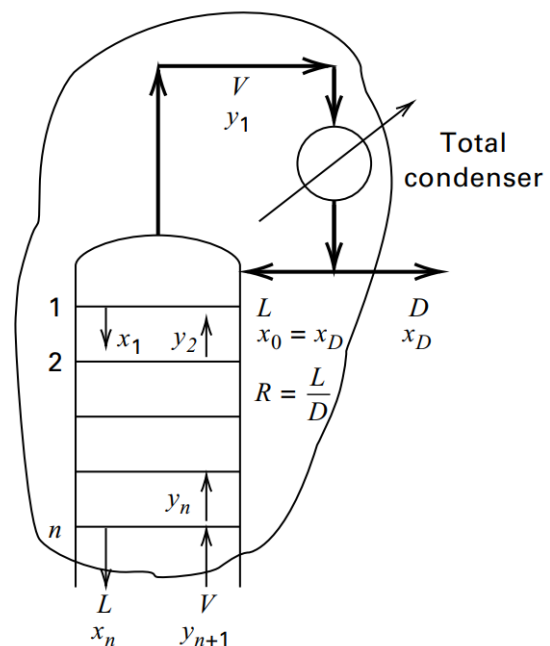


Figura 2: Volumen de control para el balance de materia en la parte superior de la columna.

Balance global

$$\bar{L} = \bar{V} + B$$

Balance por especie

$$\bar{L} x_m = \bar{V} y_{m+1} + B x_B$$

$$y_{m+1} = \frac{\bar{L}}{\bar{V}} x_m - \frac{B}{\bar{V}} x_B$$

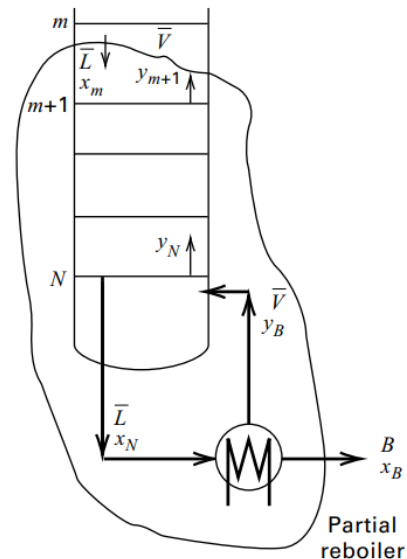


Figura 3: Volumen de control para el balance de materia en la parte inferior de la columna

Ahora, realizando un balance de materia en el plato de alimentación tenemos que

$$q = \frac{\bar{L} - L}{F} = 1 + \frac{\bar{V} - V}{F}$$

Balance global

$$F + L + \bar{V} = \bar{L} + V$$

$$V - \bar{V} = L - \bar{L} + F$$

Se reescribe el balance a

$$y = \frac{q}{q-1} x - \frac{1}{q-1} z_F$$

El balance por especies se realiza teniendo en cuenta que las composiciones tanto para líquido que proviene de la parte superior como el de la parte inferior en dicho punto son iguales, así como también sucede con la fase vapor, luego

$$F z_F + L x + \bar{V} y = \bar{L} x + V y$$

$$y(\bar{V} - V) = (\bar{L} - L)x - F z_F$$

$$\rightarrow y = \frac{\bar{L} - L}{\bar{V} - V} x - \frac{F}{\bar{V} - V} z_F$$

Relacionamos los dos balances y

$$y = \frac{\bar{L} - L}{\bar{L} - L - F} x - \frac{F}{\bar{L} - L - F} z_F$$

$$y = \frac{\frac{\bar{L} - L}{F}}{\frac{\bar{L} - L}{F} - 1} x - \frac{1}{\frac{\bar{L} - L}{F} - 1} z_F$$

Definiendo el parámetro

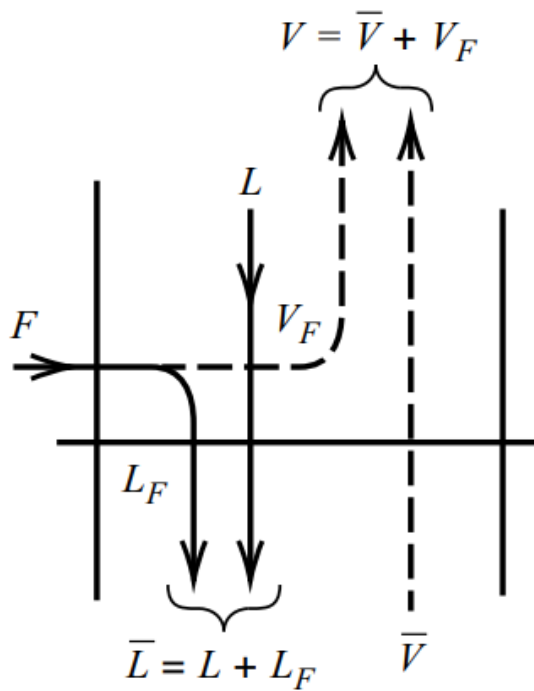


Figura 4 : Volumen de control para el balance de materia en la etapa de alimentación.

Cabe resaltar que  $q$  dependerá del estado en el que ingresa la alimentación ya que cambiará la proporción entre líquidos u vapores, llegando a tener los escenarios que se ven en la figura 5 y en la tabla 2.

Tabla 2: Valores de  $q$  dependiendo el estado de entrada.

Líquido subenfriado	$q > 1$
Líquido saturado	$q = 1$
Mezcla Líquido/Vapor	$0 < q < 1$
Vapor saturado	$q = 0$
Vapor sobrecalentado	$q < 0$

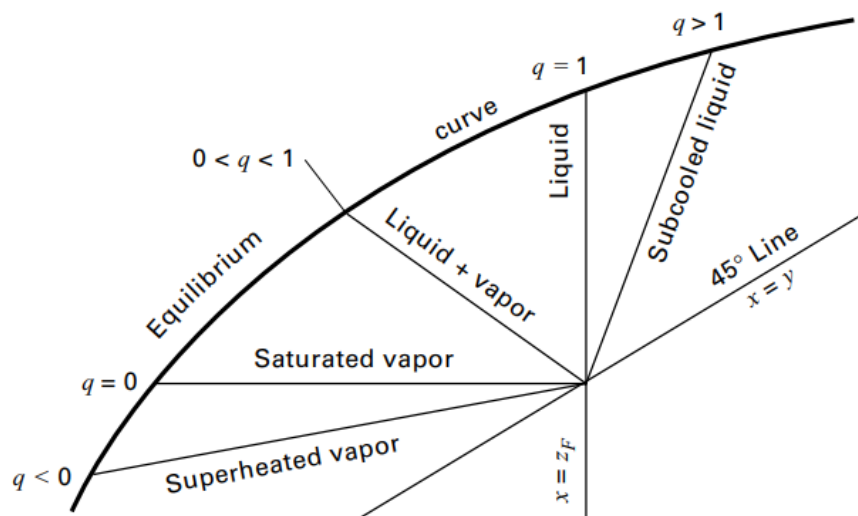


Figura 5: Volumen de control para el balance de materia en la etapa de alimentación.

