



Cálculos correspondientes al número de etapas teóricas o unidades de transferencia de la columna.

Para los cálculos del número de etapas en la columna de destilación, hay diversos métodos y fórmulas para su obtención. Entre ellos podemos destacar dos métodos diferentes, los métodos aproximados y los métodos rigurosos para el diseño de columnas de destilación de sistemas multicomponentes.

Los más destacables de los métodos aproximados son:

- Método de grupo de Smith – Brinkley (SB).
- Método de Fenske – Underwood – Gilliland (FUG).
- Método de grupo de Kremser.

Los más destacables de los métodos rigurosos son:

- Método de Lewis y Matheson.
- Método de Thiele y Geddes.

Para seleccionar el método que mejor se ajusta a nuestro diseño, de ambos grupos de métodos para columnas de destilación, observaremos las características que ofrecen cada uno, y así podremos seleccionar el más conveniente para los cálculos que realizaremos a continuación, de la columna.

Método de grupo de Smith – Brinkley (SB)

Características:

- Útil para evaluar el comportamiento de columnas ya existentes.
- Funciona bien cuando se tiene un rehervidor parcial o hay una entrada de calor por el fondo.
- Se debe conocer el número de platos totales.
- Sirve para encontrar el plato óptimo de alimentación cuando se especifican los requerimientos de recuperación.
- Sirve para calcular las composiciones de los productos cuando se han especificado el plato de alimentación y el flujo de los productos.
- El empleo de valores de k eficaces es muy útil cuando los coeficientes de distribución varían mucho a lo largo de la columna.

Método de Fenske – Underwood – Gilliland (FUG)

Características:

- Útil fundamentalmente para el diseño de columnas, aunque también sirve para evaluar el comportamiento de columnas ya existentes.



- Parte del conocimiento de la localización óptima del plato de alimentación.
- Supone flujos molares constantes (el R_m calculado es mucho menor que el R_m real).
- Sirve para calcular los flujos y las composiciones de los productos cuando se han especificado los requerimientos de recuperación de uno o máximo dos componentes.
- Se pueden determinar las temperaturas del tope y del fondo de la columna.

Método de grupo de Kremser

Características:

- Útil para hacer estimaciones preliminares de las velocidades de flujo del agente separador o absorbente.
- Se emplea para una extrapolación rápida de los resultados de una solución rigurosa para un número diferente de etapas de equilibrio.
- Cuando las corrientes de entrada tienen la misma temperatura y presión y tiene lugar una separación y absorción despreciables, los factores eficaces de absorción y separación por los componentes están determinados por las condiciones de las corrientes de entrada.
- Cuando las temperaturas de las corrientes de entrada difieren y/o ocurre una absorción y/o separación que varía de moderada a apreciable, los valores de A_i y S_i deben basarse en los valores eficaces promedio de L , V y K_i en la cascada.

Método de Lewis y Matheson y Método de Thiele y Geddes

Características:

- Ambos fueron los métodos manuales más utilizados antes que se dispusiera de ordenadores digitales.
- Las etapas de equilibrio se resuelven una por una utilizando técnicas de partición.
- Tanto los métodos de LM como de TG presentan dificultades numéricas que, en ciertos casos, pueden evitar la convergencia.
- El cálculo etapa por etapa que se utiliza en el método de LM procede de la parte superior hacia abajo y del fondo hacia arriba y está sujeto a grandes errores de truncamiento, si la volatilidad de los componentes difiere mucho.
- En el método de TG se evita esta situación anterior, pero surgen inestabilidades numéricas tan pronto como el cálculo etapa por etapa cruza una etapa de alimentación.
- En el método de TG se puede producir pérdidas de dígitos significativos, lo que hace que el método sea básicamente inadecuado para las columnas con alimentación múltiple.
- Para una sola alimentación con puntos de ebullición cercanos, el método TG es bastante eficiente.



