



# **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

Así, trabajando a una potencia de calefacción superior (933.3 W), y con un reflujo pequeño ( $Re = 1.5$ ), el modelo sencillo con  $\alpha$  constante ofrece un comportamiento muy comparable con el modelo más complejo de Batchsim. Vamos ahora a estudiar a través de la siguiente simulación, cómo se comporta el modelo al trabajar a una razón de reflujo superior.

### • Simulación N°12

$x_{\text{metanol inicial}} = 0.2$  ;  $x_{\text{agua inicial}} = 0.8$  ;  $Re = 3$  ; Tiempo a reflujo total = 35 min ;

$P = 933.3 \text{ W}$  ;  $TFIN = 260 \text{ min}$  ;  $D = 0.28 \text{ moles/min}$

Los perfiles en el destilado se indican en la siguiente figura.

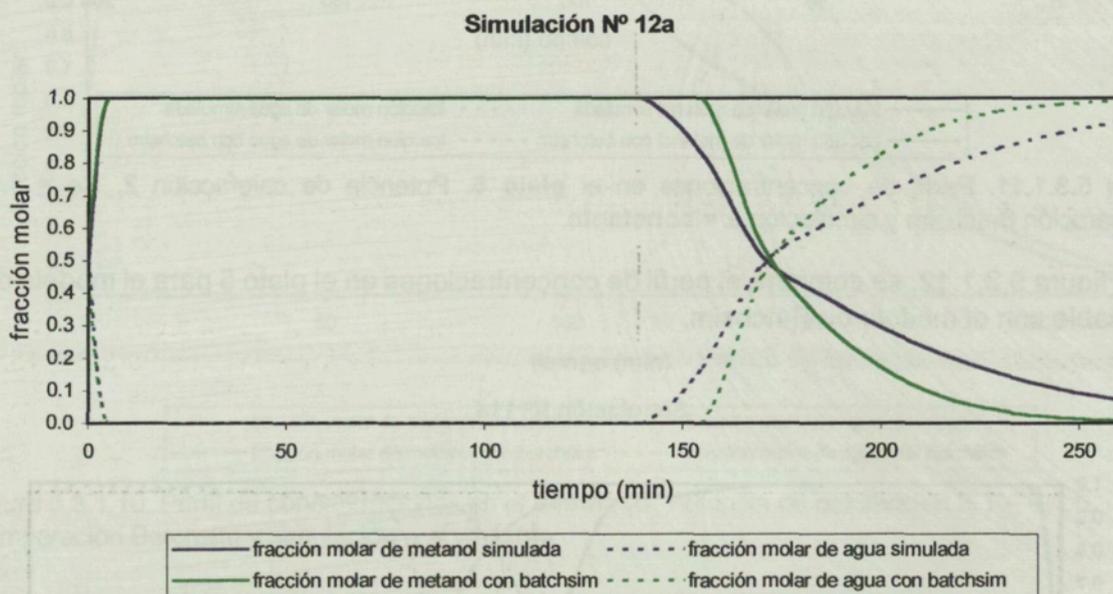


Figura 5.3.1.13. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 2,  $Re = 3$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{constante}$ .

metanol:  $x_{1, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 0.986 x_{1, \text{ batchsim}}$   $r = 0.990$

agua:  $x_{2, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 0.908 x_{2, \text{ batchsim}}$   $r = 0.990$

El modelo con  $\alpha$  constante presenta una buena correlación al compararlo con el de Batchsim.

Al comparar el modelo de  $\alpha$  variable con el de Batchsim (figura 5.3.1.14.) la correlación aún es mejor:

metanol:  $x_{1, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 0.998 x_{1, \text{ batchsim}}$   $r = 0.999$

agua:  $x_{2, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 1.014 x_{2, \text{ batchsim}}$   $r = 0.999$

Así, a una razón de reflujo de 3, el modelo con  $\alpha$  variable describe mejor el perfil de concentraciones en el destilado que el modelo con  $\alpha$  constante, al ser comparado con el modelo de Batchsim.

## Simulación Nº 12b

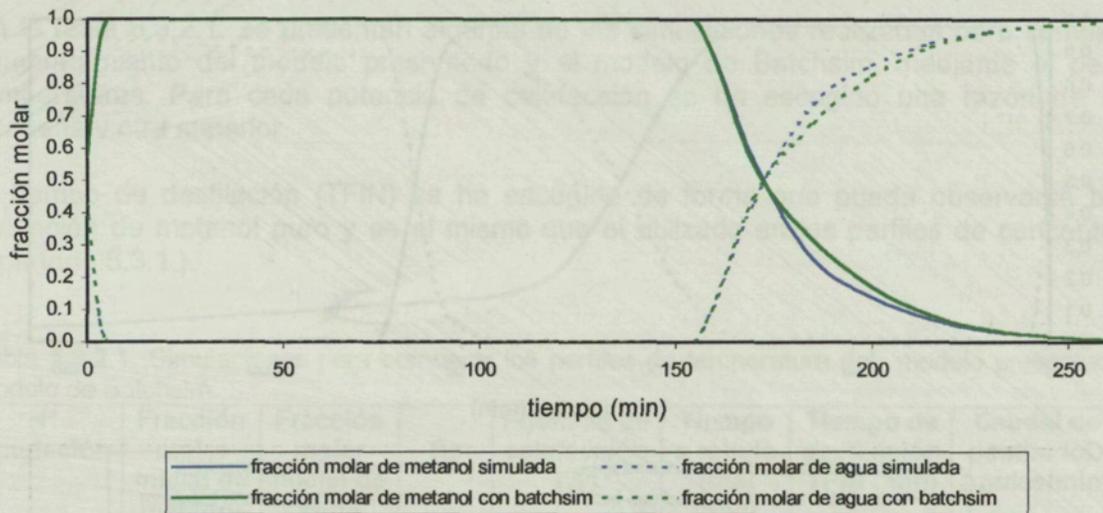


Figura 5.3.1.14. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 2, Re = 3. Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{variable}$ .

Veamos cómo se comporta el plato intermedio 5 a razón de reflujo 3. Los perfiles de concentración en este plato con el modelo de  $\alpha$  constante se indican en la figura 5.3.1.15.

## Simulación Nº 12c

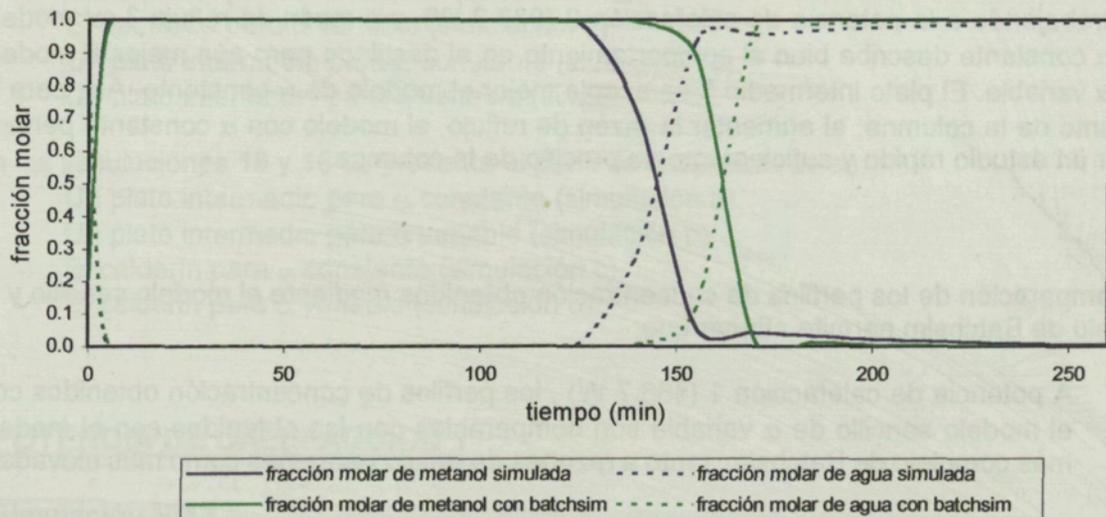


Figura 5.3.1.15. Perfil de concentraciones en el **plato 5**. Potencia de calefacción 2, Re = 3. Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{constante}$ .

$$\text{metanol: } x_{1, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 0.908 x_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.916$$

$$\text{agua: } x_{2, \text{ simulada } (\alpha=\text{cte})} = 1.000 x_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.916$$

Este plato presenta una buena correlación con el modelo de  $\alpha$  constante, aunque inferior a la correlación presentada en el perfil de concentraciones en el destilado ( $r = 0.990$ ). Al trabajar con el modelo de  $\alpha$  variable en el plato 5 (figura 5.3.1.16), la correlación no es buena ( $r = 0.759$ ).

