



CONTRIBUCION AL ESTUDIO DE LA OPERACION

DE DESTILACION DISCONTINUA MEDIANTE

SIMULACION

T 01150
1400354341

BIBLIOTECA DEPARTAMENT D'ENGINYERIA QUÍMICA
UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

Memoria de Tesis Doctoral

presentada por

Anna Bonsfills Pedrós

para optar al grado de Doctora en Ciencias (Químicas)

Barcelona, Septiembre de 2001

Director de la Tesis: Dr. Lluís Puigjaner Corbella

Departament d'Enginyeria Química

Escola Tècnica Superior d'Enginyers Industrials de Barcelona

Universitat Politècnica de Catalunya

5.2.6. RESULTADOS EXPERIMENTALES A POTENCIA DE CALEFACCION 2

Después de estudiar la separación de la mezcla metanol-agua a potencia de calefacción 1, estudiamos la separación de la misma mezcla a una potencia de calefacción de 933.3 W , que la llamaremos potencia de calefacción 2. Se realizarán cinco experiencias a distintas razones de reflujo constantes (1, 1.5, 2, 2.5 y 3) . Las mezclas de trabajo tendrán el 20% en moles de metanol y en cada experiencia se utilizará un volumen de 4 litros. La columna trabajará a presión atmosférica. Cada experiencia se ha realizado por duplicado para poder contrastar mejor los resultados. En los casos en que la dispersión de los resultados ha sido apreciable se ha realizado una tercera experiencia.

En este apartado se presentan los resultados experimentales a la potencia de calefacción 2. Estos resultados incluyen:

- Perfil de temperaturas en el calderín y en los platos 15, 10, 5 y 1. Estos gráficos se realizan con los datos que proporciona el fichero de control de la columna. En los perfiles presentados se han tomado datos de temperatura cada minuto.
- Perfil de concentraciones en los platos 15, 10, 5 y 1. Los datos de concentraciones para realizar los gráficos se han obtenido por cromatografía de gases y análisis por Karl-Fisher. Al principio de las experiencias se toman muestras en los diferentes puntos de la columna cada 5 minutos y después cada 15 minutos.
- Perfil de caudal molar de destilado.

• Método operativo

1. Introducimos en el calderín 4 litros de mezcla.
2. Abrimos la válvula del agua de refrigeración y estabilizamos su caudal a 2 l/min.
3. Ponemos en marcha la manta calefactora a potencia 2 (933.3 W).
4. Iniciamos un nuevo fichero en el programa de la columna.
5. Esperamos un tiempo hasta que el vapor llega al primer plato y la columna se estabiliza.
6. Abrimos las llaves de reflujo.
7. Ponemos el reflujo de trabajo (1, 1.5, ...)
8. Sacamos muestras de la columna cada cierto tiempo y tomamos los pesos de destilado hasta el final de la experiencia.
9. Cerramos el programa, las válvulas y la manta calefactora.

• Tiempo de las experiencias

En cada experiencia es preciso tener en cuenta dos fases distintas, al igual que en las experiencias a potencia de calefacción 1. La primera fase se realiza a reflujo total y la segunda a un reflujo determinado. El tiempo total de destilación será la suma de los tiempos de cada una de las fases.

$$\boxed{\text{Tiempo total experiencia} = \text{tiempo fase 1} + \text{tiempo fase 2}}$$

5.2.6.1. EXPERIENCIA 6: RAZON DE REFLUJO 1

Tiempo fase 1: 35 min

Tiempo fase 2: 180 min

$$\boxed{\text{Tiempo total Experiencia Reflujo 1: 215 min} = 3 \text{ h y } 35 \text{ min}}$$

5.2.6.1.1. Perfiles de temperatura

En esta experiencia y en las siguientes, se ha duplicado la potencia de calefacción del calderín, pasando de 466.7 W a 933.3 W. Este aumento en la potencia de calefacción ha hecho disminuir el tiempo de estabilización de la columna a 35 minutos. En la figura 5.2.6.1.1. se indica el perfil de temperaturas en los distintos platos de la columna.

En la fase 1 (0-35 min) las temperaturas de los platos van aumentando, siendo el plato 1 el que presenta un cambio más brusco, ya que en pocos minutos pasa de 20°C a 64.3°C.

En la primera parte de la fase 2 las temperaturas de los distintos platos se mantienen constantes. El plato 1 es el que presenta la temperatura más baja (64.3°C) y el calderín la más alta (90.7°C). Estas temperaturas concuerdan con la obtención de metanol puro en el plato 1 y la obtención de mezclas metanol-agua, con un contenido elevado de agua en el calderín.

En la segunda parte de la fase 2, las temperaturas en todos los platos van aumentando, más gradualmente en el calderín que en el destilado. Se obtienen en el calderín mezclas más ricas en agua que en metanol, ya que presenta temperaturas más elevadas. En el destilado también se obtienen mezclas metanol-agua (slop-cuts) pero más ricas en metanol que las del calderín, ya que las temperaturas son inferiores a las del calderín.

Experiencia N° 6

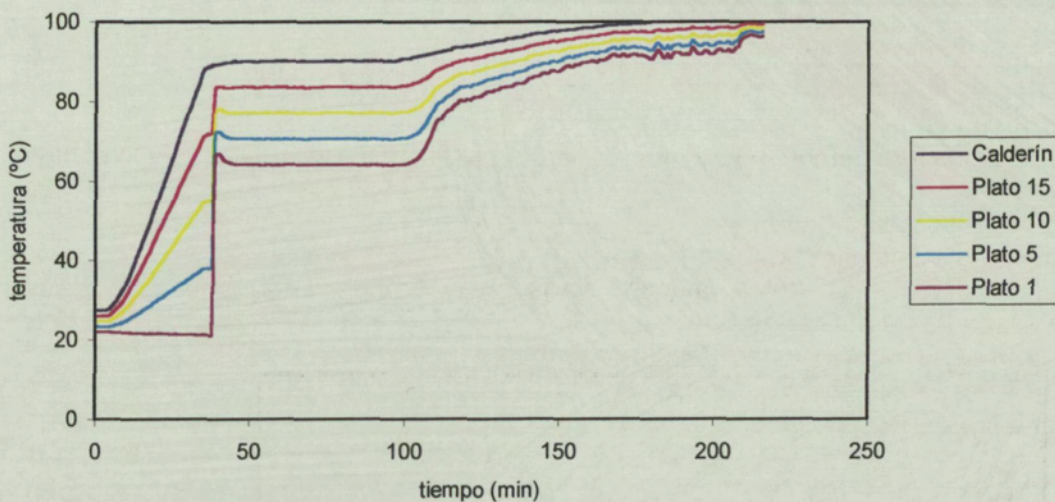


Figura 5.2.6.1.1. Perfil de temperatura en cada plato. Potencia de calefacción 2, $Re = 1$.

Al comparar este perfil con el obtenido a la misma razón de reflujo pero a potencia 1, se observa que en el destilado a potencia 2 se obtiene metanol puro durante unos 60 minutos, mientras que a potencia 1 el tiempo era de 75 minutos. Así, a potencia de calefacción superior se obtiene metanol puro durante menos tiempo.

5.2.6.1.2. Perfil del caudal molar de destilado

N° pesadas de destilado: 8

El peso de destilado disminuye a lo largo del tiempo y el caudal molar se mantiene prácticamente constante, al igual que a potencia 1, pero con valores distintos.

Para $Re = 1$ y potencia de calefacción 2, el caudal molar de destilado medio, D , es:

$$D = 0.44 \text{ moles/min}$$

Este caudal se casi es el doble del obtenido a potencia de calefacción 1, que era de 0.23 moles/min.

Experiencia N° 6

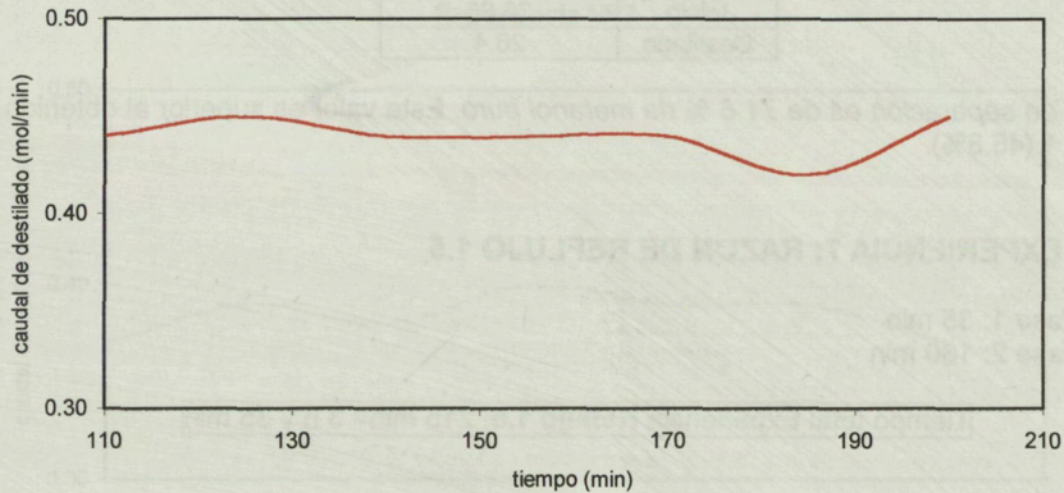


Figura 5.2.6.1.2. Perfil del caudal molar de destilado. Potencia de calefacción 2, $Re = 1$.

