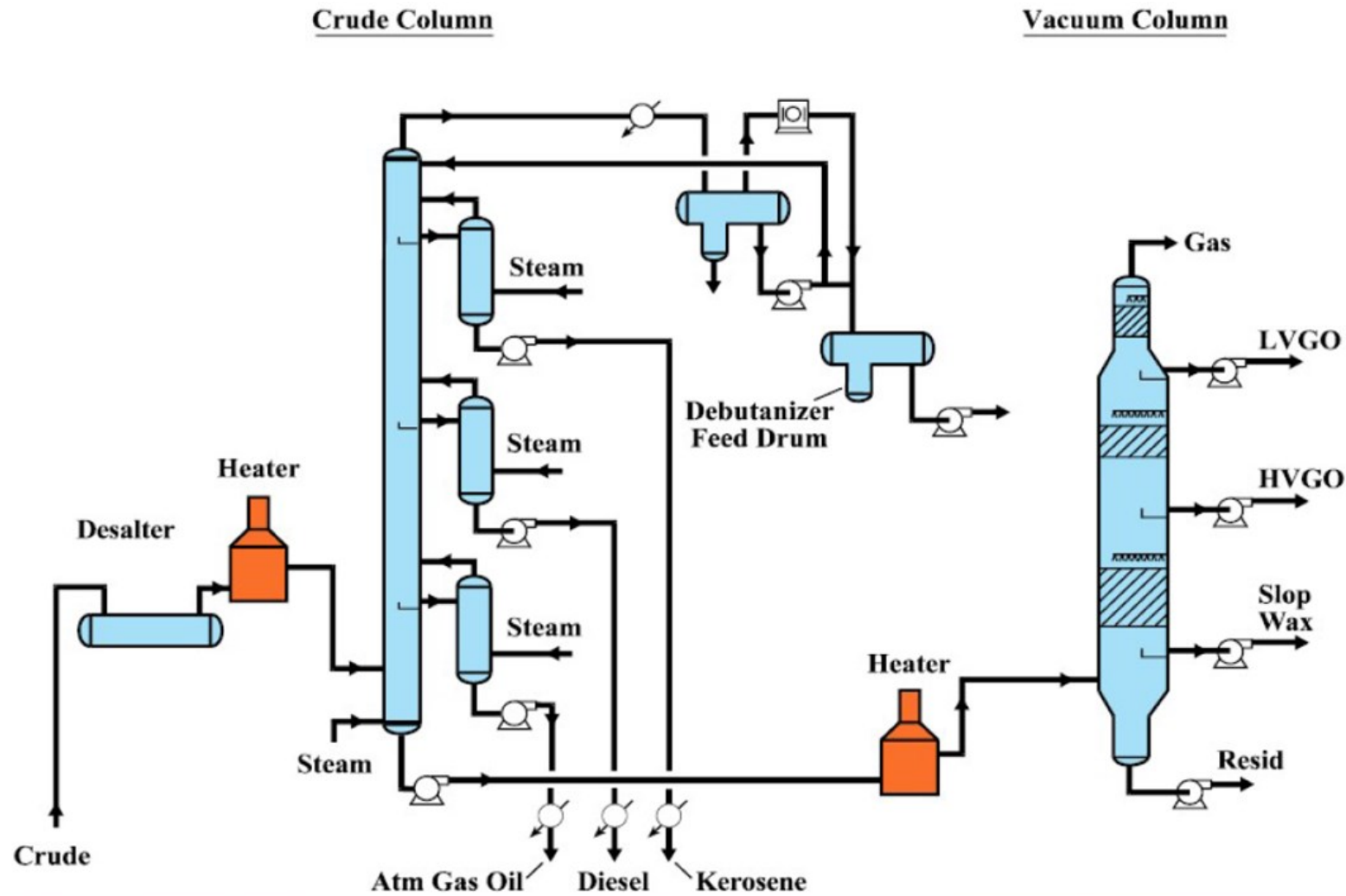


Unidad 6 DESTILACIÓN MULTICOMPONENTES

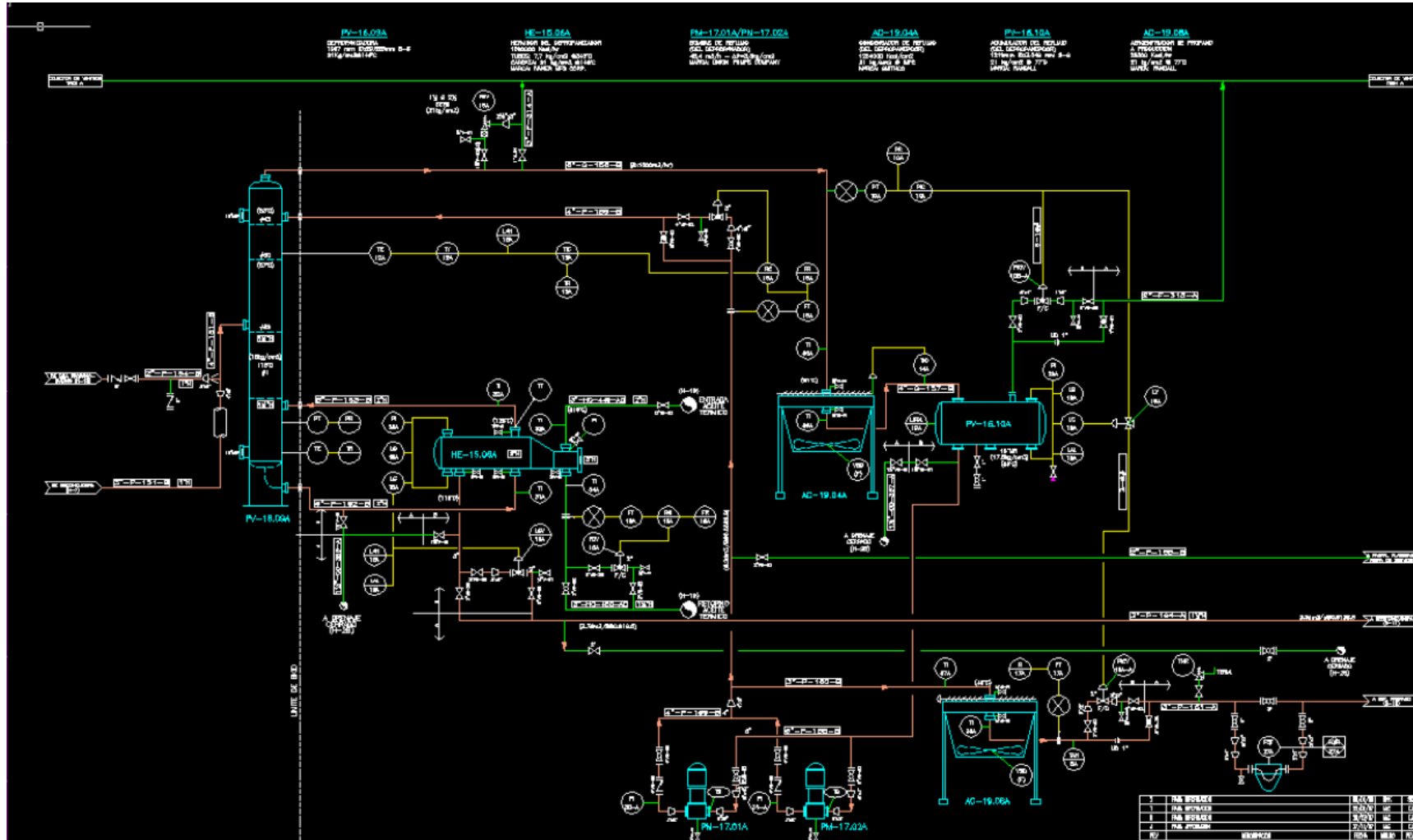
2° Cuatrimestre - 2025

Destilación Multicomponentes



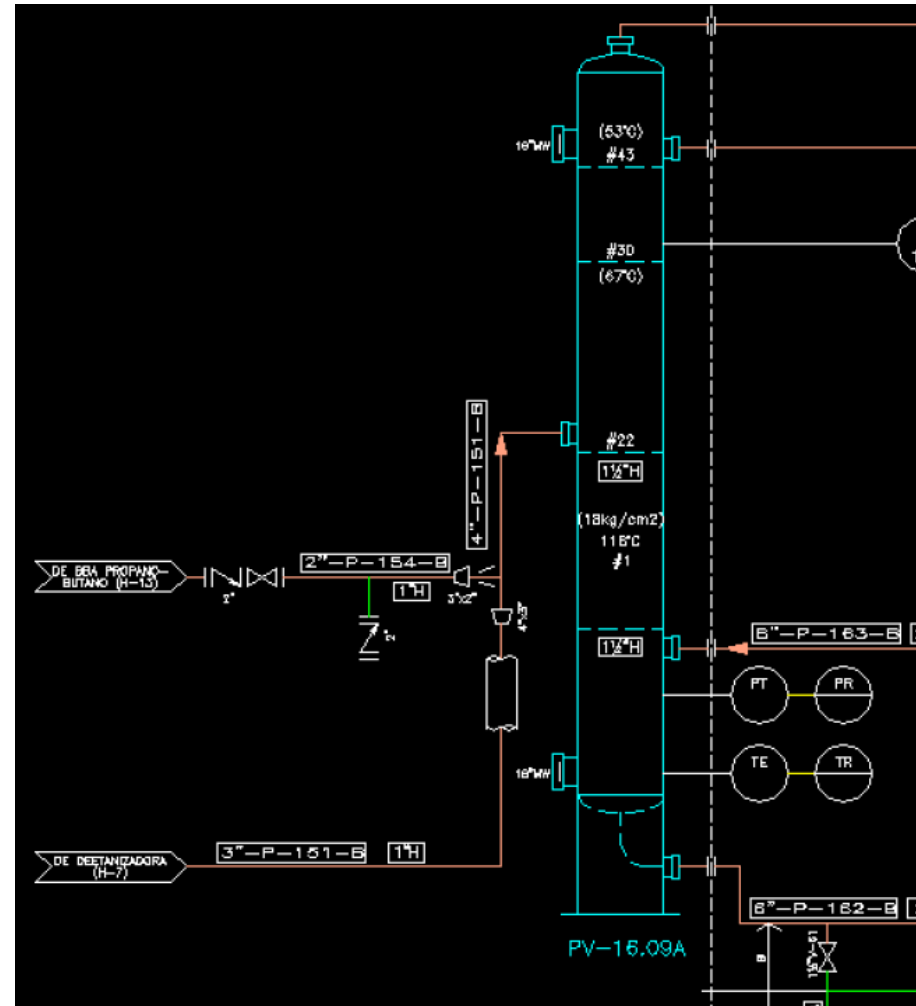
Destilación Multicomponentes

En un P&ID, una columna de destilación se ve así:



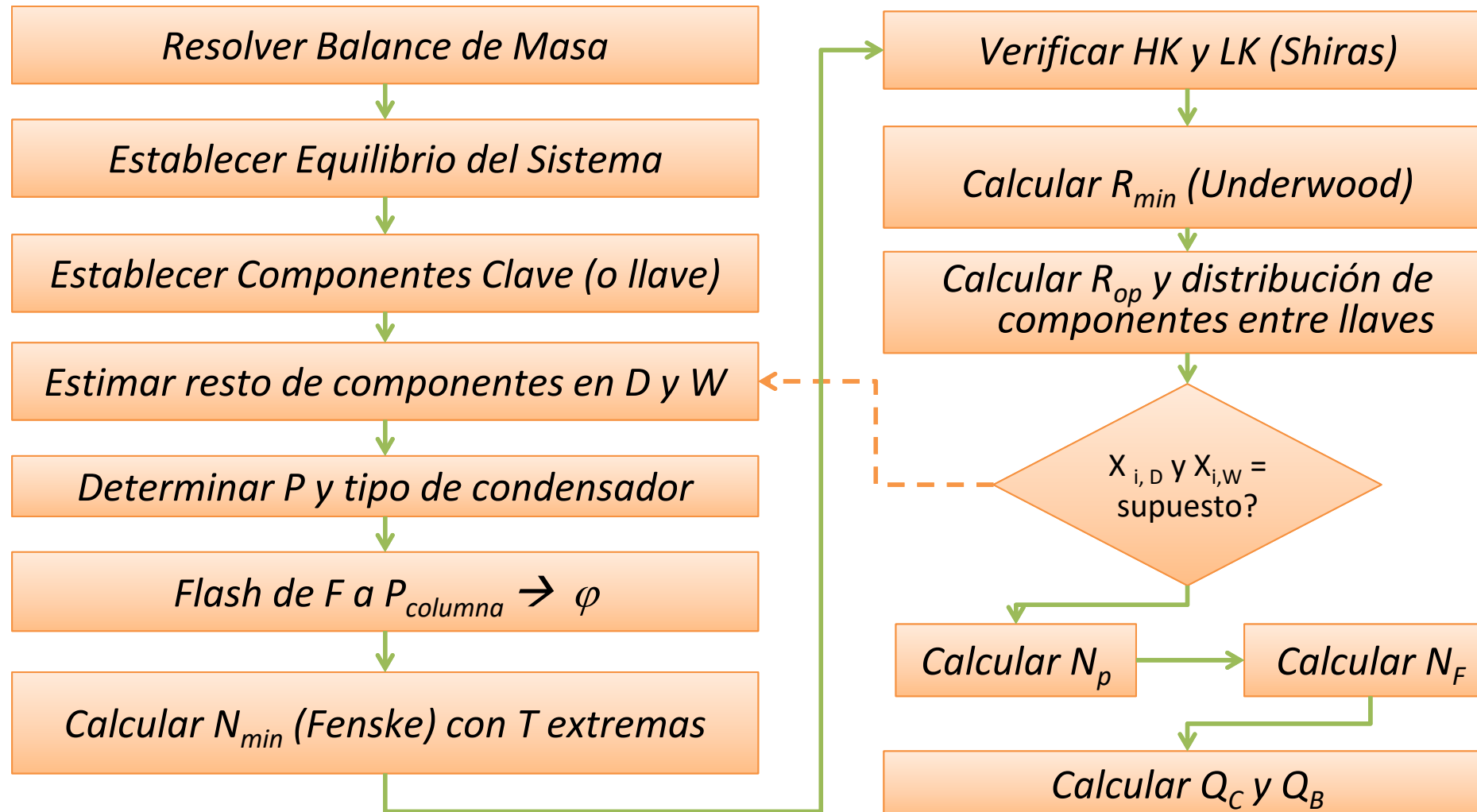
Destilación Multicomponentes

Haciendo zoom:



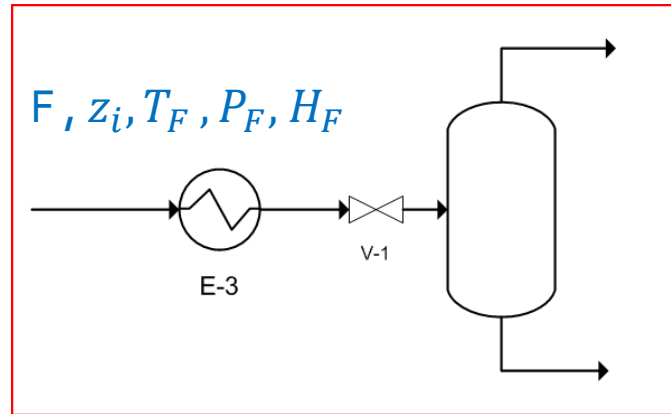
Destilación Multicomponentes

El flujo de trabajo para resolver este tipo de operación será:



Destilación Flash

Comenzamos analizando la entrada de la alimentación al equipo:



V, y_i, T_V, P_V, H_V

L, x_i, T_L, P_L, H_L

Variables del sistema:

F	1
L	1
V	1
z_i	C
x_i	C
y_i	C
T_F	1
T_V	1
T_L	1
P_V	1
P_L	1
P_F	1
Q	1

N° var = 3C+10

Ecuaciones del Sistema:

(1) $P_V = P_L$	1
(2) $T_V = T_L$	1
(3) $y_i = K_i \cdot x_i$ con $K_i = f(T, P, x_i; y_i)$	C
(4) $F \cdot z_i = V \cdot y_i + L \cdot x_i$	C-1
(5) $F = V + L$	1
(6) $F \cdot H_F + Q = V \cdot H_V + L \cdot H_L$	1
(7) $\sum z_i = 1$	1
(8) $\sum x_i = 1$	1
(9) $\sum y_i = 1$	1

N° Ecuaciones = 2C+6

Grados de Libertad:

$$3C + 10$$

$$- \underline{2C + 6}$$

$$C + 4$$