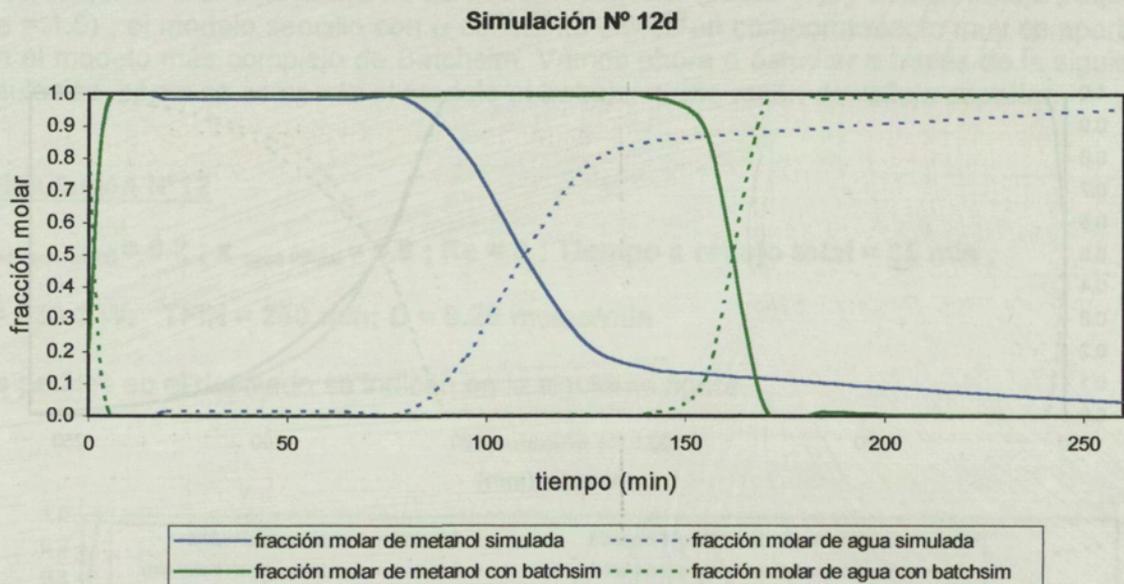


Figura 5.3.1.16. Perfil de concentraciones en el **plato 5**. Potencia de calefacción 2,  $Re = 3$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{variable}$ .

metanol:  $X_{1, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 0.718 X_{1, \text{ batchsim}} \quad r = 0.759$

agua:  $X_{2, \text{ simulada } (\alpha \neq \text{cte})} = 0.947 X_{2, \text{ batchsim}} \quad r = 0.759$

Así, trabajando a la potencia de calefacción 2 (933.3 W), y a razón de reflujo 3, el modelo con  $\alpha$  constante describe bien el comportamiento en el destilado pero aún mejor el modelo con  $\alpha$  variable. El plato intermedio 5 se acopla mejor al modelo de  $\alpha$  constante. Así, para el conjunto de la columna, al aumentar la razón de reflujo, el modelo con  $\alpha$  constante permite hacer un estudio rápido y suficientemente preciso de la columna.

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

- A potencia de calefacción 1 (466.7 W) , los perfiles de concentración obtenidos con el modelo sencillo de  $\alpha$  variable son comparables con los obtenidos con el modelo más complejo de Batchsim, tanto a razones de reflujo pequeñas como más elevadas.
- A potencia de calefacción 2 (933.3 W) , el modelo sencillo con  $\alpha$  constante es el que presenta una mejor correlación con Batchsim, tanto a razones de reflujo pequeñas como más elevadas.

### 5.3.2. PERFILES DE TEMPERATURA

En la tabla 5.3.2.1. se presentan algunas de las simulaciones realizadas para comparar el comportamiento del modelo presentado y el modelo de Batchsim, mediante el perfil de temperaturas. 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 y es el mismo que el utilizado en los perfiles de concentración (apartado 5.3.1.).

Tabla 5.3.2.1. Simulaciones para comparar los perfiles de temperatura 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 destilado D (moles/min)
13	0.2	0.8	1	466.7	75	315	0.23
14	0.2	0.8	2.5	466.7	75	360	0.16
15	0.2	0.8	1.5	933.3	35	215	0.38
16	0.2	0.8	3.0	933.3	35	260	0.28

466.7 W = Potencia 1

933.3 W = Potencia 2

En las simulaciones 13 y 14 se presenta el perfil de temperaturas en:

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

En las simulaciones 15 y 16 se presenta el perfil de temperaturas en:

- Un plato intermedio para  $\alpha$  constante (simulación a).
- Un plato intermedio para  $\alpha$  variable (simulación b).
- El calderín para  $\alpha$  constante (simulación c).
- El calderín para  $\alpha$  variable (simulación d).

#### • POTENCIA DE CALEFACCION 1

##### • Simulación N°13

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

**P = 466.7W; TFIN = 315 min; D = 0.23 moles /min**

En la figura 5.3.2.1. se compara el perfil de temperaturas en el destilado para el modelo de  $\alpha$  constante y el modelo de Batchsim. La correlación entre los dos perfiles es:

$$t_{\text{simulada } (\alpha=\text{cte})} = 1.031 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.964$$

## Simulación N° 13a

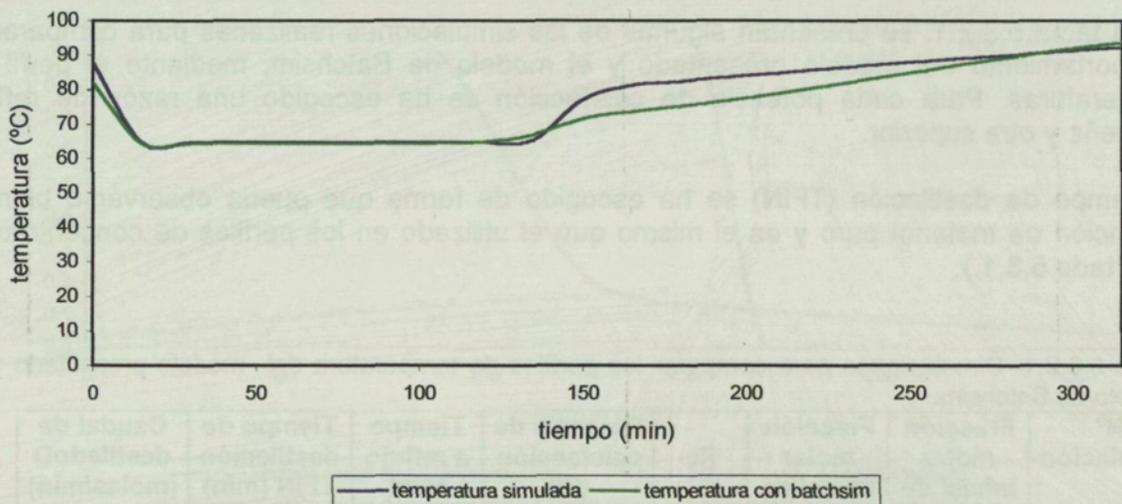


Figura 5.3.2.1. Perfil de temperaturas en el **destilado**. Potencia de calefacción 1,  $Re = 1$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{constante}$ .

En la figura 5.3.2.2. el modelo de Batchsim es comparado con el modelo de  $\alpha$  variable.

## Simulación N° 13b

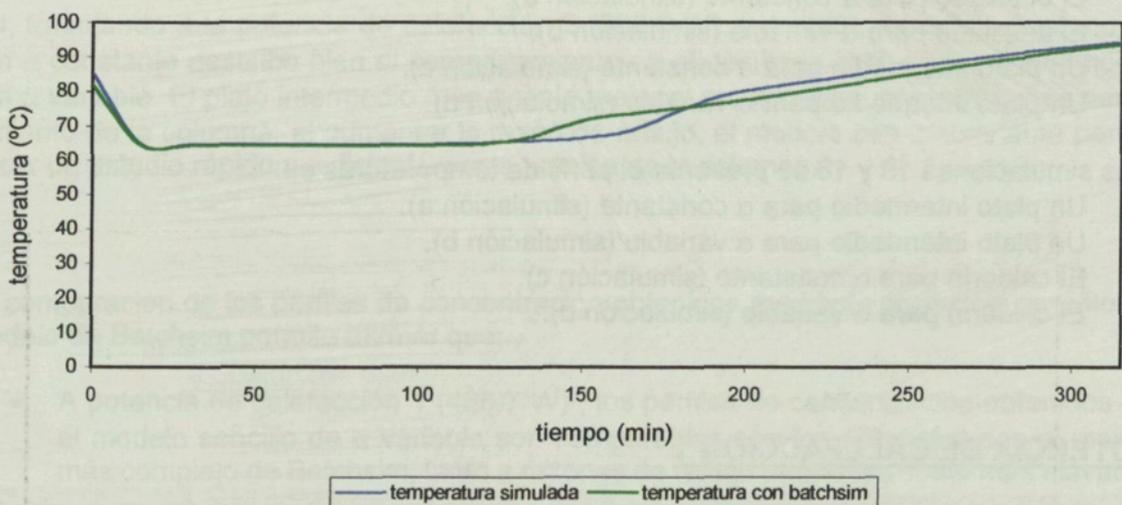


Figura 5.3.2.2. Perfil de temperaturas en el **destilado**. Potencia de calefacción 1,  $Re = 1$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{variable}$ .

Ahora la correlación es:

$$t_{\text{simulada}} (\alpha \neq \text{cte}) = 1.010 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.986$$

El modelo de  $\alpha$  variable es mejor que el de  $\alpha$  constante, para describir el perfil de temperaturas en el destilado, a una razón de reflujo de 1. Veamos ahora cómo se comporta el perfil de temperaturas en el plato 10 de la columna. En la figura 5.3.2.3. se presenta el perfil de temperaturas en este plato, obtenido mediante el modelo de  $\alpha$  constante, y se compara con el obtenido por Batchsim.

