

Implementación de Curvas Operativas para Destilación Diferencial Simple en la Enseñanza de Operaciones Unitarias.

Implementation of Operational Curves for Simple Differential Distillation in Unit Operations Education.

Presentación: 26/10/2023

Emiliano Candussi Baez

Centro de Aplicaciones Informáticas y Modelado en Ingeniería, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Rosario
emilianocandussibaez@gmail.com

Resumen

En este trabajo, el propósito es elaborar un procedimiento destinado a construir curvas operativas para la destilación diferencial simple de mezclas binarias a presión constante, utilizando los datos de equilibrio líquido-vapor. El desarrollo de este método tiene como objetivo ofrecer una alternativa más directa en comparación con los enfoques convencionales para resolver y analizar los problemas de ingeniería que emergen en los cursos de Operaciones Unitarias en Ingeniería Química. Esto a su vez facilitaría y mejoraría la comprensión del estudiantado al abordar el estudio de esta operación.

Palabras clave: Ingeniería Química, Operaciones Unitarias, Destilación Diferencial Simple, Curvas Operativas, Enseñanza-aprendizaje

Abstract

In this work, the aim is to formulate a procedure for constructing operational curves for simple differential distillation of binary mixtures at constant pressure, utilizing liquid-vapor equilibrium data. The development of this method aims to provide a more direct alternative as compared to current approaches for solving and analysing the engineering problems that arise in Chemical Engineering Unit Operations courses. This, in turn, will facilitate and enhance students' comprehension when addressing the study of this operation.

Keywords: Chemical Engineering, Unit Operations, Simple Differential Distillation, Operational Curves, Teaching-Learnig

Introducción

Abordar el proceso de enseñanza-aprendizaje de la destilación diferencial simple en cursos de Operaciones Unitarias en Ingeniería Química puede resultar desafiante para los estudiantes, ya que algunos problemas prácticos requieren cálculos iterativos. Esto se debe a que, en estos casos, es necesario resolver una integral cuyo integrando no siempre está disponible en forma analítica, por lo que debe realizarse de forma gráfica o numérica. En este contexto, se dificulta la posibilidad de analizar la forma en la que se relacionan algunas variables involucradas en la operación.

Si bien existen sistemas y métodos avanzados para el cálculo de destilación que realizan cálculos complejos y proporcionan resultados precisos para destilación, como la desarrollada por Alfaro Flores (2016) para destilación diferencial o Silviana et al. (2020) para destilación fraccionada multicomponente, en ninguna de estas propuestas se resuelve este inconveniente que surge en el ámbito de la enseñanza. Ciertamente, los simuladores comerciales son una opción para las instituciones de educación superior, pero pueden ser costosos. En este sentido, Chew Hernández et al. (2021), desarrollaron un simulador de un reactor discontinuo orientado a la educación, utilizando software libre y aplicando los principios fundamentales. Los autores sugieren que en las Universidades se debería considerar la construcción de simuladores propios, concepto con el que el objetivo del presente trabajo se alinea por completo.

A continuación, se desarrolla un método para obtener un conjunto de curvas denominadas “Curvas Operativas para Destilación Diferencial Simple”, que permiten la resolución gráfica de diversos problemas de ingeniería que incluyen esta operación, además de facilitarle a estudiantes de Operaciones Unitarias el análisis de la misma.

Metodología

La ecuación fundamental que rige la destilación diferencial simple es la ecuación de Rayleigh (Ocón García & Tojo Barreiro, 1974):

$$\ln \frac{n_0}{n_f} = \int_{x_f}^{x_0} \frac{1}{y-x} dx \quad [1]$$

Donde,

- n_0 son los moles alimentados al balón de destilación en el equipo de destilación diferencial simple
- n_f son los moles obtenidos en el mismo balón al finalizar la destilación
- x_0 es la fracción molar del componente más volátil en n_0
- x_f es la fracción molar del componente más volátil en n_f
- x e y son las fracciones molares del componente más volátil en un líquido y un vapor, respectivamente, que están en equilibrio

Para realizar la integración analítica en la ecuación de Rayleigh se debe conocer la ley de la función que relaciona a x con y . Esta última raramente viene dada por una ley (salvo en el caso de las mezclas ideales con volatilidad relativa constante) ya que los datos se obtienen de manera experimental y se presentan en forma de tabla.