Para los cálculos de el numero de etapas de la columna, no usaremos ningún método en especial, ya que ninguno se ajusta exactamente a nuestras característica, y aquellos que se acercan, sus formulas son muy complicadas de resolver. De lo que se trata es de hacer un diseño de forma aproximada, así que, seguiremos algunos de los criterios de los métodos aproximados.

Ahora de lo que se trata, es de calcular el coeficiente de actividad, γ_i , de cada componente en la alimentación, en el destilado y en el producto de fondo. Para su calculo hay dos formulas diferentes de resolución, la ecuación de NRTL [Ec. 2] y la ecuación UNIQUAC [Ec. 3], siendo estas las mas usadas entre las diferentes ecuaciones que hay.

$$\ln \gamma_1^o = \tau_{21} + \tau_{12} \exp(-\alpha_{12}\tau_{12})$$

$$\ln \gamma_2^o = \tau_{12} + \tau_{21} \exp(-\alpha_{12}\tau_{21})$$

[Ec. 2]

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^c + \ln \gamma_i^r = \ln \left(\frac{\Psi_i}{x_i} \right) + \frac{\bar{Z}}{2} q_i \ln \left(\frac{\theta_i}{\Psi_i} \right) + \ell_i - \frac{\Psi_i}{x_i} \sum_{j=1}^c (x_j \ell_j) + q_i \left[\ell - \ln \left(\sum_{j=1}^c \theta_j T_{ji} \right) - \sum_{k=1}^c \left(\frac{\theta_j T_{ij}}{\sum_{k=1}^c \theta_k T_{kj}} \right) \right]$$

C, combinatorial

[Ec.3]

La ecuación UNIQUAC intento establecer los coeficientes de actividad sobre una base más simple, aunque mas teórica, Abrams y Prausnitz utilizaron la mecánica estadística para deducir nuevas expresiones de la energía libre en exceso. Su modelo, denominado UNIQUAC (universal quasi – chemical), generaliza un análisis previo de Guggenheim y lo amplía a mezclas de moléculas que difieren apreciablemente tanto en la forma como en el tamaño. Al igual que las ecuaciones NRTL y de Wilson, se utilizan concentraciones locales. Sin embargo, en vez de fracciones en volumen locales y fracciones molares locales, UNIQUAC utiliza la fracción de área local θ_{ij} como variable primaria de concentración, que se determina representando una molécula mediante un conjunto de segmentos unidos. Cada molécula esta caracterizada por dos parámetros estructurales, que e determinan con relación a un segmento estándar, que se toma como una esfera equivalente de una unidad monomérica de una molécula lineal de polimetileno de longitud infinita. Los dos parámetros estructurales son el número relativo de segmentos por molécula r (parámetro de volumen) y la superficie relativa de la molécula q (parámetro de superficie). Abrams y Prausnitz y Gmehling y Onken dan valores de estos parámetros para diferentes especies calculados a partir de ángulos de enlace y distancias de enlace. Para otros compuestos los valores se pueden estimar por el método de contribución de grupos de Fredenslund et al.

Para una mezcla líquida multicomponente el modelo UNIQUAC conduce a la siguiente expresión para la energía libre en exceso.



$$\frac{g^E}{RT} = \sum_{i=1}^C x_i \ln\left(\frac{\Psi_i}{x_i}\right) + \frac{\bar{Z}}{2} \sum_{i=1}^C q_i x_i \ln\left(\frac{\theta_i}{\Psi_i}\right) - \sum_{i=1}^C q_i x_i \ln\left(\sum_{j=1}^C \theta_j T_{ji}\right)$$

[Ec.4]

Los dos primeros términos del segundo miembro tienen en cuenta los efectos combinatoriales debidos a diferencias de tamaño y forma de la molécula; el último término proporciona una contribución residual debido a diferencias de fuerzas intermoleculares, donde

$$\Psi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_{i=1}^C x_i r_i} = \text{fracción de segmento}$$