Simulación N° 13c

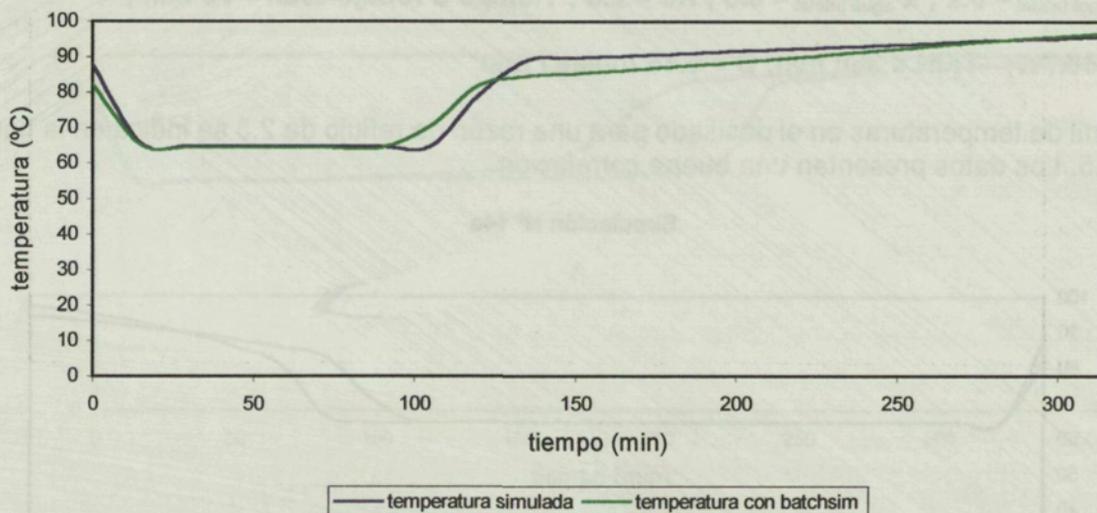


Figura 5.3.2.3. Perfil de temperaturas en el **plato 10**. Potencia de calefacción 1,  $Re = 1$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{constante}$ .

Los perfiles viene correlacionados por:

$$t_{\text{simulada}} (\alpha = \text{cte}) = 1.015 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.981$$

Si ahora se compara el modelo de Batchsim con el de  $\alpha$  variable, se obtienen los perfiles de la figura 5.3.2.4. cuya correlación es:

$$t_{\text{simulada}} (\alpha \neq \text{cte}) = 1.011 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.993$$

Simulación N° 13d

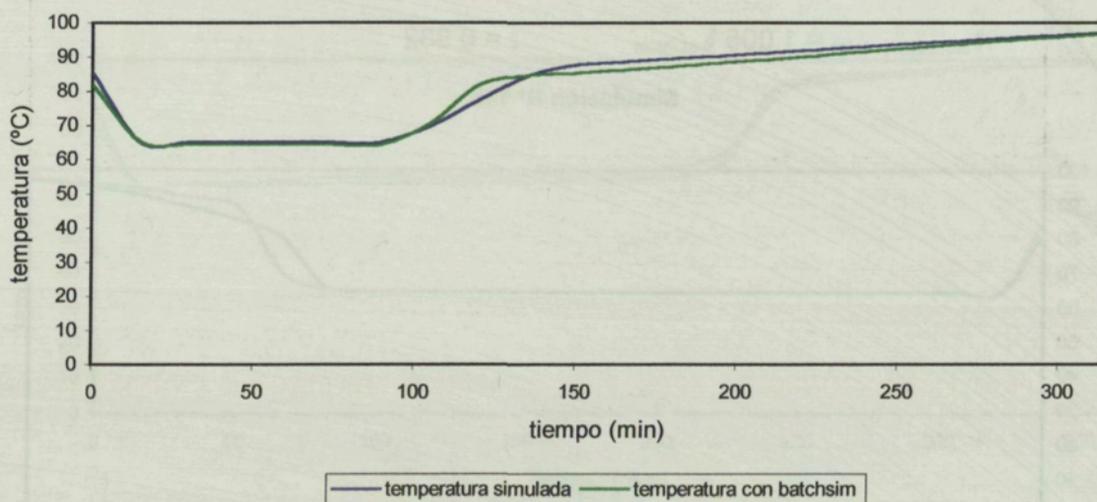


Figura 5.3.2.4. Perfil de temperaturas en el **plato 10**. Potencia de calefacción 1,  $Re = 1$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{variable}$ .

El modelo de  $\alpha$  variable es mejor para describir el comportamiento del plato 10.

Así, para una razón de reflujo de 1 y potencia de calefacción de 466.7 W, el modelo de  $\alpha$  variable es mejor que el de  $\alpha$  constante.

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  $\alpha$  variable es un buen modelo, al ser comparado con el modelo más complejo de Batchsim. Con este modelo los perfiles de temperatura han presentado una buena concordancia, al igual que los perfiles de concentración estudiados en el apartado 5.3.1.

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

### • POTENCIA DE CALEFACCION 2

Se presentan dos simulaciones, una a un reflujo pequeño ( $Re = 1.5$ ) y otra a un reflujo superior ( $Re = 3$ ) para el plato 5 y el calderín respectivamente.

#### • Simulación N°15

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

$P = 933.3 \text{ W}$  ;  $T_{\text{FIN}} = 215 \text{ min}$  ;  $D = 0.38 \text{ moles/min}$

La comparación entre el perfil de temperaturas en el plato 5 con el modelo de  $\alpha$  constante y el modelo de Batchsim se indica en la figura 5.3.2.9.

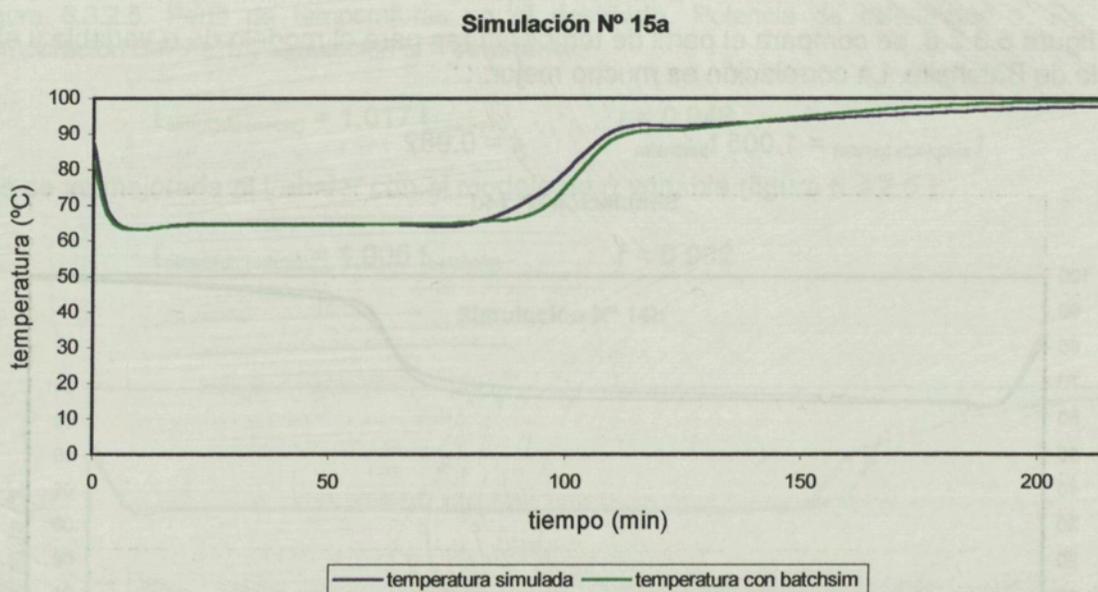


Figura 5.3.2.9. Perfil de temperaturas en el **plato 5**. Potencia de calefacción 2,  $Re = 1.5$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{constante}$ .

La correlación de los perfiles es buena:

$$t_{\text{simulada } (\alpha=\text{cte})} = 1.003 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.990$$

Al comparar el modelo de Batchsim con el de  $\alpha$  variable (figura 5.3.2.10.) se obtiene una correlación inferior:

$$t_{\text{simulada}} (\alpha \neq \text{cte}) = 0.968 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.910$$

Simulación N° 15b

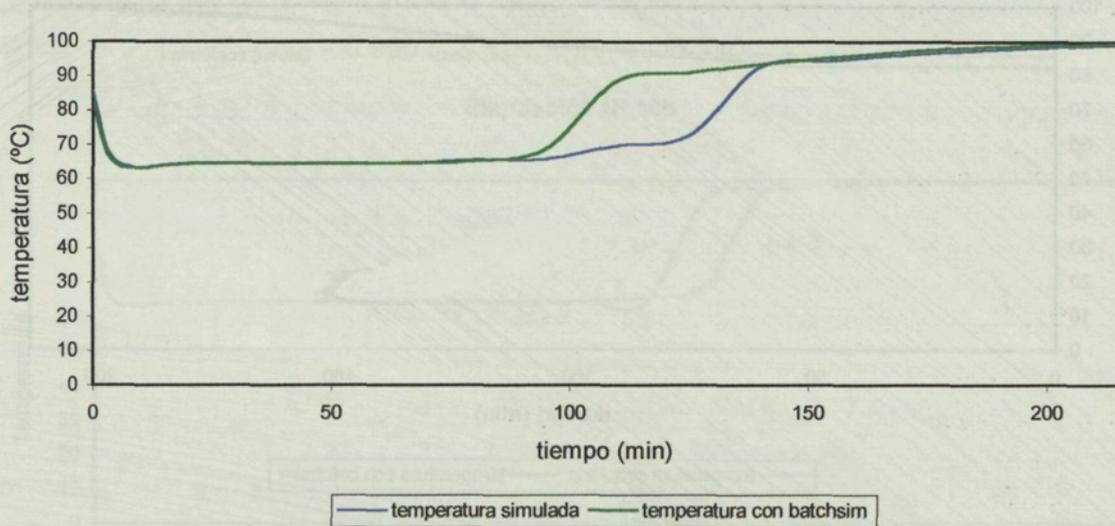


Figura 5.3.2.10. Perfil de temperaturas en el **plato 5**. Potencia de calefacción 2,  $Re = 1.5$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{variable}$ .

Así, el perfil de temperaturas en el plato 5 queda mejor definido por el modelo de  $\alpha$  constante, al ser comparado con Batchsim.