¿Qué más conocemos?

Destilación Flash

¿Qué más conocemos?

Grados de Libertad:

$$\begin{array}{r} 3C + 10 \\ - \underline{2C + 6} \\ C + 4 \end{array}$$

De la alimentación...

$$\begin{array}{c} F, z_i, T_F, P_F \\ C + 2 \end{array}$$

Necesitamos definir aún 2 variables más:

(1) P_V (o P_L) y T_V (o T_L)

Flash Isotérmico

(2) P_V (o P_L) y $Q = 0$

Flash Adiabático

(3) P_V (o P_L) y L/F (o V/F)

% de condensación
(o % de vaporización)

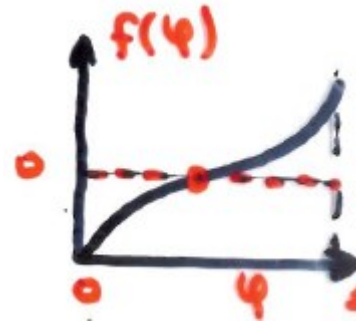
(1) Flash Isotérmico

Quando K es independiente de (x,y) , se utiliza el procedimiento de **Rachford-Rice**:

$$\left. \begin{array}{l} \text{de (4) y (5): } F \cdot z_i = V \cdot y_i + (F - V) \cdot x_i \\ \text{con (3): } F \cdot z_i = V \cdot (K_i \cdot x_i) + (F - V) \cdot x_i \end{array} \right\} \begin{array}{l} (10): x_i = \frac{z_i}{\frac{V}{F} \cdot (K_i - 1) + 1} \\ (11): y_i = \frac{K_i \cdot z_i}{\frac{V}{F} \cdot (K_i - 1) + 1} \end{array}$$

Si definimos Ec. (13): $\varphi = \frac{V}{F}$ (entre 0 y 1), con (8) y (9):

$$\sum x_i - \sum y_i = 0 \quad \therefore f(\varphi) = \sum_{i=1}^C \frac{z_i \cdot (1 - K_i)}{\frac{V}{F} \cdot (K_i - 1) + 1} = 0 \quad \text{Ec. (12)}$$