Planteando un balance de materia entre los instantes inicial y final de la destilación, surgen las otras dos ecuaciones que completan el sistema a resolver:

$$n_0 = n_f + n_D \quad [2]$$

$$n_0 x_0 = n_f x_f + n_D x_D \quad [3]$$

Donde,

- n_D son los moles de destilado recolectados a la salida del condensador
- x_D es la fracción molar del componente más volátil en n_D

Dado que el sistema consta de tres ecuaciones y seis incógnitas, se presentan tres grados de libertad, que deberán ser cerrados con datos del problema para poder resolver el mismo. Aquí se presentan dos posibles situaciones.

Si los grados de libertad se cierran proporcionando valores para tres de algunas de las cuatro variables que intervienen en la ecuación de Rayleigh (x_0 , x_f , n_0 y n_f), entonces el problema se resuelve fácilmente encontrando el valor de la cuarta variable a través de esa ecuación y luego se determinan los valores de n_D y x_D a través del balance de materia.

En cambio, si los grados de libertad se cierran proporcionando valores para únicamente una o dos de las variables en la ecuación de Rayleigh antes mencionadas, la misma no se puede resolver en una primera instancia, debiéndose determinar primero algunos valores adicionales a través del balance de materia. Como este tampoco se puede resolver, ya que consiste de dos ecuaciones con tres incógnitas, es necesario recurrir al cálculo iterativo. A continuación, se detalla un paso a paso propuesto para la resolución del problema, suponiendo que los datos proporcionados son n_0 , x_0 y x_D :

1. Se propone un valor inicial de x_f .
2. Con el valor de x_0 proporcionado y el propuesto de x_f se calcula el área de la integral de la ecuación de Rayleigh.
3. Despejando n_0 de la ecuación se tiene:

$$n_0 = n_f \times e^{\text{Área}} \quad [4]$$

4. Con esta relación y el balance de materia global (Ec. 2), se obtienen n_0 y n_f .
5. Con el balance de materia del componente más volátil (Ec. 3) se calcula x_f y se verifica si coincide con el valor propuesto inicialmente.
6. De coincidir, el problema queda resuelto. En caso contrario, se debe proponer otro valor de x_f y volver a iterar, hasta que el resultado obtenido sea lo suficientemente cercano al propuesto.

Si los datos proporcionados fueran otros, la resolución del problema sería igualmente similar.

Esta serie de cálculos iterativos se puede evitar construyendo una única vez las Curvas Operativas para Destilación Diferencial Simple, detalladas a continuación.

Curvas Operativas para Destilación Diferencial Simple

Las curvas proporcionan el porcentaje de la carga inicial que debe ser destilada para obtener un destilado de una concentración deseada si se parte de una determinada concentración inicial. Es decir, con únicamente x_0 y x_D se puede resolver casi por completo el problema.

Para la construcción de las curvas se debe definir una nueva variable adimensional denominada Fracción Destilada, que representa la fracción de moles de la carga inicial que se obtuvieron en el destilado al finalizar la destilación:

$$f = \frac{n_D}{n_0} \quad [5]$$

Dividiendo la ecuación 2 por n_0 y despejando el cociente entre n_f y n_0 se tiene:

$$\frac{n_f}{n_0} = 1 - f \quad [6]$$

Dividiendo la ecuación 3 por n_0 :

$$x_0 = f x_D + (1 - f) x_f \quad [7]$$

Y, por otro lado, la ecuación de Rayleigh (Ec. 1) resulta:

$$\ln \frac{1}{1-f} = \int_{x_f}^{x_0} \frac{1}{y-x} dx \quad [8]$$

Luego de independizar el problema de cantidades absolutas de carga inicial, residuo y destilado, se prosigue de la siguiente forma:

1. Se selecciona un valor arbitrario de x_0 , por ejemplo 0,1.
2. Se proponen distintos valores de x_f , barriendo todo el rango de valores posibles sabiendo que se parte de un x_0 de 0,1, es decir, tener en cuenta las limitaciones para x_f dada por las concentraciones del equilibrio líquido vapor.
3. Para cada valor de x_f propuesto se resuelve la integral de la ecuación 7 y luego se determina f .
4. Con los valores de f calculados, los de x_f propuestos, el de x_0 inicial y la ecuación 6, se determinan los valores de x_D para todo el rango barrido con x_f .
5. Con estos resultados, ya se puede graficar la primera curva operativa para una concentración inicial para x_0 de 0,1.

Finalmente, se realiza el mismo procedimiento para un valor inicial de x_0 diferente, repitiendo los pasos hasta completar el rango de concentraciones posibles de x_0 y obteniendo una curva operativa para cada x_0 .

Resultados y discusión

Para representar los resultados obtenidos se parte de los datos de equilibrio líquido vapor para el sistema benceno-tolueno a presión atmosférica (Ocón García & Tojo Barreiro, 1974), realizando sobre una hoja de cálculo de Microsoft Office Excel el procedimiento recién indicado y obteniendo así el conjunto de curvas operativas indicado en la Figura 1:

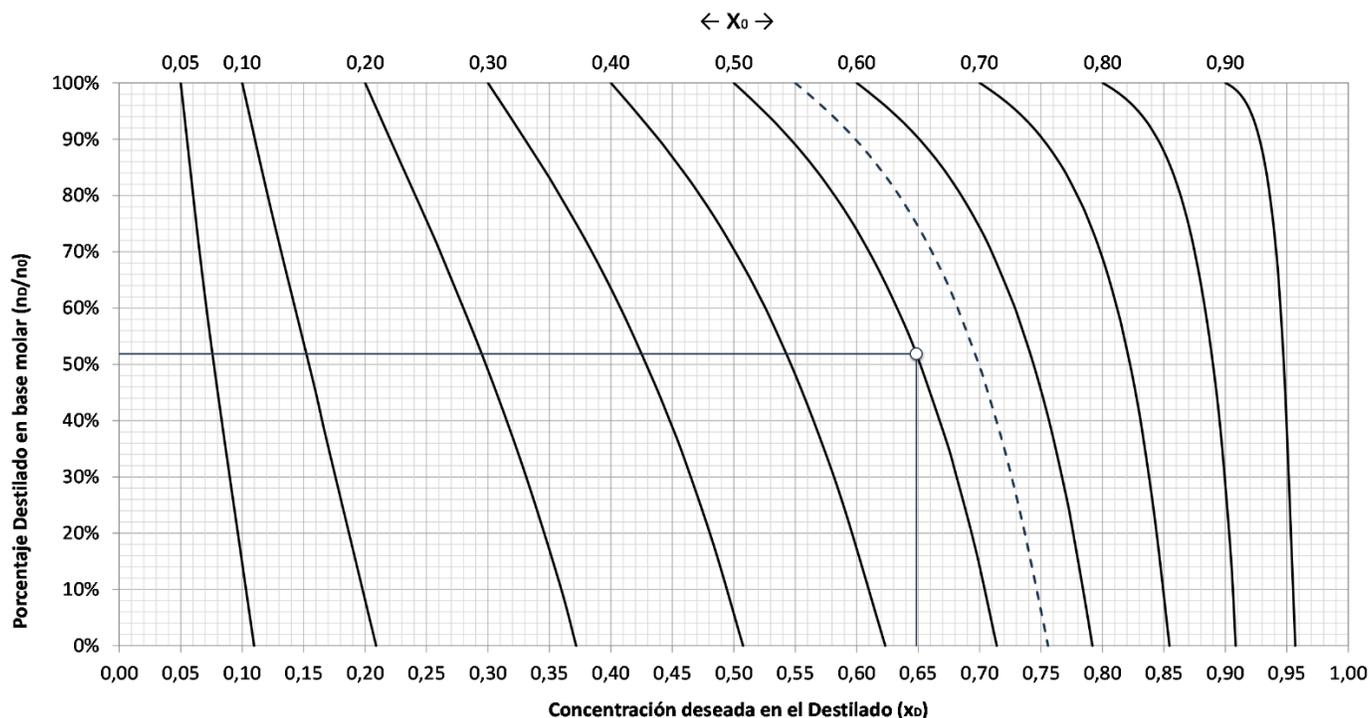


Figura 1: Curvas Operativas para Destilación Diferencial Simple para el sistema benceno-tolueno a 1 atm de presión.

Como se indica en la figura, en las abscisas se encuentra la concentración deseada para el destilado, en las ordenadas la fracción destilada expresada en porcentaje y en la parte superior del gráfico se observan los distintos valores posibles de x_0 con los que se puede trabajar. En el caso de partir de una alimentación cuya concentración no se representa en las curvas, se debe interpolar trazando una curva intermedia entre las dos más próximas, como se indica en el caso del trazo de guiones para $x_0=0,55$.

Además, en forma de ejemplo, se representa en trazo continuo fino la determinación del porcentaje a destilar de la alimentación si se parte de una mezcla de 0,50 de benceno y se desea obtener un destilado de 0,65 de benceno, obteniendo 52% como resultado.

Para continuar el análisis, se compara como se observa la destilación de una mezcla benceno-tolueno de fracción molar 0,70 en benceno en las curvas operativas con respecto al tradicional diagrama de equilibrio x-y:

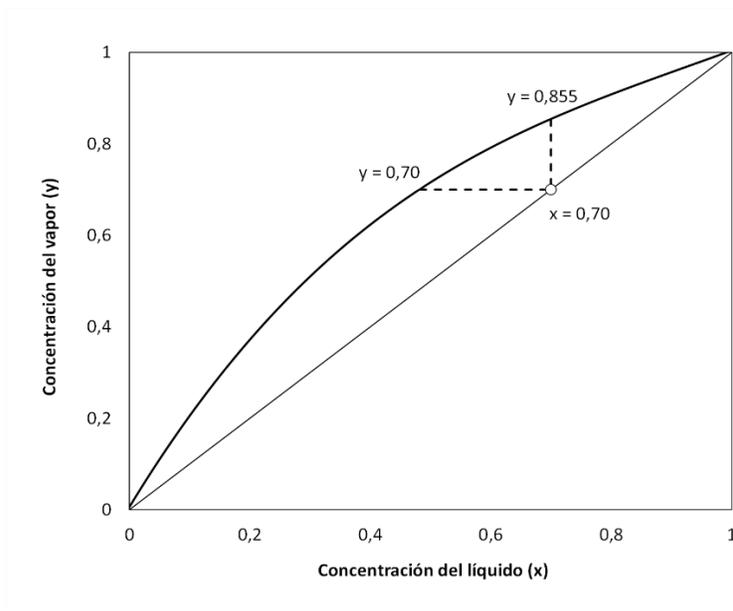


Figura 2: datos de equilibrio líquido-vapor para una mezcla binaria de benceno-tolueno a presión atmosférica en función de las fracciones molares de benceno (componente más volátil) en cada fase.

El segmento diagonal es auxiliar y representa los puntos donde $x = y$. Tomando sobre este segmento el punto que corresponde a una concentración inicial de 0,70 de benceno se tienen dos casos: la destilación de un diferencial de masa, cuya concentración sería de $y = 0,855$; y la destilación de la totalidad de la mezcla, que lograría un destilado $y = 0,70$ que iguala la concentración inicial, es decir, con redistribución nula de componentes. Trasladando el análisis a las curvas operativas, el primer caso corresponde a una fracción destilada igual a cero (por haberse destilado solamente un diferencial) y para el segundo igual a 1. Observando en la Figura 1 la concentración del destilado logrado para $f = 0\%$ y $f = 100\%$ sobre la curva de $x_0 = 0,70$, se encuentra que los resultados obtenidos coinciden con aquellos proporcionados por el diagrama de equilibrio x-y.