En la figura 5.3.2.11. se estudian los perfiles de temperatura en el calderín. El modelo de  $\alpha$  constante y Batchsim son comparados y ofrecen una buena correlación:

$$t_{\text{simulada}} (\alpha = \text{cte}) = 1.023 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.994$$

Simulación N° 15c

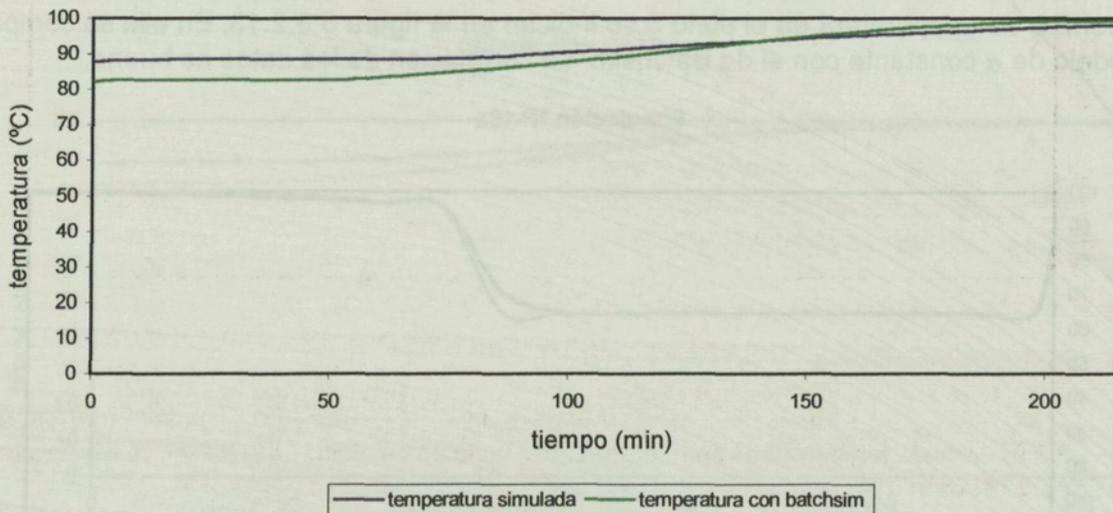


Figura 5.3.2.11. Perfil de temperaturas en el **calderín**. Potencia de calefacción 2,  $Re = 1.5$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{constante}$ .

Cuando se compara con el modelo de  $\alpha$  variable (figura 5.3.2.12.), la correlación es ligeramente inferior:

$$t_{\text{simulada}} (\alpha \neq \text{cte}) = 1.011 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.990$$

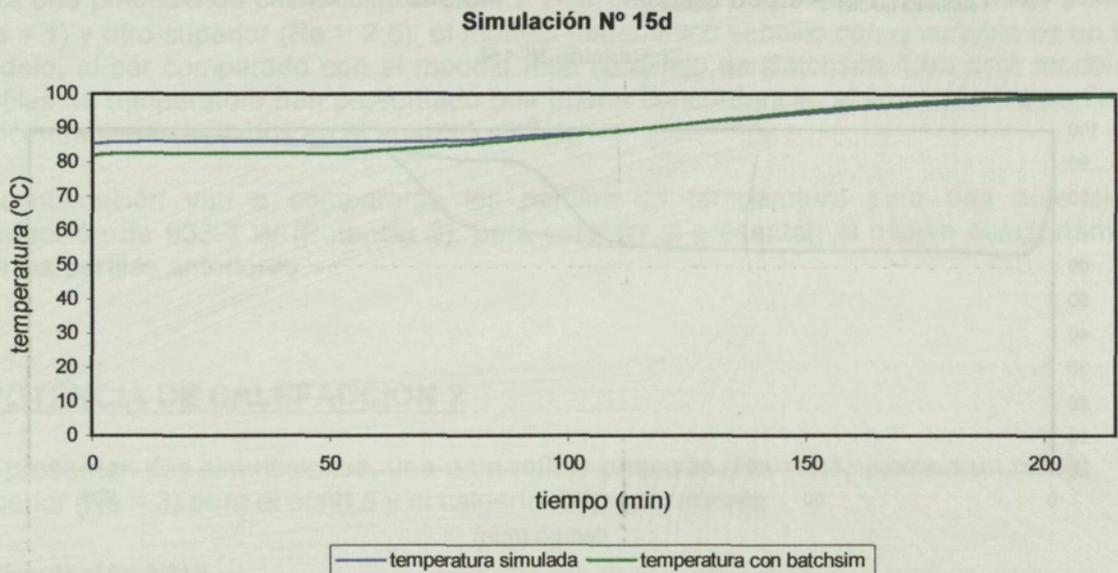


Figura 5.3.2.12. Perfil de temperaturas en el **calderín**. Potencia de calefacción 2,  $Re = 1.5$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{variable}$ .

Así, a una razón de reflujo de 1.5 y potencia 2, el calderín, al igual que el plato 5, quedan mejor definidos por el modelo sencillo de  $\alpha$  constante. En la simulación 16, se realiza un estudio similar pero ahora trabajando a una razón de reflujo superior de 3.

#### • Simulación N°16

$x_{\text{metanol inicial}} = 0.2$  ;  $x_{\text{agua inicial}} = 0.8$  ;  $Re = 3$  ; Tiempo a reflujo total = 35 min ;

$P = 933.3 \text{ W}$  ;  $T_{\text{FIN}} = 260 \text{ min}$  ;  $D = 0.28 \text{ moles/min}$

Los perfiles de temperatura en el plato 5 se indican en la figura 5.3.2.13. En ella se compara el modelo de  $\alpha$  constante con el de Batchsim. La correlación de los datos es buena.

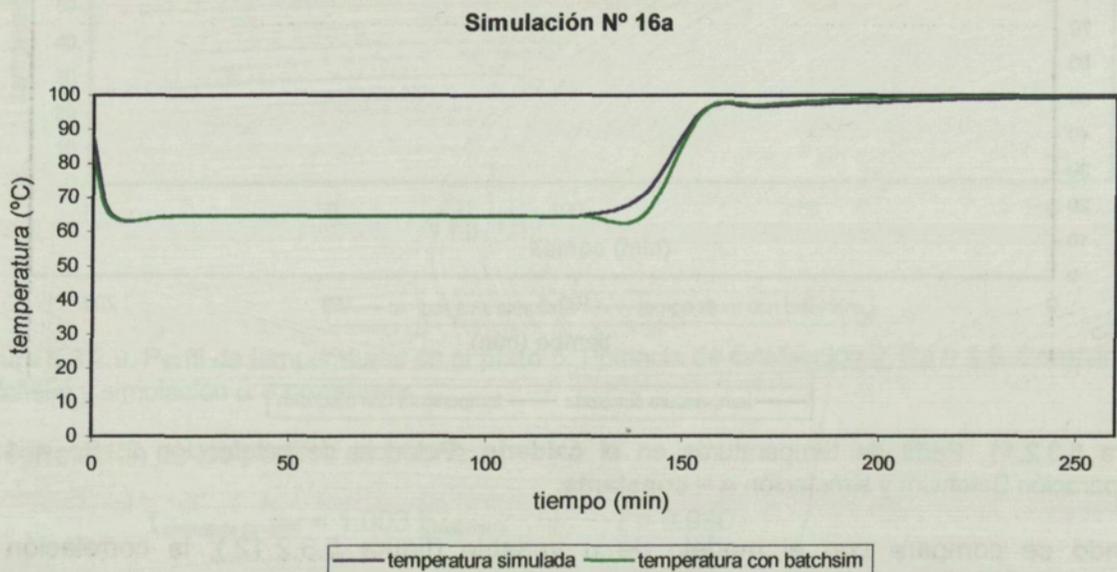


Figura 5.3.2.13. Perfil de temperaturas en el **plato 5**. Potencia de calefacción 2,  $Re = 3$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{constante}$ .

$$t_{\text{simulada}} (\alpha=\text{cte}) = 1.000 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.990$$

pero disminuye al trabajar con el modelo de  $\alpha$  variable (figura 5.3.2.14.):

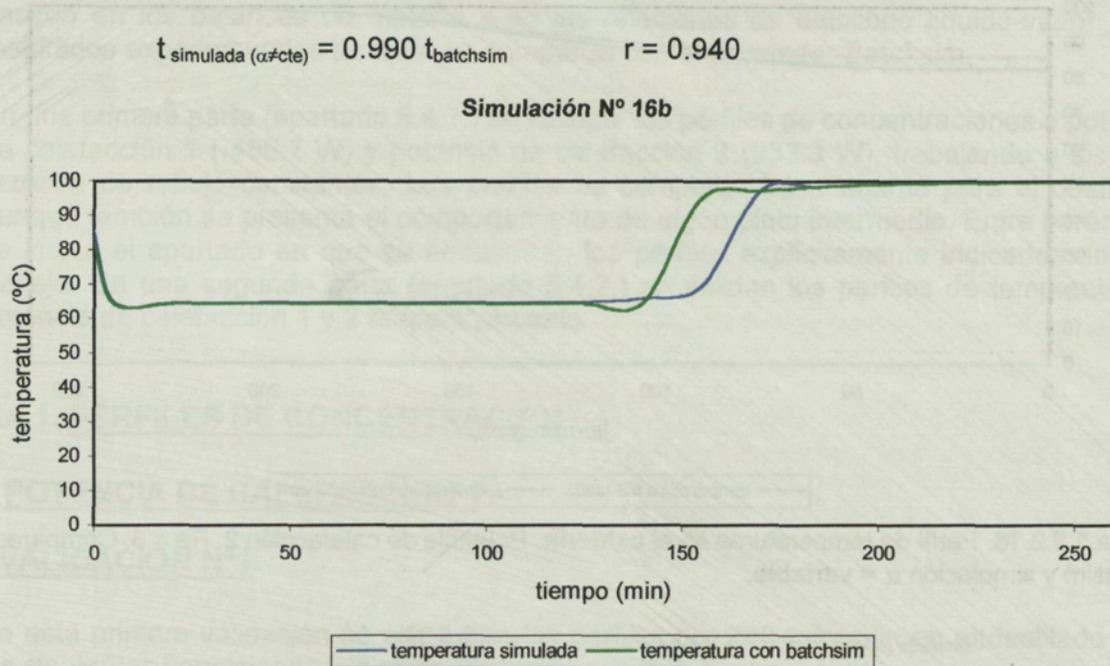


Figura 5.3.2.14. Perfil de temperaturas en el **plato 5**. Potencia de calefacción 2,  $Re = 3$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{variable}$ .