[Ec.5]

$$\theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum_{i=1}^C x_i q_i} = \text{fracción de área}$$

[Ec.6]

\bar{Z} = número de coordinación de red, que se toma igual a 10.

$$T_{ji} = \exp\left(-\frac{u_{ji} - u_{ii}}{RT}\right)$$

[Ec.7]

La ecuación [Ec.4] solamente contiene dos parámetros ajustables para cada pareja binaria, $(u_{ji} - u_{ii})$ y $(u_{ij} - u_{jj})$. Abrams y Prausnitz demostraron que $u_{ji} = u_{ij}$ y $T_{ii} = T_{jj} = 1$. En general, $(u_{ji} - u_{ii})$ y $(u_{ij} - u_{jj})$ son funciones lineales de la temperatura.

El coeficiente de actividad se obtiene de dos ecuaciones, de la [Ec.4] y de la ecuación siguiente:

$$\frac{\bar{g}_i^E}{RT} = \ln \gamma_i = \left[\frac{\partial (n_T g^E / RT)}{\partial n_i} \right]_{P,T,n_j} = \frac{g^E}{RT} - \sum_k x_k \left[\frac{\partial (g^E / RT)}{\partial x_k} \right]_{T,P,x_r}$$

[Ec.8]

De ambas expresiones se obtiene el coeficiente de actividad en fase líquida para una especie en una mezcla multicomponente.



$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R = \ln \left(\frac{\Psi_i}{x_i} \right) + \frac{\bar{Z}}{2} q_i \ln \left(\frac{\theta_i}{\Psi_i} \right) + \ell_i - \frac{\Psi_i}{x_i} \sum_{j=1}^C (x_j \ell_j) + q_i \left[\ell - \ln \left(\sum_{j=1}^C \theta_j T_{ji} \right) - \sum_{j=1}^C \left(\frac{\theta_j T_{ji}}{\sum_{k=1}^C \theta_k T_{kj}} \right) \right]$$

[Ec.9]

donde:

$$l_j = \left(\frac{\bar{Z}}{2} \right) (r_j - q_j) - (r_j - 1)$$

[Ec.10]

Para la obtención de estos coeficientes de forma mas rápida y con el fin de ahórranos los cálculos, que son costosos, utilizaremos un programa de Matlab, que se adjunta en el anexo n° 8, llamado UNQUAC_2.m, en el cual introduciendo la temperatura y composición de cada componente, obteniendo así la información de los coeficientes de actividad, γ_i . Los valores obtenidos en el programa son los siguientes, tabla 1, sabiendo como datos, los valores de r_i , q_i y los parámetros de interacción binaria, u_{ij} , para los componentes:

DATOS

DME $\rightarrow r_1 = 2,0461$
 $q_1 = 1,9360$

Metanol $\rightarrow r_2 = 1,4311$
 $q_2 = 1.4320$

Agua $\rightarrow r_3 = 1,4311$
 $q_3 = 1.4320$

$u_{1,1} = 0$

$u_{1,2} = 581,7202$

$u_{1,3} = -373,0713$

$u_{2,1} = -216,9689$

$u_{2,2} = 0$

$u_{2,3} = -364,1164$

$u_{3,1} = 984,8416$

$u_{3,2} = 582,5940$

$u_{3,3} = 0$

RESULTADOS DEL PROGRAMA UNQUAC

| DME \rightarrow 1 Metanol \rightarrow 2 Agua \rightarrow 3 | Temperatura | Composición | Coef. de actividad, γ_i |
|--|---------------|---|---|
| Destilado | 45 °C (318K) | $x_1 = 0.995$ $x_2 = 0.005$ $x_3 = 0.000$ | $\gamma_1 = 1.0000$ $\gamma_2 = 1.9676$ $\gamma_3 = 2.0231$ |
| Alimentación | 90 °C (363K) | $x_1 = 0.396$ $x_2 = 0.198$ $x_3 = 0.406$ | $\gamma_1 = 1.2299$ $\gamma_2 = 1.1657$ $\gamma_3 = 1.4480$ |
| Fondo | 150 °C (423K) | $x_1 = 0.004$ $x_2 = 0.325$ $x_3 = 0.671$ | $\gamma_1 = 2.4460$ $\gamma_2 = 1.3069$ $\gamma_3 = 1.1053$ |

