

## OPTIMIZACIONES PRELIMINARES EN EL SISTEMA DE DESTILACIÓN POR CAMBIO DE PRESIÓN PARA SEPARAR TETRAHIDROFURANO Y H<sub>2</sub>O

Bressán, Gianella

*Cátedra Transferencia de Materia y Operaciones – Área Operaciones Unitarias – Departamento de Ingeniería de Procesos – Facultad de Ingeniería Química – Universidad Nacional del Litoral*  
Director: Gross, Martín

Área: Ingeniería

Palabras claves: Destilación, Mezcla Azeotrópica, Cambio de Presión

### INTRODUCCIÓN

En el presente trabajo se estudia la manera de separar los componentes de la mezcla tetrahidrofurano-agua (THF-H<sub>2</sub>O). Este sistema binario presenta una desviación del comportamiento ideal de las soluciones, hecho que se evidencia por la presencia de un azeótropo binario homogéneo. La destilación de mezclas azeotrópicas es un tema de gran interés en la actualidad, por lo que se encuentra en continuo desarrollo. Existen numerosos métodos como la destilación azeotrópica, la destilación extractiva, la destilación por pervaporación, la destilación por cambio de presión, entre otras (Lauzarique 2013). En este último caso, se utilizan columnas tradicionales y no es necesaria la adición de un agente material externo, sino que por medio de un aumento o disminución de presión de operación se desplaza la composición azeotrópica de manera tal de alcanzar las concentraciones requeridas, más allá de la restricción que impone el azeótropo. Un requisito necesario para aplicar este método es que el azeótropo a separar debe ser sensible a la presión. Para que el proceso sea viable, la composición del azeótropo debe variar al menos un 5% en un intervalo de presión, que no debe ser mayor a 10 atm entre columnas. El proceso de separación de THF y H<sub>2</sub>O mediante destilación es un ejemplo de la implementación de este método. En la Figura 1 se presenta un esquema típico de una destilación por cambio de presión. El sistema consta de dos columnas, una columna que opera a baja presión (CBP) y una columna que opera a alta presión (CAP). En el esquema presentado, la alimentación ingresa a la CBP con una fracción molar de THF de 0,5. El producto obtenido por tope en esta columna tiene una composición cercana al azeótropo, dado que el azeótropo es de mínima temperatura de ebullición. La fracción molar de THF en la corriente de fondo (principalmente agua) debe ser lo suficientemente pequeña para que no genere pérdidas económicas o implique un daño al ambiente si es que el agua es vertida. Luego, al aumentar la presión, la composición del azeótropo se desplaza hacia menores valores, moviendo el sistema hacia la zona derecha del diagrama de equilibrio. De esta manera la corriente de tope de la columna anterior es la alimentación de la CAP, que opera a mayor presión que la CBP. En esta segunda columna se obtiene por tope una corriente cuya composición es cercana al azeótropo, a mayor presión. Esta corriente se recircula a la CBP, previa descompresión claramente. La corriente de fondo de la HPC tiene una fracción molar de THF de 0,999.

Título del proyecto: Separación de mezclas azeotrópicas vía destilación mejorada.

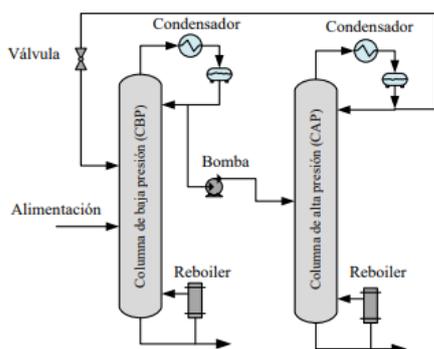
Instrumento: CAI+D 2020 50520190100068LI

Año de convocatoria: 2022

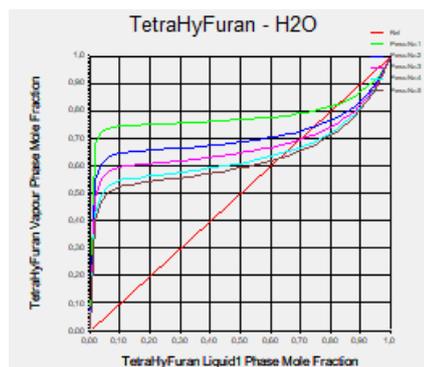
Organismo financiador: UNL

Director: Gross, Martín Sebastián





**Figura 1:** Proceso de destilación con cambio de presión para un azeótropo de mínimo punto de ebullición. Fuente: Matsuda, et al., 2011



