



Simulación y Control



---

**MÉTODO CORTO PARA LA DESTILACIÓN DISCONTINUA MULTICOMPONENTE  
CONSIDERANDO UNA POLÍTICA DE REFLUJO VARIABLE**

**SHORTCUT METHOD FOR MULTICOMPONENT BATCH DISTILLATION  
CONSIDERING A VARIABLE REFLUX POLICY**

A. Narváez-García<sup>1\*</sup>, J.C. Zavala-Loría<sup>2</sup>, A. Rocha-Uribe<sup>1</sup> y C. Rubio-Atoche<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Yucatán, Facultad de Ingeniería Química, Campus de Ingenierías y Ciencias Exactas, Periférico Norte Kilómetro 33.5, Tablaje Catastral 13615, Colonia Chuburna de Hidalgo Inn, C.P. 97203, Mérida, Yucatán, México. Tel: +52 (999) 9460956.

<sup>2</sup>Universidad Autónoma del Carmen, Dependencia Académica de Ciencias Químicas y Petrolera (DACQyP), Facultad de Química, Cuerpo Académico Consolidado de Ingeniería Química Aplicada, Campus Principal, Calle 56 No. 4 Esquina Avenida Concordia, Colonia Benito Juárez, C.P. 24180, Cd. del Carmen, Campeche, México. Tel: +52 (938) 3828484.

Recibido 26 de Octubre de 2012; Aceptado 14 de Julio de 2013

---

**Resumen**

Se ha propuesto un método corto para destilación discontinua considerando una política de reflujo variable. El método está basado en el trabajo de Sundaram y Evans (1993) y considera un balance global de materia, así como un balance parcial de materia. La relación funcional entre las concentraciones del fondo y del domo es calculada mediante la utilización de las ecuaciones de Fenske, Underwood y Gilliland (FUG). La solución al modelo matemático propuesto se ha comparado con un método riguroso utilizando varias mezclas del tipo Clase I y Clase II. El método corto propuesto es de simple aplicación y puede ser utilizado para trabajos preliminares de diseño, simulación y optimización.

*Palabras clave:* método corto, FUG, destilación discontinua, política de reflujo variable.

---

**Abstract**

A Shortcut method for batch distillation has proposed considering a variable reflux policy. The method is based on the work of Sundaram and Evans (1993) and considered an overall material balance, as well as a partial material balance. The functional relationship between the concentrations of the bottom and the dome is calculated using the Fenske, Underwood and Gilliland equations (FUG). The solution to the proposed mathematical model has been compared with the rigorous method using Class I and Class II mixtures. The proposed shortcut method is very simple and it can be used for preliminary design, simulation and optimization work.

*Keywords:* shortcut method, FUG, batch distillation, variable reflux policy.

---

---

\*Autor para la correspondencia. E-mail: narvaez1410@hotmail.com Tel.: +52 (999) 9460956, Fax +52 (999) 9460956

## 1 Introducción

La destilación batch o discontinua es un proceso ampliamente utilizado para la separación de pequeñas cantidades de mezclas, la recuperación de pequeñas cantidades de materiales peligrosos en corrientes de desechos, la recuperación de solventes, así como para la obtención de productos farmacéuticos y biotecnológicos de alto valor agregado entre otros, por tanto, el desarrollo de modelos matemáticos para la predicción del comportamiento del proceso es un trabajo que ha ganado interés a lo largo de los últimos tiempos.

Una columna de destilación batch o discontinua puede operar utilizando cualquiera de las siguientes políticas: reflujo constante, reflujo variable y reflujo óptimo. El comportamiento del proceso puede predecirse mediante la utilización de modelos matemáticos basados en los balances de materia y energía. Los modelos matemáticos que se obtienen pueden clasificarse como modelos simplificados (métodos cortos), modelos semirigurosos, modelos rigurosos y modelos de reducción de orden.

En la actualidad la obtención de modelos rigurosos es un campo de mucho interés sobre todo porque las computadoras actuales cuentan con un alta precisión y capacidades de procesamiento mayores, sin embargo, el uso generalizado de equipos tales como las tabletas y/o computadoras portátiles de menor capacidad de procesamiento de datos, hacen factible la búsqueda de métodos simplificados que puedan predecir el comportamiento de los procesos sin tener que recurrir a mayores capacidades de procesamiento. Aunado a esto, siempre será necesario contar con este tipo de métodos para obtener datos iniciales para el proceso de optimización matemática.

Cabe mencionar que el modelado y la simulación del proceso de destilación discontinua, utilizando una política de reflujo variable, ha sido abordado de forma exitosa utilizando teoría de control (Monroy-Loperena, R. y Álvarez-Ramírez, J., 2003) y redes neuronales (Cressy, D.C. y col., 1993). También, se han realizado trabajos tendientes a encontrar el efecto de la derivación del reflujo (Zavala y col., 2006).

Entre los trabajos reportados en la literatura se considera que el primer modelo de la dinámica completa de la columna fue resuelto por Distefano (1968) y es conocido como un modelo o método riguroso. Domenech y Enjalbert (1981) presentaron reducciones al modelo riguroso considerando entre otras restricciones que la columna puede trabajar sin acumulación de líquido en cada uno de los platos y en

el condensador, este tipo de modelo es conocido como semiriguroso.

Diwekar (1988) presentó un método simplificado o corto basado en un balance global de materia, un balance parcial respecto al componente ( $i$ ) y, para la relación funcional entre la concentración del fondo y el domo, las ecuaciones de Hengstebach-Geddes, Underwood y Gilliland. La solución presentada por Diwekar consideró el uso de las políticas de reflujo constante y reflujo variable.

Sundaram y Evans (1993) también presentaron un método corto basado en un balance global de materia y un balance parcial respecto al componente ( $i$ ). En ese caso el trabajo únicamente consideró una política de reflujo constante. Para la relación funcional entre la concentración del fondo y el domo, utilizaron las ecuaciones de Fenske, Underwood y Gilliland (FUG). Otros autores que han presentados trabajos al respecto en tiempos más recientes son Barolo y Guarise (1996) y Ehsani (2002).

A diferencia de los métodos rigurosos que consideran la dinámica completa de la columna, los métodos reducidos o cortos son modelos matemáticos que predicen el comportamiento del proceso considerando la menor cantidad de ecuaciones, generalmente realizando un balance global de materia y los balances parciales en el fondo de la columna considerando un componente cualesquiera " $i$ ". Aún cuando los equipos de cómputo actuales tienen capacidades de procesamiento y almacenamiento mayores, los métodos cortos continúan justificándose a partir de considerar la reducción en los tiempos de cómputo, así como una precisión aceptable en los resultados obtenidos respecto al método riguroso, además, son una herramienta adecuada para encontrar valores iniciales para el proceso de optimización matemática. También, son utilizados para el diseño de la columna al permitir la obtención de condiciones límite del proceso. Los métodos cortos son muy sencillos de aplicar y por lo consiguiente son de utilidad en los procesos de enseñanza-aprendizaje.

Además, los métodos cortos pueden proporcionar condiciones límites del proceso (número mínimo de etapas y relación de reflujo mínima) y son métodos que permiten obtener de forma rápida valores iniciales para los procesos de optimización matemática donde la complejidad de los métodos requieren datos muy cercanos a la solución. Por otra parte, el uso extensivo de equipos de cómputo pequeños y de menor capacidad tales como las tabletas, los Smartphones y las computadoras mini, cuyas capacidades son limitadas o reducidas, requieren de programas con

menos requerimientos, de ahí que el desarrollo de un método corto sea de mucha utilidad en este sentido. Por tanto, el presente trabajo retoma la metodología propuesta por Sundaram y Evans (1993) y propone un método corto considerando una política de reflujo variable. El modelo matemático obtenido considera volatilidades relativas constantes, flujo molar constante así como acumulación despreciable de vapor y líquido en los platos y el condensador.

La diferencia de esta propuesta con los métodos cortos reportados en la literatura, es que el presente trabajo utiliza directamente el sistema de ecuaciones de Fenske-Underwood-Gilliland, mientras que otras propuestas consideran la ecuación de Hengestebeck-Geddes, la cual, es una derivación de la ecuación de la Fenske. También, esta propuesta no realiza la comparación entre las relaciones de reflujo mínimo de Underwood y de Gilliland, lo que tiende a reducir el tiempo de cálculo.

Al igual que otros métodos reportados, esta propuesta puede ser utilizada para obtener condiciones de diseño y/o parámetros iniciales para la optimización matemática del proceso de destilación discontinua, también conocida como solución de problemas de control óptimo. Las limitaciones que impone el uso de volatilidades relativas constantes a lo largo del tiempo y de la columna pueden ser superadas al calcularse las volatilidades relativas del fondo en cada paso y obteniendo una volatilidad relativa promedio. Para cada corte, la volatilidad relativa del domo permanece sin cambios significativos debido a que la concentración del producto deseado permanece sin variaciones o sus variaciones son muy pequeñas.