Recordando las Ecuaciones del Sistema:

(1) $P_V = P_L$	1
(2) $T_V = T_L$	1
(3) $y_i = K_i \cdot x_i$ con $K_i = f(T, P, x_i; y_i)$	C
(4) $F \cdot z_i = V \cdot y_i + L \cdot x_i$	C-1
(5) $F = V + L$	1
(6) $F \cdot H_F + Q = V \cdot H_V + L \cdot H_L$	1
(7) $\sum z_i = 1$	1
(8) $\sum x_i = 1$	1
(9) $\sum y_i = 1$	1

N° Ecuaciones = 2C+6

Para el cálculo:

Datos: $F, T_F, P_F, T_V, P_V, z_1, z_2, \dots$

$$\begin{array}{ll} (1) T_V = T_L \text{ (isotérmico)} & (10): x_i = \frac{z_i}{\varphi \cdot (K_i - 1) + 1} \\ (2) P_V = P_L & (11): y_i = \frac{K_i \cdot z_i}{\varphi \cdot (K_i - 1) + 1} \\ (3) z_C = 1 - \sum_{i=1}^{C-1} z_i & (5) L = F - V \\ (12) f(\varphi) = \sum_{i=1}^C \frac{z_i \cdot (1 - K_i)}{\frac{V}{F} \cdot (K_i - 1) + 1} = 0 & (6) Q = V \cdot H_V + L \cdot H_L - F \cdot H_F \\ (13) V = \varphi \cdot F & \end{array}$$

(1) Flash Isotérmico

Cuando K es independiente de (x,y) , el procedimiento de **Rachford-Rice**:

Datos F, T_P, P_P, T_V, P_V
 z_1, z_2, \dots, z_{C-1}

$$T_L = T_V \quad (1)$$

$$P_L = P_V \quad (2)$$

$$z_C = 1 - \sum_{i=1}^{C-1} z_i \quad (7)$$

$$f(\psi) = \sum_{i=1}^C \frac{z_i(1-K_i)}{\psi(K_i-1)+1} = 0 \quad (12)$$

$$y = F \psi \quad (13)$$

$$x_i = \frac{z_i}{\psi(K_i-1)+1} \quad (10)$$

$$y_i = \frac{K_i z_i}{\psi(K_i-1)+1} \quad (11)$$

$$L = F - V \quad (5)$$

$$Q = V H_V + L B_L - F H_P \quad (6)$$

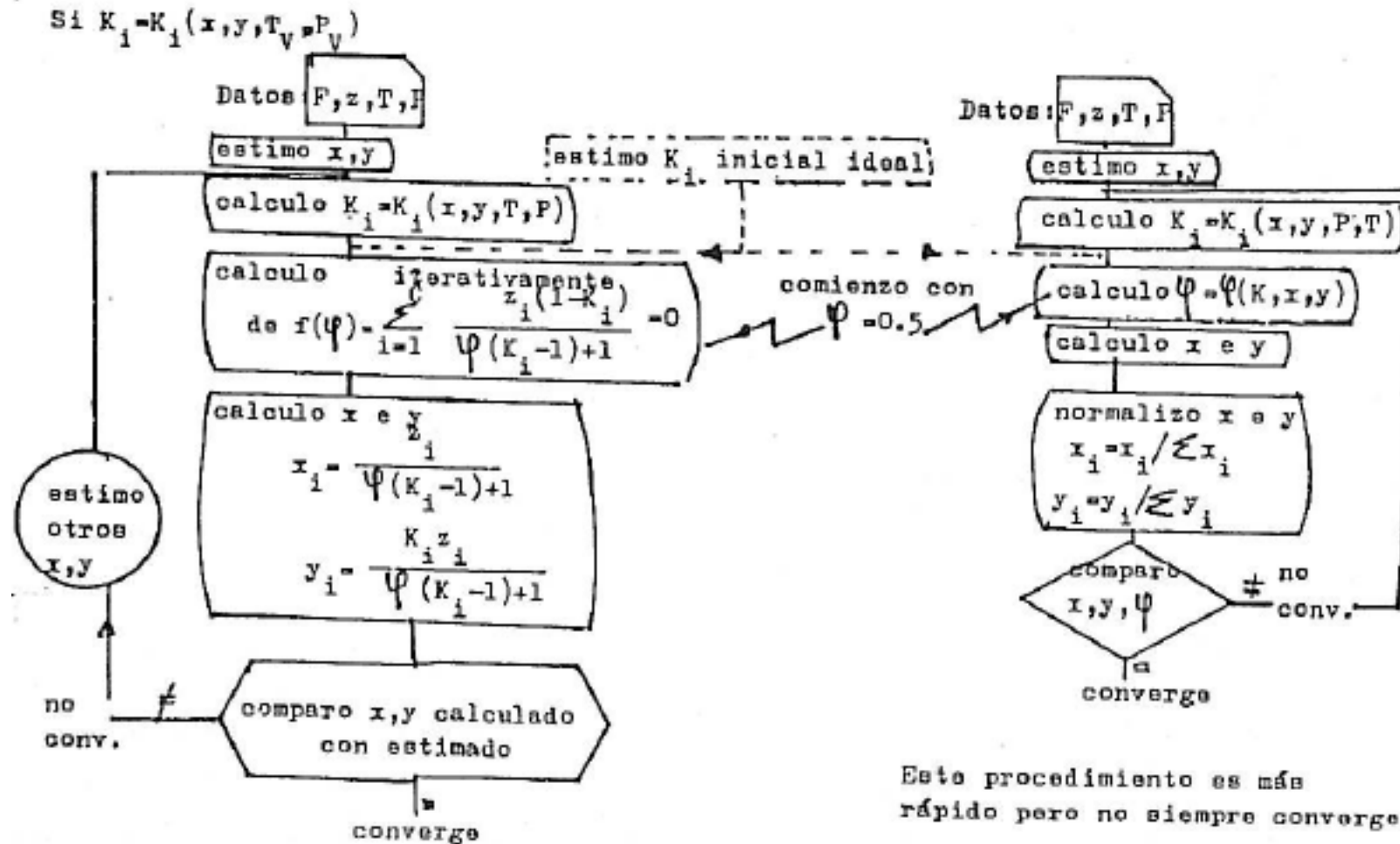
Los K_i de tablas de hidrocarburos o bien
 Raoult $y_i = p v_i x_i / P_T$
 $K_i = p v_i / P_T$
 La ec. (12) se resuelve iterativamente por Newton hasta que $\frac{\psi^{k+1} - \psi^k}{\psi^k} < 10^{-4}$

$$f'(\psi) = \frac{z_i(1-K_i)^2}{(1+\psi(K_i-1))^2}$$

$$\psi^{k+1} = \psi^k - \frac{f(\psi^k)}{f'(\psi^k)}$$

(1) Flash Isotérmico

Cuando K es $f(x, y, P, T)$:



(3) % Vaporización

Cálculo del punto de burbuja



$$x_i = z_i$$

$$y_i = K_i \cdot x_i$$

$$\sum y_i = \sum K_i \cdot z_i = 1$$

$$\text{Con Ec. (12): } f(0) = \sum_{i=1}^C \frac{z_i \cdot (1 - K_i)}{0 \cdot (K_i - 1) + 1} = 0$$

$$\sum z_i - \sum K_i \cdot z_i = 0 \Rightarrow \boxed{\sum K_i \cdot z_i = 1}$$

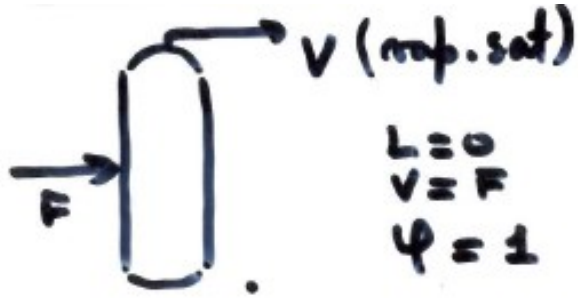
Si todos los $K_i < 1$, $f(0) > 0 \Rightarrow$ tenemos líquido subenfriado