Como para el ejercicio se tiene liquido subenfriado, entonces supondremos un valor de

$$q = 1.5$$

Y por tanto, la ecuación del balance en el plato de alimentación se ve como

$$y = 3x - 2z_F$$

Y calculamos la intersección con la curva de equilibrio y trazamos una línea que conecte este punto de intersección con las concentraciones del destilado y con la composiciones de fondos

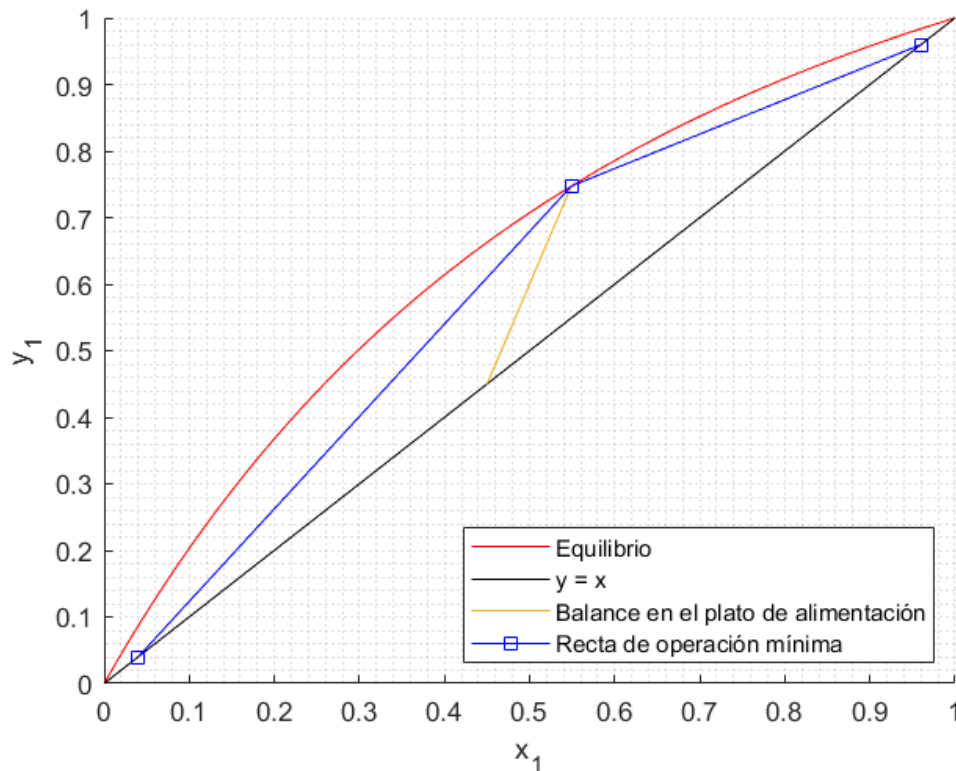


Figura 6: Gráfico de operación mínima.

Y, por el balance en la zona de enriquecimiento, se calcula la pendiente con las composiciones previamente adquiridas

$$\frac{R_m}{R_m + 1} = \frac{y_{BPA} - x_{D,1}}{x_{BPA} - x_{D,1}} = m = \frac{0.7473 - 0.96}{0.5491 - 0.96} = 0.5176$$

$R_m$ : Relación de reflujo mínima.

$x_{BPA}, y_{BPA}$ : Composiciones intersección balance plato de alimentación y equilibrio.

Y, por tanto, se puede encontrar la relación de reflujo mínimo

$$R_m = \frac{m}{1 - m} = \frac{0.5176}{1 - 0.5176} = 1.0729$$

## Cálculo de la curva de operación y de las etapas

Por los datos del enunciado se sabe que el reflujo de operación es 1.4 el mínimo, es decir

$$R = \alpha R_m = 1.4 \cdot 1.0729 = 1.5020$$

Con este reflujo, se puede obtener la curva de operación en la zona de enriquecimiento,

$$y = \frac{R}{R+1} x + \frac{1}{R+1} x_D = \frac{1.502}{1.502+1} x + \frac{0.96}{1.502+1}$$
$$\rightarrow y = 0.60 x + 0.384$$

Y se calcula la intersección de esta recta con la línea del balance de materia en el plato de alimentación ( $x_{int}$ ), encontrando

$$x_{int} = 0.5349$$

Y se trazan las rectas que conectan este punto con el destilado y fondos

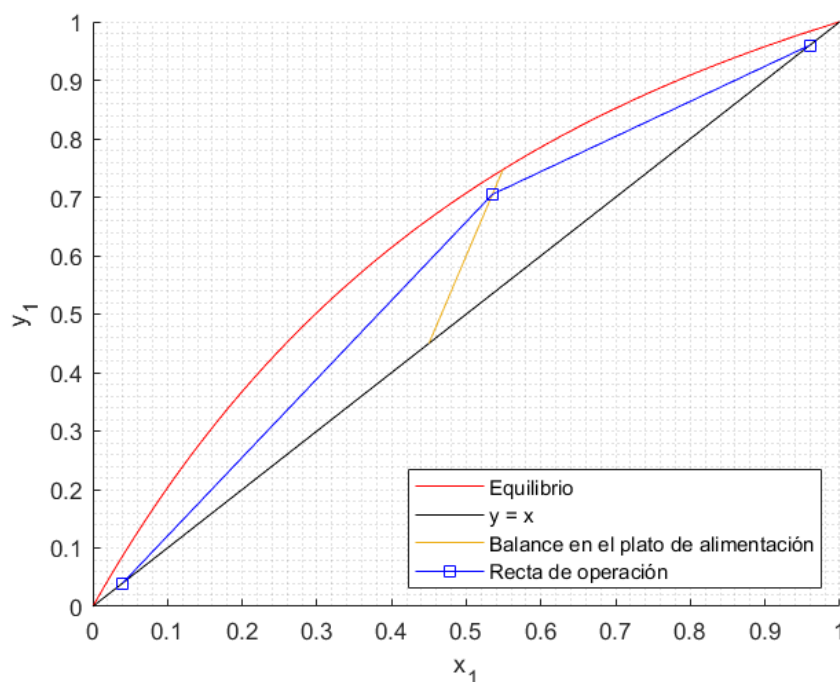


Figura 7: Gráfico con recta de operación.

En cada etapa de equilibrio los efluentes, tanto líquido como vapor, salen en equilibrio, es decir,

$$y_n = \phi_{eq}(x_n)$$

Y justo debajo de plato, el vapor que viene de la etapa siguiente ( $y_{n+1}$ ) se encuentra sobre la curva de operación de esa sección, es decir

$$y_{n+1} = \phi_{ope}(x_n)$$

Y así se continúa hasta la parte inferior de la columna, donde la recta de operación cambiara según la zona en la que se esté tal y como se vieron en los balances de materia de la zona superior e inferior de la columna. De esta forma, este desarrollo entre equilibrio y operación se ve representado con triángulos debido a que se parte de  $x_0 = x_D$ , se mueve horizontalmente hasta encontrar las composiciones en el equilibrio y una vez allí se traza una línea vertical para buscar las composiciones en operación y así sucesivamente.