5.2.6.1.3. Perfiles de concentración

N° muestras analizadas: 72

Experiencia N° 6

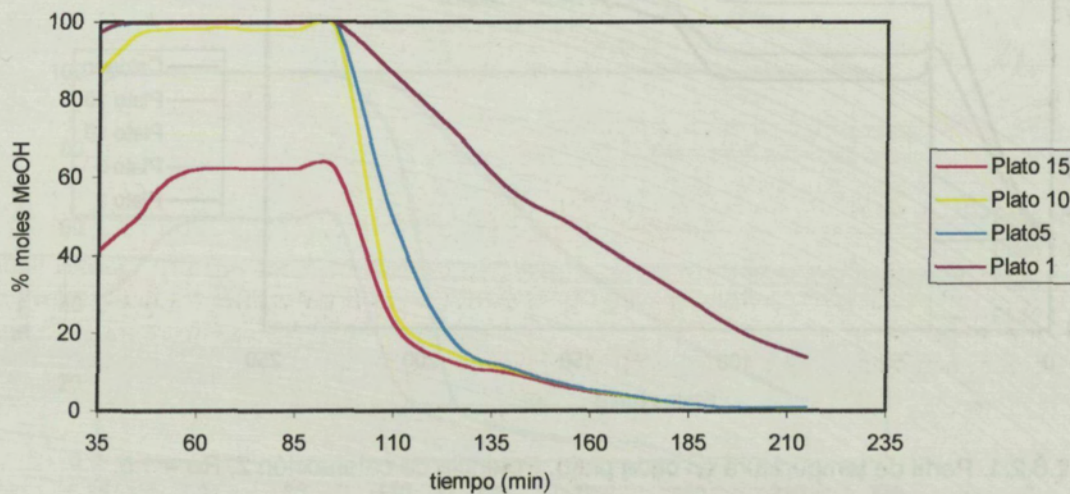


Figura 5.2.6.1.3. Perfil de concentraciones en los distintos platos. Potencia de calefacción 2, $Re = 1$.

El perfil de concentraciones es parecido al obtenido a potencia de calefacción 1. Los platos 1, 5 y 10 mantienen una misma concentración elevada durante unos 60 minutos a potencia

2, mientras que a potencia 1 este tiempo es de 75 minutos. El plato 15 mantiene una concentración constante alrededor del 60% en moles de metanol tanto a potencia 1 como a potencia 2, durante 40 minutos.

Los balances de materia nos permiten conocer la cantidad de metanol puro que se obtiene a través del destilado, trabajando a $Re=1$ y potencia 2.

Tabla 5.2.6.1.3. Balances de materia a $Re=1$.

	Metanol (moles)
Inicio	36.86
Destilado	26.4

El grado de separación es de 71.6 % de metanol puro. Este valor es superior al obtenido a potencia 1 (46.8%).

5.2.6.2. EXPERIENCIA 7: RAZON DE REFLUJO 1.5

Tiempo fase 1: 35 min

Tiempo fase 2: 180 min

Tiempo total Experiencia **Reflujo 1.5**: 215 min = 3 h y 35 min

5.2.6.2.1. Perfiles de temperatura

Ya que los perfiles de temperatura que se irán obteniendo en las siguientes experiencias son parecidos, sólo se comentará el tiempo en que se obtiene metanol puro, que es variable de una a otra experiencia.

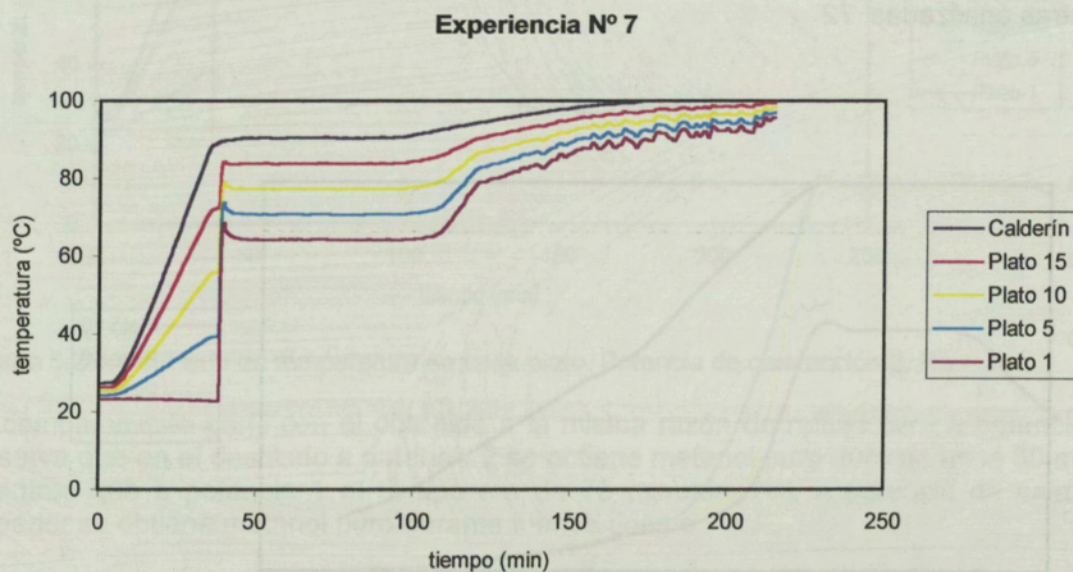


Figura 5.2.6.2.1. Perfil de temperatura en cada plato. Potencia de calefacción 2, $Re = 1.5$.

Ahora se obtiene metanol puro durante 70 minutos, desde el minuto 35 hasta el minuto 105. A potencia 1, este tiempo era de 90 minutos.

5.2.6.2.2. Perfil del caudal molar de destilado

Nº pesadas de destilado: 8

El caudal medio de destilado es casi el doble del obtenido a potencia 1 (0.20 moles/min):

$$D = 0.38 \text{ moles/min}$$

Experiencia Nº 7

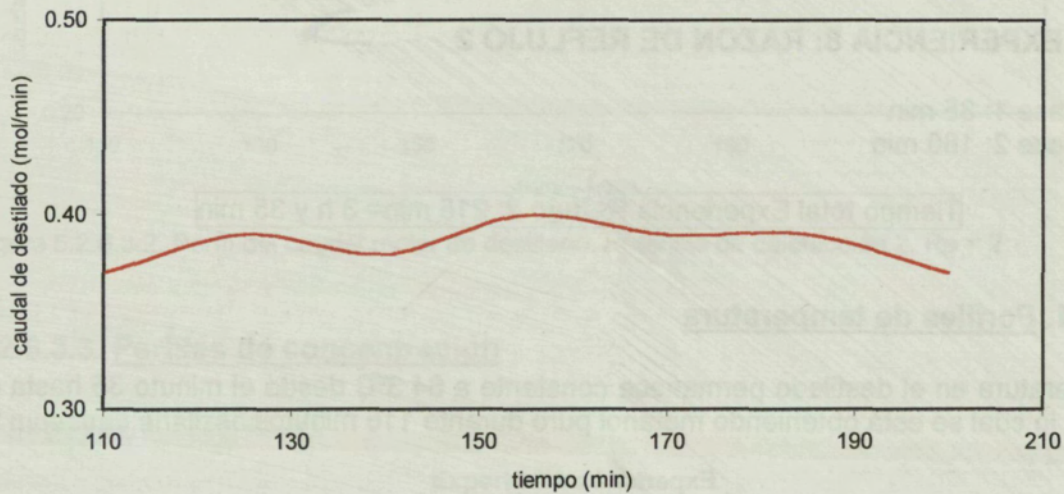


Figura 5.2.6.2.2. Perfil del caudal molar de destilado. Potencia de calefacción 2, $Re = 1.5$.

5.2.6.2.3. Perfiles de concentración

Nº muestras analizadas: 72

Experiencia Nº 7

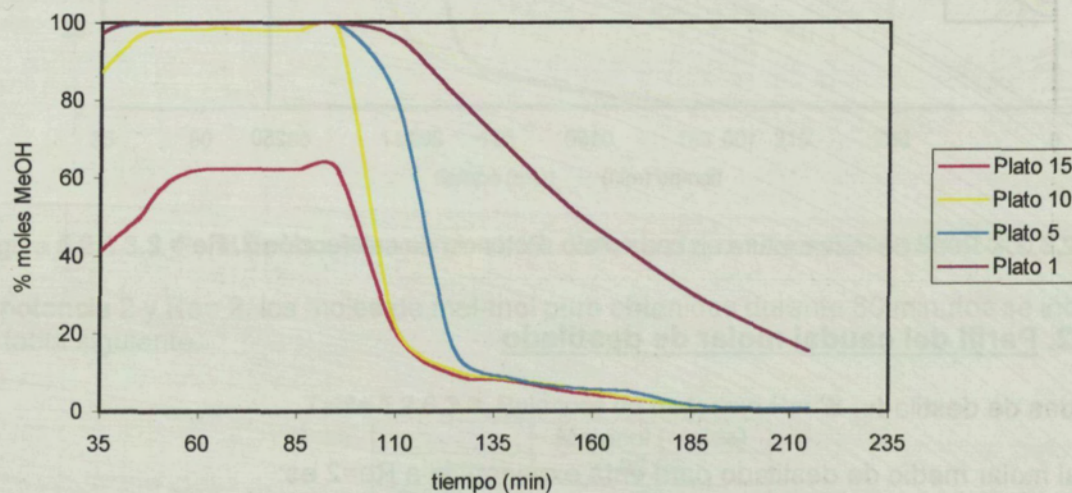


Figura 5.2.6.2.3. Perfil de concentraciones en los distintos platos. Potencia de calefacción 2, $Re = 1.5$.

A potencia 2 y $Re=1.5$, los moles de metanol puro obtenidos durante 70 minutos se indican en la tabla siguiente.

Tabla 5.2.6.2.3. Balances de materia a $Re=1.5$.

	Metanol (moles)
Inicio	36.86
Destilado	27.74

El grado de separación es de 72.2 % de metanol puro. Este valor es superior al obtenido a potencia 1 (48.8%).