Este trabajo sólo considera el uso de volatilidades relativas constantes, sin embargo, si existieran cambios significativos en la volatilidad relativa se puede considerar lo siguiente: para mezclas ideales, el equilibrio líquido-vapor se calcula utilizando la Ley de Raoult y se aplican un punto de burbuja para conocer la temperatura en el fondo y en el domo. Para el caso en que el coeficiente de actividad ( $\gamma$ ) no pueda considerarse cercano a la unidad se puede utilizar la Ley de Raoult modificada y calcular dicho coeficiente utilizando algún modelo de solución (Wilson, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC, etc.). En los casos en que el vapor de la mezcla no tenga un comportamiento ideal será necesario utilizar una ecuación de estado para obtener el coeficiente de fugacidad ( $\phi$ ).

Para la utilización de las ecuaciones de Underwood se han considerado separaciones Clase I y también separaciones Clase II, definidas por Shiras y col., (1950) de la siguiente manera: Clase

I son aquellas separaciones que al efectuarse en una columna, de platos infinitos, todos los componentes de la alimentación se encuentran presentes en el producto del domo y en el producto del fondo, es decir, todos los componentes se encuentran distribuidos (presentes) a lo largo de la columna y, Clase II son aquellas separaciones que al efectuarse en una columna, de platos infinitos, uno o varios de los componentes de la alimentación sólo se encuentran presentes en el producto del domo o en el producto del fondo, es decir, uno o más de los componentes no se distribuye a lo largo de la columna. De igual forma, un concepto importante en el desarrollo del modelo es el concepto de componente clave ligero y componente clave pesado definidos de la siguiente manera: componente clave ligero ( $lk$ ) es aquel componente ligero de una mezcla que se encuentra presente en el residuo en cantidades importantes y el componente clave pesado ( $hk$ ) es aquel componente pesado que se encuentra presente en cantidades importantes en el destilado.

A continuación se presentan las ecuaciones que conforman el método corto desarrollado por Sundaram y Evans:

Balance global:

$$B_{nueva} = B_{anterior} - \left( \frac{V}{1+R} \right)_{anterior} \Delta t \quad (1)$$

Balance parcial respecto al componente "i"

$$x_{B,nueva}^{(i)} = x_{B,anterior}^{(i)} + [x_D^{(i)} - x_B^{(i)}]_{anterior} \left[ \frac{B_{nueva} - B_{anterior}}{B_{anterior}} \right] \quad (2)$$

Ecuación de Fenske y modificaciones:

$$N_{min} = \frac{\log \left\{ \left[ \frac{x_D^{(i)}}{x_B^{(i)}} \right] \left[ \frac{x_B^{(k)}}{x_D^{(k)}} \right] \right\}}{\log a_{i,k}} \quad (3)$$

$$x_D^{(i)} = x_B^{(i)} \left[ \frac{x_D^{(k)}}{x_B^{(k)}} \right] a_{i,k}^{N_{min}} \quad (4)$$

$$x_D^{(k)} = \frac{x_B^{(k)}}{\sum_{i=1}^c x_B^{(i)} a_{i,k}^{N_{min}}} \quad (5)$$

Ecuaciones de Gilliland:

$$Y = 1 - \exp \left[ \frac{(1 + 54.4X)(X - 1)}{(11 + 117.2X) \sqrt{X}} \right] \quad (6)$$

$$Y = \frac{N - N_{min}}{N + 1} \quad (7)$$

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad (8)$$

Ecuación de Eduljee:

$$Y = 0.75 - X^{0.5668} \quad (9)$$

Ecuación de Underwood (Clase I)

$$R_{\min} = \frac{\alpha_{l,k}^{N_{\min}} - \alpha_{l,k}}{(\alpha_{l,k} - 1) \sum_{i=1}^c x_{Bi} \alpha_{l,k}^{N_{\min}}} \quad (10)$$

Ecuaciones de Underwood (Clase II):

$$\sum_{i=1}^c \frac{\alpha_{i,k} x_B^{(i)}}{\alpha_{i,k} - \phi} = 0 \quad (11)$$

$$R_{\min} + 1 = \sum_{i=1}^c \frac{\alpha_{i,k} x_D^{(i)}}{\alpha_{i,k} - \phi} \quad (12)$$

Cabe señalar que el trabajo de Sundaram y Evans (1993) sólo considera la separación de mezclas Clase I. Las ecuaciones (11) y (12) se presentan en este trabajo porque la propuesta que se desarrolla hace uso de ellas en la separación de mezclas Clase II. Las ecuaciones (11) y (12) son ecuaciones no lineales que requieren de algún método numérico para resolverlas, tal y como el método de Newton-Raphson.

## 2 Método simplificado o corto

Hasta la actualidad, no se han reportado en la literatura del área, propuestas tendientes a obtener un método corto para destilación discontinua utilizando el trabajo de Sundaram y Evans (1993) considerando la política de reflujo variable, por tanto, el presente trabajo, retoma el método corto mencionado y propone una metodología que considera la política de reflujo variable. Para el caso de reflujo variable, la concentración del componente deseado permanece constante durante toda la operación, por tanto, en cada tiempo es necesario calcular la relación de reflujo, cálculo que puede realizarse utilizando un despeje de la ecuación (8):

$$R = \frac{X + R_{\min}}{1 - X} \quad (13)$$

Esta ecuación (13) requiere el cálculo de  $R_{\min}$  por lo que se puede utilizar la ecuación (10) o la ecuación (12). La ecuación (10) es aplicable cuando se considera que todos los componentes están distribuidos desde el fondo hasta el domo. La ecuación (12) se aplica cuando alguno de los componentes no se distribuye a través de la columna. Para el caso de utilizar la ecuación (12) se tiene que:

$$R_{\min} = -1 + \sum_{i=1}^c \frac{\alpha_{i,k} x_D^{(i)}}{\alpha_{i,k} - \phi} \quad (14)$$

esta ecuación (14) requiere el cálculo de  $\phi$  y la concentración del domo. Para  $\phi$  se utiliza la ecuación (11) [Ecuación de Underwood]:

$$\sum_{i=1}^c \frac{\alpha_{i,k} x_B^{(i)}}{\alpha_{i,k} - \phi} = 0$$

y, para las concentraciones en el domo se utiliza la ecuación (4) [Ecuación de Fenske] para el componente (i):

$$x_D^{(i)} = x_B^{(i)} \left[ \frac{x_D^{(k)}}{x_B^{(k)}} \right] \alpha_{i,k}^{N_{\min}} \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad i \neq k$$

siendo  $k$  el componente de referencia. La composición del componente de referencia ( $k$ ), puede obtenerse utilizando una modificación de la ecuación (5) de forma que quede expresada en función del componente clave ligero ( $lk$ ). La modificación se obtiene utilizando la restricción de la suma de las composiciones en el domo

$$\sum_{i=1}^c x_D^{(i)} = 1 \quad (15)$$

expresión a la cual puede restarse la concentración del componente ligero ( $lk$ ):

$$\sum_{i=1}^c x_D^{(i)} - x_D^{(lk)} = 1 - x_D^{(lk)} \quad (16)$$

y, sustituyendo la ecuación (4) en esta ecuación (16) se tiene que:

$$\sum_{i=1}^c \left\{ \left[ \frac{x_D^{(k)}}{x_B^{(k)}} \right] (\alpha_{i,k})^{N_{\min}} x_B^{(i)} \right\} - x_D^{(lk)} = 1 - x_D^{(lk)} \quad (17)$$

La propia ecuación (4) para la concentración del componente  $lk$  queda expresada como:

$$x_D^{(lk)} = \left[ \frac{x_D^{(k)}}{x_B^{(k)}} \right] x_B^{(lk)} \alpha_{lk,k}^{N_{\min}} \quad (18)$$

Ahora bien, sustituyendo esta ecuación (18) en la ecuación (17) y despejando para obtener  $x_D^{(k)}$ , se tiene:

$$\left[ \frac{x_D^{(k)}}{x_B^{(k)}} \right] \left\{ \left[ \sum_{i=1}^c \alpha_{i,k}^{N_{\min}} x_B^{(i)} \right] - \alpha_{lk,k}^{N_{\min}} x_B^{(lk)} \right\} = 1 - x_D^{(lk)} \quad (19)$$

$$x_D^{(k)} = \frac{(1 - x_D^{(lk)}) x_B^{(k)}}{\left[ \sum_{i=1}^c \alpha_{i,k}^{N_{\min}} x_B^{(i)} \right] - \alpha_{lk,k}^{N_{\min}} x_B^{(lk)}} \quad (20)$$