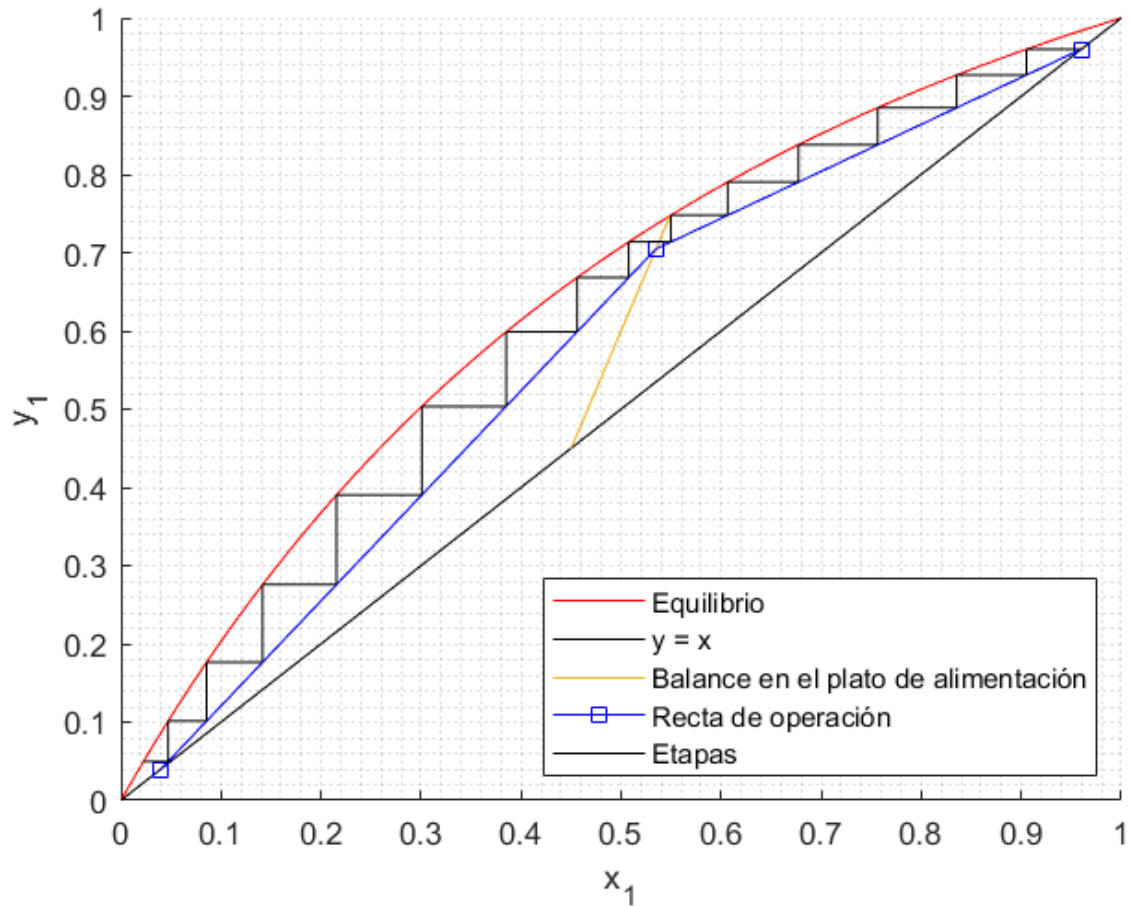


Figura 8: Gráfico con las etapas de equilibrio.

Como se ve en la figura 8, se obtienen 15 etapas de equilibrio.

### Mínimo número de etapas de equilibrio

Como se puede observar en la gráfica 6 y 7, a medida que se aumenta la relación de reflujo la curva de operación se aleja de la curva de equilibrio y, por tanto, las etapas de equilibrio. Entonces, se puede predecir que la cantidad mínima de etapas de equilibrio se conseguirán cuando  $R \rightarrow \infty$  que desemboca en que la recta de operación se convierta en la recta  $y = x$ , encontrando entonces un total de 8 etapas.



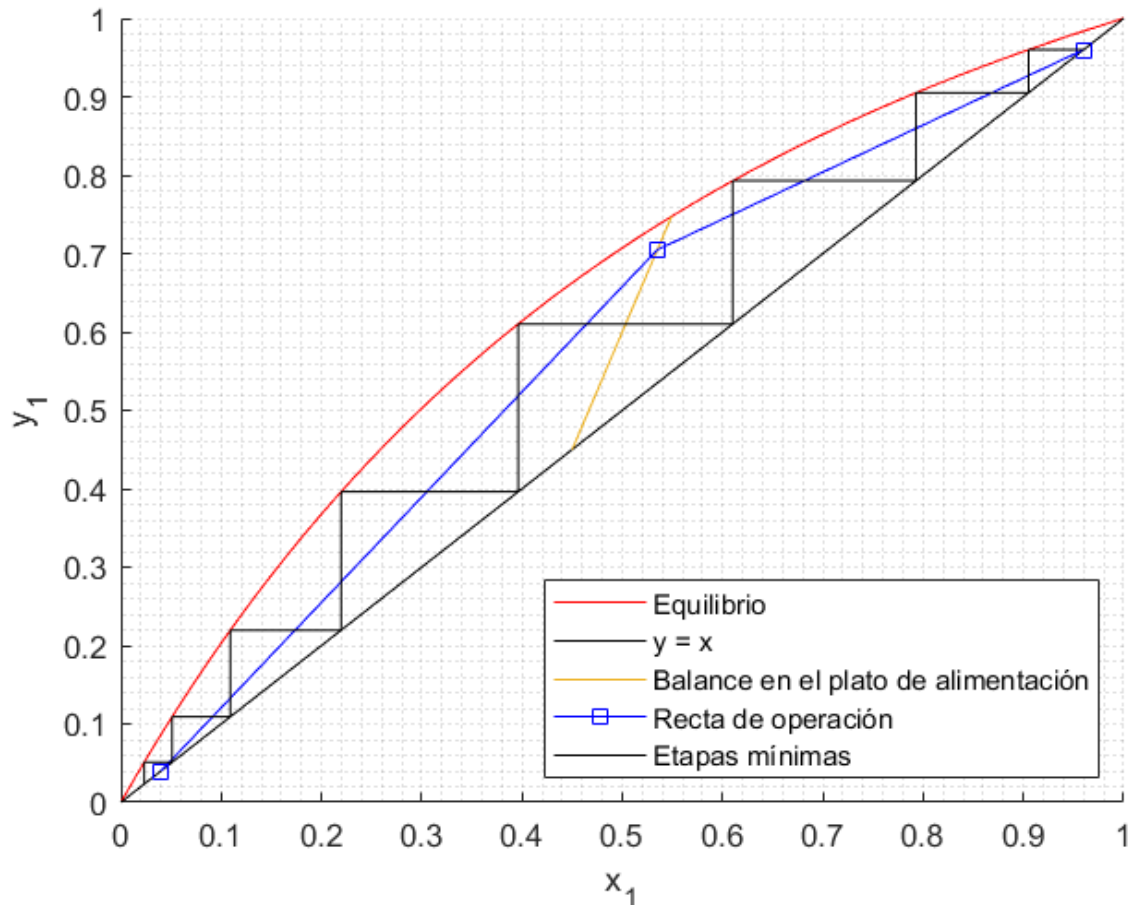


Figura 9: Gráfico con mínimo número de etapas de equilibrio.