5.2.6.3. EXPERIENCIA 8: RAZON DE REFLUJO 2

Tiempo fase 1: 35 min

Tiempo fase 2: 180 min

Tiempo total Experiencia **Reflujo 2**: 215 min = 3 h y 35 min

5.2.6.3.1. Perfiles de temperatura

La temperatura en el destilado permanece constante a 64.3°C desde el minuto 35 hasta el 115, con lo cual se está obteniendo metanol puro durante 115 minutos.

Experiencia N° 8

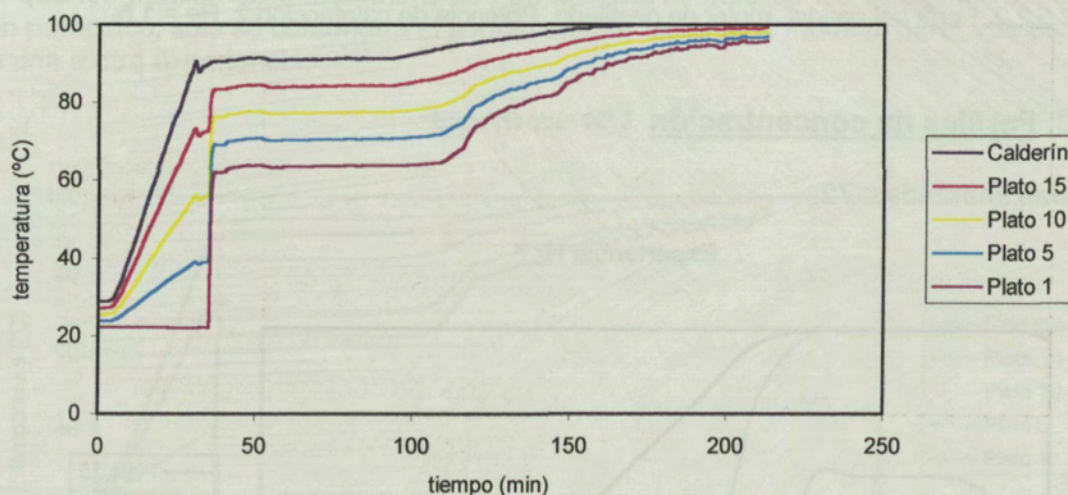


Figura 5.2.6.3.1. Perfil de temperatura en cada plato. Potencia de calefacción 2, $Re = 2$.

5.2.6.3.2. Perfil del caudal molar de destilado

N° pesadas de destilado: 8

El caudal molar medio de destilado para esta experiencia a $Re=2$ es:

$$D = 0.35 \text{ moles/min}$$

Valor inferior al obtenido a potencia 1, que es de 0.17 moles/min

Experiencia N° 8

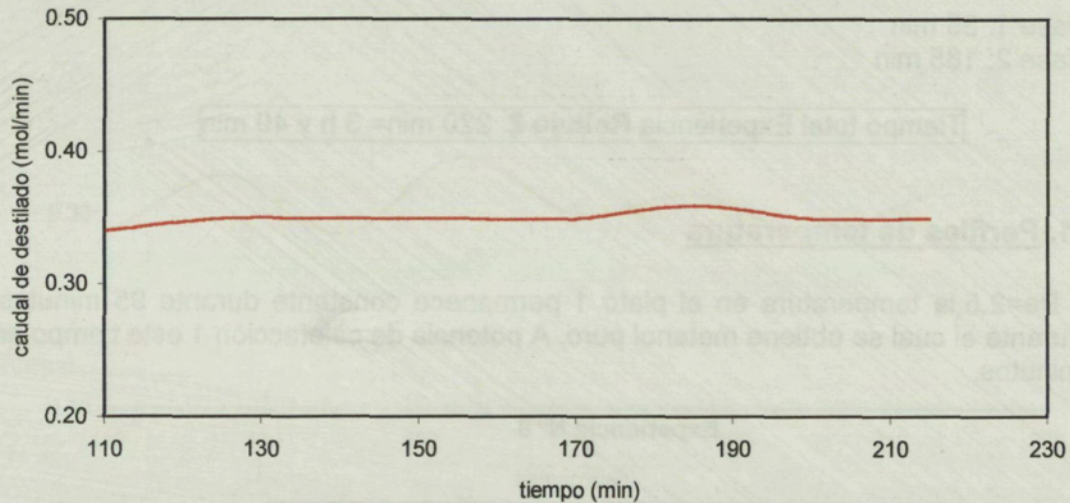


Figura 5.2.6.3.2. Perfil del caudal molar de destilado. Potencia de calefacción 2, $Re = 2$.

5.2.6.3.3. Perfiles de concentración

N° muestras analizadas: 72

Experiencia N° 8

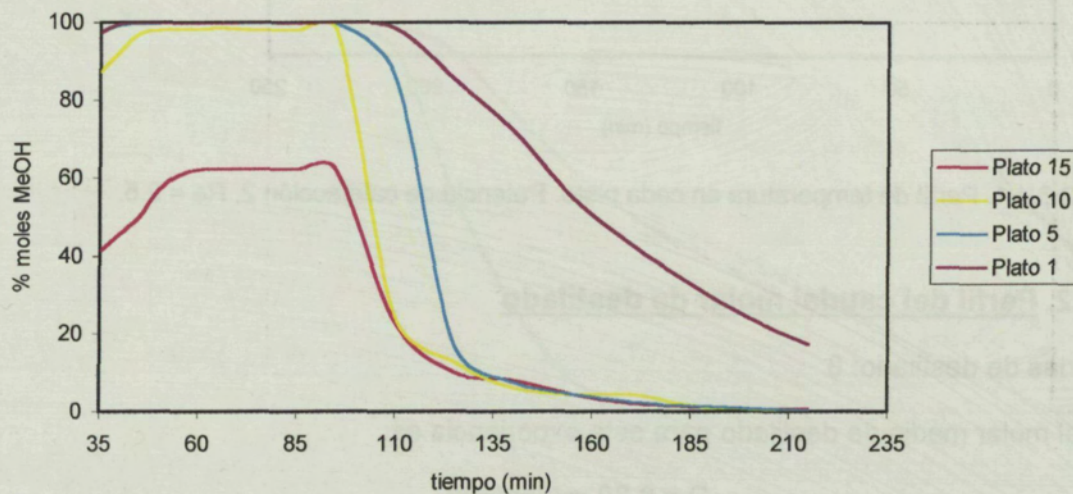


Figura 5.2.6.3.3. Perfil de concentraciones en los distintos platos. Potencia de calefacción 2, $Re = 2$.

A potencia 2 y $Re = 2$, los moles de metanol puro obtenidos durante 80 minutos se indican en la tabla siguiente.

Tabla 5.2.6.3.3. Balances de materia a $Re = 2$.

	Metanol (moles)
Inicio	36.86
Destilado	28

El grado de separación es de 76.0 % de metanol puro. Este valor es superior al obtenido a potencia 1 (50.7%).

5.2.6.4. EXPERIENCIA 9: RAZON DE REFLUJO 2.5

Tiempo fase 1: 35 min

Tiempo fase 2: 185 min

Tiempo total Experiencia Reflujo 2: 220 min = 3 h y 40 min

5.2.6.4.1. Perfiles de temperatura

Ahora a $Re=2.5$, la temperatura en el plato 1 permanece constante durante 95 minutos., tiempo durante el cual se obtiene metanol puro. A potencia de calefacción 1 este tiempo era de 130 minutos.

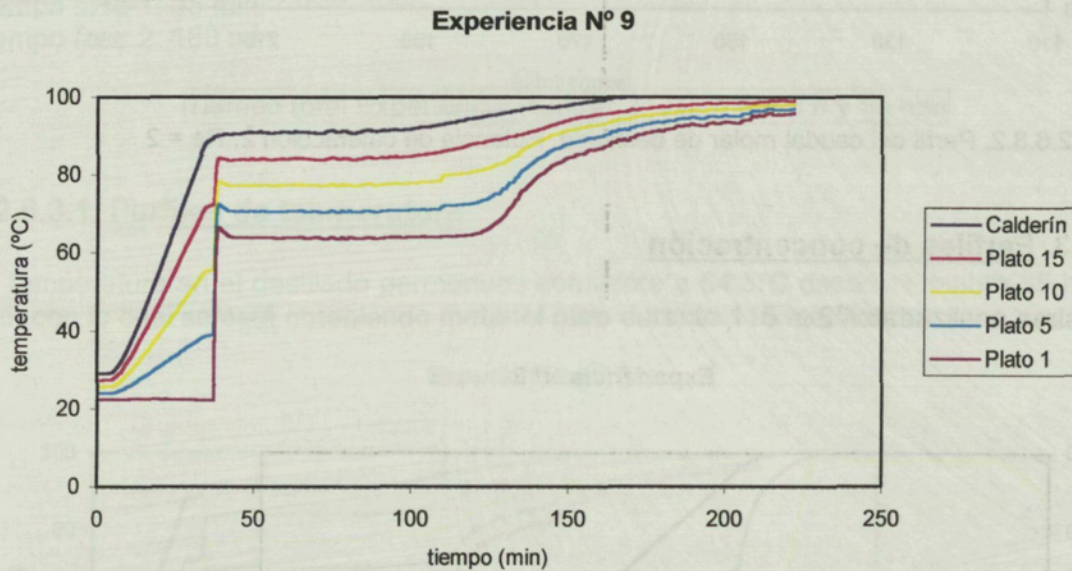


Figura 5.2.6.4.1. Perfil de temperatura en cada plato. Potencia de calefacción 2, $Re = 2.5$.

5.2.6.4.2. Perfil del caudal molar de destilado

N° pesadas de destilado: 8

El caudal molar medio de destilado para esta experiencia es:

$$D = 0.30 \text{ moles/min}$$

El caudal obtenido a potencia 2 y $Re = 2.5$ es superior al obtenido a la misma razón de reflujo y potencia 1.