Cuando se puede aplicar Raoult: $K_i = \frac{p_{vap_i}}{P_T}$

$$\therefore P_{burbuja} = \sum z_i \cdot P_{vap_i}$$

(3) % Vaporización

Cálculo del *punto de rocío*



$$y_i = z_i$$

$$x_i = y_i/k_i$$

$$\sum x_i = \sum \frac{z_i}{k_i} = 1$$

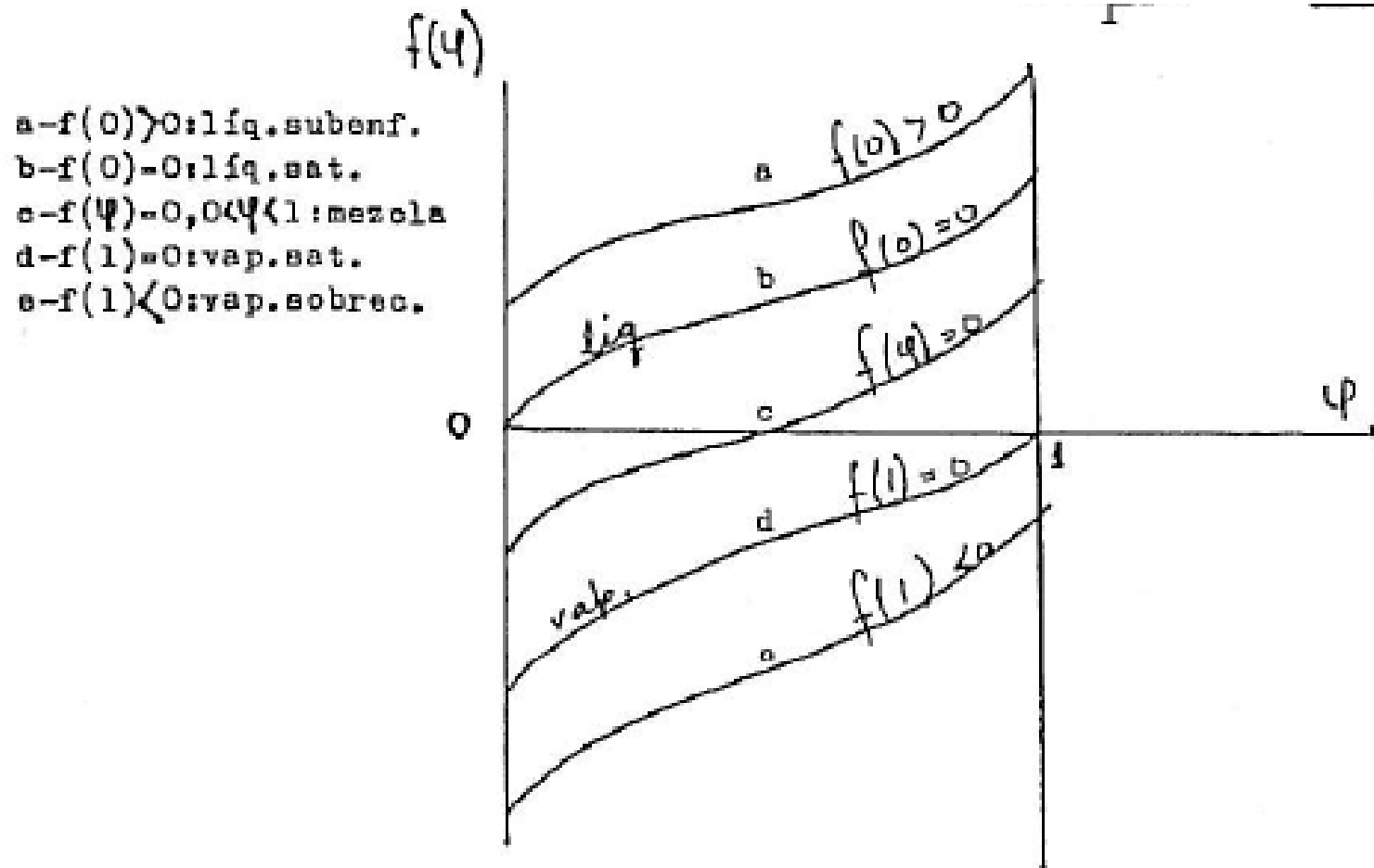
$$\text{Con Ec. (12): } f(1) = \sum_{i=1}^C \frac{z_i \cdot (1-k_i)}{1 \cdot (k_i-1)+1} = 0$$

$$\therefore \sum z_i/k_i - \sum z_i = 0 \Rightarrow \boxed{\sum z_i/k_i = 1}$$

Si todos los $k_i > 1$, $f(1) < 0 \Rightarrow$ tenemos vapor sobrecalentado

(3) % Vaporización

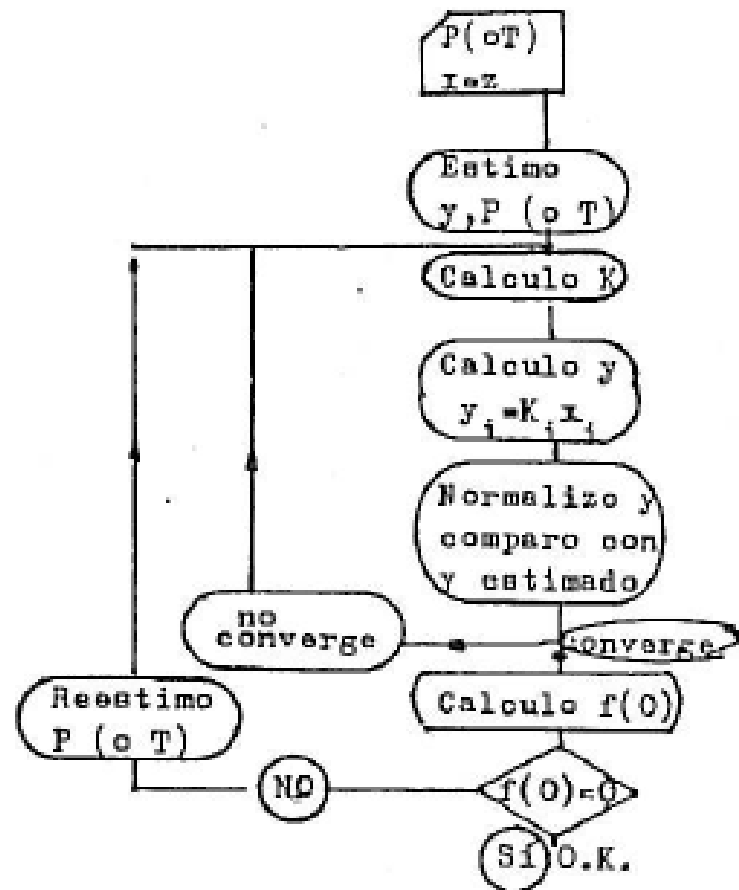
Definimos entonces la **condición térmica de la alimentación**



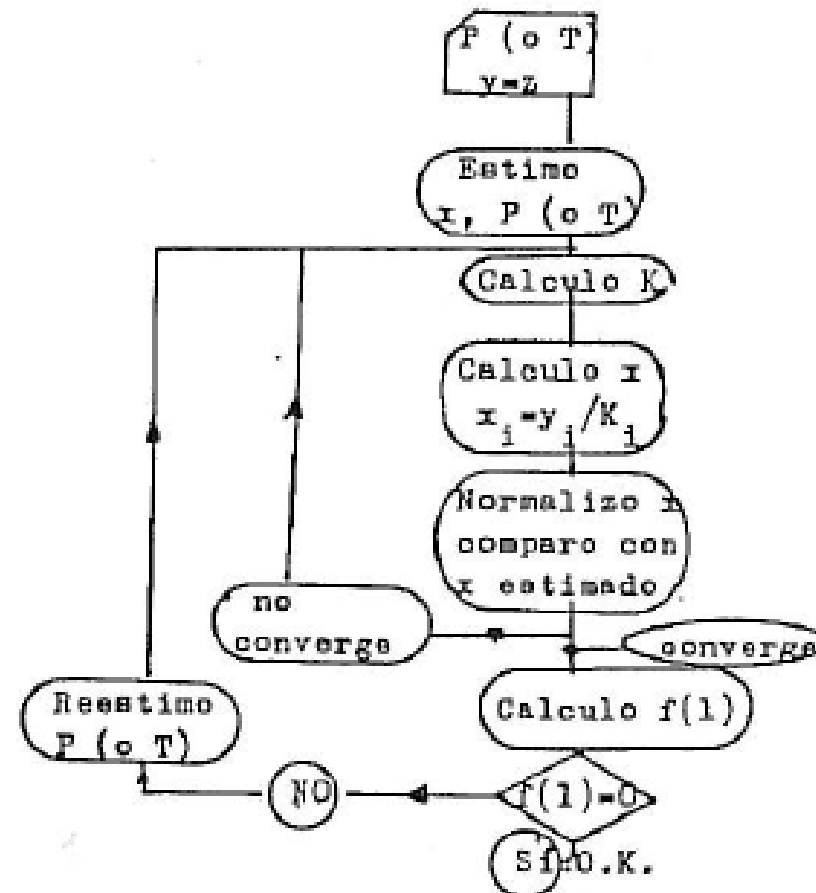
(3) Punto de Burbuja y Rocío

Procedimiento

Punto de burbuja



Punto de rocío



(2) Flash Adiabático

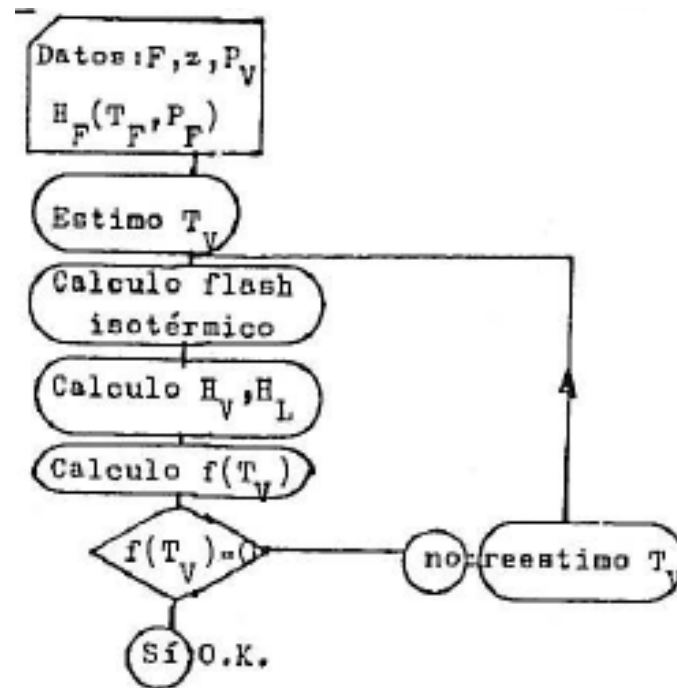
Para este caso, vamos a partir de la ecuación (6) que corresponde al balance entálpico

$$(6) F \cdot H_F + Q = V \cdot H_V + L \cdot H_L \text{ (con } Q = 0)$$

Lo expresamos en función de la condición térmica de la alimentación: $H_F = \varphi \cdot H_V + (1 - \varphi) \cdot H_L \Rightarrow \varphi \cdot H_V + (1 - \varphi) \cdot H_L - H_F = 0$