## Carga de condensador y rehervidor

Para la carga del condensador y rehervidor es necesario realizar el balance de energía en cada una de estas unidades, razón por la cual es imprescindible definir cómo se realizará el cálculo de esta propiedad como se muestra a continuación

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

$$\Delta H_{l(x_1, T)} = x_1 \cdot C_{p1}^{liq} \cdot (T - T_{ref}) + (1 - x_1) \cdot C_{p2}^{liq} \cdot (T - T_{ref}) + \Delta H_{Tref}^E$$

Donde  $\Delta H^E$  representa la entalpía en exceso o desviación de la solución ideal para la mezcla líquida y  $\lambda$  es el calor de vaporización a la temperatura de referencia.

Realizamos el balance de energía en el rehervidor y tenemos

$$Q_{reb} + \bar{L} \cdot H_{l(x_N, T_N)} = \bar{V} \cdot H_{v(y_N, T_N)} + B \cdot H_{l(x_B, T_N)}$$

$$\rightarrow Q_{reb} = \bar{V} \cdot H_{v(y_N, T_N)} + B \cdot H_{l(x_B, T_N)} - \bar{L} \cdot H_{l(x_N, T_N)}$$

De igual manera

$$Q_{cond} + D \cdot H_{l(x_D, T_N)} + L \cdot H_{l(x_0, T_N)} = V \cdot H_{v(y_N, T_N)}$$

$$\rightarrow Q_{cond} = V \cdot H_{v(y_N, T_N)} - D \cdot H_{l(x_D, T_N)} - L \cdot H_{l(x_0, T_N)}$$

Para calcular los flujos molares realizamos los balances de materia pertinentes

$$F = D + B$$

$$Fz_F = Dx_D + Bx_B$$

$$\rightarrow D = F \frac{z_F - x_B}{x_D - x_B} = 66.85 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Y, entonces

$$B = F - D = 83.15 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Con la relación de reflujo vemos que

$$L = \frac{L}{D} \cdot D = R \cdot D = 100.41 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$V = L + D = 167.25 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Y también calculamos los flujos en la zona inferior

$$q = \frac{\bar{L} - L}{F} = 1 + \frac{\bar{V} - V}{F}$$

$$\rightarrow \bar{L} = L + q \cdot F = 325.41 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

$$\rightarrow \bar{V} = V + (q - 1) \cdot F = 242.25 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$$

Se reemplaza en los balances de energía y se obtiene

$$Q_{reb} = 7.7582 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{h}}$$

$$Q_{cond} = 4.9723 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{h}}$$

## Simulación

### Simulación torre de destilación empleando Soave-Redlich-Kwong y PSRK:

Inicialmente se debe especificar la temperatura de entrada de la corriente, que se puede calcular como

$$q = \frac{H_F - H_V^{eq}}{H_L^{eq} - H_V^{eq}}$$

En este caso las entalpías en el equilibrio se calculan con las ecuaciones presentadas anteriormente, pero en la temperatura de rocío ( $T_{dew}$ ) y de burbuja ( $T_{burb}$ ) a la composición en cuestión

$$q = \frac{H_{(x_F, T_F)} - H_{v(x_F, T_{dew}(x_1))}}{H_{v(x_F, T_{burb}(x_1))} - H_{v(x_F, T_{dew}(x_1))}}$$

Como se había estipulado  $q = 1.5$ , se tiene la composición de entrada y la relación entre las temperaturas de rocío y de burbuja (Fig 1) entonces la única variable por calcular es  $T_F$  la cual resulta teniendo un valor de

$$T_F \approx 6^\circ\text{C}$$

Con base en esto se estipulan los inputs necesarios para la corriente de entrada (Figura 11)

Component	Value
TOLUE-01	0,55
CYCLO-01	0,45
Total	1

Figura 11: Inputs de la corriente de alimentación.

Aspen Plus cuenta con varios modelos de cálculos de torres de destilación, uno de los modelos más simplistas y que arrojan mayor cantidad de resultados para la comparación es el modelo DSTWU que funciona bajo el método de Winn-Underwood-Gilliland, cuyo inputs serán el número de etapas o la relación de reflujo y los porcentajes de recuperación de la clave liviana (Ciclohexano) y la clave pesada (Tolueno) en la corriente del destilado. Con los datos brindados por el enunciado se pueden determinar los parámetros de las claves liviana y pesada, encontrando

$$LightKeyRecov = \frac{D (1 - x_D)}{F (1 - z_F)} = 0.9507$$

$$HeavyKeyRecov = \frac{D x_D}{F z_F} = 0.0324$$

Y la relación de reflujo de  $R = 1.502$  que fue calculada con el método McCabe-Thiele con los procedimientos previamente mostrados.

Key component recoveries	Value
Light key	
Comp	CYCLO-01
Recov	0,9507
Heavy key	
Comp	TOLUE-01
Recov	0,0324

Figura 12: Valores ingresados a la columna DSTWU.

**SRK:**

Se corre la simulación de la columna de destilación con el modelo SRK y se obtienen los resultados de la Figura 13. Donde se puede ver que también estima 15 etapas, pero ubica la de alimentación entre la etapa 8-9. También se determina una relación de reflujo mínima de 1.18336 que comparado con el calculado con este trabajo ( $R_{min} = 1.0729$ ) presenta una diferencia de 0.1105.

▶	Minimum reflux ratio	1,18336	
▶	Actual reflux ratio	1,502	
▶	Minimum number of stages	7,4572	
▶	Number of actual stages	14,9255	
▶	Feed stage	8,68372	
▶	Number of actual stages above feed	7,68372	
▶	Reboiler heating required	481,723	cal/sec
▶	Condenser cooling required	338,773	cal/sec
▶	Distillate temperature	81,217	C
▶	Bottom temperature	108,756	C
▶	Distillate to feed fraction	0,445635	
▶	HETP		

Figura 13: Resultados de la columna DSTWU empleando  $R=1.502$ .

Como la columna trabaja con 1.4 veces el reflujo mínimo, entonces la relación de reflujo de esta torre se debe cambiar a aquel que cumpla con esta condición, encontrando

$$R = 1.4 \cdot 1.18336 = 1.6567$$

Con el que se obtiene una relación de reflujo de  $\sim 1.65$  con una relación de reflujo mínimo de  $\sim 1.18$ , reduciendo una etapa teórica (Etapas  $\sim 14$ ) y la etapa de alimentación en el 8 (Fig. 14).