Entonces, la ecuación (4) puede quedar expresada como:

$$x_D^{(i)} = \frac{[1 - x_D^{(lk)}] \alpha_{i,k}^{N_{\min}} x_B^{(i)}}{\left[ \sum_{j=1}^c \alpha_{i,k}^{N_{\min}} x_B^{(j)} \right] - x_B^{(lk)} \alpha_{lk,k}^{N_{\min}}} = \frac{(1 - x_D^{(lk)})}{\left\{ \sum_{j=1}^c \left( \frac{\alpha_{jk}}{\alpha_{i,k}} \right)^{N_{\min}} \left[ \frac{x_B^{(j)}}{x_B^{(i)}} \right] - \left( \frac{\alpha_{lk,k}}{\alpha_{i,k}} \right)^{N_{\min}} \left[ \frac{x_B^{(lk)}}{x_B^{(i)}} \right] \right\}}$$

$$i = 1, 2, \dots, n \quad (21)$$

Si se considera que el componente clave ligero (*lk*) es el componente 1, entonces, esta ecuación (21) se reduce a:

$$x_D^{(i)} = \frac{(1 - x_D^{(1)})}{\left\{ \sum_{j=2}^c \left( \frac{\alpha_{jk}}{\alpha_{1,k}} \right)^{N_{\min}} \left[ \frac{x_B^{(j)}}{x_B^{(i)}} \right] \right\}}; \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (22)$$

Para las ecuaciones (20), (21) y (22) se requiere la obtención del número mínimo de etapas, además de que es necesario considerar que la ecuación (12) requiere el valor de *X*, que se puede obtener utilizando las ecuaciones (6) ó (9). Si se utiliza la correlación de Eduljee [ecuación (9)] el despeje es:

$$X = \left[ 1 - \frac{4(N - N_{\min})}{3(N + 1)} \right]^{1.7643} \quad (23)$$

Si se utiliza la ecuación (6) el proceso es un poco más complejo y se requiere un proceso iterativo. En ambos casos es necesario el valor del número mínimo de etapas, por tanto, obtener *N<sub>min</sub>* es de máxima prioridad.

La ecuación de Fenske [Ecuación (3)] permite calcular el número mínimo de etapas considerando los componentes clave ligero (*lk*) y el componente de referencia (*k*), entonces:

$$N_{\min} = \frac{\log \left\{ \left[ \frac{x_D^{(lk)}}{x_B^{(lk)}} \right] \left[ \frac{x_B^{(k)}}{x_D^{(k)}} \right] \right\}}{\log(\alpha_{lk,k})} \quad (24)$$

donde *x<sub>D</sub><sup>(lk)</sup>* es una cantidad conocida y *x<sub>D</sub><sup>(hk)</sup>* está dada por la ecuación (20), entonces, la ecuación (4) se puede expresar como:

$$N_{\min} = \frac{\log \left\{ \left[ \frac{x_D^{(lk)}}{x_B^{(lk)}} \right] \left[ \frac{\sum_{j=2}^c \alpha_{jk}^{N_{\min}} x_B^{(j)}}{1 - x_D^{(lk)}} \right] \right\}}{\log \alpha_{lk,k}} = \frac{\log \left\{ \left[ \frac{x_D^{(lk)}}{1 - x_D^{(lk)}} \right] \left[ \sum_{j=2}^c \alpha_{jk}^{N_{\min}} \left( \frac{x_B^{(j)}}{x_B^{(lk)}} \right) \right] \right\}}{\log \alpha_{lk,k}} \quad (25)$$

Ahora bien, esta ecuación (25) requiere un proceso iterativo para la solución del número mínimo de

etapas, por tanto, se puede utilizar la ecuación (21) o la ecuación (22) para obtener la función de *N<sub>min</sub>* necesaria para el método de Newton-Raphson. Entonces, cuando *i = lk = 1*, la ecuación (17) puede expresarse de la siguiente manera:

$$\left[ \frac{x_D^{(1)}}{x_B^{(1)}} \right] \left[ \sum_{j=2}^c \left( \frac{\alpha_{jk}}{\alpha_{1,k}} \right)^{N_{\min}} x_B^{(j)} \right] = 1 - x_D^{(1)} \quad (26)$$

$$f(N_{\min}) = x_D^{(1)} \left\{ \left[ \sum_{j=2}^c \left( \frac{x_B^{(j)}}{x_B^{(1)}} \right) \left( \frac{\alpha_{jk}}{\alpha_{1,k}} \right)^{N_{\min}} \right] + 1 \right\} - 1 = 0 \quad (27)$$

$$f'(N_{\min}) = x_D^{(1)} \left\{ \left[ \sum_{j=2}^c \left( \frac{x_B^{(j)}}{x_B^{(1)}} \right) \left( \frac{\alpha_{jk}}{\alpha_{1,k}} \right)^{N_{\min}} \right] \ln \left( \frac{\alpha_{jk}}{\alpha_{1,k}} \right) \right\} \quad (28)$$

$$N_{\min, nueva} = N_{\min, anterior} - \frac{f(N_{\min})}{f'(N_{\min})} \quad (29)$$

Con el valor del número mínimo de etapas ya se puede obtener la relación de reflujo y los demás valores que involucran a la variable *N<sub>min</sub>*. El equilibrio líquido-vapor de las mezclas es obtenido utilizando la ecuación (30):

$$y^{(i)} = \frac{\alpha_{i,k} x^{(i)}}{\sum_{j=i}^c [\alpha_{j,k} x^{(j)}]} \quad (30)$$

siendo *k* el componente de referencia.

### 3 Procedimiento de solución

A continuación se detalla el procedimiento para obtener el perfil de las relaciones de reflujo requeridas para mantener constante la concentración del componente clave ligero (*lk*) en el producto. De inicio se debe contar con los siguientes datos conocidos: composición [*x<sub>B</sub><sup>(i)</sup>*] y cantidad de alimentación (*F*), flujo de vapor (*V*) a través de la columna, número de etapas teóricas (*N*), volatilidades relativas (*α<sub>i</sub>*) de los componentes de la mezcla, el tiempo de producción (*t<sub>prod</sub>*) y el componente de referencia (*k*). En la metodología presentada por Sundaram y Evans (1993) el componente clave pesado (*hk*) es el componente de referencia.

La solución inicia obteniendo el número de etapas teóricas mínima (*N<sub>min</sub>*) que es un valor necesario para calcular las composiciones en el domo [*x<sub>D</sub><sup>(i)</sup>*] utilizando la ecuación de Fenske. Después, es necesario calcular

la cantidad de reflujo mínima ( $R_{\min}$ ) cuyo valor es utilizado para calcular la relación de reflujo ( $R$ ). Conociendo el valor de  $R$ , se puede calcular el valor de la cantidad de destilado ( $D$ ) instantáneo. Se considera el incremento del tiempo ( $\Delta t$ ) y mediante los balances total y parcial se calcula el remanente en los fondos ( $B$ ) y su composición [ $x_B^{(i)}$ ]. También se puede conocer la cantidad de destilado acumulado. La Figura 1 muestra el diagrama de flujo para la solución del método corto propuesto.

## 4 Casos de estudio

El modelo matemático del método corto propuesto ha sido resuelto considerando varias mezclas (binaria y multicomponentes) cuyas condiciones de entrada al proceso se muestran en la Tabla 1. En cada uno de los casos de estudio se considera que la mezcla es alimentada a la temperatura de ebullición. La tolerancia al error es de  $1.0 \times 10^{-4}$ , el paso de integración es  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-1}$  h y el tiempo de producción es el necesario para agotar al componente clave ligero. Se ha considerado una alimentación de 200 kmol y un flujo de vapor de 110 kmol/h.

Los resultados de la solución a los problemas presentados en la Tabla 1 se comparan con un método riguroso despreciando la acumulación de líquido en la columna y en el condensador-tanque de reflujo. En este trabajo se despreció la acumulación de vapor. El comparativo se realiza utilizando el programa MultiBatchDS® (1991) para el modelo riguroso.

### 4.1 Discusión de resultados

En cada caso, los perfiles de concentración en el fondo de la columna (rehervidor) no alcanzaron una desviación mayor al 7% para las concentraciones y un 7% para la relación de reflujo permitiendo considerar que los valores obtenidos en la solución del método propuesto son apropiados. La comparación de los resultados fue realizada de la siguiente manera: los datos que se utilizaron para la solución del modelo matemático propuesto también fueron utilizados en el software MultiBatchDS® obteniéndose los perfiles de composición y relación de reflujo para un tiempo amplio y adecuado para agotar al componente clave ligero. En cada caso, se tomaron mezclas consideradas en la literatura con la intención de validar los datos de la solución.