**Figura 2:** Diagrama x-y a diferentes presiones. Fuente: UniSim Thermoworkbench®

## OBJETIVOS

Analizar de qué manera influyen los diferentes parámetros de diseño sobre el tamaño de las columnas y encontrar las condiciones que optimicen tanto los costos fijos como operativos.

## METODOLOGÍA

### Regresión de datos experimentales de equilibrio.

Se realizó la regresión de datos de equilibrio líquido vapor a presión de 1 atm (Hala, E; Polak, J y otros). Luego, se elaboraron los diagramas de equilibrio correspondientes a cada una de las presiones con cada uno de los modelos obtenidos para observar la calidad del ajuste. Para esto se usó la utilidad UniSim Thermoworkbench®, la que permite mediante regresión no lineal de datos experimentales de equilibrio, obtener los valores de los parámetros del modelo de equilibrio propuesto. Para la fase líquida se propuso el modelo de coeficientes de actividad Wilson y para la fase vapor comportamiento ideal. Se asume que los coeficientes binarios no se modifican significativamente con la variación de presión en el rango de trabajo de este estudio.

### Adopción de las condiciones de operación.

Con el objetivo de obtener el diseño óptimo de las columnas, se analizan la influencia de distintas variables involucradas. Para ello, se utilizó el diseño de columnas mediante el método abreviado del software Unisim Design. Se adoptaron las diferentes variables operativas según se detalla a continuación: a) La presión de la CAP debe ser suficiente elevada para modificar la composición del azeótropo de manera significativa con respecto a la composición a baja presión y posteriormente se verificó que sea adecuada. b) Se adoptó la alimentación de la CBP con un caudal de 100 kmol/h y fracción molar 0,5. c) En la CBP, la composición de tope se fijó próxima a la del azeótropo a presión atmosférica y posteriormente se verificó este valor, mientras que en la corriente de fondo se adoptó una composición de manera de disminuir las pérdidas de THF. d) En la CAP se fijó como objetivo la obtención de THF anhidro en la corriente de fondo y en la corriente de tope una composición cercana al azeótropo de alta presión.

### Verificación de presión en CAP y composición en CBP.

Para verificar que la presión adoptada no sea demasiado elevada, se realizó la optimización de la CAP y se observó el efecto sobre el número total de etapas teóricas.

### Simulación y optimización.

En primer término, se realizó la simulación y optimización de las columnas por separado. Para ello, se realizaron simulaciones asumiendo columnas con distintos números de platos y plato de ingreso de alimentación, tomando como punto de partida el número de etapas teóricas que determina el método abreviado de cálculo; de manera de encontrar para cada número de etapas teóricas el correspondiente plato óptimo de alimentación que produce el mínimo requerimiento energético.

## CONCLUSIONES

### Estudio del equilibrio líquido-vapor

A 1 atm de presión, las temperaturas de ebullición del THF y H<sub>2</sub>O son 65,9°C y 100°C respectivamente. El azeótropo de mínima temperatura tiene una composición del 0,828 en fracción molar de THF y hierve a 63,9°C (Perry's Chemical Engineer's Handbook). Estos valores fueron cotejados con UniSim Thermoworkbench®, modelando la fase líquida con el modelo de coeficientes de actividad Wilson y para la fase vapor comportamiento ideal. La composición azeotrópica para diferentes presiones propuestas se lista en la Tabla 1.