▶	Minimum reflux ratio	1,17904	
▶	Actual reflux ratio	1,65	
▶	Minimum number of stages	7,4572	
▶	Number of actual stages	14,0296	
▶	Feed stage	8,22253	
▶	Number of actual stages above feed	7,22253	
▶	Reboiler heating required	504,784	cal/sec
▶	Condenser cooling required	359,023	cal/sec
▶	Distillate temperature	81,217	C
▶	Bottom temperature	108,756	C
▶	Distillate to feed fraction	0,445635	
▶	HETP		

Figura 14: Resultados de la columna DSTWU con  $R=1.4 \cdot R_{min}$  y SRK.

### PSRK:

Dentro de la base de método de Aspen Plus se encuentra PSRK, el cual es el método convencional de la ecuación de estado Soave-Redlich-Kwong, pero empleando las reglas de mezclado predictivas de HolderBaum. El método de PSRK (Predictive SRK) puede estar

asociado a un ejemplo de las reglas de mezclado modificadas de Huron-Vidal, haciendo que esta nueva versión de la ecuación de estado se comporte adecuadamente cuando los parámetros binarios son desconocidos e, incluso, cuando se trabajan a altas presiones. Por esta razón, se elige el método PSRK que corresponde a una versión mejorada de SRK.

Una vez cambiado el modelo termodinámico, corremos con los inputs de la figura 12, la relación de reflujo mínima aumenta, llegando a un valor de 1.26393 (Ver Fig 15). Debido a que debe operar con 1.4 veces el reflujo mínimo se vuelve a iterar hasta cumplir con esta condición encontrando la relación de reflujo de 1.7695.

▶	Minimum reflux ratio	1,26393	
▶	Actual reflux ratio	1,502	
▶	Minimum number of stages	8,08236	
▶	Number of actual stages	17,4565	
▶	Feed stage	11,5849	
▶	Number of actual stages above feed	10,5849	
▶	Reboiler heating required	484,403	cal/sec
▶	Condenser cooling required	336,451	cal/sec
▶	Distillate temperature	80,9404	C
▶	Bottom temperature	107,837	C
▶	Distillate to feed fraction	0,445635	
▶	HETP		

Figura 15: Resultados columna DSTWU empleando PSRK y R=1.502.

Una vez se realiza el cambio en la relación de reflujo de operación, la cantidad de etapas se mantiene en 15 etapas, pero la alimentación se mueve hasta la etapa 10 (Ver fig 16).

▶	Minimum reflux ratio	1,26393	
▶	Actual reflux ratio	1,7695	
▶	Minimum number of stages	8,08236	
▶	Number of actual stages	15,0678	
▶	Feed stage	10,1365	
▶	Number of actual stages above feed	9,13648	
▶	Reboiler heating required	520,823	cal/sec
▶	Condenser cooling required	372,871	cal/sec
▶	Distillate temperature	80,9404	C
▶	Bottom temperature	107,837	C
▶	Distillate to feed fraction	0,445635	
▶	HETP		

Figura 16: Gráfico con mínimo número de etapas de equilibrio.

**Análisis comparativo entre las dos simulaciones y McCabe Thiele:**

En términos generales, los cambios principales que se encuentran entre los dos métodos está asociada a la variación en la etapa de alimentación y la relación de reflujo tanto mínimo como el de operación. Estos cambios están justificados, principalmente, en el cálculo de las curvas de equilibrios que son aquellas que cambian considerablemente entre los modelos.

Extrayendo datos de equilibrio isobárico, que es el tipo de proceso que se trabaja en la columna de destilación, se puede observar que el modelo trabajado en este trabajo (solución ideal) presenta una desviación considerable con respecto a los datos experimentales, incluso con SRK el equilibrio Txy se parece al de solución ideal estando distantes del comportamiento real y esperado.

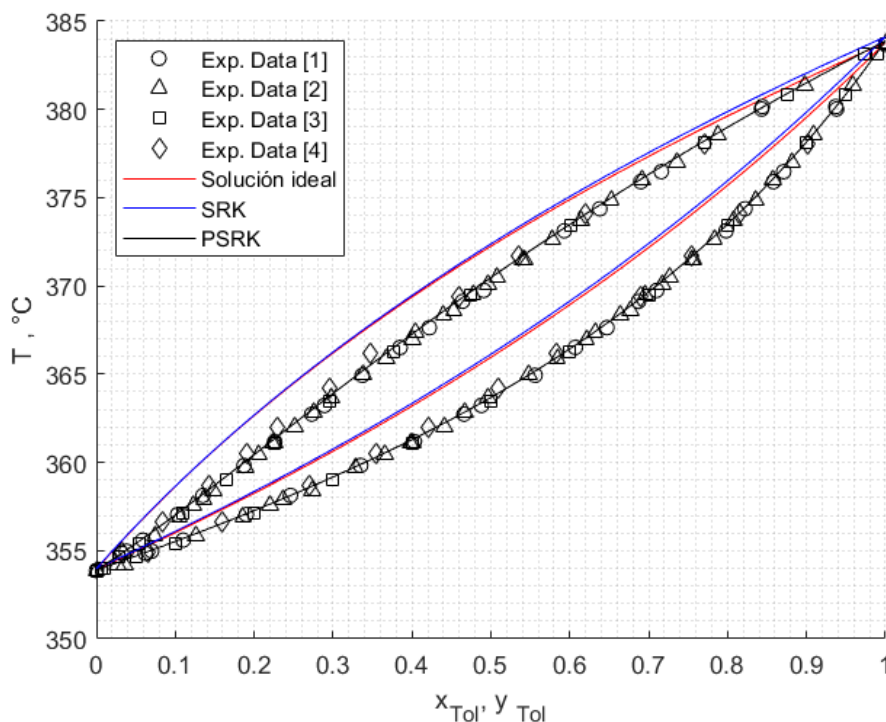


Figura 17: Diagrama Txy de la mezcla binaria Ciclohexano-Tolueno a P=101.3 kPa.

Por otro lado, se puede comprobar que el método más apropiado para modelar el equilibrio líquido-vapor de esta mezcla es el PSRK, presentando un mayor acople o menor porcentaje de error con respecto a los datos experimentales, razón por la cual será el método selecto para el dimensionamiento y diseño de la columna de destilación rigurosa RADFRAC en AspenPlus.