Así, al aumentar la razón de reflujo ( $Re = 3$ ) y trabajando a potencia 2, el plato 5 queda mejor definido con el modelo de  $\alpha$  constante.

Para el calderín, tanto el modelo de  $\alpha$  constante (figura 5.3.2.15.) como el de  $\alpha$  variable (figura 5.3.2.16.) definen bien el comportamiento del perfil de temperaturas, tal como puede observarse en las respectivas correlaciones.

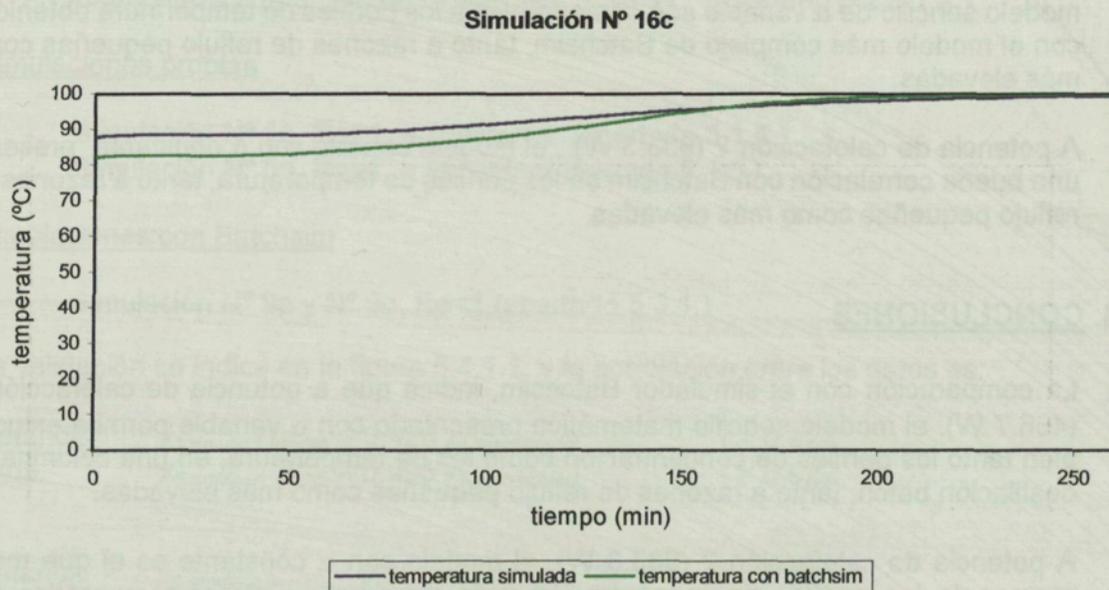


Figura 5.3.2.15. Perfil de temperaturas en el **calderín**. Potencia de calefacción 2,  $Re = 3$ . Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{constante}$ .

$$t_{\text{simulada}} (\alpha=\text{cte}) = 1.024 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.998$$

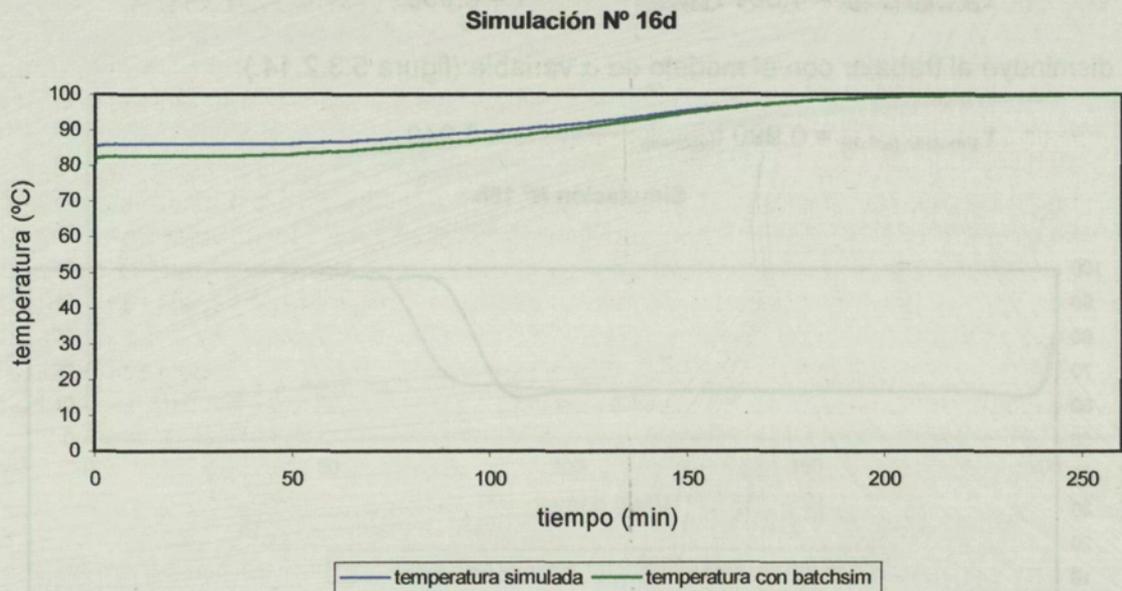


Figura 5.3.2.16. Perfil de temperaturas en el calderín. Potencia de calefacción 2, Re = 3. Comparación Batchsim y simulación  $\alpha = \text{variable}$ .

$$t_{\text{simulada}} (\alpha \neq \text{cte}) = 1.015 t_{\text{batchsim}} \quad r = 0.999$$

Par una potencia de calefacción de 933.3 W y trabajando a un razón de reflujo de 3, el modelo con  $\alpha$  constante permite definir bien los perfiles de temperatura, al ser comparado con el modelo de Batchsim.

Después de comparar los perfiles de temperatura obtenidos con el modelo sencillo y con el modelo de Batchsim se puede afirmar que:

- A potencia de calefacción 1 (466.7 W), los perfiles de temperatura obtenidos con el modelo sencillo de  $\alpha$  variable son comparables a los perfiles de temperatura obtenidos con el modelo más complejo de Batchsim, tanto a razones de reflujo pequeñas como más elevadas.
- A potencia de calefacción 2 (933.3 W), el modelo sencillo con  $\alpha$  constante presenta una buena correlación con Batchsim en los perfiles de temperatura, tanto a razones de reflujo pequeñas como más elevadas.

### 5.3.3. CONCLUSIONES

- La comparación con el simulador Batchsim, indica que a potencia de calefacción 1 (466.7 W), el modelo sencillo matemático presentado con  $\alpha$  variable permite estudiar bien tanto los perfiles de concentración como los de temperatura, en una columna de destilación batch, tanto a razones de reflujo pequeñas como más elevadas.
- A potencia de calefacción 2 (933.3 W), el modelo con  $\alpha$  constante es el que mejor representa los perfiles de concentración y de temperatura al ser comparados con Batchsim, tanto a razones de reflujo pequeñas como más elevadas.
- Estos resultados serán concluyentes después de ser comparados con los resultados experimentales obtenidos en la planta piloto.

## 5.4. VALIDACION DE LAS SIMULACIONES METANOL-AGUA

El objetivo de este apartado es realizar la validación experimental del modelo presentado, basado en los balances de materia y en las relaciones de equilibrio líquido-vapor. Los resultados experimentales también se comparan con el simulador Batchsim.

En una primera parte (apartado 5.4.1.) se validan los perfiles de concentraciones a potencia de calefacción 1 (466.7 W) y potencia de calefacción 2 (933.3 W), trabajando a distintas razones de reflujo constantes. Los perfiles se comparan básicamente para el destilado, aunque también se presenta el comportamiento de algún plato intermedio. Entre paréntesis se indica el apartado en que se encuentran los perfiles explícitamente indicados en este trabajo. En una segunda parte (apartado 5.4.2.) se validan los perfiles de temperatura a potencia de calefacción 1 y 2 respectivamente.

### 5.4.1. PERFILES DE CONCENTRACION

#### • POTENCIA DE CALEFACCION 1

#### • VALIDACION N°1

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

Fracción molar inicial de metanol (1):	0.2
Fracción molar inicial de agua (2):	0.8
Razón de reflujo:	1

Las experiencias y simulaciones comparadas en esta primera validación son:

#### Experiencias

- Experiencia a potencia de calefacción 1, Re=1 . (apartado 5.2.5.1.2.)

#### Simulaciones propias

- Simulación N° 1a, Re=1,  $\alpha$  constante. (apartado 5.1.5.)
- Simulación N° 5a, Re=1,  $\alpha$  variable. (apartado 5.1.6.)

#### Simulaciones con Batchsim

- Simulación N° 9a y N° 9b, Re=1.(apartado 5.3.1.)