Experiencia N° 9

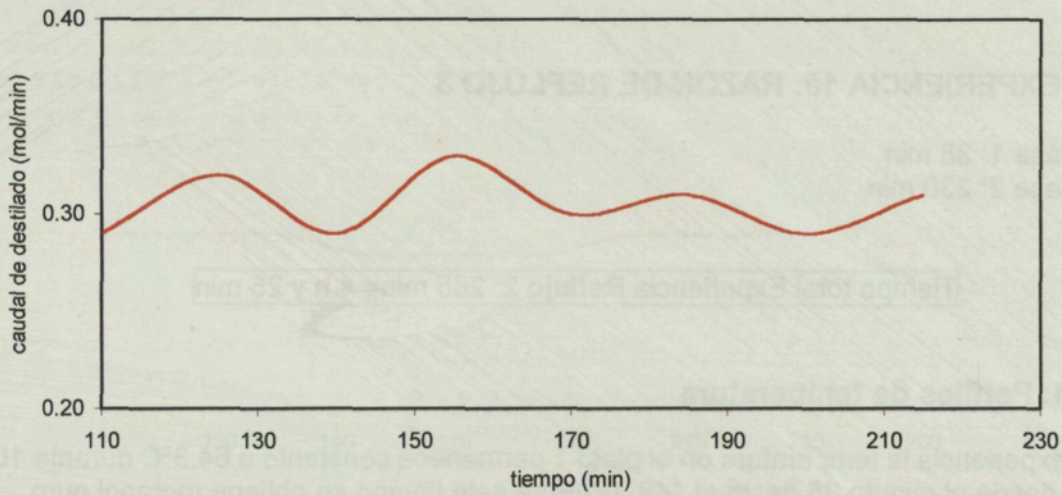


Figura 5.2.6.4.2. Perfil del caudal molar de destilado. Potencia de calefacción 2, $Re = 2.5$.

5.2.6.4.3. Perfiles de concentración

N° muestras analizadas: 72

Experiencia N° 9

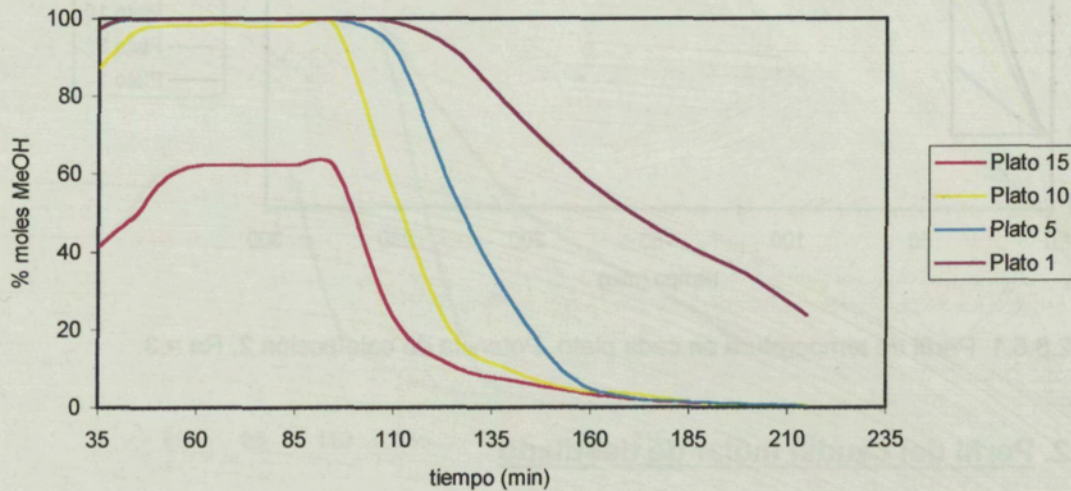


Figura 5.2.6.4.3. Perfil de concentraciones en los distintos platos. Potencia de calefacción 2, $Re = 2.5$.

A potencia 2 y $Re = 2.5$, los moles de metanol puro obtenidos durante 95 minutos se indican en la tabla siguiente.

Tabla 5.2.6.4.3. Balances de materia a $Re=2.5$.

	Metanol (moles)
Inicio	36.86
Destilado	28.5

El grado de separación es de 77.3 % de metanol puro. Este valor es superior al obtenido a potencia 1 (56.4%).

5.2.6.5. EXPERIENCIA 10: RAZON DE REFLUJO 3

Tiempo fase 1: 35 min

Tiempo fase 2: 230 min

Tiempo total Experiencia Reflujo 2: 265 min = 4 h y 25 min

5.2.6.5.1. Perfiles de temperatura

En esta experiencia la temperatura en el plato 1 permanece constante a 64.3°C durante 105 minutos, desde el minuto 35 hasta el 140. Durante este tiempo se obtiene metanol puro.

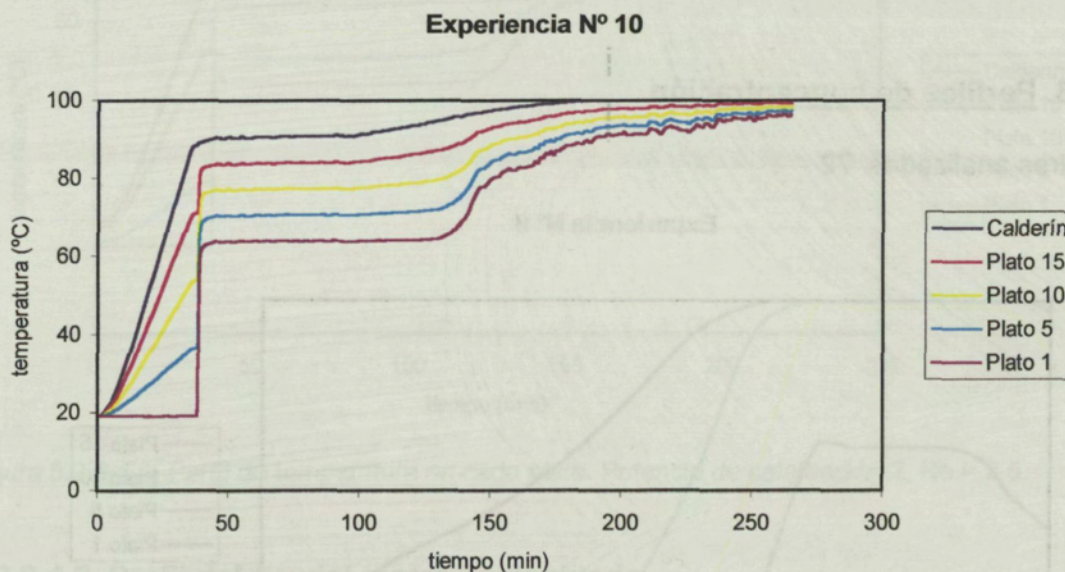


Figura 5.2.6.5.1. Perfil de temperatura en cada plato. Potencia de calefacción 2, Re = 3.

5.2.6.5.2. Perfil del caudal molar de destilado

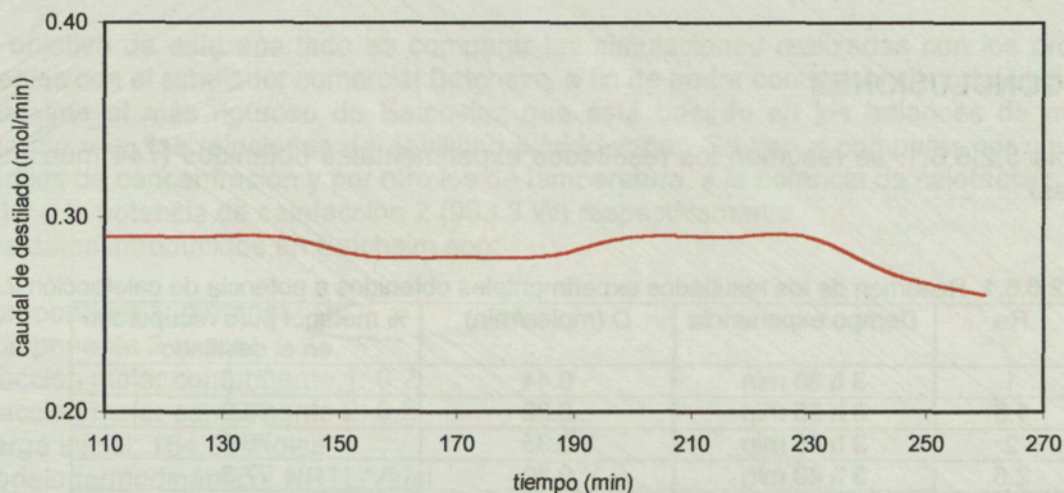
N° pesadas de destilado: 11

El caudal molar medio de destilado para esta experiencia es:

$$D = 0.28 \text{ moles/min}$$

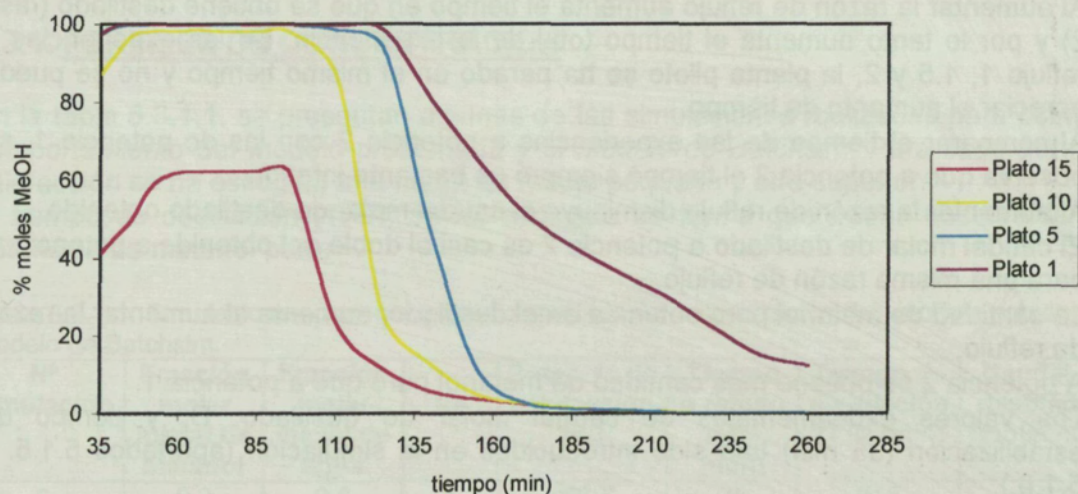
A potencia 1 y Re = 3, el caudal molar en el destilado era de 0.15 moles/min.