Este balance debemos evaluarlo a la temperatura del flash (que no conocemos). Partimos del Flash isotérmico: $f(T_V) = \frac{\varphi \cdot H_V + (1 - \varphi) \cdot H_L - H_F}{1000} = 0$

Procedimiento de Cálculo:



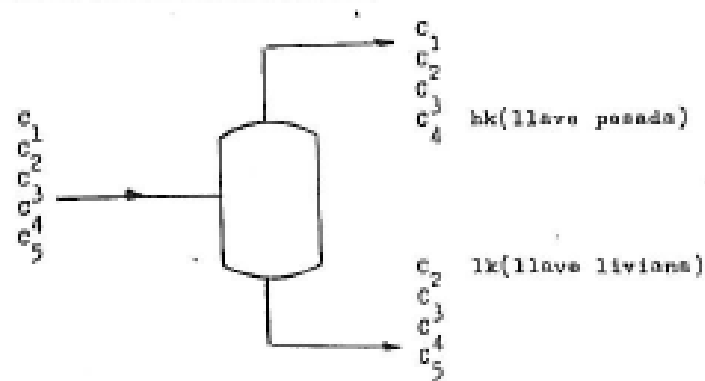
Si $f(\varphi)$ es muy sensible a T (rango de ebullición pequeño), se adopta φ como variable del loop externo:

Se calcula $f(T) = \frac{z_i(1-k_i)}{1+\varphi(k_i-1)} = 0$ y luego se verifica $f(\varphi)$ entálpico = 0

$$(\varphi) = \frac{H_F - H_L}{H_V - H_L}$$

(hasta que $\frac{T_V^{k+1} - T_V^k}{T_V^k} < 10^{-6}$)

Diseño del Equipo



Llave pesada es el componente más pesado con composición significativa en el destilado.

Llave liviana es el componente más liviano con composición significativa en el residuo.

Para el caso de una torre sencilla la cantidad de variables a fijar para obtener una solución única sigue siendo $C+6$

Sistema binario sin pérdidas de Q y con condensador total

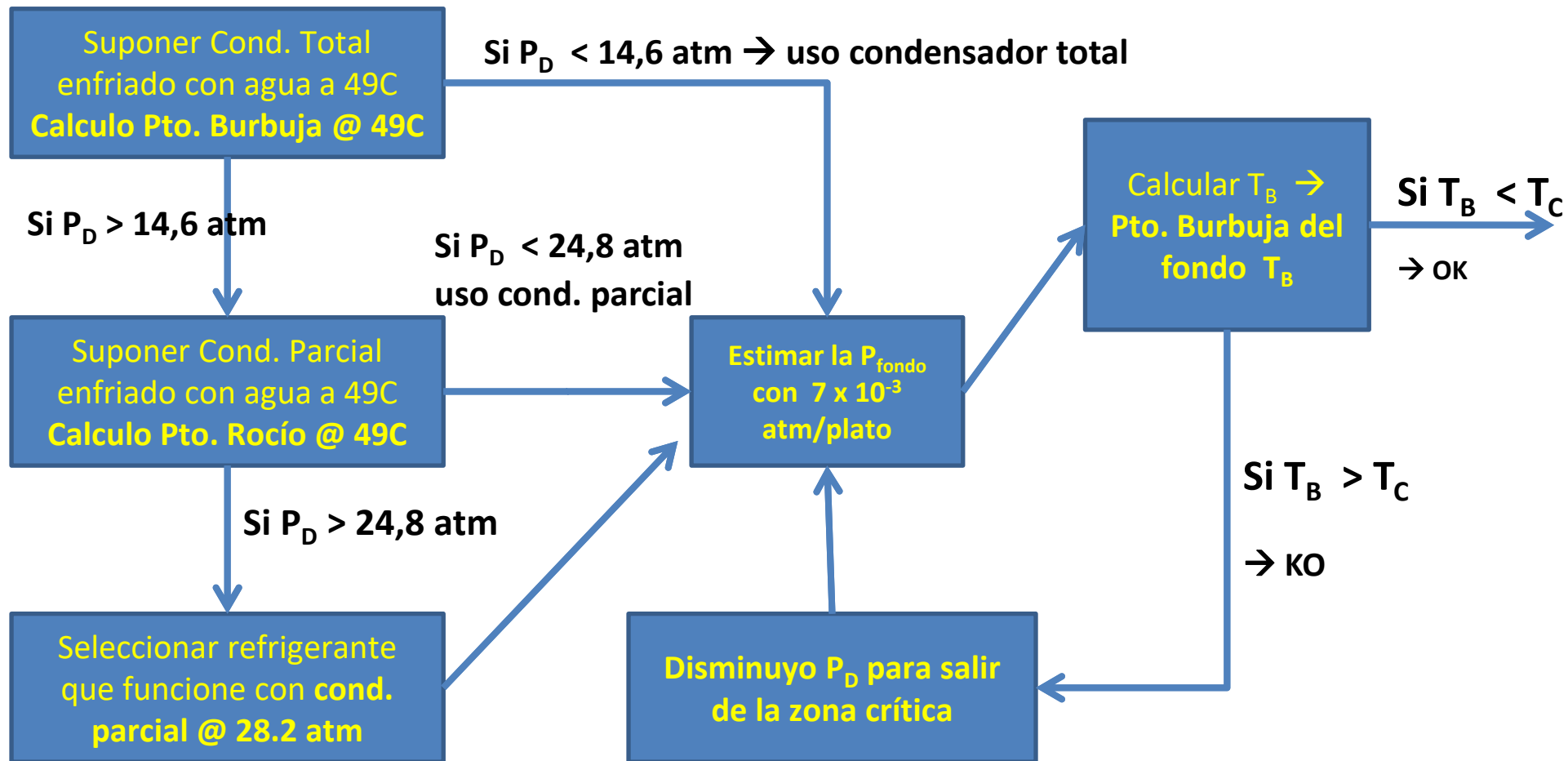
-) F
 -) q
 -) z_F
 -) $P_{\text{reab.}}$ (adoptado por quien diseña)
 -) $R=1.2R_{\text{min}}$ (adoptado por quien diseña)
 -) $t_F=t\phi$ (condición de diseño óptimo)
 -) x_D (especificaciones, pueden ser otras dos composiciones, "no llaves")
 -) x_V
- Total: $C+6$

Sistema multicomponente sin pérdida de Q y con condensador total

- 1) F
 - 2) F_F y T_F (resolviendo el flash: q)
 - 3) $z_{F,j}$ ($C-1$)
 - 4) P_{trabajo} (depende de la del H_2O de enfriam.)
 - 5) $R=1.2R_{\text{min}}$
 - 6) $t_F=t\phi$
 - 7) $x_{lk,D}$
 - 8) $x_{hk,D}$
- Total: $C+6$

Presión del Condensador

Cálculo de la Presión del Condensador → Presión de la Torre



Presión de la Torre

Una vez definida la Presión de la Torre, podemos calcular el Flasheo de F a dicha presión:

Calculo con P_D o con un promedio de la presión de tope y fondo si fueran muy diferentes, el flash adiabático

Punto de burbuja a P_D \therefore $\psi = \frac{V}{F}$ se obtiene q con T_F , P_F y P_D
Punto de rocío a P_D

Volatilidad Relativa:

- Alpha (relative volatility) is a measure of the intrinsic difficulty in using fractionation to separate two components
- It is the ratio of the vapor liquid equilibrium K values for two components

LK = Light Key Component

HK = Heavy Key Component

$$\alpha = \left(\frac{K_{LK}}{K_{HK}} \right)$$

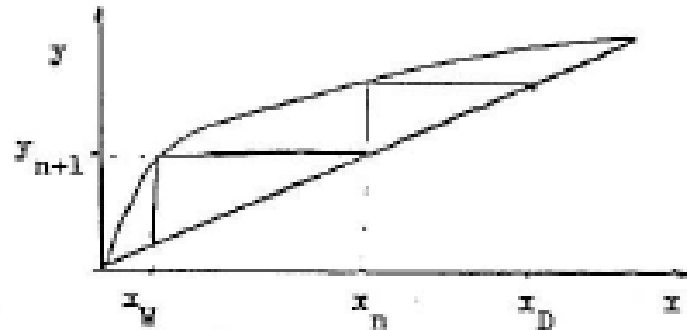
en general

$$\alpha_{i,D} = \frac{K_{i,D}}{K_{HK,D}}$$

Cálculo de N_{\min} (Reflujo Total)

Método de Fenske

En un sistema binario:



En reflujo total $y_{n+1} = x_n$

En multicomponentes:

$$y_{i,n} = x_{i,n-1}$$

$$\alpha_i = \frac{K_i}{K_{hk}}$$

$$\alpha_{i,n} = \frac{y_{i,n} / y_{hk,n}}{x_{i,n} / x_{hk,n}}$$

en el fondo de la torre:

$$\alpha_{i,W} = \frac{y_{i,W} / y_{hk,W}}{x_{i,W} / x_{hk,W}}$$

$$y_{i,W} = x_{i,Np}$$

$$\alpha_{i,Np} = \frac{y_{i,Np} / y_{hk,Np}}{x_{i,Np} / x_{hk,Np}}$$

$$\frac{y_{i,Np}}{y_{hk,Np}} = \alpha_{i,Np} \alpha_{i,W} \frac{x_{i,W}}{x_{hk,W}}$$

Cálculo de N_{\min} (Reflujo Total)

Método de Fenske

En multicomponentes (continuación):

en el plato 1 :

$$\frac{y_{i,1}}{y_{hk,1}} = \underbrace{\alpha_{i,1} \alpha_{i,2} \dots \alpha_{i,Np} \alpha_{i,W}}_{\alpha_{i,pr}^{N_{\min}+1}} \frac{x_{i,W}}{x_{hk,W}} = \frac{x_{i,D}}{x_{hk,D}} \quad \text{ec.1}$$

$$\alpha_{i,pr} = \sqrt{\alpha_{i,1} \alpha_{i,W}}$$

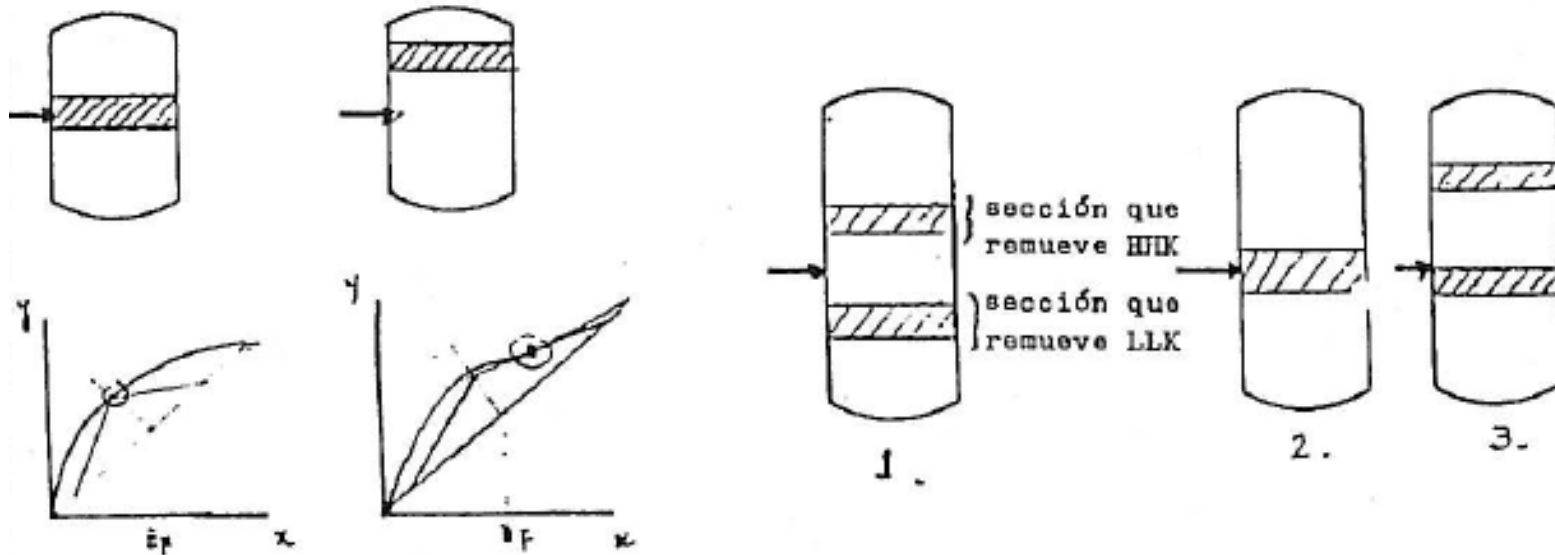
$$N_{pmin} + 1 = \frac{\log \frac{x_{lk,D}}{x_{hk,D}} \frac{x_{hk,W}}{x_{lk,W}}}{\log \alpha_{lk,pr}}$$

El método se desarrolla con las siguientes hipótesis simplificativas:
L/G=cte. y α =cte.

1. Evaluate α_{av} at $T_{av} = (T_{top} + T_{bot})/2$
2. $\alpha_{av} = (\alpha_{top} + \alpha_{bot})/2$
3. $\alpha_{av} = \alpha$ at feed tray temperature
4. $\alpha_{av} = \sqrt{\alpha_{top} \alpha_{bot}}$
5. $\alpha_{av} = \sqrt[3]{\alpha_{top} \alpha_{mid} \alpha_{bot}}$

Cálculo de R_{\min} ($N_p = \infty$)

Método de Underwood



Para R_{\min} hay una zona en donde x e y permanecen constantes; se llama "pinch" o adelgazamiento.

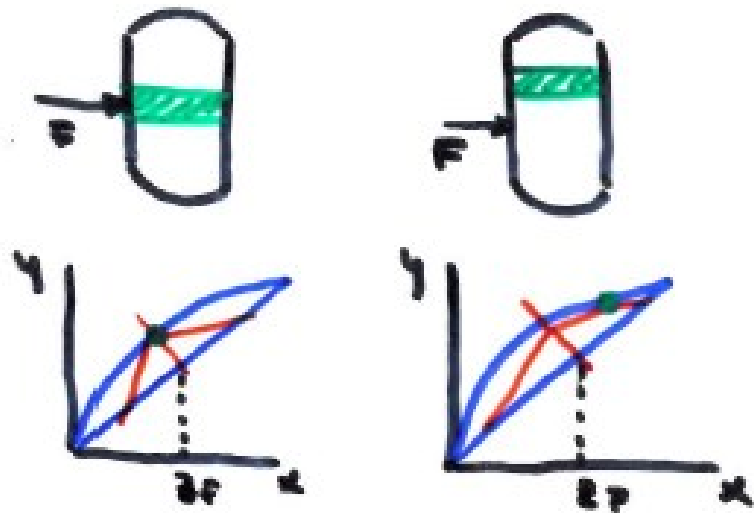
Pueden darse varios casos:

- 1-El más común, en ella existen LLK y HHK que no distribuyen.
- 2-En ella todos los componentes distribuyen.
- 3-En ella no existen LLK que no distribuyan pero sí HHK que no distribuyen

Cálculo de R_{\min} ($N_p = \infty$)

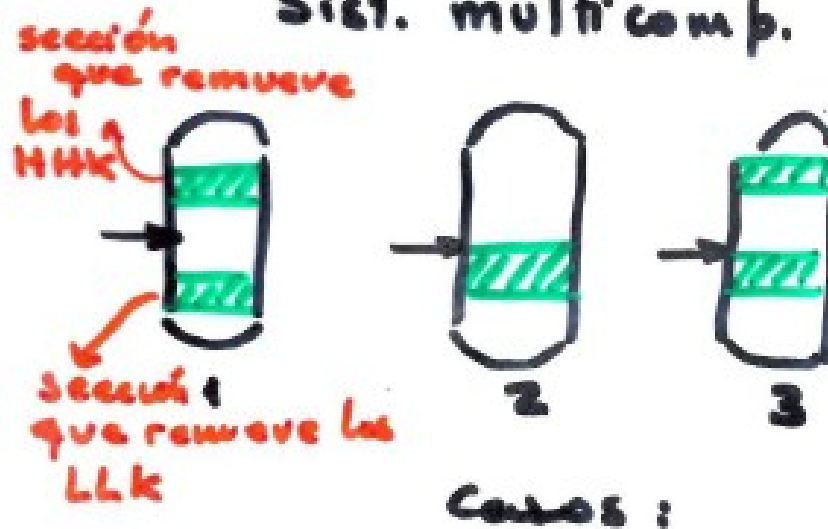
Método de Underwood

Sistema binario



Para R_{\min} hay una zona en donde x e y permanecen constantes: "pinch" o adelgazamiento

Sist. multicomponente

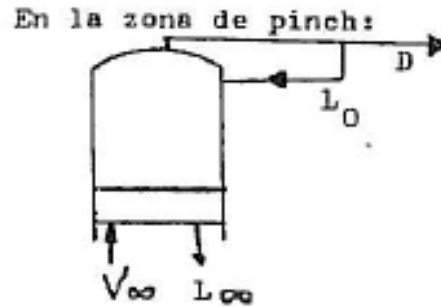


Casos:

1. + común 2 pinch
2. todos los c distribuyen
3. Solo HHK en pinch.