La validación se indica en la figura 5.4.1.1. y la correlación entre los datos es:

metanol:	$X_{1,simulada (\alpha=cte)} = 0.920 X_{1,experimental}$	$r = 0.922$
agua:	$X_{2,simulada (\alpha=cte)} = 0.996 X_{2,experimental}$	$r = 0.922$

metanol:	$X_{1,simulada (\alpha \neq cte)} = 0.989 X_{1,experimental}$	$r = 0.995$
agua:	$X_{2,simulada (\alpha \neq cte)} = 1.004 X_{2,experimental}$	$r = 0.995$

metanol:	$X_{1,experimental} = 1.063 X_{1,batchsim}$	$r = 0.971$
agua:	$X_{2,experimental} = 0.921 X_{2,batchsim}$	$r = 0.971$

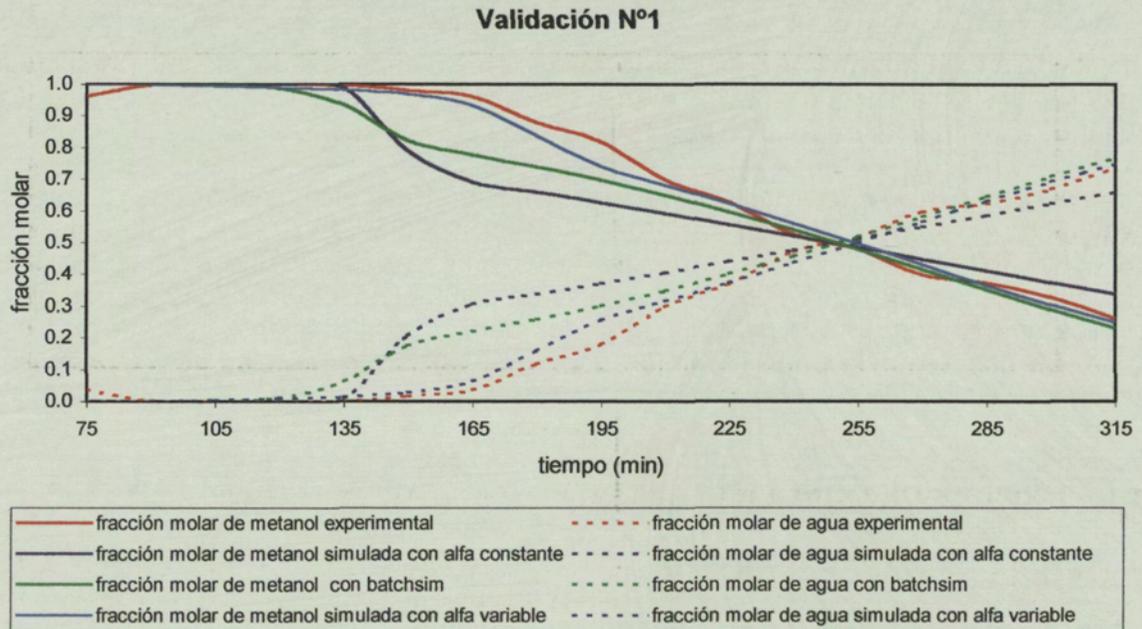


Figura 5.4.1.1. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 1,  $Re = 1$ .

Todas las correlaciones son bastante buenas pero la mejor corresponde al modelo con  $\alpha$  variable ( $r=0.995$ ). Así, el perfil de concentraciones en el destilado para una razón de reflujo de 1 puede estudiarse bien con este modelo.

## • VALIDACION N°2

En esta validación se comparan los perfiles de concentración en el plato 10 para las mismas condiciones iniciales que en la validación anterior:

Fracción molar inicial de metanol (1): 0.2  
 Fracción molar inicial de agua (2): 0.8  
 Razón de reflujo: 1

Las experiencias y simulaciones comparadas en esta primera validación son:

### Experiencias

- Experiencia a potencia de calefacción 1,  $Re=1$  . (apartado 5.2.5.1.2.)

### Simulaciones propias

- Simulación N° 1c,  $Re=1$ ,  $\alpha$  constante. (apartado 5.1.5.)
- Simulación N° 5c,  $Re=1$ ,  $\alpha$  variable.

### Simulaciones con Batchsim

- Simulación N° 9c y N° 9d,  $Re=1$ . (apartado 5.3.1.)

La validación se indica en la figura 5.4.1.2. donde se observa que el perfil experimental no se ajusta demasiado a los perfiles simulados.

## Validación N° 2

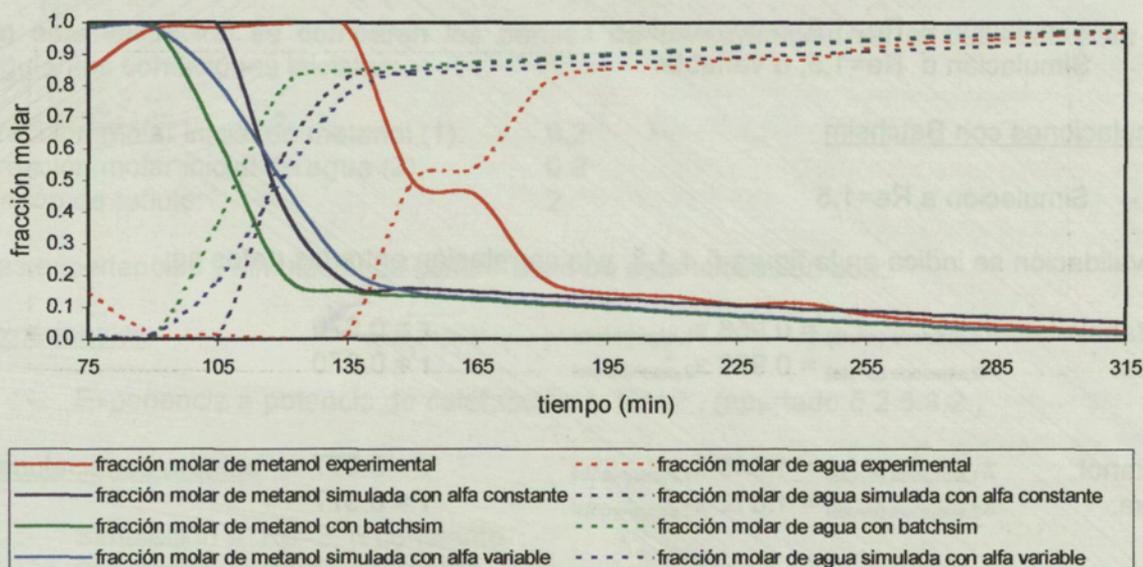


Figura 5.4.1.2. Perfil de concentraciones en el plato 10. Potencia de calefacción 1,  $Re=1$ .

La correlación matemática también corrobora este comportamiento:

$$\begin{array}{ll} \text{metanol:} & X_{1,\text{simulada}} (\alpha=\text{cte}) = 0.702 X_{1,\text{experimental}} \quad r = 0.780 \\ \text{agua:} & X_{2,\text{simulada}} (\alpha=\text{cte}) = 1.037 X_{2,\text{experimental}} \quad r = 0.780 \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{metanol:} & X_{1,\text{simulada}} (\alpha \neq \text{cte}) = 0.680 X_{1,\text{experimental}} \quad r = 0.826 \\ \text{agua:} & X_{2,\text{simulada}} (\alpha \neq \text{cte}) = 1.071 X_{2,\text{experimental}} \quad r = 0.826 \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{metanol:} & X_{1,\text{experimental}} = 1.188 X_{1,\text{batchsim}} \quad r = 0.722 \\ \text{agua:} & X_{2,\text{experimental}} = 0.797 X_{2,\text{batchsim}} \quad r = 0.722 \end{array}$$

Los resultados obtenidos no permiten conocer cual es el mejor modelo para el plato 10.

### • VALIDACION N°3

Para una  $Re=1$ , el perfil de concentraciones en el destilado sigue bien el modelo de  $\alpha$  variable. En esta tercera validación se estudia el comportamiento de los perfiles para una razón de reflujo de 1.5, ligeramente superior a la anterior. Las condiciones iniciales son:

$$\begin{array}{ll} \text{Fracción molar inicial de metanol (1):} & 0.2 \\ \text{Fracción molar inicial de agua (2):} & 0.8 \\ \text{Razón de reflujo:} & 1.5 \end{array}$$

Las experiencias y simulaciones comparadas en esta validación son:

#### Experiencias

- Experiencia a potencia de calefacción 1,  $Re=1.5$ . (apartado 5.2.5.2.2.)

Simulaciones propias

- Simulación a  $Re=1.5$ ,  $\alpha$  constante.
- Simulación a  $Re=1.5$ ,  $\alpha$  variable.