Experiencia N° 10

Figura 5.2.6.5.2. Perfil del caudal molar de destilado. Potencia de calefacción 2, $Re = 3$.5.2.6.5.3. Perfiles de concentración

N° muestras analizadas: 84

Experiencia N° 10

Figura 5.2.6.5.3. Perfil de concentraciones en los distintos platos. Potencia de calefacción 2, $Re = 3$.

A potencia 2 y $Re=3$, los moles de metanol puro obtenidos durante 105 minutos se indican en la tabla siguiente.

Tabla 5.2.6.5.3. Balances de materia a $Re=3$.

	Metanol (moles)
Inicio	36.86
Destilado	29.4

El grado de separación es de 79.7 % de metanol puro. También este valor es superior al obtenido a potencia 1 (59.1%).

5.2.6.6. CONCLUSIONES

En la tabla 5.2.6.6.1. se resumen los resultados experimentales obtenidos (744 muestras analizadas).

Tabla 5.2.6.6.1. Resumen de los resultados experimentales obtenidos a potencia de calefacción 2.

Re	Tiempo experiencia	D (moles/min)	% metanol puro recuperado en el destilado
1	3 h 35 min	0.44	71.6
1.5	3 h 35 min	0.38	72.2
2	3 h 35 min	0.35	76.0
2.5	3 h 40 min	0.30	77.3
3	4 h 25 min	0.28	79.7

- Trabajando con una potencia de calefacción de 933.3 W (potencia 2), el tiempo de estabilización de la columna en todas las experiencias es de 35 minutos (tiempo fase 1).
- Un aumento en la potencia de calefacción implica una disminución en el tiempo de estabilización de la columna. A través de las experiencias realizadas, se ha podido comprobar que al aumentar la potencia de calefacción al doble, de 466.7 W a 933.3 W, el tiempo de estabilización se ha reducido casi a la mitad, de 75 min a 35 min.
- Al aumentar la razón de reflujo aumenta el tiempo en que se obtiene destilado (fase 2) y por lo tanto aumenta el tiempo total de la experiencia. En las experiencias a reflujo 1, 1.5 y 2, la planta piloto se ha parado en el mismo tiempo y no se puede apreciar el aumento de tiempo.
- Al comparar el tiempo de las experiencias a potencia 2 con las de potencia 1, se observa que a potencia 2 el tiempo siempre es bastante inferior.
- Al aumentar la razón de reflujo disminuye el caudal molar de destilado obtenido.
- El caudal molar de destilado a potencia 2 es casi el doble del obtenido a potencia 1, para una misma razón de reflujo.
- La cantidad de metanol puro obtenida en el destilado, aumenta al aumentar la razón de reflujo.
- A potencia 2 se obtiene más cantidad de metanol puro que a potencia 1.
- Los valores experimentales de caudal molar de destilado, D, y tiempo de estabilización (35 min) han sido introducidos en la simulación (apartados 5.1.5. y 5.1.6.).
- La comparación del metanol puro recuperado en el destilado de la simulación N° 4 (apartado 5.1.5.), en la que se utilizaba la volatilidad relativa constante, con el experimento 10, nos da resultados muy concordantes.

Tabla 5.2.6.6.2. Comparación simulación N° 4 y experiencia N° 10.

	Simulación α constante	Experiencia 10
% metanol puro recuperado en el destilado	79.8	79.7

Esto nos confirma que a razón de reflujo de 3, el modelo matemático utilizado en este trabajo con α constante, es un modelo satisfactorio.

5.3. COMPARACION DE LAS SIMULACIONES CON EL SIMULADOR BATCHSIM

El objetivo de este apartado es comparar las simulaciones realizadas con los programas propios con el simulador comercial Batchsim, a fin de poder conocer si el modelo utilizado se aproxima al más riguroso de Batchsim, que está basado en los balances de materia y energía y en las relaciones de equilibrio líquido-vapor. Se van a comparar por un lado los perfiles de concentración y por otro los de temperatura, a la potencia de calefacción 1 (466.7 W) y a la potencia de calefacción 2 (933.3 W) respectivamente.

Los datos introducidos en Batchsim son:

Componente 1: metanol

Componente 2: agua

Fracción molar componente 1: 0.2

Fracción molar componente 2: 0.8

Carga inicial: 184.32 moles

Modelo termodinámico: NRTL/Virial

Nº de platos: 15

Presión cabeza de columna: 1.013 bar

Presión cola de columna: 1.013 bar

Holdup en los platos: 0.175 moles

Holdup en el condensador: 0.175 moles

Temperatura aproximada de ebullición de la mezcla: 93°C

Paso inicial de integración: 0.05 min

Paso máximo de integración: 0.1 min

Error de integración tolerado: 0.001

5.3.1. PERFILES DE CONCENTRACION

En la tabla 5.3.1.1. se presentan algunas de las simulaciones realizadas para comparar el comportamiento del modelo presentado y el modelo de Batchsim. Para cada potencia de calefacción se ha escogido una razón de reflujo pequeña y otra superior.

El tiempo de destilación (TFIN) se ha escogido de forma que pueda observarse bien la obtención de metanol puro.

Tabla 5.3.1.1. Simulaciones para comparar los perfiles de concentración del modelo presentado y el modelo de Batchsim.

Nº simulación	Fracción molar inicial de metanol	Fracción molar inicial de agua	Re	Potencia de calefacción (W)	Tiempo a reflujo total (min)	Tiempo de destilación TFIN (min)	Caudal de destiladoD (moles/min)
9	0.2	0.8	1	466.7	75	315	0.23
10	0.2	0.8	2.5	466.7	75	360	0.16
11	0.2	0.8	1.5	933.3	35	215	0.38
12	0.2	0.8	3.0	933.3	35	260	0.28

466.7 W = Potencia 1

933.3 W = Potencia 2

En cada simulación se presenta el perfil de concentraciones en:

- El destilado para α constante (simulación a).
- El destilado para α variable (simulación b).
- Un plato intermedio para α constante (simulación c).
- Un plato intermedio para α variable (simulación d).

• POTENCIA DE CALEFACCION 1

• Simulación N°9

$x_{\text{metanol inicial}} = 0.2$; $x_{\text{agua inicial}} = 0.8$; $Re = 1.0$; Tiempo a reflujo total = 75 min ;

$P = 466.7 \text{ W}$; $TFIN = 315 \text{ min}$; $D = 0.23 \text{ moles / min}$

En la figura 5.3.1.1. se indica el perfil de concentraciones en el destilado obtenido mediante Batchsim y se compara con el obtenido mediante el modelo más sencillo.

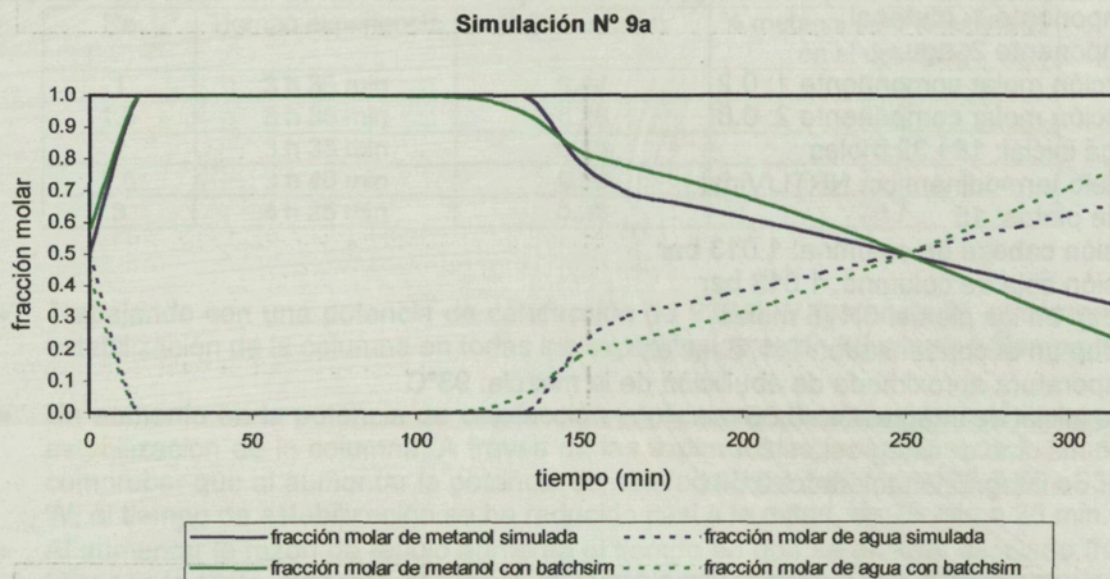


Figura 5.3.1.1. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 1, $Re=1$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{constante}$.