Por ejemplo, el caso 5 fue tomado de Diwekar y Madhavan (1991). Ellos reportaron una desviación

para los valores de la concentración del componente clave (componente 1) del 8.1% máximo. En este trabajo la desviación máxima obtenida fue del 6.35% considerando hasta el 51.8% de destilado, ya que a partir de ese punto las cantidades de reflujo que se requieren son muy grandes y la obtención de producto es mínima, lo cual implica gastos energéticos mayores que pueden influir en la economía del proceso, sobre todo porque gran parte de la energía se retira por el condensador. La Figura 7 muestra un comparativo del comportamiento de las concentraciones en el fondo de la columna, así como del comportamiento de las relaciones de reflujo, observándose que el método propuesto tiene un mejor ajuste con el modelo riguroso utilizado.

Los perfiles de las relaciones de reflujo muestran discrepancia cuando el componente clave ligero ( $lk$ ) se encuentra en cantidades pequeñas y, se considera que esto es debido a que existen procesos iterativos en el método corto que pueden introducir pequeños errores de redondeo que se pueden incrementar en cada iteración. La influencia del proceso iterativo en el cálculo de la relación de reflujo  $R$  para el método corto se observa en la ecuación (13), ya que el valor de  $R$  depende de los valores de  $R_{\min}$  y  $X$ . Para el método riguroso el valor de  $R$  depende de las concentraciones del condensador y los dos últimos platos de la columna (Diwekar, 2012).

También, un factor de importancia es el número de etapas utilizadas, ya que en los casos resueltos, la mayor discrepancia se encuentra cuando se utiliza un número mayor de etapas (15 y 30 platos) debido a que la solución al sistema de ecuaciones de Underwood y Gilliland se ve afectada con la precisión del proceso iterativo para resolverlo. Otro factor que influye en los resultados es la desviación de la idealidad de la mezcla, y para ese caso, será necesario considerar la influencia de la temperatura y la concentración para predecir el comportamiento de las volatilidades relativas, factor que no ha sido considerado en este trabajo.

Una de las limitantes que se ha observado para la adecuada solución del método es la elección de los componentes claves, ya que si se hace de forma inadecuada puede causar una sobrestimación o una subestimación en los balances como mencionan Zamar y col., (1998). Una forma sencilla de elegir dichos componentes es predecir la distribución de los mismos en la columna de destilación discontinua utilizando la ecuación (31) obtenida por los autores antes mencionados.

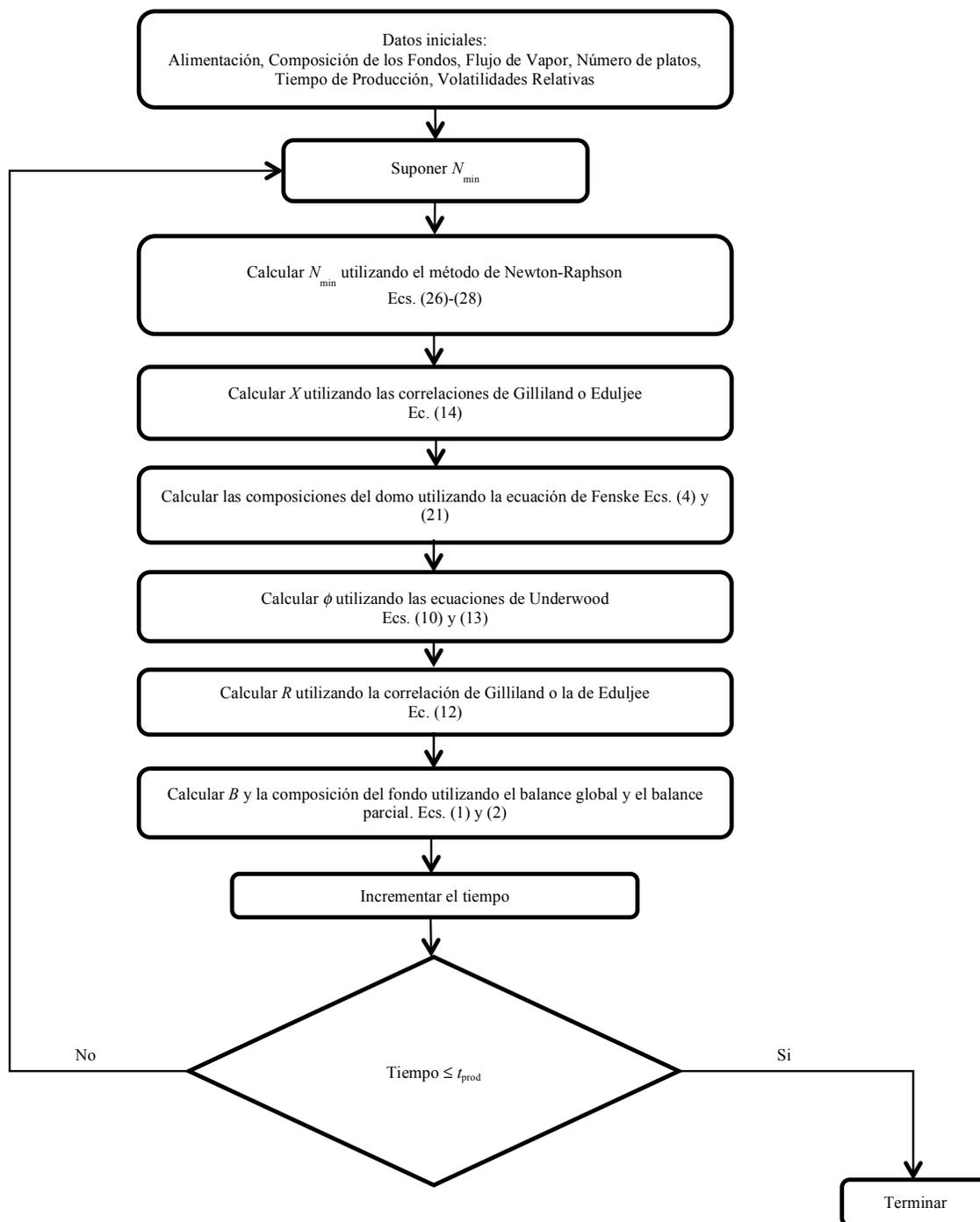


Fig. 1. Diagrama de flujo para la solución del método corto considerando una política de reflujo variable.

Tabla 1. Condiciones de entrada para los casos de estudio a reflujo variable.

Caso	Fracción molar de alimentación				Volatilidades relativas				$N^+$	$r$	$x_D^{(lk)}$	Clase
	1	2	3	4	1	2	3	4				
1	0.40	0.20	0.30	0.10	1.67	1.25	1.00	0.83	5	3	0.70	I
2	0.50	0.30	0.10	0.10	1.67	1.25	1.00	0.83	30	3	0.95	II
3	0.33	0.33	0.34	-	1.33	1.00	0.67	-	10	2	0.80	I
4	0.41	0.39	0.20	-	1.76	1.00	0.68	-	10	2	0.99	I
5	0.50	0.50	-	-	2.40	1.00	-	-	9	2	0.95	I

$$(1 - \eta_i) = (1 - \eta_r)^{\alpha_{ir}^{N_{\min}}} \quad (31)$$

siendo  $\eta_i$  el número de moles del componente “ $i$ ” en el fondo ( $\eta_i = d_i/f_i$ ) y “ $r$ ” el componente de referencia.

Los datos calculados con esta ecuación (31) se trazan y ajustan a una línea recta. De los componentes que se encuentran sobre la línea recta se obtienen los componentes clave, el componente más ligero será el componente clave ligero ( $lk$ ) y el componente más pesado será el componente clave pesado ( $hk$ ). Una descripción detallada de este proceso se encuentra en el trabajo de Zamar y col., (1998). La Figura (8) muestra el comportamiento de la concentración y la relación de reflujo considerando dos diferentes componentes claves pesados ( $hk$ ). En este caso, se obtiene una subestimación de la concentración del componente clave ligero ( $lk$ ) de hasta un 15.5% y de un 24.3% en la relación de reflujo.

Aunque este trabajo es una derivación del trabajo de Sundaram y Evans (1993), aquí se considera que el componente clave ligero ( $lk$ ) es el componente ligero que se encuentra en mayor cantidad en los fondos y el componente clave pesado ( $hk$ ) el componente pesado que se encuentra en mayor cantidad en el domo de acuerdo con la definición dada anteriormente. Otra limitante para una adecuada solución son los procesos iterativos involucrados en las ecuaciones de Fenske, Underwood y la correlación de Gilliland ya que requieren de un “adecuado” estimado inicial incrementando los tiempos de cálculo y/o procesos de ciclados si no se alcanzan valores dentro del límite de error deseado y, es que, de acuerdo con Barolo y Guarise (1996) el sistema formado por las ecuaciones de Underwood y Gilliland puede no tener solución, sin embargo, cuando el número de etapas es pequeña generalmente si la tiene.