Cuando se comparan las cargas del condensador y del rehervidor obtenidas vemos que en el caso de la simulación con PSRK en la DSTWU se estiman las siguientes cargas en el condensador y rehervidor

▶ Reboiler heating required	7850,1	kJ/hr
▶ Condenser cooling required	5620,09	kJ/hr

Y los calculados en este trabajo son

$$Q_{reb} = 7758.2 \frac{kJ}{h}$$

$$Q_{cond} = 4972.3 \frac{kJ}{h}$$

Es decir que se obtiene una diferencia porcentual, con respecto a los calculados con Aspen Plus de

$$\%Dif_{Q_{reb}} = 1.17$$

$$\%Dif_{Q_{cond}} = 11.52$$

Lo cual permite concluir, una vez más, que incluso si se realizaron suposiciones de mezcla ideal y se trabajó con el modelo simplificado de McCabe-Thiele, la estimación de curvas de equilibrio y de operación no están alejados de los que se obtienen con simuladores de mayor carga computacional.

### Dimensionamiento de la torre:

Empleando el modelo de RADFRAC de Aspen plus ingresamos los inputs arrojados por la columna DSTWU con el método de PSRK ya que modela mejor el equilibrio.

The screenshot shows the RADFRAC configuration interface. Under 'Setup options', the calculation type is 'Equilibrium', the number of stages is 15, the condenser is 'Total', the reboiler is 'Kettle', valid phases are 'Vapor-Liquid', and convergence is 'Standard'. Under 'Operating specifications', the reflux ratio is 1.77 (mole basis), the distillate to feed ratio is 0.4457 (mole basis), and the free water reflux ratio is 0. A 'Feed Basis' button is also visible.

Figura 18: inputs de la columna de destilación RADFRAC.

El plato de alimentación será el plato 7, como se obtuvo con McCabe Thiele con el cual se obtienen los siguientes resultados

	Units	F2	B2	D2
<b>— Mole Flows</b>	<b>mol/hr</b>	<b>150</b>	<b>83,145</b>	<b>66,855</b>
TOLUE-01	mol/hr	82,5	79,0275	3,47251
CYCLO-01	mol/hr	67,5	4,11751	63,3825
<b>— Mole Fractions</b>				
TOLUE-01		0,55	0,950478	0,0519409
CYCLO-01		0,45	0,049522	0,948059

Figura 19: Resultados de corriente de alimentación, fondos y destilado.

Como se puede evidenciar, la composición de salida cambia y no cumple con el criterio de que sea del 96% en composición de ciclohexano. Por esta razón, se ingresa una especificación de diseño y se varía la relación de reflujo encontrando una relación de reflujo de  $R = 2.1689$  que es prácticamente el doble que el que se encontró con McCabe-Thiele.

Primary specifications

Reflux ratio Mole 1,77

Distillate to feed ratio Mole 0,4457

Free water reflux ratio 0

Additional specifications

ID	Active	Description	Type	Units	Target Value	Calculated Value	Error
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Composicion	Mole purity		0,96	0,96	1,50303e-08

New Edit Delete

Adjusted variables

ID	Active	Description	Type	Units	Lower Bound	Upper Bound	Calculated Value
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Reflujo	Molar Reflux		0,5	10	2,16886

Figura 20: Resultados del diseño de especificaciones dentro de la torre.

Para poder encontrar la relación de reflujo y la temperatura de la alimentación óptimas en la torre, se realiza un análisis de sensibilidad que garantice minimizar las cargas de los intercambiadores (Rehervidor y condensador) y la relación de reflujo. Para los intervalos de variación de la temperatura se toma como límite inferior 0°C y como límite superior 80°C con el objetivo de garantizar que este se encuentre debajo de la temperatura de ebullición de ciclohexano. De esta forma se garantiza que la alimentación se encuentre como líquido subenfriado y, con la especificación de que el destilado tenga una pureza de 96% se estaría variando la relación de reflujo que permita tener esta especificación.

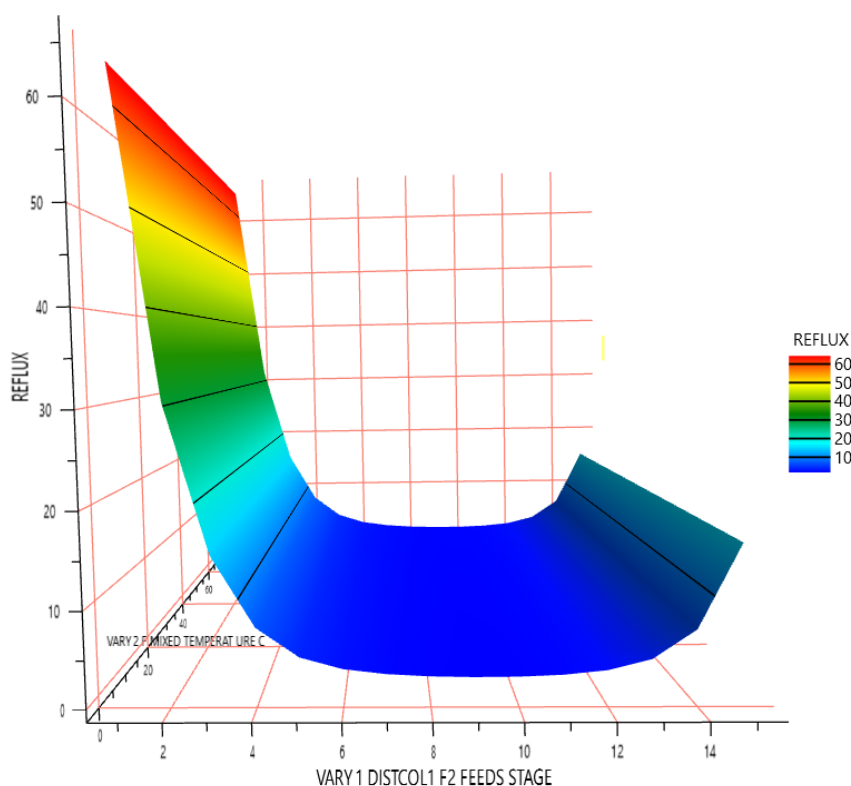


Figura 22: Relación de reflujo en función de la etapa de alimentación y la temperatura del alimento.



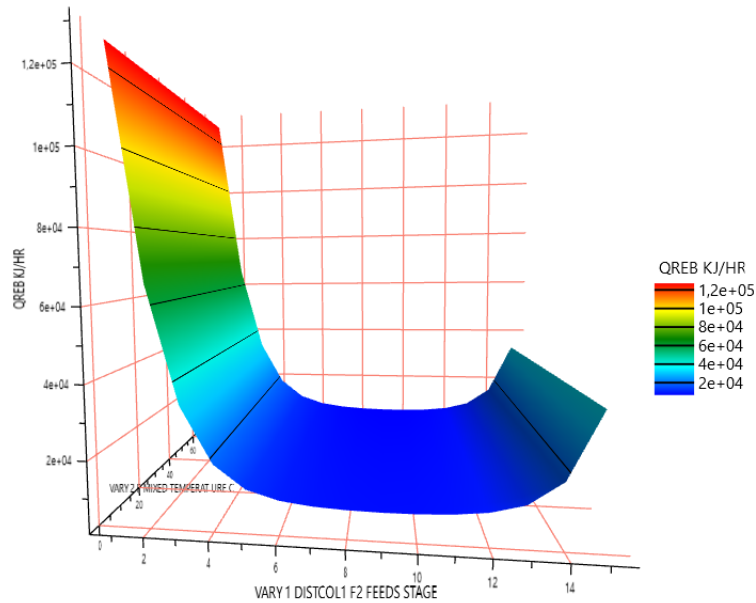


Figura 23: Carga del re-hervidor en función de la etapa de alimentación y la temperatura del alimento.