Los resultados obtenidos por simulación con α constante y los simulados con Batchsim presentan una buena correlación matemática:

$$\text{metanol: } X_{1, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 0.988 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.981$$

$$\text{agua: } X_{2, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 0.978 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.981$$

En la figura 5.3.1.2. se compara el perfil anterior obtenido mediante Batchsim y el perfil obtenido con el modelo sencillo y α variable. En este caso la correlación matemática nos lleva a:

$$\text{metanol: } X_{1, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 1.036 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.985$$

$$\text{agua: } X_{2, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 0.938 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.985$$

Por consiguiente, el modelo con α variable es mejor que el de α constante para describir la evolución del perfil de concentraciones en el destilado para $Re = 1$.

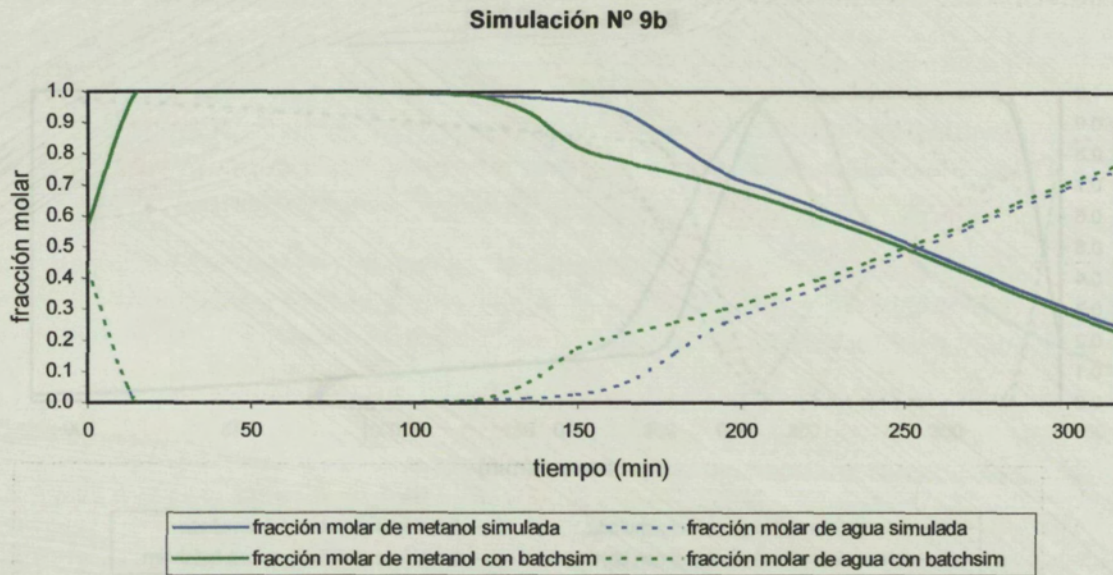


Figura 5.3.1.2. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 1, $Re=1$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{variable}$.

Después de comparar los perfiles de concentración en el destilado, en las figuras 5.3.1.3. y 5.3.1.4. se estudia el comportamiento de un plato intermedio, en concreto del plato 10 de la columna.

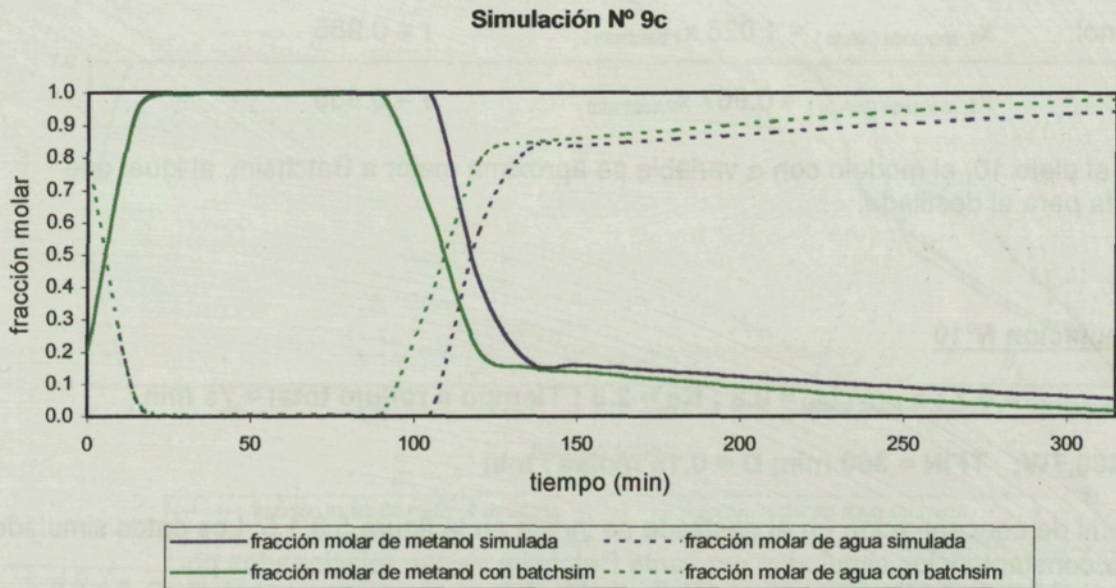


Figura 5.3.1.3. Perfil de concentraciones en el **plato 10**. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{constante}$.

La correlación entre los resultados obtenidos por simulación propia con α constante y Batchsim conducen a :

metanol: $X_{1, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 1.049 X_{1, \text{ batchsim}}$ $r = 0.980$

agua: $X_{2, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 0.944 X_{2, \text{ batchsim}}$ $r = 0.980$

Simulación N° 9d

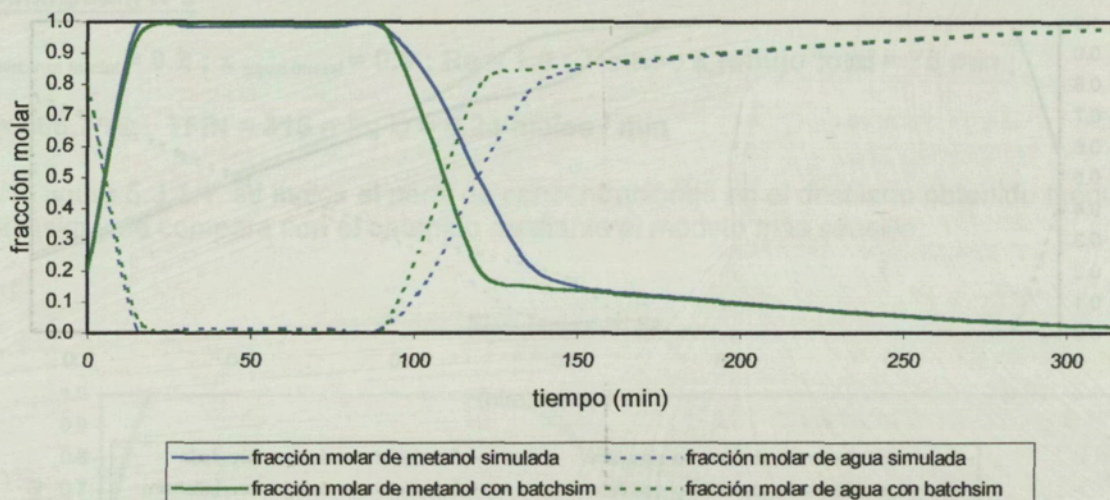


Figura 5.3.1.4. Perfil de concentraciones en el plato 10. Potencia de calefacción 1, $Re = 1$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{variable}$.

La correlación entre los resultados obtenidos por simulación propia con α variable y Batchsim conducen a :

$$\text{metanol: } X_{1, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 1.028 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.985$$

$$\text{agua: } X_{2, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 0.967 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.985$$

Para el plato 10, el modelo con α variable se aproxima mejor a Batchsim, al igual que ocurría para el destilado.

• Simulación N°10

$x_{\text{ metanol inicial}} = 0.2$; $x_{\text{ agua inicial}} = 0.8$; $Re = 2.5$; Tiempo a reflujo total = 75 min ;

$P = 466.7W$; $TFIN = 360$ min; $D = 0.16$ moles / min

El perfil de concentración en el destilado se indica en la figura 5.3.1.5. Los datos simulados con α constante y los simulados mediante Batchsim vienen relacionados por:

$$\text{metanol: } X_{1, \text{ simulada } (\alpha = \text{cte})} = 0.981 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.967$$

$$\text{agua: } X_{2, \text{ simulada } (\alpha = \text{cte})} = 0.888 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.967$$

Trabajando a una razón de reflujo superior de 2.5, se observa que los perfiles del modelo simple y de Batchsim presentan una buena correlación.

Simulación N° 10a

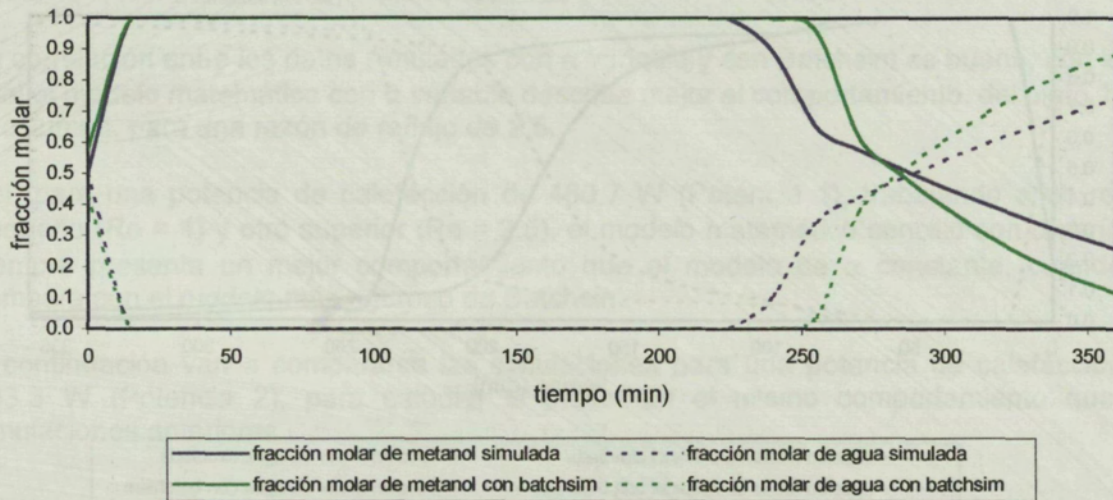


Figura 5.3.1.5. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.5$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{constante}$.