Como el perfil de reflujo es una función continua (una función es continua cuando para puntos cercanos en el dominio se producen pequeñas variaciones en la función) la dificultad de solución generalmente se produce en el primer paso, siendo los demás pasos más sencillos de resolver porque ya se conoce el punto

anterior, sin embargo, las propias restricciones en el error aceptado pueden derivar en procesos ciclados o “desbordes” en la memoria de la computadora.

Otra dificultad que puede existir en la solución de la ecuación de Underwood es que en su forma original es una función discontinua cuando  $\phi \rightarrow \alpha_i$ , sin embargo, esta dificultad puede ser superada considerando que la ecuación de Underwood (en su forma original) puede ser representada adecuadamente por un polinomio de orden “ $N$ =Número de componentes” (Monroy-Loperena y Vargas-Villamil, 2001) cuyas raíces se obtienen utilizando cualquier método numérico convencional. Para el caso de la destilación discontinua [ecuación (11)] el polinomio es de orden “ $N-1$ ” y está representado por la ecuación (32)

$$\sum_{i=1}^c \left[ \alpha_{i,k} x_B^{(i)} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^c (\alpha_{j,k} - \phi) \right] = 0 \quad (32)$$

donde “ $k$ ” es el componente de referencia y “ $c$ ” es el número de componentes de la mezcla.

## Conclusiones

En este trabajo se ha desarrollado un método corto considerando una política de reflujo variable para el proceso de destilación discontinua. El modelo matemático propuesto ha sido desarrollado a partir del trabajo de Evans y Sundaram (1993) y pretende ser una alternativa viable dentro del contexto de los métodos cortos utilizados para el diseño, simulación, optimización y problemas de control del proceso de destilación discontinua. Cabe decir, que a diferencia del método original de Evans y Sundaram para reflujo constante (donde sólo se presentan mezclas con distribución Clase I), este trabajo también considera la separación de mezclas con distribución Clase II. Además, se consideran las definiciones de componente clave ligero ( $lk$ ) y clave pesado ( $hk$ ) dadas por Shiras y col., (1950) a diferencia del trabajo de Sundaram y

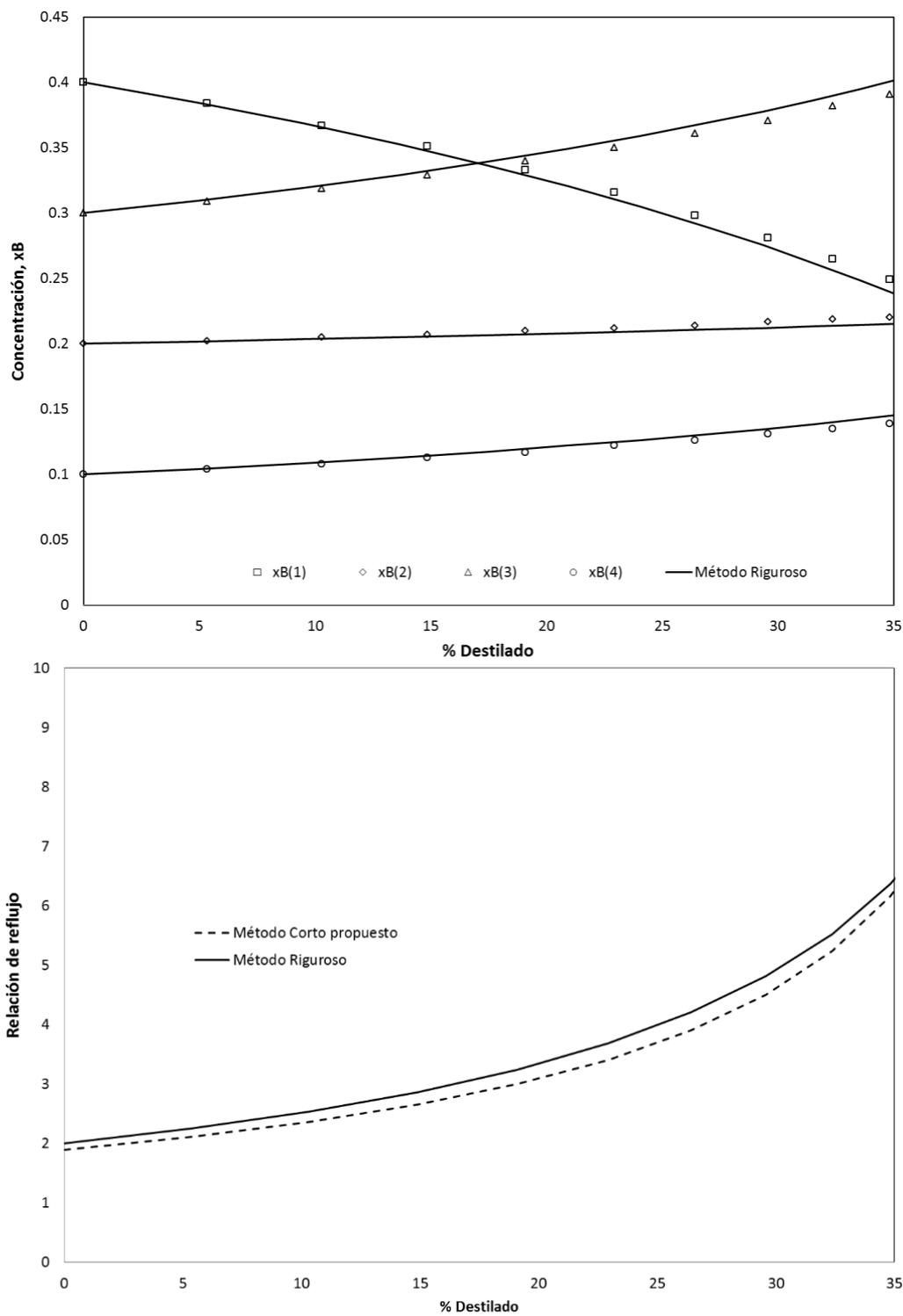


Fig. 2. Caso 1: Mezcla cuaternaria, clase I. Comparación del método corto propuesto con un modelo riguroso utilizando MultibatchDS<sup>®</sup>.