Simulaciones con Batchsim

- Simulación a  $Re=1.5$

La validación se indica en la figura 5.4.1.3. y la correlación entre los datos es:

metanol:	$X_{1,simulada (\alpha=cte)} = 0.956 X_{1,experimental}$	$r = 0.970$
agua:	$X_{2,simulada (\alpha=cte)} = 0.999 X_{2,experimental}$	$r = 0.970$

metanol:	$X_{1,simulada (\alpha \neq cte)} = 1.040 X_{1,experimental}$	$r = 0.977$
agua:	$X_{2,simulada (\alpha \neq cte)} = 1.012 X_{2,experimental}$	$r = 0.977$

metanol:	$X_{1,experimental} = 1.000 X_{1,batchsim}$	$r = 0.997$
agua:	$X_{2,experimental} = 0.931 X_{2,batchsim}$	$r = 0.997$

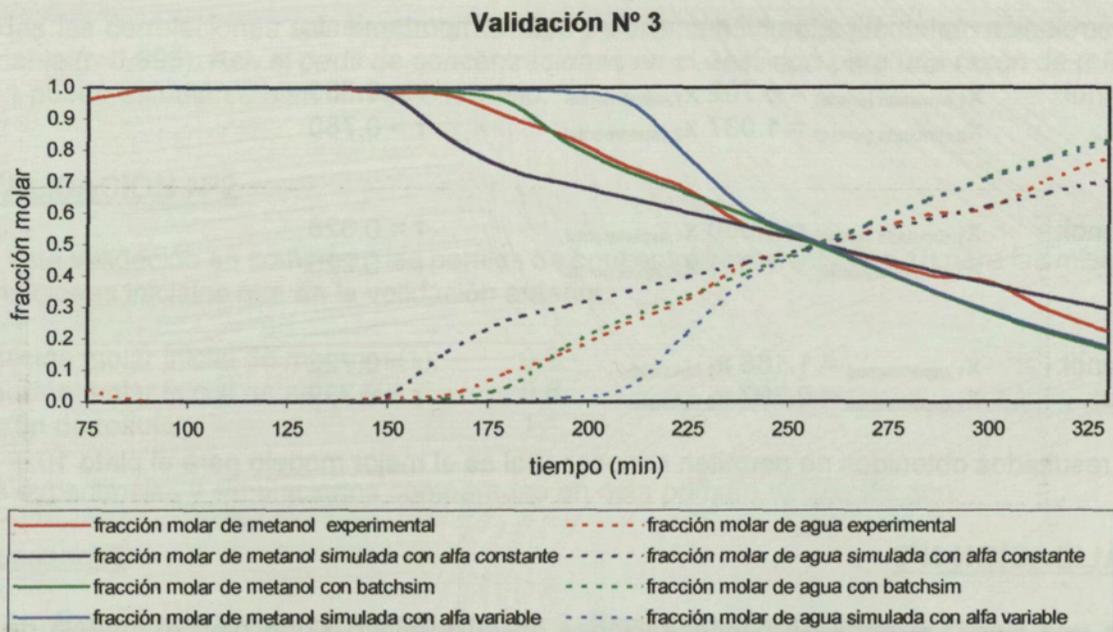


Figura 5.4.1.3. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 1,  $Re = 1.5$ .

El modelo con  $\alpha$  variable presenta una correlación mejor que el modelo con  $\alpha$  constante. El modelo de Batchsim también se acopla bien a los resultados experimentales.

Así, tanto a  $Re=1$  como  $Re=1.5$ , el modelo sencillo con  $\alpha$  variable describe bien el perfil de concentraciones en el destilado.

## • VALIDACION N°4

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

Fracción molar inicial de metanol (1): 0.2  
 Fracción molar inicial de agua (2): 0.8  
 Razón de reflujo: 2

Las experiencias y simulaciones comparadas en esta validación son:

### Experiencias

- Experiencia a potencia de calefacción 1,  $Re=2$  . (apartado 5.2.5.3.2.)

### Simulaciones propias

- Simulación a  $Re=2$ ,  $\alpha$  constante.
- Simulación a  $Re=2$ ,  $\alpha$  variable.

### Simulaciones con Batchsim

- Simulación a  $Re=2$ .

La validación se indica en la figura 5.4.1.4.

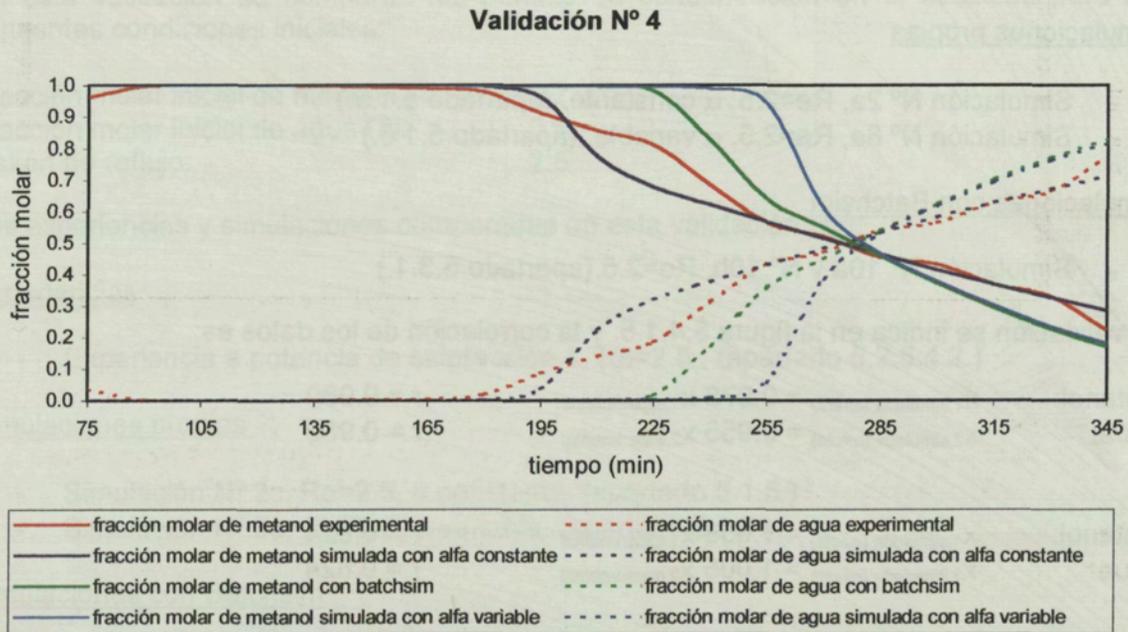


Figura 5.4.1.4. Perfil de concentraciones en el destilado. Potencia de calefacción 1,  $Re = 2$ .

metanol:  $X_{1,simulada (\alpha=cte)} = 0.991 X_{1,experimental}$   $r = 0.987$   
 agua:  $X_{2,simulada (\alpha=cte)} = 1.005 X_{2,experimental}$   $r = 0.987$

metanol:  $X_{1,simulada (\alpha \neq cte)} = 1.068 X_{1,experimental}$   $r = 0.921$   
 agua:  $X_{2,simulada (\alpha \neq cte)} = 0.924 X_{2,experimental}$   $r = 0.921$

metanol:	$X_{1,\text{experimental}} = 0.956 X_{1,\text{batchsim}}$	$r = 0.977$
agua:	$X_{2,\text{experimental}} = 0.948 X_{2,\text{batchsim}}$	$r = 0.977$

La mejor correlación la presenta el modelo de  $\alpha$  constante al ser comparado con los resultados experimentales. Así, a  $Re=2$ , este modelo es el que mejor simula el perfil de concentraciones en el destilado. A razones de reflujo inferiores a 2, habíamos visto que el modelo mejor era el de  $\alpha$  variable. En las siguientes validaciones se trabajará a razones de reflujo superiores a 2, para conocer si realmente trabajando con estos reflujo el modelo mejor es ahora el de  $\alpha$  constante.

### • VALIDACION N°5

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

Fracción molar inicial de metanol (1):	0.2
Fracción molar inicial de agua (2):	0.8
Razón de reflujo:	2.5

Las experiencias y simulaciones comparadas en esta validación son:

#### Experiencias

- Experiencia a potencia de calefacción 1,  $Re=2.5$  . (apartado 5.2.5.4.2.)

#### Simulaciones propias

- Simulación N° 2a,  $Re=2.5$ ,  $\alpha$  constante. (apartado 5.1.5.)
- Simulación N° 6a,  $Re=2.5$ ,  $\alpha$  variable. (apartado 5.1.6.)

#### Simulaciones con Batchsim

- Simulación N° 10a y N° 10b,  $Re=2.5$ .(apartado 5.3.1.)

La validación se indica en la figura 5.4.1.5. y la correlación de los datos es:

metanol:	$X_{1,\text{simulada}} (\alpha=\text{cte}) = 0.978 X_{1,\text{experimental}}$	$r = 0.980$
agua:	$X_{2,\text{simulada}} (\alpha=\text{cte}) = 0.955 X_{2,\text{experimental}}$	$r = 0.980$

metanol:	$X_{1,\text{simulada}} (\alpha\neq\text{cte}) = 1.056 X_{1,\text{experimental}}$	$r = 0.824$
agua:	$X_{2,\text{simulada}} (\alpha\neq\text{cte}) = 1.005 X_{2,\text{experimental}}$	$r = 0.824$

metanol:	$X_{1,\text{experimental}} = 0.938 X_{1,\text{batchsim}}$	$r = 0.829$
agua:	$X_{2,\text{experimental}} = 0.881 X_{2,\text{batchsim}}$	$r = 0.829$

El modelo simulado con  $\alpha$  constante es el que presenta una mejor correlación. Así, este modelo sirve para simular el perfil de concentraciones en el destilado a  $Re=2.5$  . En la simulación siguiente, se estudia para este mismo reflujo el comportamiento del plato intermedio 10.

## Validación N° 5

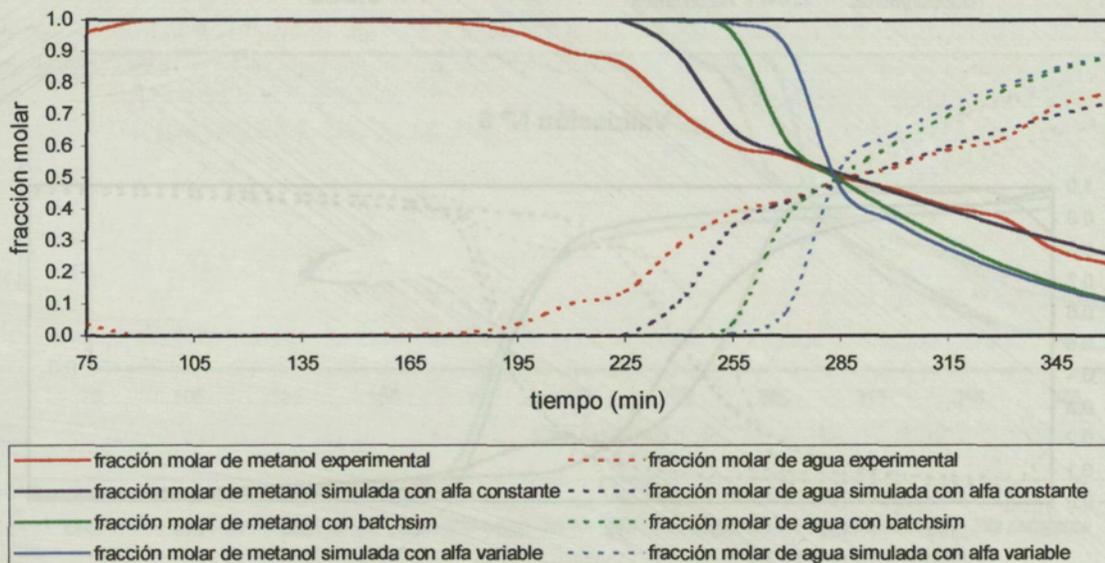


Figura 5.4.1.5. Perfil de concentraciones en el destilado. Potencia de calefacción 1,  $Re = 2.5$ .