“Tabla 1”



Ahora procedemos a los cálculos de P_i^0 , presiones de vapor de los componentes puros que viene en mmHg y la T en K, mediante la expresión de Antoine [Ec.11], siendo las constantes para cada componente las siguientes:

| | A | B | C |
|----------------|----------|----------|----------|
| DME | 16,36 | 2176,8 | -24,673 |
| Metanol | 18,51 | 3593,4 | -35,225 |
| Agua | 18,304 | 3816,4 | -46,13 |

“Tabla 2”

$$\ln P_j^0 = A_j - \frac{B_j}{T + C_j}$$

$$P_j^0 = e^{A_j - \frac{B_j}{T + C_j}}$$

[Ec.11], “Ecuación de Antoine”

Tras los cálculos, los resultados obtenidos son los siguientes, tabla 3, conocidos estos datos podremos calcular a continuación los valores de K_i :

| $P_i^0 = \text{mmHg}$ | Destilado | Alimentación | Fondo |
|-----------------------|-------------------|---------------------|--------------------|
| DME → 1 | $P_1^0 = 7623.04$ | $P_1^0 = 20455.11$ | $P_1^0 = 53913.88$ |
| Metanol → 2 | $P_2^0 = 331.08$ | $P_2^0 = 1895.03$ | $P_2^0 = 10334.94$ |
| Agua → 3 | $P_3^0 = 71.26$ | $P_3^0 = 523.19$ | $P_3^0 = 3559.69$ |

“Tabla 3”

Tras conocer los valores de P_i^0 , calculamos los valores obtenidos para K_i , mediante la ecuación:

$$K_i = \gamma_i \frac{P_i^0}{P}$$

[Ec.12]

Cuyos valores obtenidos tras los cálculos son los que se adjuntan en la tabla 4:

| K_i | Destilado | Alimentación | Fondo |
|--------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| DME → 1 | $K_1 = 1,003031579$ | $K_1 = 3,3102289$ | $K_1 = 17,35175664$ |
| Metanol → 2 | $K_2 = 0,085714869$ | $K_2 = 0,29066269$ | $K_2 = 1,777201722$ |
| Agua → 3 | $K_3 = 0,018969224$ | $K_3 = 0,09968146$ | $K_3 = 0,5177007$ |

“Tabla 4”

Cálculo de número mínimo de platos (N_{\min}):

El cálculo se realiza mediante la ecuación de Feuske, [Ec.13], y los términos de su ecuación son los siguientes:

$$(\alpha_{1.2})_{eficaz} = \sqrt[3]{((\alpha_{1.2})_{cabeza} \times (\alpha_{1.2})_{fondo} \times (\alpha_{1.2})_{a\ lim\ entacion})}$$

De donde cada uno de sus términos tiene la siguiente expresión;

$$(\alpha_{1.2})_{cabeza} = \left(\frac{K_1}{K_2} \right)_{cabeza}$$

$$(\alpha_{1.2})_{a\ lim\ entacion} = \left(\frac{K_1}{K_2} \right)_{a\ lim\ entacion}$$

$$(\alpha_{1.2})_{fondo} = \left(\frac{K_1}{K_2} \right)_{fondo}$$

La expresión de Freuske, es la siguiente:

$$N_{\min} = \frac{\log\left(\frac{x_{1D} \times x_{2W}}{x_{1W} \times x_{2D}}\right)}{\log(\alpha_{1.2})_{eficaz}}$$

[Ec.13]

El valor obtenido es de $N_{\min} = 3.92$, por lo tanto el número de platos reales que tenemos son los siguientes:

$$N_{\text{real}} = \frac{N_{\min}}{0.4} \rightarrow N_{\text{real}} = \frac{3.92}{0.4} = 9.8 \cong 10 \text{ platos reales}$$

Cálculo, mediante Matlab y la recta de operación, del nº de platos teóricos:

Se trata de calcular el número de etapas (platos teóricos) necesarios para nuestro diseño.