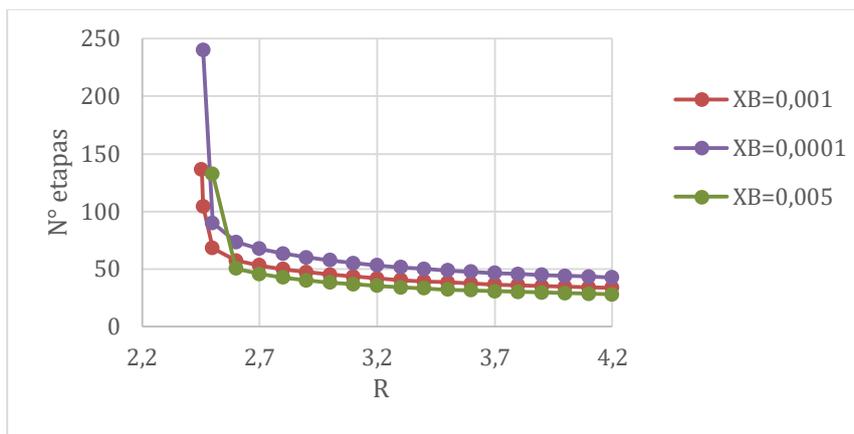
**Tabla 1:** composición del azeótropo a diferentes presiones

P (atm)	X <sub>THF</sub>
1	0,845
2	0,777
3	0,744
5	0,706
7	0,666

### Variación del número de etapas ante una variación del reflujo y la composición de fondo para la CBP.

En este caso, la presión de operación de la columna se mantuvo fija en 1 atm, la composición de destilado en 0,836 y se consideró una alimentación con una fracción molar de 0,5. Las variables a modificar fueron la relación de reflujo, cuyo valor se fue aumentando a partir del reflujo mínimo correspondiente a esas condiciones, y la composición de fondo. Los resultados obtenidos se muestran en la Figura 3.

Se observa que, para diferentes composiciones de fondo, el número de etapas tiende a mantenerse constante a partir de una determinada relación de reflujo. Este comportamiento está de acuerdo con el límite operativo dado por el reflujo total, para el sistema con el que se está trabajando podría decirse que un valor mayor a 3 equivale a decir que se está trabajando a reflujo total. Por lo que aumentar la relación de reflujo por encima de 3 resultaría antieconómico, ya que implicaría mayor costo operativo, mayores caudales de bombeo, mayor consumo de vapor de calefacción y agua de enfriamiento, sin una disminución significativa en el número de etapas teóricas. Por otro lado, un incremento en la relación de reflujo requiere que el diámetro de la columna sea más grande para que opere lejos del régimen de inundación.



**Figura 3:** Variación del número de etapas con el reflujo y la composición de fondo

### Variación del número de etapas teóricas con la presión en la CAP.

Se varió la presión de operación de la columna, manteniendo constante las demás variables. Se consideró un 1% de la composición del azeótropo correspondiente a cada presión para fijar la composición de destilado, mientras que la composición de fondo se mantuvo en una fracción molar de  $10^{-3}$  de agua, se adoptó una relación de reflujo 30% mayor al correspondiente reflujo mínimo para cada presión y se consideró una alimentación de 0,836. Se obtuvieron los siguientes resultados indicados en la Tabla 2.

**Tabla 2:** variación del número de etapas teóricas con la presión

P (atm)	Xd thf	N° etapas
1	0,836	141,621531
2	0,769	35,5174863
3	0,736	31,6082942
5	0,699	28,0231037
7	0,658	24,732874

Se observa una disminución del número de etapas ante un aumento de presión, lo que conlleva a la disminución en los costos de construcción de la columna. Habría que tener más información para poder comparar los costos operativos con los de inversión, porque claramente a mayor presión, se incrementan los costos operativos.

Si bien se ha logrado mostrar de qué manera diferentes parámetros y condiciones de operación influyen sobre los costos fijos (tamaño de columnas) y costos de operación (servicios auxiliares) sobre cada una de las columnas por separado, para lograr un mejor proceso de optimización deberá realizarse un estudio más profundo donde se analicen además recuperaciones de energía mediante el acople indirecto de las columnas, analizar cómo influye el plato de alimentación en la CBP de la corriente de destilado de la CAP.

### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

**Lauzarique, Y.,** Acosta, L., Pérez, O., Zumalacárregui, L. 2013. Procesos de separación en la producción de etanol anhidro. Universidad de Santiago, Chile.  
**R.H. Perry,** D.W. Green, J.O. Maloney, 1999. Perry's Chemical Engineer's Handbook, McGraw-Hill, New York.