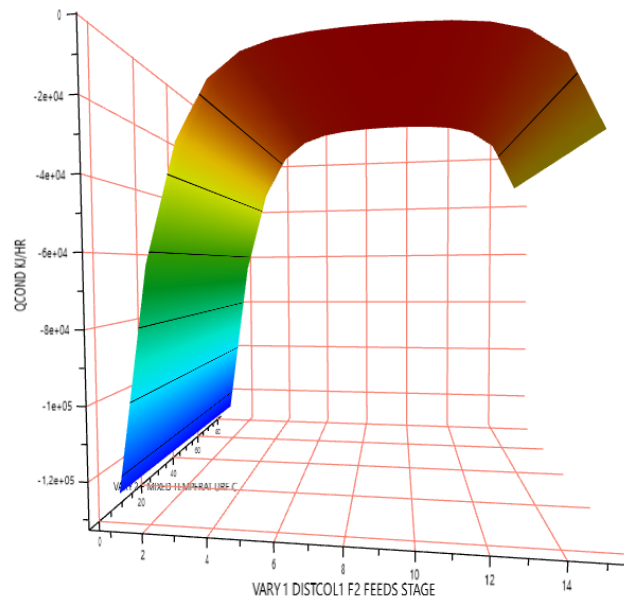


Figura 24 : Carga del condensador en función de la etapa de alimentación y la temperatura del alimento.

Como se puede ver con el análisis de sensibilidad el comportamiento del reflujo refleja la misma tendencia que la carga del condensados y rehervidor, los cuales presentan mayor variación en función de la etapa de alimentación que el que presenta con respecto a la temperatura de la corriente de alimentación. En términos generales, el valor mínimo del reflujo que concuerda con los mínimos en las cargas del condensador y rehervidor se presenta cuando la alimentación se realiza en la etapa 9 o 10 y a bajas temperaturas. Sin embargo, las temperaturas mínimas que son permitidas deben estar alrededor de 10°C con el objetivo de garantizar que dentro de esa corriente no se alcance a dar solidificar el ciclohexano cuyo punto de fusión está alrededor de 7°C. Con base en esto, la temperatura del alimento se ajusta a un valor de 10°C y la alimentación se cambia al plato 9, dejando estable la cantidad de etapas (15 etapas) la relación de destilado

a la alimentación y obteniendo un valor de la relación de reflujo de 1.8208. Una vez ajustadas las condiciones óptimas de operación de la torre de destilación, obtenemos los perfiles finales

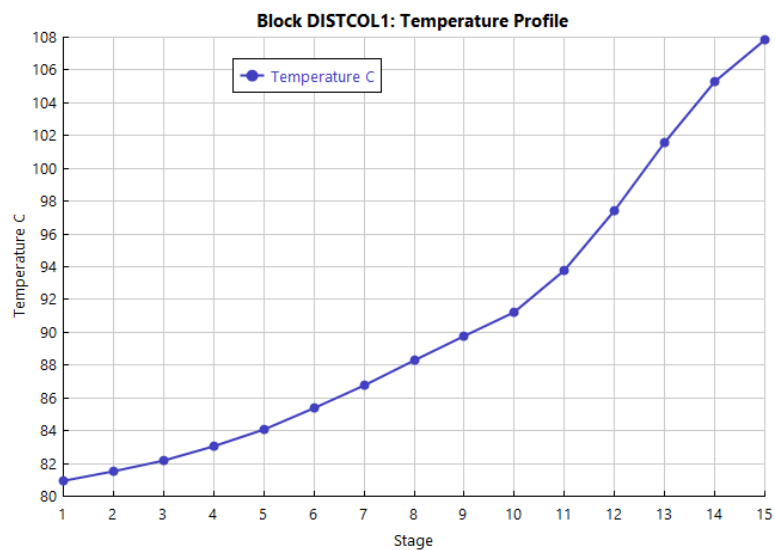


Figura 25 : Perfil de temperatura de la columna de destilación.

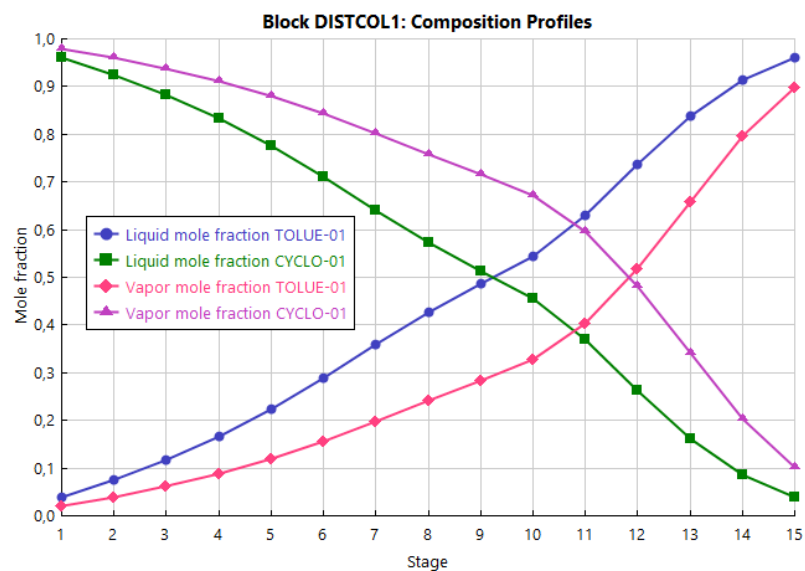


Figura 26 : Perfiles de composiciones de vapor y líquido del ciclohexano y tolueno.

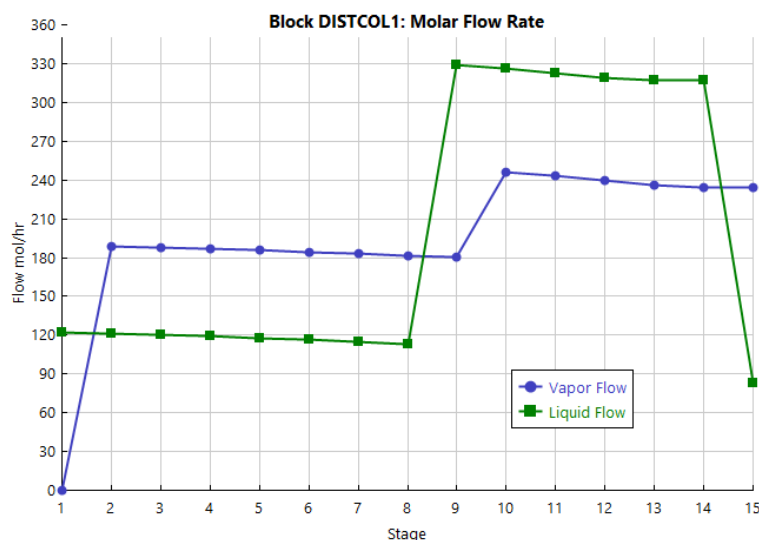


Figura 27 : Perfiles de flujos molares del líquido y del vapor en función de las etapas.