El método utilizado es ascender desde el primer plato (rehervidor) con las condiciones de operación de este y calcular los datos de operación del segundo, así sucesivamente, hasta llegar a un plato en el que obtengamos un 99.5 % de DME a una temperatura de 45 °C, haciendo el cambio previo de la recta de operación cuando lleguemos a la inyección de la alimentación, donde se divide la columna en dos partes, una en la zona de agotamiento (parte inferior de la torre) y la otra en la zona de enriquecimiento (parte superior de la torre), en la que cada parte tendrá su recta de operación respectiva. Se realizará el cambio de recta una vez llegado al punto de alimentación, este punto será aquel en el que el plato tenga las condiciones de alimentación exigidas para el diseño y será en ese punto donde se cambiara de recta de operación, pasando por tanto de zona de empobrecimiento a la zona de enriquecimiento.

El número de platos obtenidos en los cálculos serán en numero de etapas teóricas que necesitamos en nuestro diseño de la columna de DME.

Los cálculos en las diferentes etapas teóricas, son las siguientes, calculadas con la ayuda de los programas de Matlab, UNIQUAC, BURBUJA Y ANTOINE (ver anexo nº 8) para el cálculo de los parámetros necesitados en los cálculos.

CONDICIONES DE OPERACIÓN: ZONA DE EMPOBRECIMIENTO.

$$y_m = \left(\frac{L'}{V'}\right) * x_{m+1} - \left(\frac{B * x_B}{V'}\right)$$

- PLATO 1: Calderín. Tª de ebullición (Plato nº 1) = 150 °C (423 K)

$$y = K * x$$

$$\begin{array}{lcl} x_{1,1} = 0.004 & \text{-----} \rightarrow & y_{1,1} = 0.06962 \\ x_{2,1} = 0.325 & \text{-----} \rightarrow & y_{2,1} = 0.58080 \\ x_{3,1} = 0.671 & \text{-----} \rightarrow & y_{3,1} = 0.34960 \end{array}$$

- PLATO 1 → 2. Tª ebullición (Plato nº 2) = 136.4391 °C (409.4391 K)

$$y_{1,1} = \left(\frac{L'}{V'}\right) * x_{1,2} - \left(\frac{B * x_{1,1}}{V'}\right) \rightarrow 0.06962 = \left(\frac{307.3}{109.37}\right) * x_{1,2} - \left(\frac{197.927 * 0.004}{109.37}\right)$$

$$x_{1,2} = 0.02735$$

$$y_{2,1} = \left(\frac{L'}{V'}\right) * x_{2,2} - \left(\frac{B * x_{2,1}}{V'}\right) \rightarrow 0.06962 = \left(\frac{307.3}{109.37}\right) * x_{2,2} - \left(\frac{197.927 * 0.325}{109.37}\right)$$

$$x_{2,2} = 0.4160$$



$$y_{3,1} = \left(\frac{L'}{V'}\right) * x_{3,2} - \left(\frac{B * x_{3,1}}{V'}\right) \rightarrow 0.3496 = \left(\frac{307.3}{109.37}\right) * x_{3,2} - \left(\frac{197.927 * 0.671}{109.37}\right)$$

$$x_{3,2} = 0.5632$$

Obteniendo $y_{1,2}$, $y_{2,2}$ e $y_{3,2}$ mediante la ecuación $y = K * x$, los datos obtenidos son los siguientes;

$$\begin{array}{lcl} & y = K * x & \\ x_{1,1} = 0.02735 & \text{-----} \rightarrow & y_{1,2} = 0.3158 \\ x_{2,2} = 0.41600 & \text{-----} \rightarrow & y_{2,2} = 0.4718 \\ x_{3,2} = 0.56320 & \text{-----} \rightarrow & y_{3,3} = 0.2124 \end{array}$$

Estos serán los cálculos que se realizarán para cada plato. A continuación expondremos a solución obtenida para cada etapa teórica.