## • VALIDACION N°6

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

Fracción molar inicial de metanol (1):	0.2
Fracción molar inicial de agua (2):	0.8
Razón de reflujo:	2.5

Las experiencias y simulaciones comparadas en esta validación son:

### Experiencias

- Experiencia a potencia de calefacción 1,  $Re=2.5$ . (apartado 5.2.5.4.2.)

### Simulaciones propias

- Simulación N° 2c,  $Re=2.5$ ,  $\alpha$  constante. (apartado 5.1.5.)
- Simulación N° 5a,  $Re=2.5$ ,  $\alpha$  variable. (apartado 5.1.6.)

### Simulaciones con Batchsim

- Simulación N° 10c y N° 10d,  $Re=2.5$ . (apartado 5.3.1.)

La correlación entre los perfiles (figura 5.4.1.6.) es:

metanol:	$X_{1,simulada (\alpha=cte)} = 0.978 X_{1,experimental}$	$r = 0.984$
agua:	$X_{2,simulada (\alpha=cte)} = 0.991 X_{2,experimental}$	$r = 0.984$

metanol:	$X_{1,simulada (\alpha \neq cte)} = 1.076 X_{1,experimental}$	$r = 0.824$
agua:	$X_{2,simulada (\alpha \neq cte)} = 0.834 X_{2,experimental}$	$r = 0.824$

metanol:  $X_{1,experimental} = 0.753 X_{1,batchsim}$   $r = 0.829$   
 agua:  $X_{2,experimental} = 1.031 X_{2,batchsim}$   $r = 0.829$

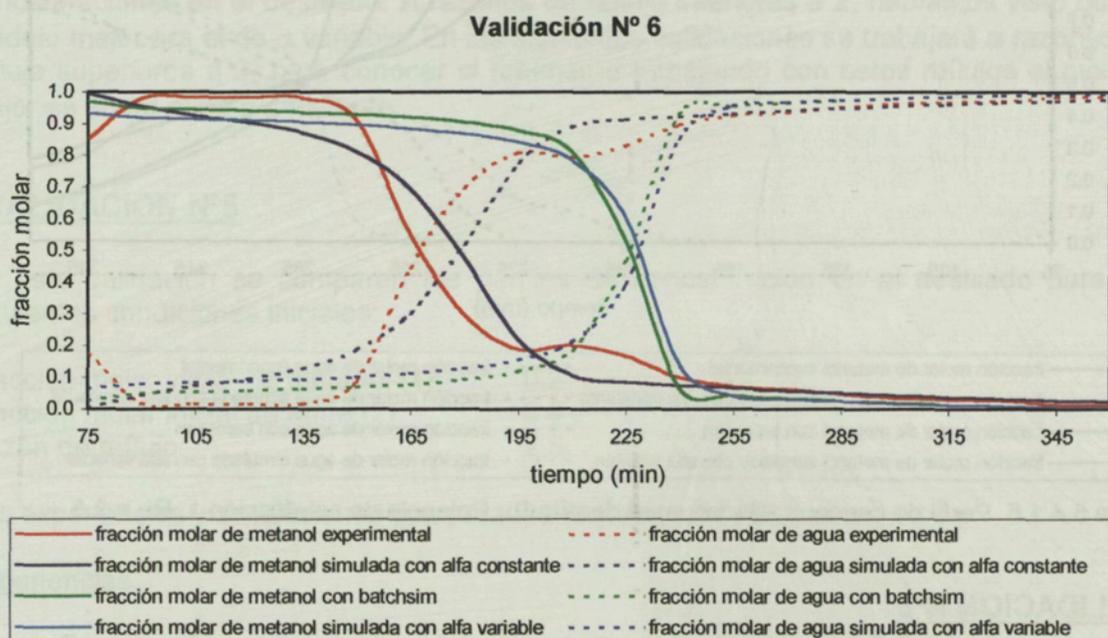


Figura 5.4.1.6. Perfil de concentraciones en el plato 10. Potencia de calefacción 1,  $Re = 2.5$ .

Los resultados nos indican que para el plato 10, al igual que para el destilado, el modelo con  $\alpha$  constante es el que mejor simula el perfil de concentraciones.

### • VALIDACION N°7

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

Fracción molar inicial de metanol (1): 0.2  
 Fracción molar inicial de agua (2): 0.8  
 Razón de reflujo: 3

Las experiencias y simulaciones comparadas en esta validación son:

#### Experiencias

- Experiencia a potencia de calefacción 1,  $Re=3$ . (apartado 5.2.5.5.2.)

#### Simulaciones propias

- Simulación a  $Re=3$ ,  $\alpha$  constante.
- Simulación a  $Re=3$ ,  $\alpha$  variable.

#### Simulaciones con Batchsim

- Simulación a  $Re=2.5$ .

En la figura 5.4.1.7. se comparan los respectivos perfiles.

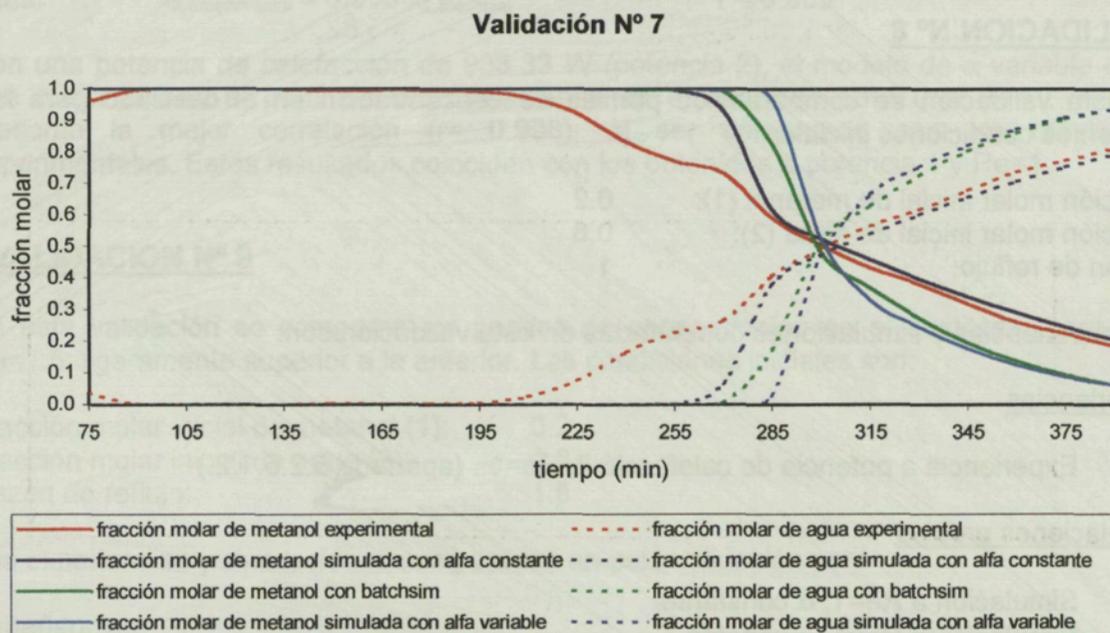


Figura 5.4.1.7. Perfil de concentraciones en el **destilado**. Potencia de calefacción 1,  $Re = 3$ .

La correlación entre los perfiles es:

metanol:  $X_{1,simulada} (\alpha=cte) = 1.049 X_{1,experimental}$   $r = 0.977$

agua:  $X_{2,simulada} (\alpha=cte) = 0.928 X_{2,experimental}$   $r = 0.977$

metanol:  $X_{1,simulada} (\alpha \neq cte) = 1.048 X_{1,experimental}$   $r = 0.943$

agua:  $X_{2,simulada} (\alpha \neq cte) = 1.063 X_{2,experimental}$   $r = 0.943$

metanol:  $X_{1,experimental} = 0.942 X_{1,batchsim}$   $r = 0.960$

agua:  $X_{2,experimental} = 0.877 X_{2,batchsim}$   $r = 0.960$

Para  $Re=3$ , el modelo con  $\alpha$  constante es el que mejor simula el perfil de concentraciones.

De las 7 validaciones realizadas a potencia de calefacción de 466.7 W (potencia 1), se puede deducir que para razones de reflujo pequeñas (1, 1.5) el modelo con  $\alpha$  variable es el que mejor simula los perfiles de concentración. Para razones de reflujo superiores (2, 2.5, 3) es el modelo con  $\alpha$  constante el que mejor simula los perfiles de concentración.

A continuación se presentan algunas validaciones para una potencia de calefacción de 933.33 W (potencia 2). Las razones de reflujo para estas validaciones son las mismas que para la potencia de calefacción 1 (1, 1.5, 2, 2.5 y 3).