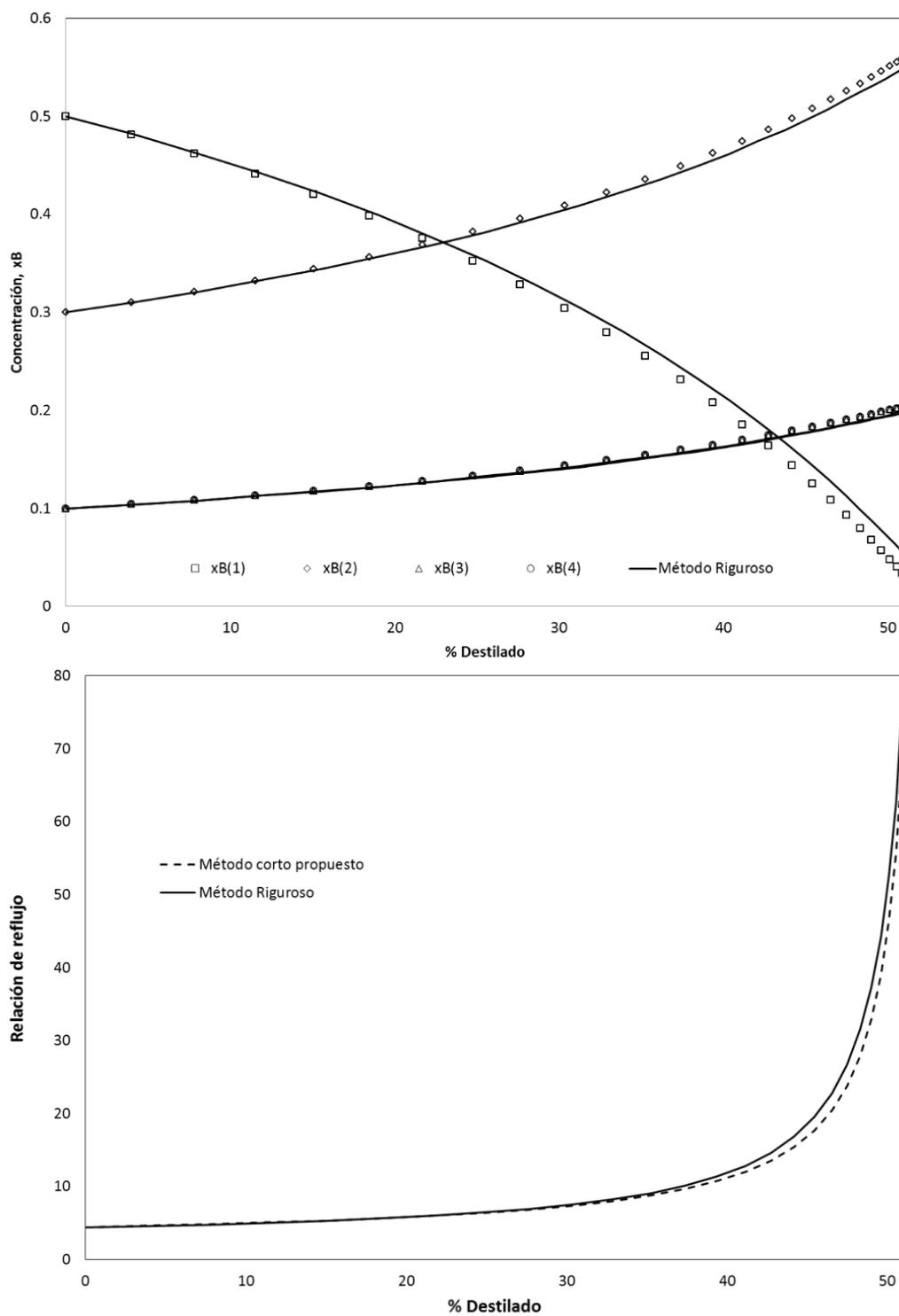


Fig. 3. Caso 2: Mezcla cuaternaria, clase II. Comparación del método corto propuesto con un modelo riguroso utilizando MultibatchDS<sup>®</sup>.

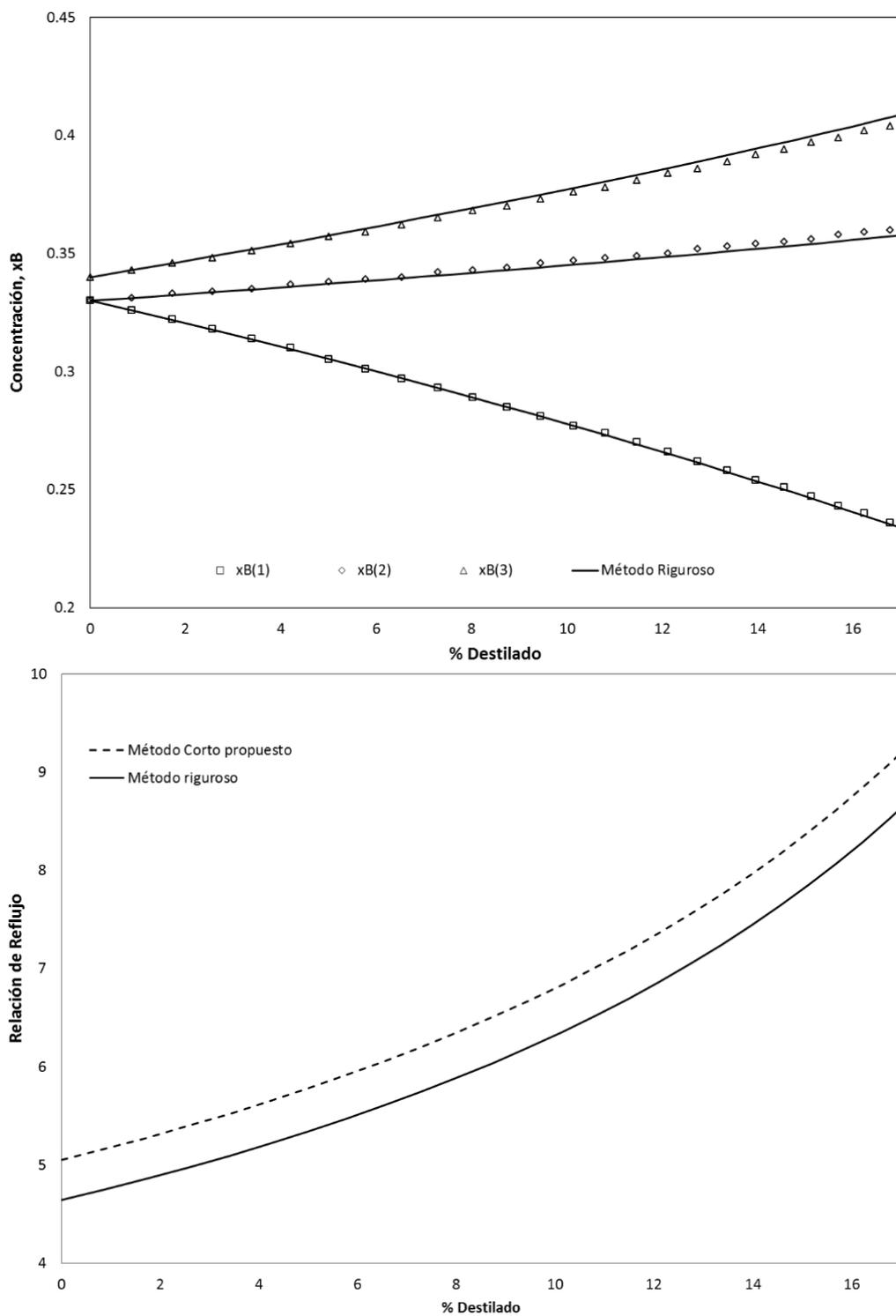


Fig. 4. Caso 3: Mezcla ternaria, clase I. Comparación del método corto propuesto con un modelo riguroso utilizando MultibatchDS<sup>®</sup>.

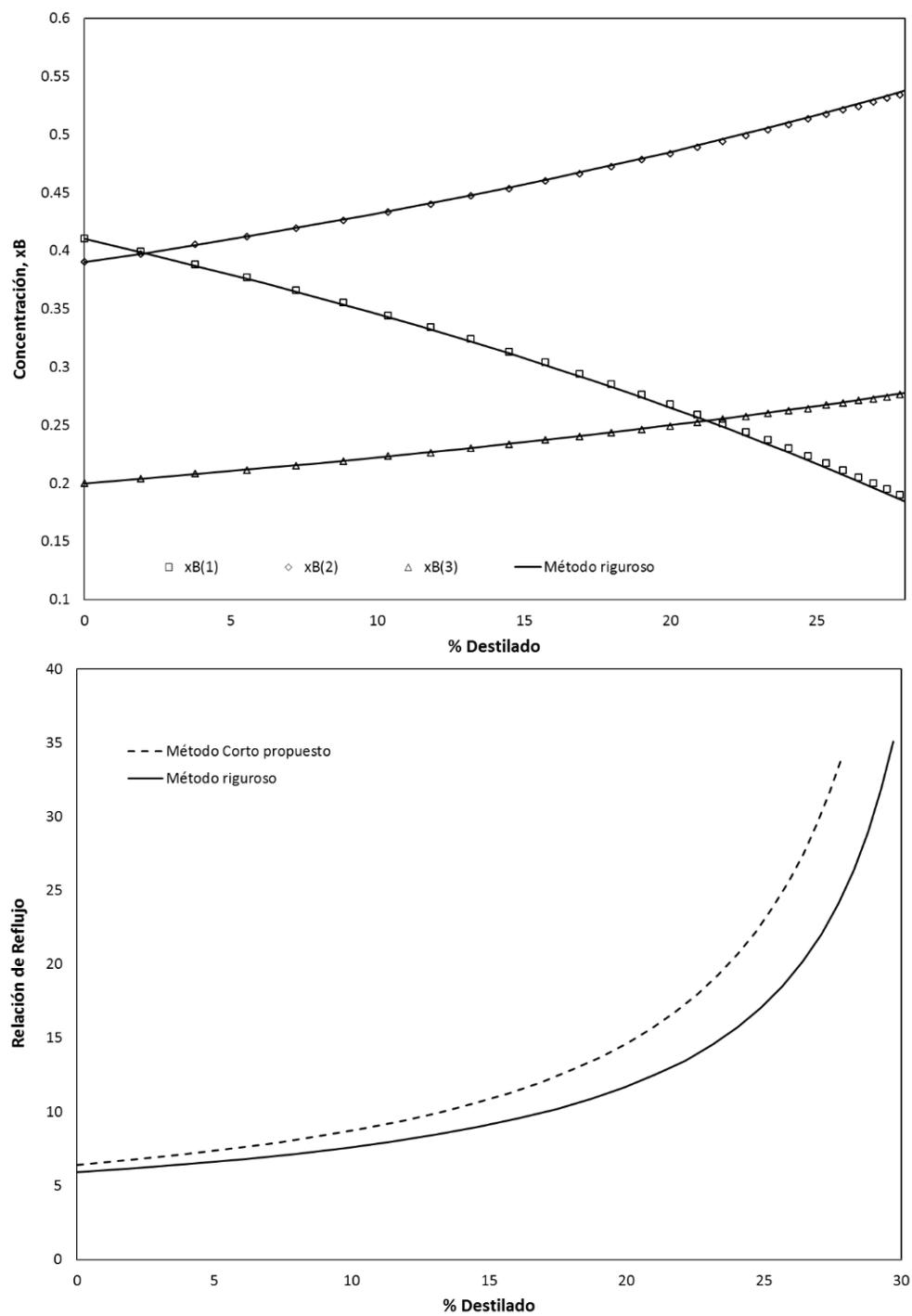


Fig. 5. Caso 4: Mezcla ternaria, clase II. Comparación del método corto propuesto con un modelo riguroso utilizando MultibatchDS<sup>®</sup>.