Cálculo de R_{\min} ($N_p = \infty$)

Método de Underwood



Zona de enriquecimiento
con $R_{\min} = L_{\infty} / D$

$$y_{i,\infty} = K_{i,\infty} x_{i,\infty}$$

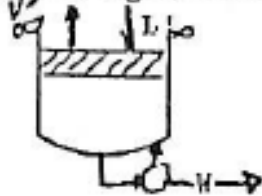
$$V_{\infty} = L_{\infty} + D$$

$$y_{i,\infty} V_{\infty} = x_{i,\infty} L_{\infty} + x_{i,D} D$$

Se resuelve $\forall i$ entre 1 y HK

$$\sum_{i=1}^{HK} \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \beta} = D (R_{\min} + 1) \quad \text{ec.A}$$

Zona de agotamiento:



con $R'_{\min} = L' / W$

$$\sum_{i=LK}^C \frac{\alpha_i x_{i,W}}{\alpha_i - \beta_i} = W (1 - R'_{\min})$$

En toda la torre con $qF = L'_{\infty} - L_{\infty}$

Hipótesis de Underwood:

1-caudales molares constantes en cada zona. 2- α constante.

$$\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,F}}{\alpha_i - \beta} = F (1 - q)$$

ec.B

Cálculo de R_{\min} ($N_P = \infty$)

Método de Underwood

Se resuelve la ec B para encontrar los ϕ reales y positivos (uno más que los comp. entre llaves)



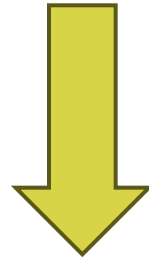
Se plantea ec A para cada $\phi \Rightarrow D_{xi,j}$ y R_{\min}
En el ejemplo quedarán 3 ec. con 3 incógnitas:
 R_{\min} ; $D_{x_{3D}}$; $D_{x_{4D}}$. Con resultados T_{Tops} y $T_B \rightarrow$ reales.

Verificación de componentes clave

Método de Shiras

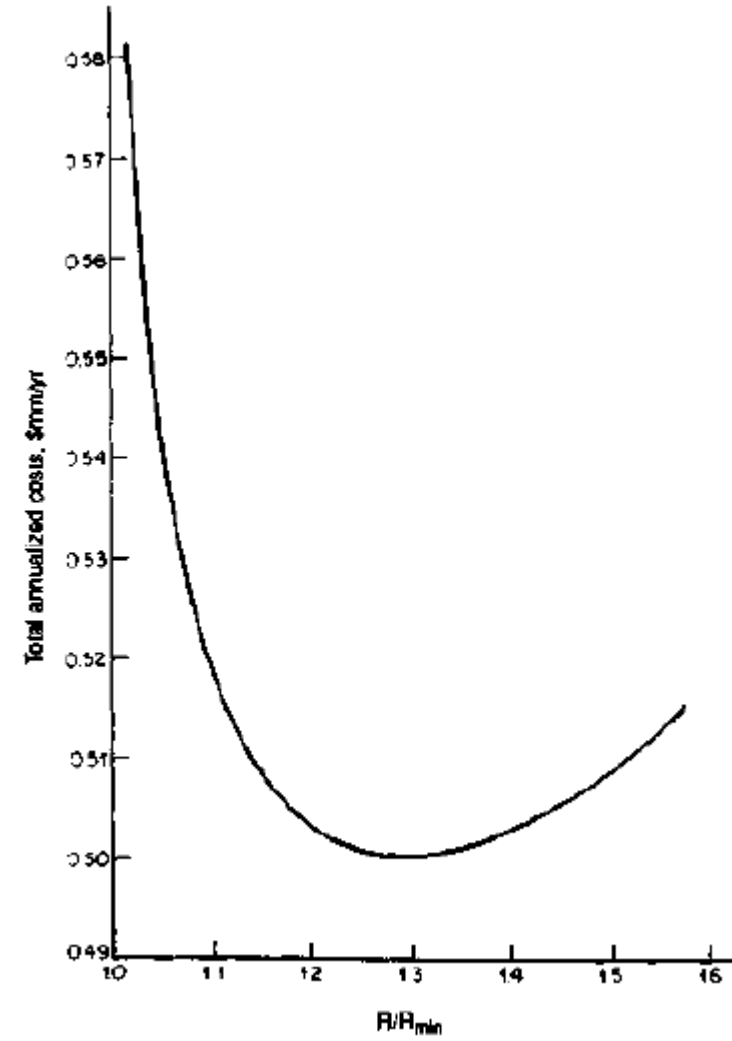
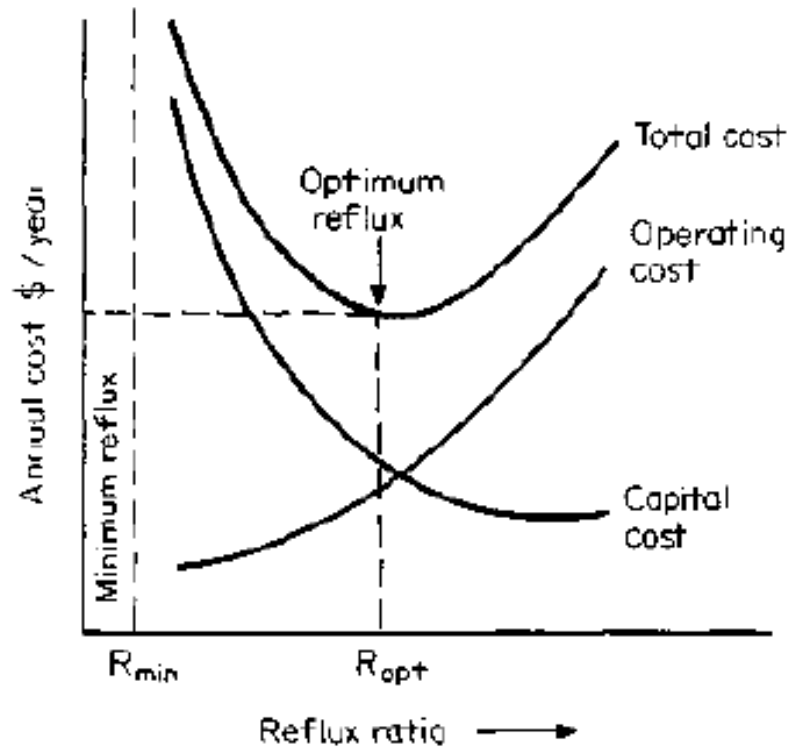
Para John Shiras propuso una ecuación para decidir cuales serán los componentes claves.

$$\frac{x_{i,D} \cdot D}{z_{i,F} \cdot F} = \frac{\alpha_i - 1}{\alpha_{1k} - 1} \frac{x_{1k,D} \cdot D}{z_{1k,F} \cdot F} + \frac{\alpha_{1k} - \alpha_i}{\alpha_{1k} - 1} \frac{x_{hk,D} \cdot D}{z_{hk,F} \cdot F}$$

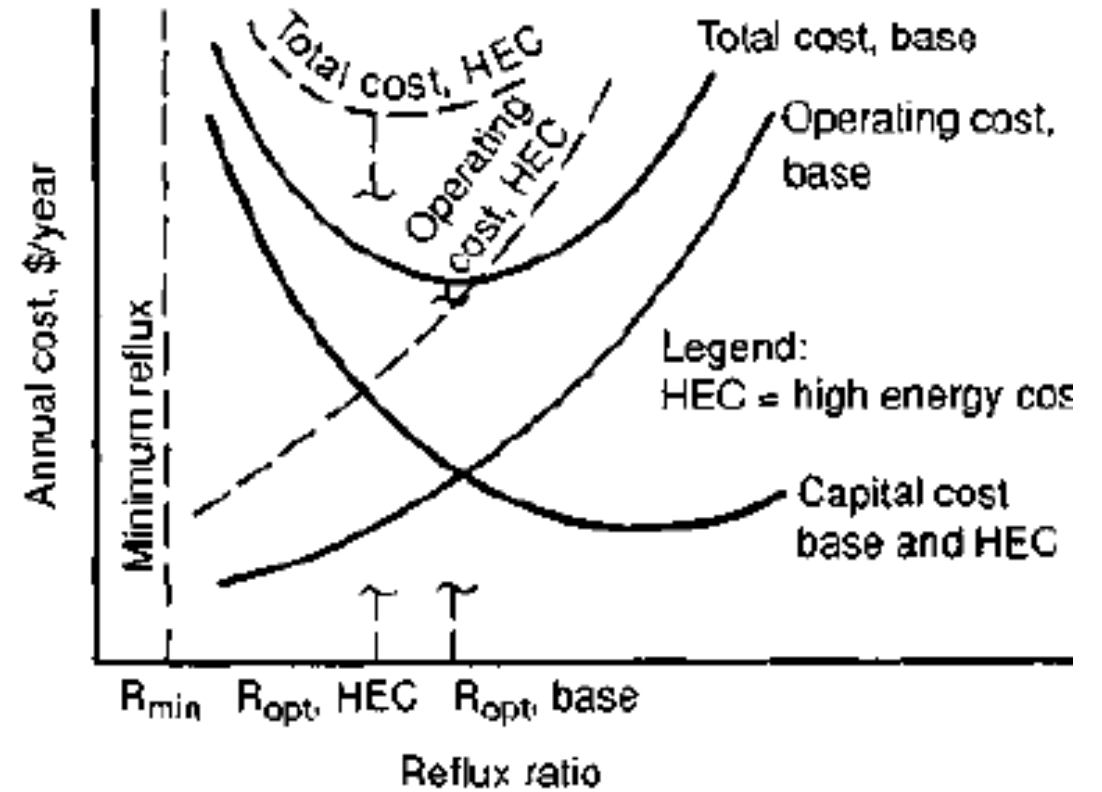
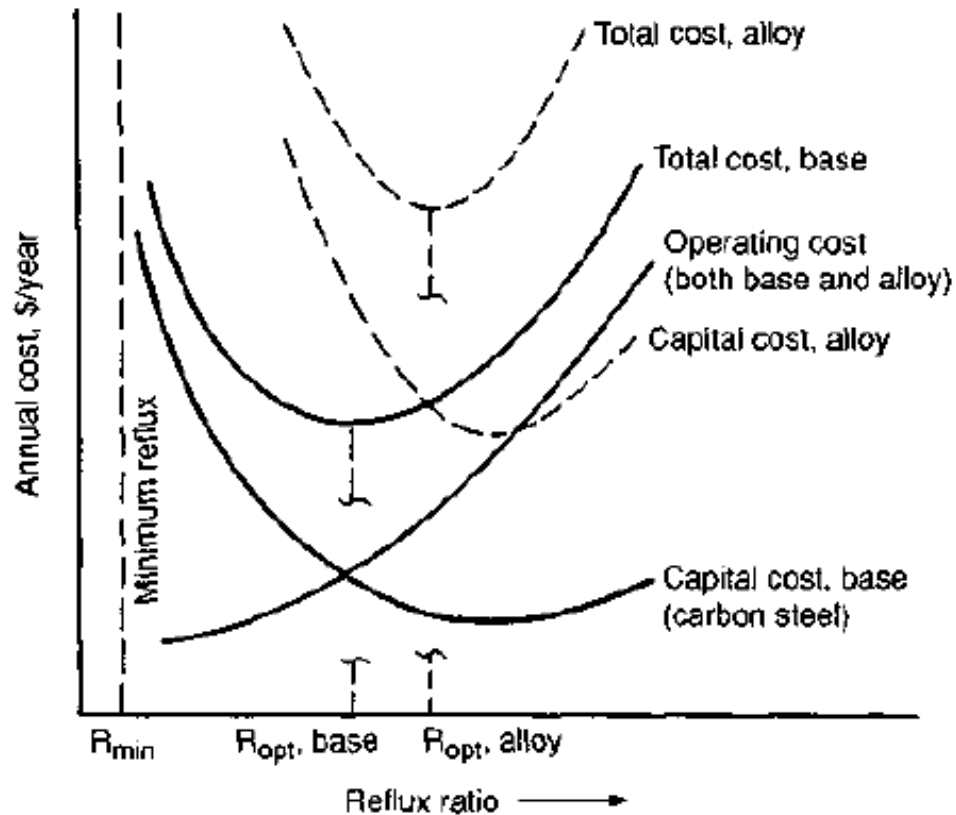