Acercando las curvas operativas al desarrollo de las clases de Operaciones Unitarias II en cuarto año de Ingeniería Química, en la Facultad Regional Rosario de la Universidad Tecnológica Nacional, se detectó una mejoría en la comprensión de la operación por parte del estudiantado y una ampliación en el análisis que podía realizarse, generándose nuevas discusiones (en base a la forma de las curvas y su relación con las experiencias prácticas y de laboratorio) que no se habían desarrollado antes en las clases.

La construcción y análisis de las curvas se hizo sobre un libro de cálculo de Microsoft Office Excel, donde se pudo seleccionar en clases distintas mezclas binarias según sus datos de equilibrio y observar cómo se modificó la forma de las curvas en base a esa selección, así como la relación de estas modificaciones con el equilibrio en sí y con su dificultad o facilidad de separación a través de una destilación diferencial simple. Este libro además fue implementado para calcular problemas abiertos de ingeniería planteados en clase, proporcionando resultados precisos.

Conclusiones

En primer lugar, se concluye que la ventaja que proporcionan las curvas operativas por sobre el diagrama de equilibrio x-y, es la introducción de la fracción destilada, ya que esta observación es imposible de realizar sobre este último sin antes resolver la

ecuación de Rayleigh. Con las curvas, fácilmente se puede determinar la concentración del destilado para cualquier fracción destilada partiendo de cualquier concentración inicial.

Por otro lado, como se discutió anteriormente, si se quisiera observar en el diagrama x-y el rango de concentraciones posibles de obtener en el destilado para distintas alimentaciones dadas, se debería realizar un trazado particular sobre ese diagrama para cada alimentación. En cambio, ese rango surge necesariamente al construir las curvas operativas y se observa directamente sobre ellas. De aquí se puede analizar que dicho rango es pequeño a concentraciones bajas o altas y grande a concentraciones intermedias, es decir, que cuando la solución es muy concentrada en uno de los dos componentes, la posible redistribución por destilación diferencial de los mismos es mucho más acotada.

Finalmente, las curvas presentarían utilidad para la resolución de problemas durante el desarrollo de clases en cursos de Operaciones Unitarias de Ingeniería Química, permitiendo al estudiantado analizar con mayor profundidad el comportamiento de la operación y la forma en que se relaciona la composición del destilado con la cantidad de masa destilada, fomentando de esta manera el desarrollo del pensamiento crítico, y constituyendo su construcción sobre libros de cálculo una nueva estrategia de enseñanza-aprendizaje.

Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento por el Ing. Jesús Lione, quien responsablemente ha sido mentor, guía y compañero en mi proceso de formación como adscripto de la asignatura Operaciones Unitarias II, así como a la Dra. Patricia Mores por incentivar y acompañarme en mis tareas de iniciación a la investigación.

Referencias bibliográficas

- Alfaro Flores, G. (2016). "Diseño de un Sistema Informático para Simular la Operación de un Destilador Diferencial", Tesis (Ingeniero Químico Industrial), Instituto Politécnico Nacional, México D.F. (166 páginas).
- Silviana, S., Dalanta, F., A'yuni, D. Q., Khoiriyah, L., Nabila, P. R., & Alfaris, M. F. (2020). "Design simulation and economic optimization of a benzene-toluene-xylene system distillation process upon the energy cost". E3S web of conferences, 202, 10003. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202020210003>
- Chew Hernández, M. L., Gómez Gómez, T. R., Bosques Brugada, G., Ruvalcaba Vargas, D. E. (2021). "Desarrollo del Simulador Dinámico de un Reactor Batch con Fines Didácticos", Pistas Educativas Vol. 43, 34-49.
- Ocón García, J., & Tojo Barreiro, G. (1974). Problemas De Ingeniería Química – Tomo I (3.a ed.). Madrid: Ediciones Aguilar SA, Grupo Santillana. 295, 298