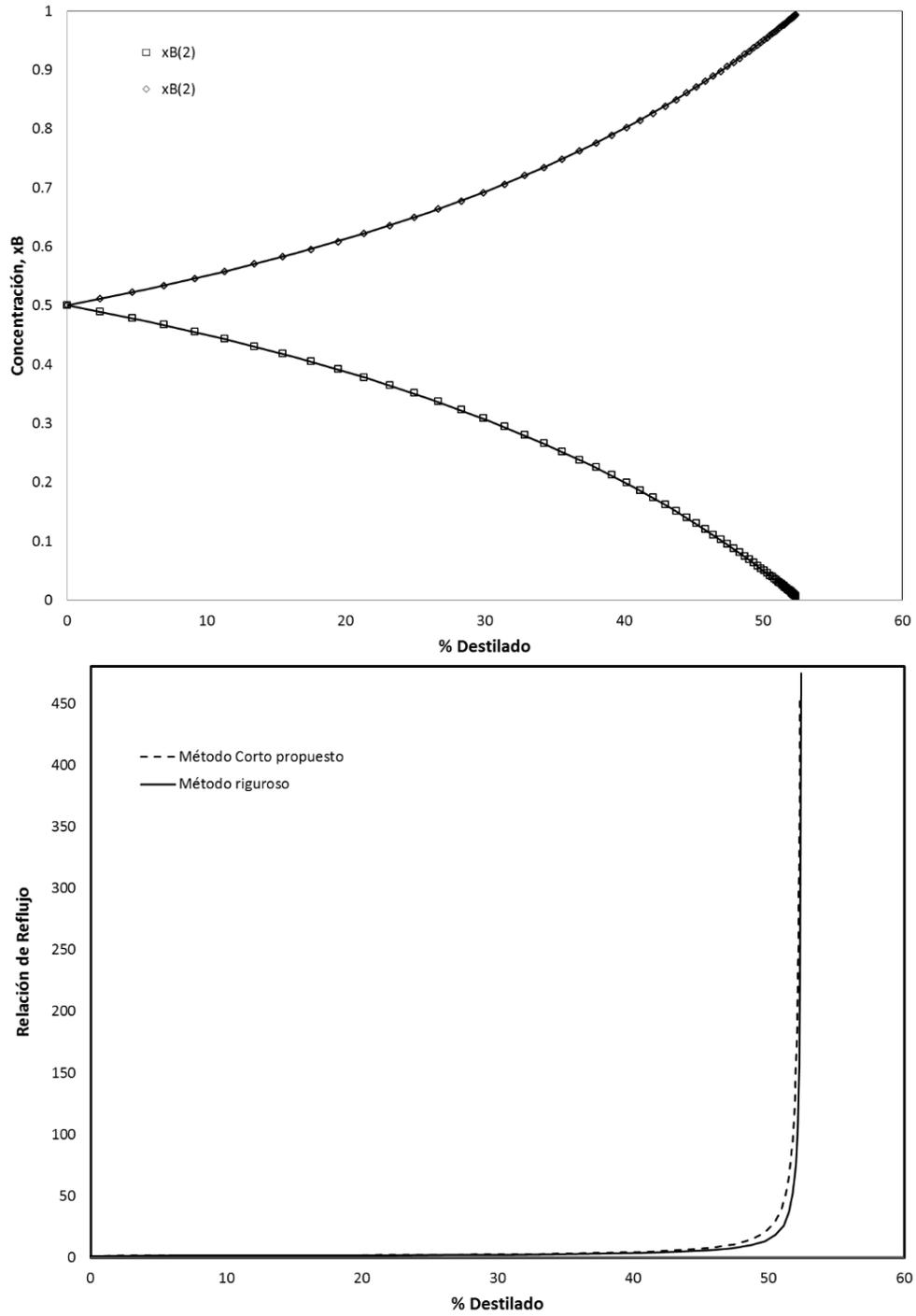


Fig. 6. Caso 5: Mezcla binaria, Clase I. Comparación del método corto propuesto con un modelo riguroso utilizando MultibatchDS®.

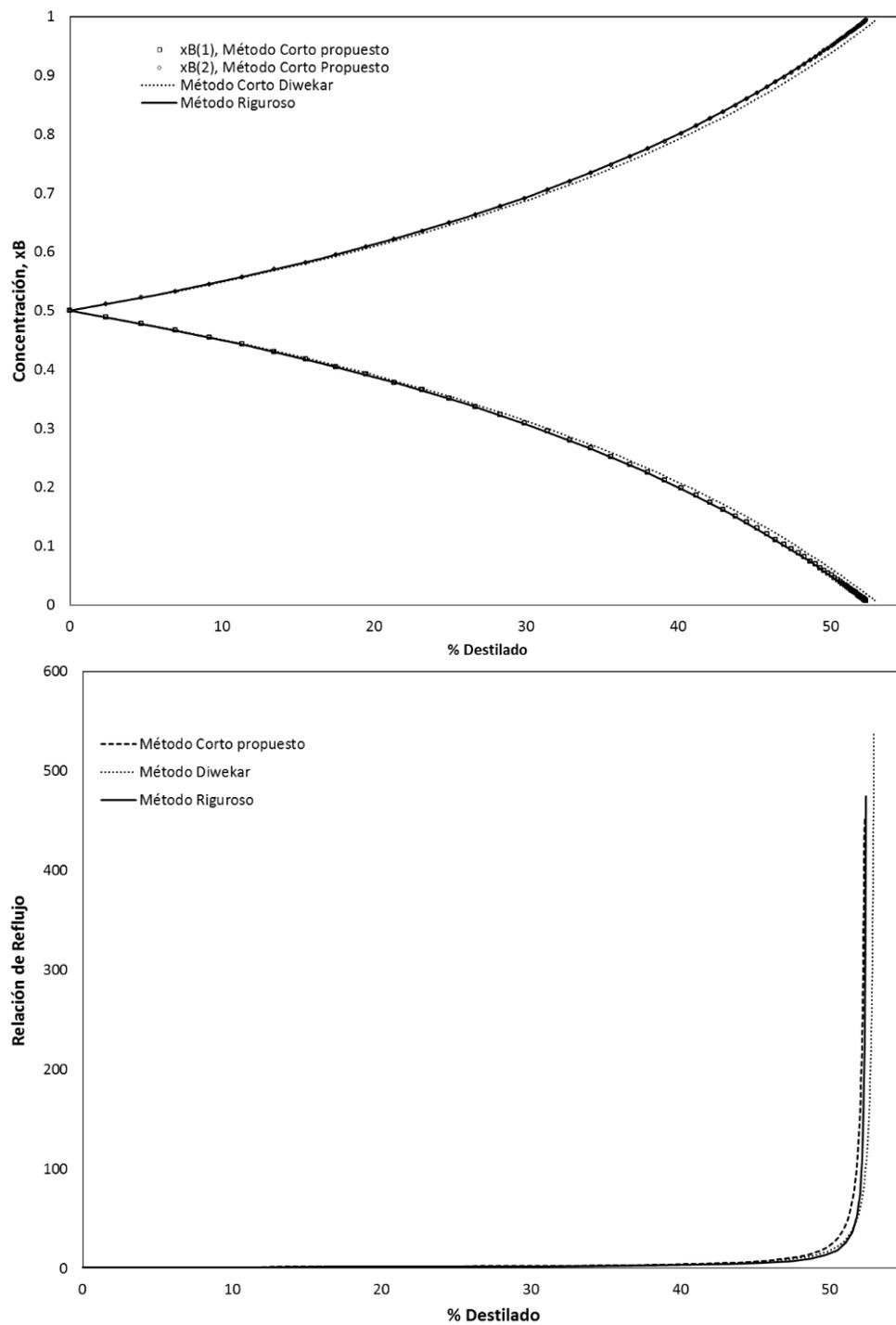


Fig. 7. Caso 5: Mezcla binaria, Clase I. Comparación del método corto propuesto con un método corto y un modelo riguroso utilizando MultibatchDS<sup>®</sup>.