En la figura 5.3.1.5. se comparan los perfiles en el destilado para el modelo de α variable y el modelo de Batchsim.

Simulación N° 10b

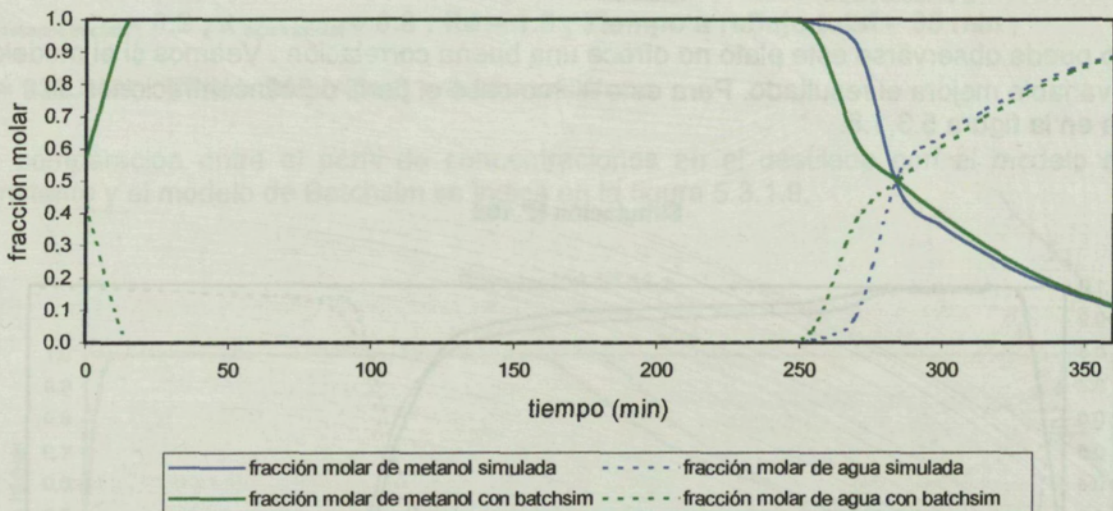


Figura 5.3.1.6. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.5$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{variable}$.

La comparación de los perfiles nos da una correlación mejor que utilizando el modelo de α constante:

$$\text{metanol: } X_{1, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 1.010 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.982$$

$$\text{agua: } X_{2, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 0.988 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.982$$

En la figura 5.3.1.7. se comparan los perfiles en el plato 10 de la columna para el modelo de α constante y el modelo de Batchsim.

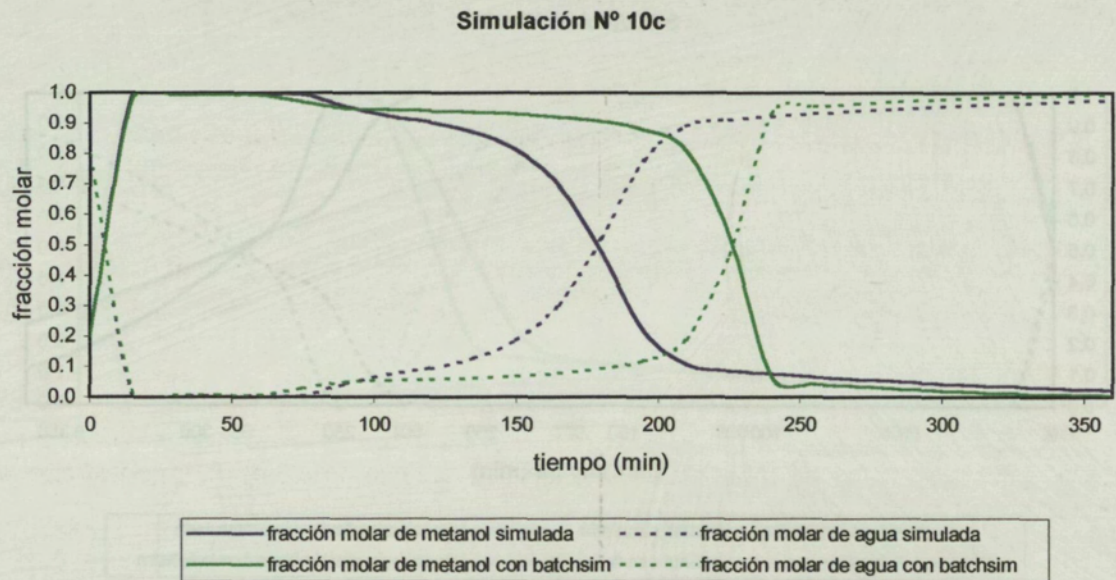


Figura 5.3.1.7. Perfil de concentraciones en el **plato 10**. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.5$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{constante}$.

La correlación matemática es:

$$\text{metanol: } X_{1, \text{ simulada } (\alpha = \text{cte})} = 0.831 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.875$$

$$\text{agua: } X_{2, \text{ simulada } (\alpha = \text{cte})} = 1.032 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.875$$

Como puede observarse este plato no ofrece una buena correlación. Veamos si el modelo de α variable mejora el resultado. Para este último caso el perfil de concentraciones se indica en la figura 5.3.1.8.

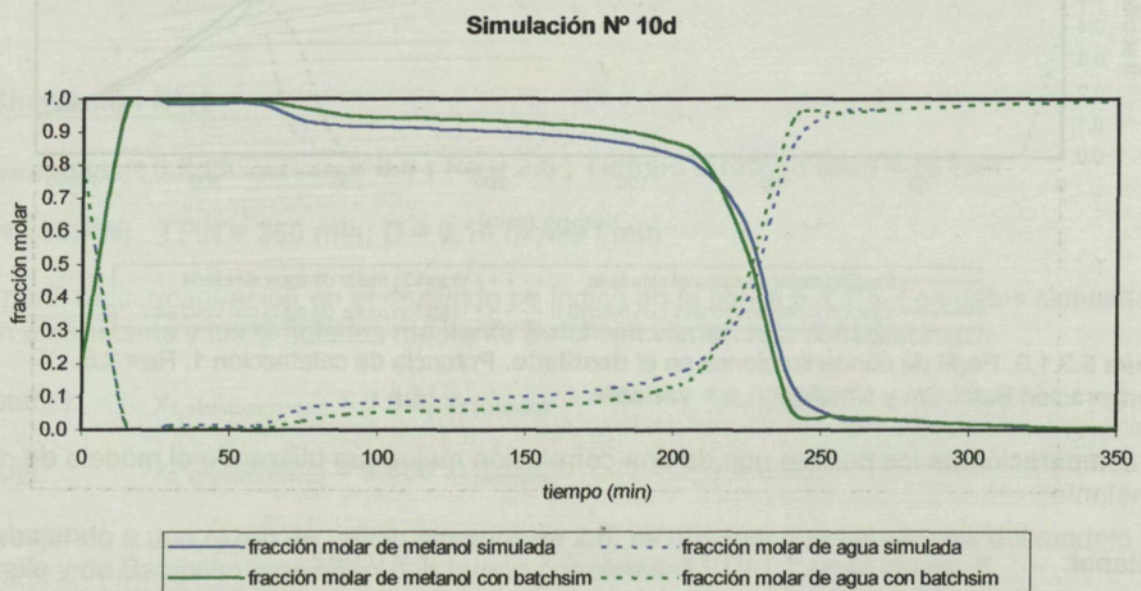


Figura 5.3.1.8. Perfil de concentraciones en el **plato 10**. Potencia de calefacción 1, $Re = 2.5$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{variable}$.

metanol: $x_{1, \text{ simulada}} (\alpha \neq \text{cte}) = 0.978 x_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.998$

agua: $x_{2, \text{ simulada}} (\alpha \neq \text{cte}) = 0.992 x_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.998$

La correlación entre los datos simulados con α variable y con Batchsim es buena, con lo cual el modelo matemático con α variable describe mejor el comportamiento del plato 10 de la columna, para una razón de reflujo de 2.5.

Así, para una potencia de calefacción de 466.7 W (Potencia 1), trabajando a un reflujo pequeño ($Re = 1$) y otro superior ($Re = 2.5$), el modelo matemático sencillo con α variable, siempre presenta un mejor comportamiento que el modelo de α constante, cuando se compara con el modelo más riguroso de Batchsim.

A continuación van a compararse las simulaciones para una potencia de calefacción de 933.3 W (Potencia 2), para estudiar si presentan el mismo comportamiento que las simulaciones anteriores.

• POTENCIA DE CALEFACCION 2

Se presentan dos simulaciones, una a un reflujo pequeño ($Re = 1.5$) y otra a un reflujo superior ($Re = 3$).

• Simulación N°11

$x_{\text{ metanol inicial}} = 0.2$; $x_{\text{ agua inicial}} = 0.8$; $Re = 1.5$; **Tiempo a reflujo total = 35 min** ;

P = 933.3 W ; **TFIN = 215 min** ; **D = 0.38 moles/min**

La comparación entre el perfil de concentraciones en el destilado con el modelo de α constante y el modelo de Batchsim se indica en la figura 5.3.1.9.