- PLATO 2 \rightarrow 3. T^a de ebullición (Plato n° 3) = 108 °C (381.2842 K)

$$\begin{array}{lcl} & y = K * x & \\ x_{1,3} = 0.1150 & \text{-----} \rightarrow & y_{1,3} = 0.72800 \\ x_{2,3} = 0.3772 & \text{-----} \rightarrow & y_{2,3} = 0.18780 \\ x_{3,3} = 0.5070 & \text{-----} \rightarrow & y_{3,3} = 0.00842 \end{array}$$

- PLATO 3 \rightarrow 4. T^a de ebullición (Plato n° 4) = 85 °C (358.0042 K)

$$\begin{array}{lcl} & y = K * x & \\ x_{1,4} = 0.2617 & \text{-----} \rightarrow & y_{1,4} = 0.0900 \\ x_{2,4} = 0.2762 & \text{-----} \rightarrow & y_{2,4} = 0.0648 \\ x_{3,4} = 0.4621 & \text{-----} \rightarrow & y_{3,4} = 0.0351 \end{array}$$

Como los datos obtenidos en el plato n° 4, se aproximan a los datos de alimentación, es por tanto en este plato donde se inyectará la alimentación y se producirá a su vez, el cambio de la recta de operación, ya que para los platos sucesivos estaremos en la zona de enriquecimiento, cuya expresión es la siguiente:

$$y_n = \left(\frac{L}{V}\right) * x_{n+1} + \left(\frac{D * x_D}{V}\right)$$

- PLATO 4 \rightarrow 5. T^a ebullición (Plato n° 5) = 57 °C (330.9739 K)

$$y_{1,4} = \left(\frac{L}{V}\right) * x_{1,5} + \left(\frac{D * x_{1,1}}{V}\right) \rightarrow 0.9 = \left(\frac{53.33}{183.4}\right) * x_{1,5} + \left(\frac{130.073 * 0.995}{183.4}\right)$$

$$x_{1,5} = 0.6682$$



$$y_{2,4} = \left(\frac{L}{V}\right) * x_{2,5} + \left(\frac{D * x_{2,1}}{V}\right) \rightarrow 0.0648 = \left(\frac{53.33}{183.4}\right) * x_{2,5} + \left(\frac{130.073 * 0.003}{183.4}\right)$$

$$x_{2,5} = 0.2106$$

$$y_{3,1} = \left(\frac{L}{V}\right) * x_{3,5} + \left(\frac{D * x_{3,1}}{V}\right) \rightarrow 0.0351 = \left(\frac{53.33}{183.4}\right) * x_{3,5} + \left(\frac{130.073 * 0.002}{109.37}\right)$$

$$x_{3,5} = 0.1212$$

Obteniendo $y_{1,5}$, $y_{2,5}$ e $y_{3,5}$ mediante la ecuación $y = K * x$, los datos obtenidos son los siguientes:

$$\begin{array}{lcl}
 & y = K * x & \\
 x_{1,5} = 0.6682 & \text{-----} \rightarrow & y_{1,5} = 0.9752 \\
 x_{2,5} = 0.2106 & \text{-----} \rightarrow & y_{2,5} = 0.0211 \\
 x_{3,5} = 0.1212 & \text{-----} \rightarrow & y_{3,5} = 0.0031
 \end{array}$$

Estos serán los cálculos que se realizarán para cada plato. A continuación expondremos a solución obtenida para cada etapa teórica.