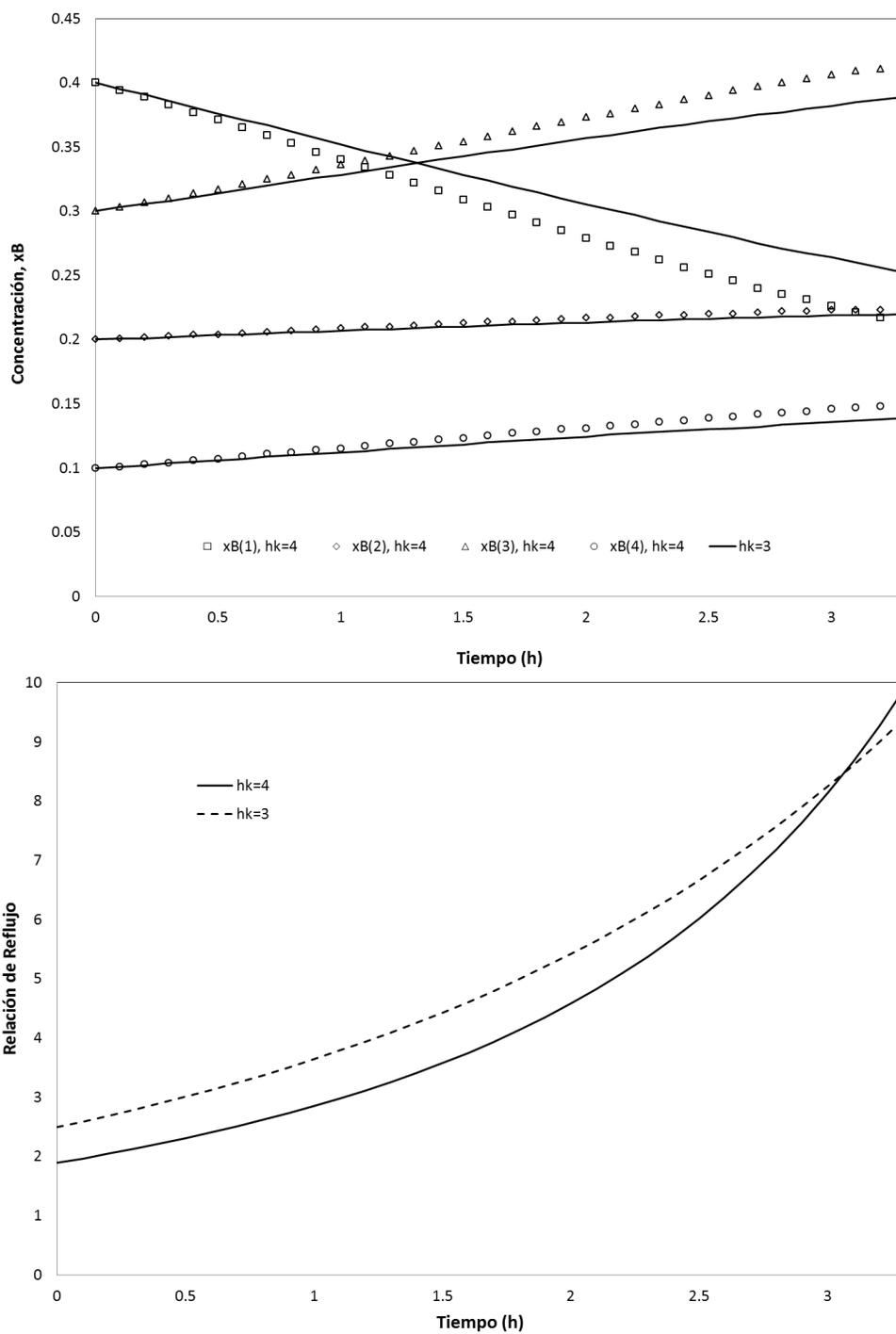


Fig. 8. Caso 1: Mezcla cuaternaria, Clase I. Solución del método corto propuesto eligiendo como componente clave pesado ( $hk$ ) al componente más pesado (4) y al componente pesado (3) que se encuentra en mayor cantidad inicialmente.

Evans que consideran como componente clave ligero (*lk*) al componente más volátil y como componente clave pesado (*hk*) al componente más pesado.

La elección de los componentes claves es parte fundamental en la solución del modelo matemático propuesto ya que puede obtenerse una sobreestimación o subestimación de los balances de materia. En este trabajo, se presentó el impacto de no elegir correctamente a los componentes claves. La solución del modelo matemático se comparó con los resultados obtenidos mediante un método riguroso considerando una acumulación de líquido y vapor igual a CERO y, que se encuentra implementado en el simulador MultiBatchDS<sup>®</sup>. En todos los casos, la diferencia de resultados respecto a los perfiles de concentración, tanto en el fondo como en el domo, no excedió al 7%, lo mismo se observa para los perfiles de las relaciones de reflujo, por lo que se considera que los resultados obtenidos son satisfactorios. En cuanto a los perfiles de la relación de reflujo, el comportamiento permite observar que se puede “terminar” el proceso de separación cuando una pequeña variación en los fondos de la concentración del componente deseado requiere de una relación de reflujo muy grande.

## Agradecimientos

Agradecemos a la Universidad Autónoma del Carmen y a la Universidad Autónoma de Yucatán, en México, por todas las facilidades brindadas para el desarrollo de este trabajo, de la misma manera agradecemos al PROMEP por aportar los recursos financieros mediante el convenio PROMEP/103.5/10/5126.

## Nomenclatura

<i>B</i>	fondos (kmol)
<i>D</i>	producto (kmol)
<i>hk</i>	componente clave pesado
<i>N</i>	número de etapas
<i>c</i>	número de componentes
<i>N<sub>min</sub></i>	número mínimo de etapas
<i>lk</i>	componente clave ligero
<i>k</i>	componente de referencia
<i>R</i>	relación de reflujo
<i>R<sub>min</sub></i>	relación de reflujo mínima
<i>t</i>	tiempo (h)
<i>V</i>	flujo de vapor (kmol/h)
<i>x</i>	composición del líquido

## Índices

<i>B</i>	fondos
<i>D</i>	producto
<i>hk</i>	componente clave pesado
<i>lk</i>	componente clave ligero
<i>i</i>	componente “i”

## Símbolos griegos

$\alpha$	Volatilidad relativa
$\phi$	Parámetro de la ecuación de Underwood

## Referencias

- Barolo, M. y Guarise, G. B. (1996). Batch distillation of multicomponent systems with constant relative volatilities. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 74, 863-871.
- Cressy, D.C., Nabney, Ian T. y Simper, A. (1993). Neural control of a batch distillation. *Neural Computing and Applications* 1, 115-123.
- Distefano, G.P. (1968). Mathematical modeling and numerical integration of multicomponent batch distillation equations. *AIChE Journal* 14, 190-199.
- Diwekar, U.M. (1988). *Simulation, Design, Optimization and Optimal Control of Multicomponent Batch Distillation Columns*. Ph. D. Thesis. Indian Institute of Technology, Bombay, India.
- Diwekar, U.M. y Madhavan, K.P. (1991). Batch-Dist: A comprehensive package for simulation, design, optimization and optimal control of multicomponent, multifraction batch distillation columns. *Computers and Chemical Engineering* 15, 833-842.
- Diwekar, U. (2012). *Batch Distillation: Simulation, Optimal Design, and Control*. Second Edition. CRC Press. U.S.A.
- Domenech, S. y Enjalbert, M. (1981). Program for simulating batch rectification as a unit operation. *Computers and Chemical Engineering* 5, 181-184.
- Ehsani, Mohammad R. (2002). Prediction of the operating conditions in a batch distillation column using a shortcut method. *Iran Journal of Chemistry & Chemical Engineering* 21, 118-125.
- Monroy-Loperena, R. y Álvarez-Ramírez, J. (2003). A note on the identification and control of batch

- distillation columns. *Chemical Engineering Science* 58, 4729-4737.
- Monroy-Loperena, R. y Vargas-Villamil, F.D. (2001). Determination of the polynomial defining Underwood's equations in short-cut distillation design. *Industrial and Engineering Chemistry Research* 40, 5810-5814.
- Shiras, R.N., Hanson, D.N. y Gibson, C.H. (1950). Calculation of minimum reflux in distillation columns. *Industrial & Engineering Chemistry* 42, 871-876.
- Sundaram, S. y Evans, L.B. (1993). Shortcut procedure for simulating batch distillation operations. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 32, 511-517.
- Zamar, Silvina D., Salomone, Enrique y Iribarren, Oscar A. (1998). Shortcut method for multiple task batch distillations. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 37, 4801-4807.
- Zavala-Loría, J.C., Córdova-Quiroz, A.V., Robles-Heredia, J.C., Anguebes-Franceschi, F., Narváez-García, A. y Elvira-Antonio, N. (2006). Efecto de la derivación del reflujo en destilación discontinua. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 5, 109-113.