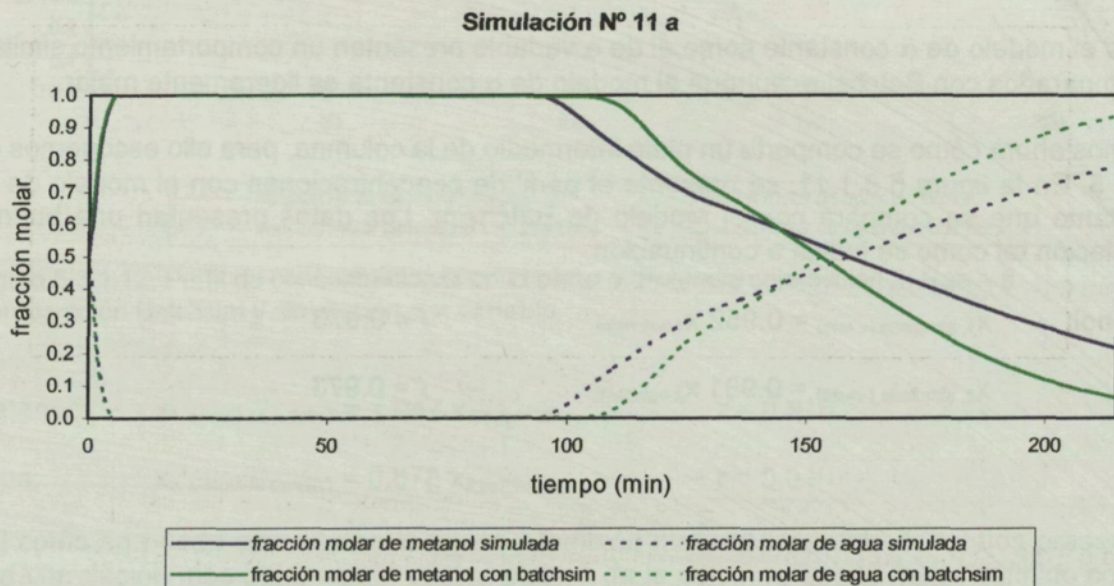


Figura 5.3.1.9. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 2, $Re = 1.5$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{constante}$.

Los perfiles en el destilado presentan una buena correlación:

$$\text{metanol: } X_{1, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 0.989 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.983$$

$$\text{agua: } X_{2, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 0.870 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.983$$

En la figura 5.3.1.10. se comparan los perfiles en el destilado para el modelo de α variable y el modelo de Batchsim.

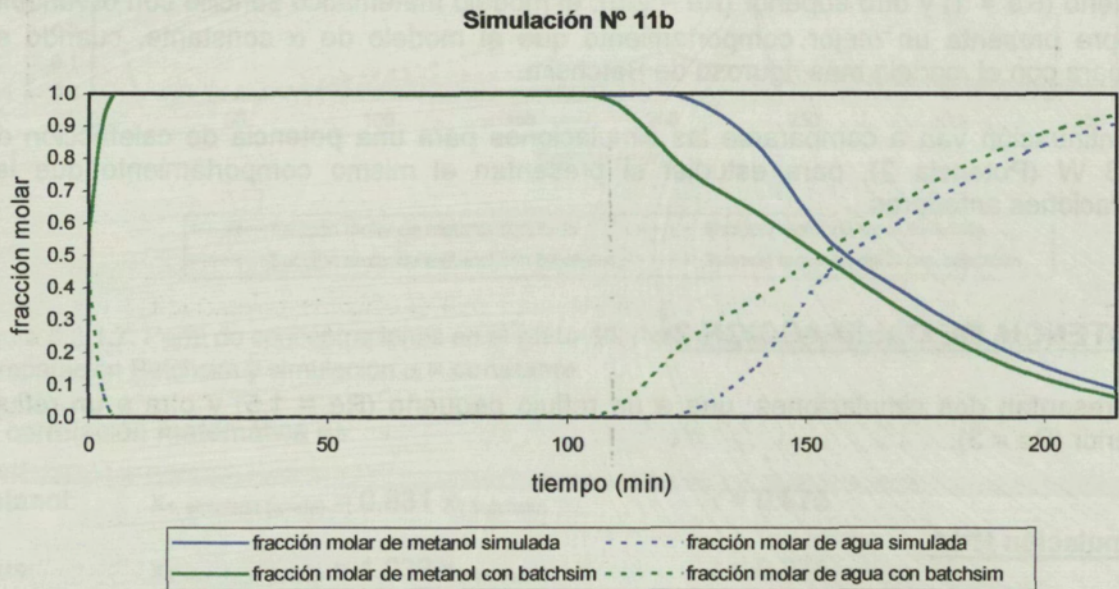


Figura 5.3.1.10. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 2, $Re = 1.5$, Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{variable}$.

$$\text{metanol: } X_{1, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 1.041 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.980$$

$$\text{agua: } X_{2, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 0.910 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.980$$

Tanto el modelo de α constante como el de α variable presentan un comportamiento similar al compararlos con Batchsim, aunque el modelo de α constante es ligeramente mejor.

Veamos ahora cómo se comporta un plato intermedio de la columna, para ello escogemos el plato 5. En la figura 5.3.1.11. se presenta el perfil de concentraciones con el modelo de α constante que se compara con el modelo de Batchsim. Los datos presentan una buena correlación tal como se indica a continuación:

$$\text{metanol: } X_{1, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 0.952 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.973$$

$$\text{agua: } X_{2, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 0.991 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.973$$

Simulación N° 11c

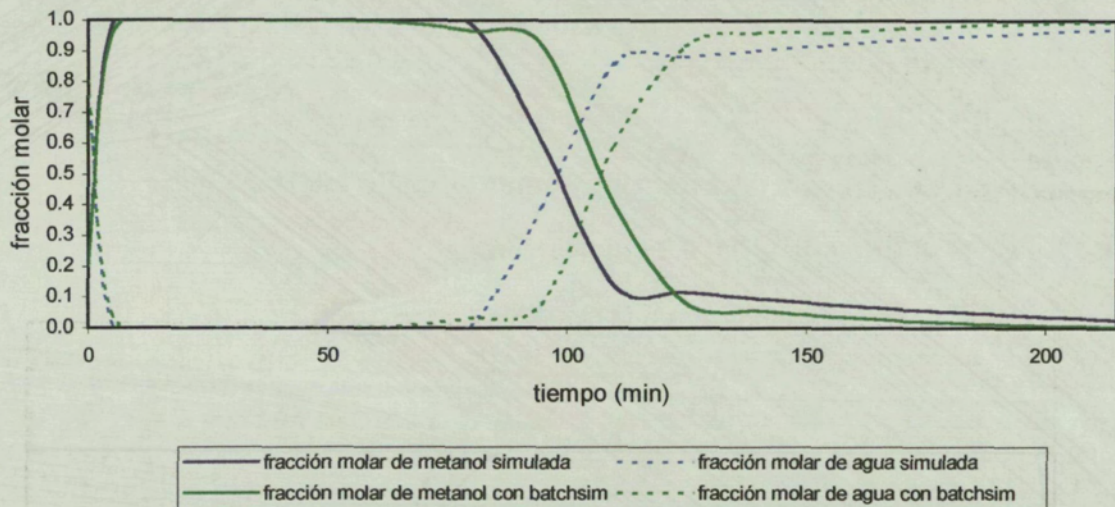


Figura 5.3.1.11. Perfil de concentraciones en el **plato 5**. Potencia de calefacción 2, $Re = 1.5$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{constante}$.

En la figura 5.3.1.12. se compara el perfil de concentraciones en el plato 5 para el modelo de α variable con el modelo de Batchsim.

Simulación N° 11d

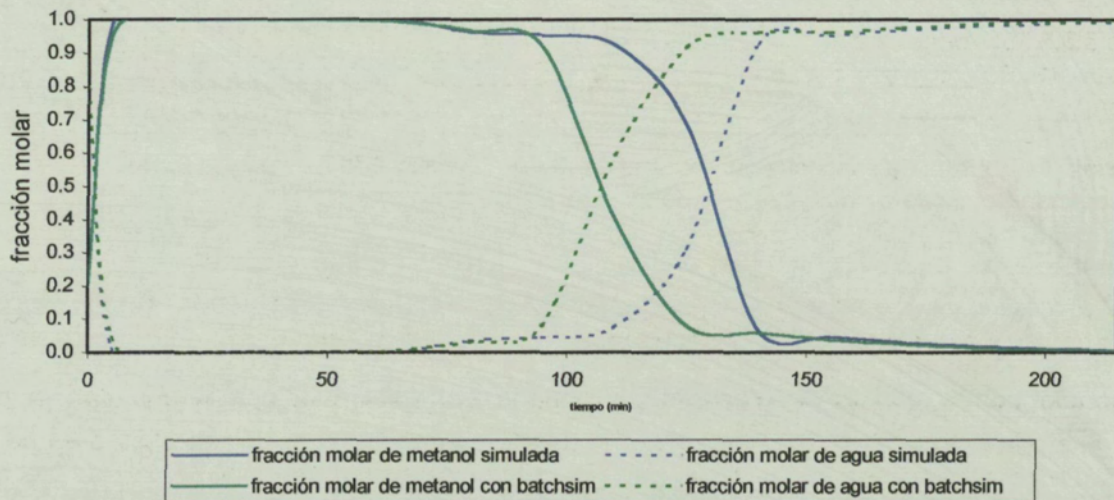


Figura 5.3.1.12. Perfil de concentraciones en el **plato 5**. Potencia calefacción 2, $Re = 1.5$. Comparación Batchsim y simulación $\alpha = \text{variable}$.

metanol: $X_{1, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 1.047 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.916$

agua: $X_{2, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 0.878 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.916$

Tal como se puede apreciar en la figura y también matemáticamente, los datos presentan una correlación más baja, con lo cual el plato 5 de la columna queda mejor definido con el modelo de α constante.