- PLATO 5 \rightarrow 6. T^a de ebullición (Plato nº 6) = 47 °C (320.5306 K)

$$\begin{array}{lcl}
 & y = K * x & \\
 x_{1,6} = 0.92680 & \text{-----} \rightarrow & y_{1,6} = 0.994600 \\
 x_{2,6} = 0.06037 & \text{-----} \rightarrow & y_{2,6} = 0.005100 \\
 x_{3,6} = 0.01283 & \text{-----} \rightarrow & y_{3,6} = 0.000267
 \end{array}$$

- PLATO 6 \rightarrow 7. T^a de ebullición (Plato nº 7) = 45 °C (318.1178 K)

$$\begin{array}{lcl}
 & y = K * x & \\
 x_{1,7} = 0.993500 & \text{-----} \rightarrow & y_{1,7} = 0.9995 \\
 x_{2,7} = 0.005344 & \text{-----} \rightarrow & y_{2,7} = 4.5907 * 10^{-4} \\
 x_{3,7} = 0.001156 & \text{-----} \rightarrow & y_{3,7} = 2.2046 * 10^{-5}
 \end{array}$$

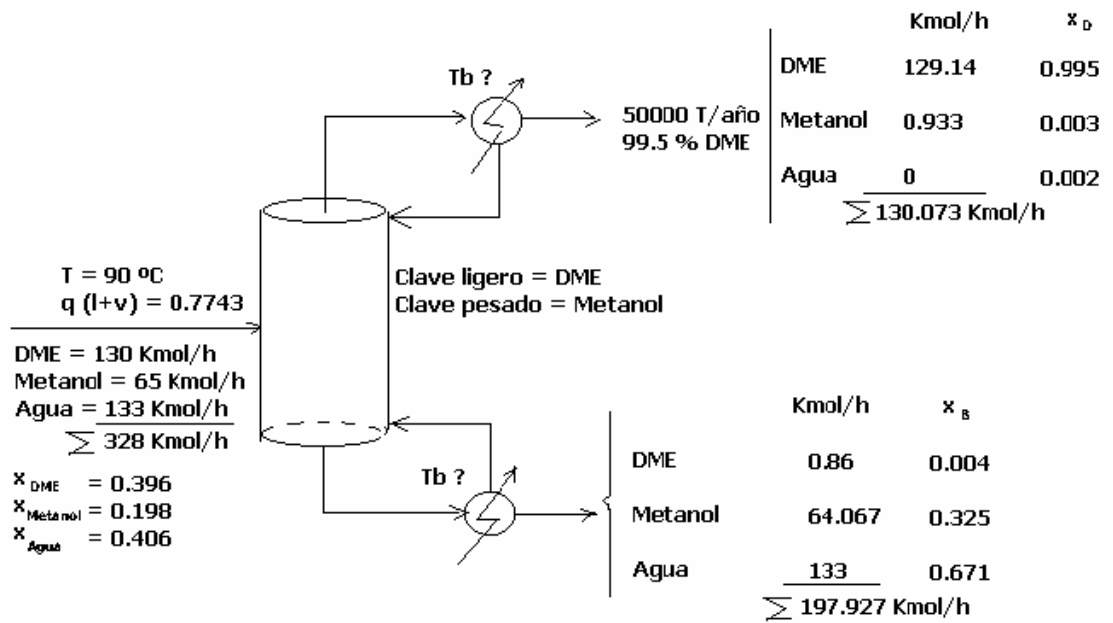
Como podemos observar, en el plato 7 obtenemos las condiciones del destilado que nos interesaba para nuestro diseño:

$$\begin{array}{l}
 T^a = 45 \text{ °C} \\
 \text{DME} = 99.5 \% \text{ de pureza}
 \end{array}$$

Por tanto, de los cálculos realizado deducimos que la columna de nuestro diseño irá provista de **7 platos teóricos (6 platos teóricos + calderín)**.



Haciendo un resumen de todos los datos recogidos tras los cálculos, partíamos de la información que se adjunta en la Fig. 1:



“Fig. 1”