La torre de destilación funciona en términos termodinámicos y de equilibrio, sin embargo, es indispensable diseñar la columna en términos mecánicos e hidráulicos. Para esto se ingresa en los aspectos internos de la columna en Aspen Plus y se utilizan los cálculos predeterminados que realiza Aspen, teniendo una columna de platos sieve con espaciado de platos de 0.6096m y un diámetro de 0.092m.

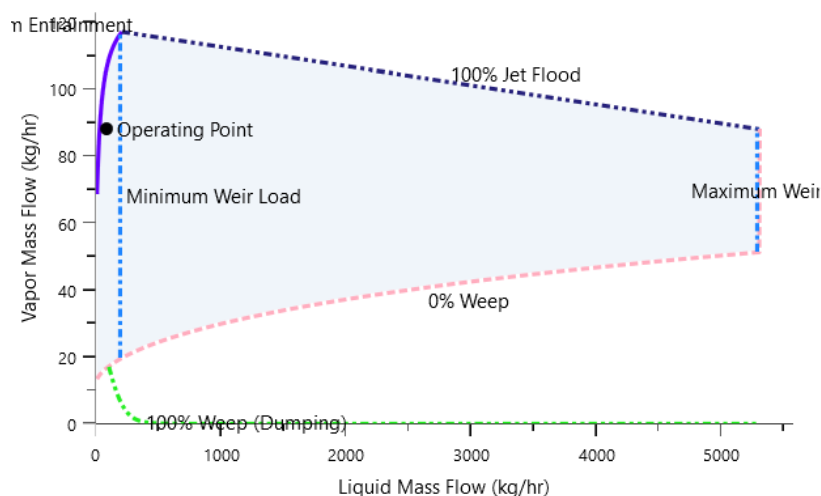


Figura 28 : Gráficos hidráulicos del primer plato de la columna de destilación de platos SIEVE.

Cuando se analiza los diagramas hidráulicos se puede observar que el punto de operación está por debajo de la carga mínima que debería tener por cada plato (Figura 28). Esto es debido a los bajos flujos de masa trabajados dentro de la columna, la alimentación de 150mol/h representa un flujo másico de 13kg/h o 200g/min, que repartido a lo largo de la columna de destilación no alcanza a ser lo suficiente para abastecer el plato. Se podría disminuir el diámetro de la columna para compensar este escenario y permitir mayor almacenamiento dentro los platos, no obstante, el diámetro en este momento se encuentra por debajo de los 10cm y no sería recomendable utilizar diámetros menores por lo que se recurre a utilizar empaque en vez de platos.

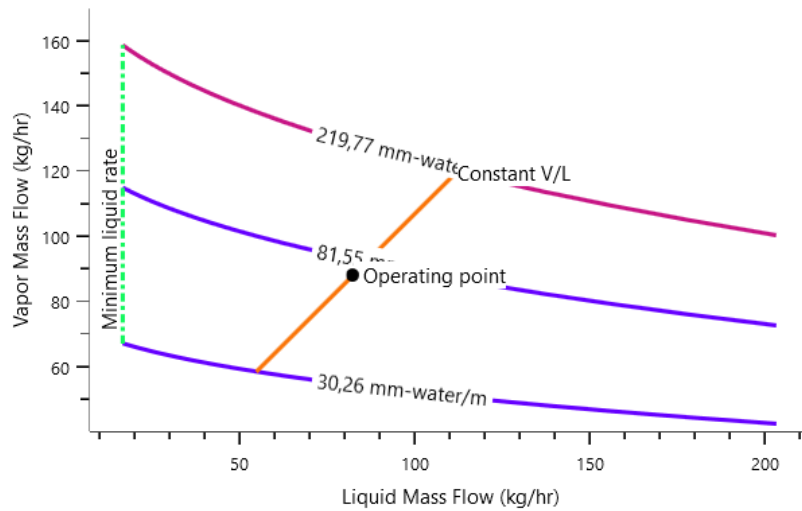


Figura 29 : Gráfica hidráulica del primer plato de la columna empacada (Rasching).

Cuando se cambia a una columna empacada se da más versatilidad en la elección de la longitud empacada. Por la magnitud del flujo que se alimenta se estipula una longitud de 80cm, para lo cual el simulador calcula un diámetro de 0.159861m y, como se puede observar en la figura 29, con los flujos de vapor y líquido dentro de la columna se obtiene una caída de presión por debajo del límite permitido, y el flujo de líquido también se encuentra por encima del valor mínimo. Las únicas advertencias que presenta este diseño están asociadas al cálculo de la curva de caída de presión mínima, razón por la cual parece ser un diseño viable y es aceptado.

Section starting stage	2	
Section ending stage	14	
Calculation Mode	Sizing	
Column diameter	0,159861	meter
Packed height per stage	0,0615385	meter
Section height	0,8	meter
Maximum % capacity (constant L/V)	80	
Maximum capacity factor	0,0291633	m/sec
Section pressure drop	0,00707047	bar
Average pressure drop / Height	90,1234	mm-water/m
Average pressure drop / Height (Frictional)	87,1617	mm-water/m
Maximum stage liquid holdup	0,0858993	l
Maximum liquid superficial velocity	7,49291	cum/hr/sqm
Surface area	3,67	sqcm/cc
Void fraction	0,64	
1st Stichlmair constant	1,68288	
2nd Stichlmair constant	2,14241	

Figura 30 : Gráfico con mínimo número de etapas de equilibrio.

El empaque utilizado son las sillas Rasching, cuyas características se presentan en la figura 29. Debido a que es una torre empacada se debe contemplar dispersores de líquido para la parte superior de la columna que garanticen una buena distribución de la fase líquida y los soportes del empaque, que deben ser diseñados específicamente para esta columna.



Figura 31: Sillas Rasching.

## Bibliografía

- [1] Sieg, L. Chem.-Ing.-Tech., 1950, 22, 322-326 Liquid-vapor equilibria in binary systems of hydrocarbons of various types.
- [2] Myers, H. S. Ind. Eng. Chem., 1956, 48, 1104-1108 Binary mixtures of naphthenes and aromatics vapor-liquid equilibrium data.
- [3] Black, C. Ind. Eng. Chem., 1959, 51, 211 Multicomponent vapor-liquid equilibria from binary data
- [4] Delzenne, A. O. Bull. Soc. Chim. Fr., 1961, 295 Vapor-Liquid Equil. for the Cyclohexane\_toluene System at One Atm.

Green, D. W. (2019). *Perry's chemical engineers' handbook*. McGraw-Hill Education.