Si $0,01 < d_i / f_i < 0,99 \rightarrow$ El componente DISTRIBUYE

Análisis de Rop óptimo

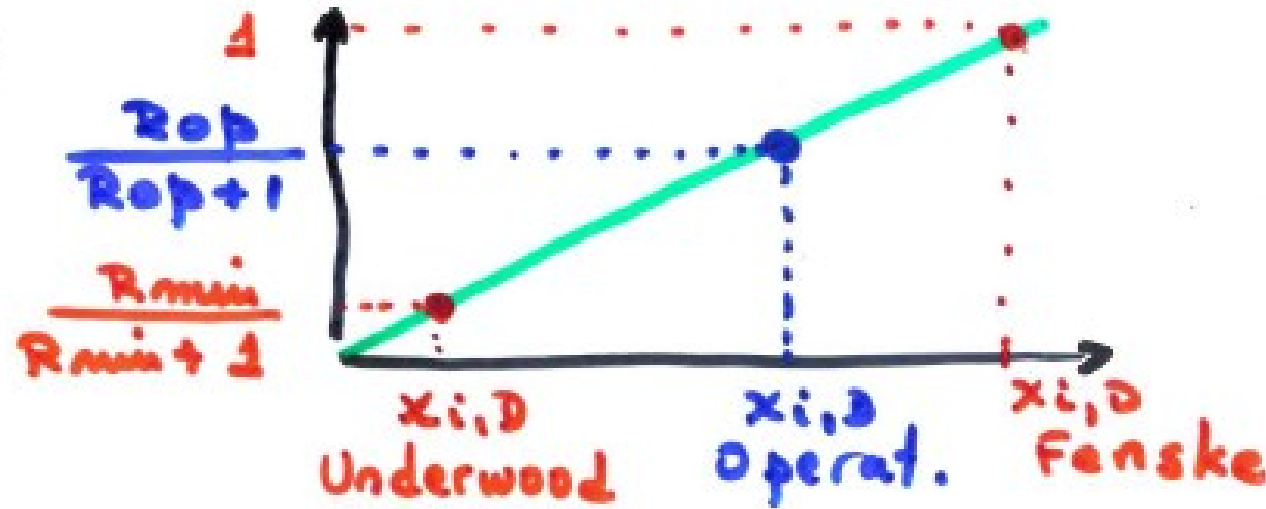


Análisis de Rop óptimo



Distribución de Componentes a Rop

$$Rop \approx 1.5 R_{min}$$



Una vez definido el $R_{op} \rightarrow$ mediante interpolación lineal se determinan las distribuciones de los componentes ENTRE claves

Cálculo de Np a Rop

Existen correlaciones gráficas que permiten obtener el Número de Platos a partir del Roperativo

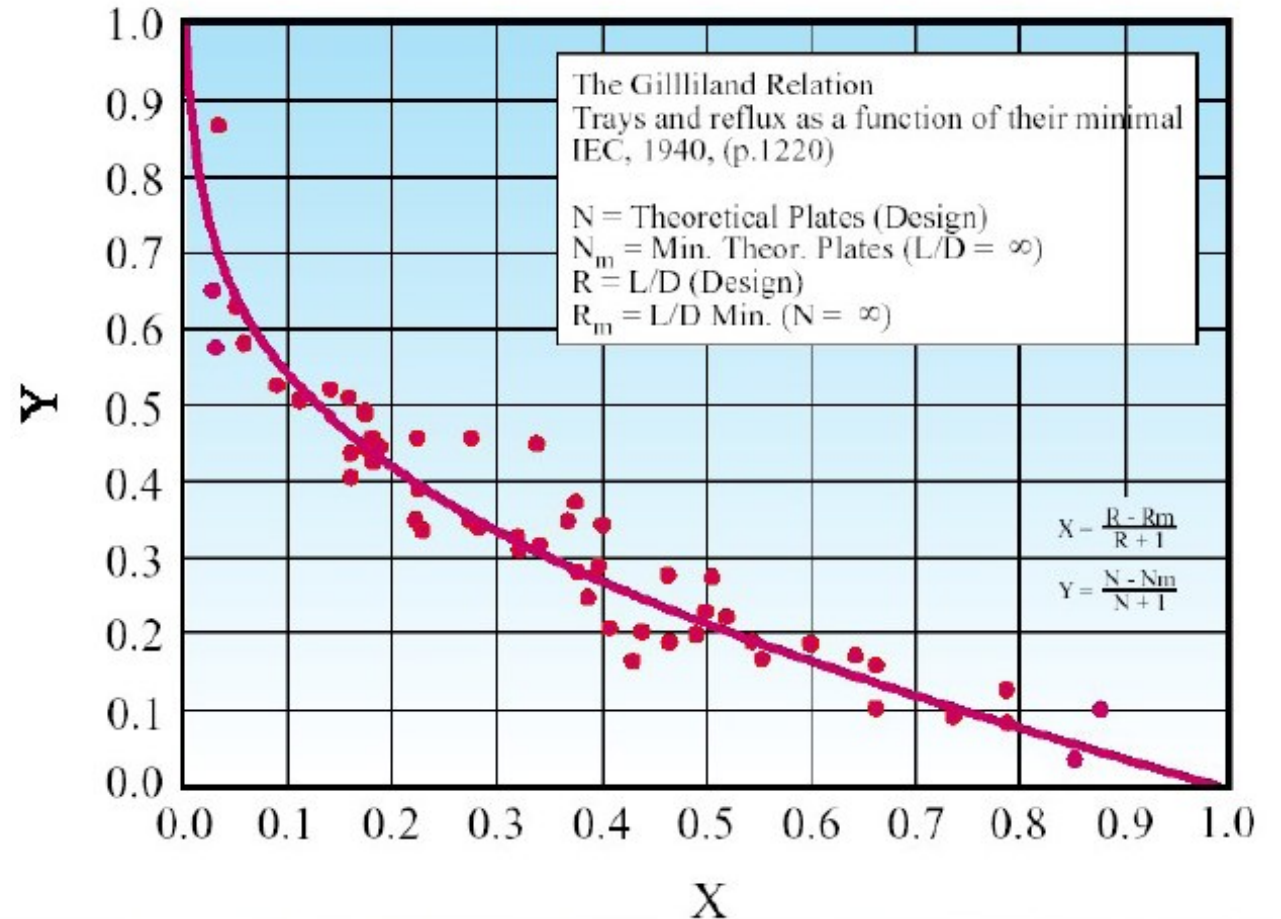
Correlación de Gilliland:

Eduljee: $Y = 0.75 (1 - X^{0.5668})$

Molokanov: $Y = 1 - \exp \left(\left(\frac{1 + 54.4 X}{11 + 117.2 X} \right) \left(\frac{X - 1}{X^{0.5}} \right) \right)$

donde $Y = \frac{N - N_{min}}{N + 1}$

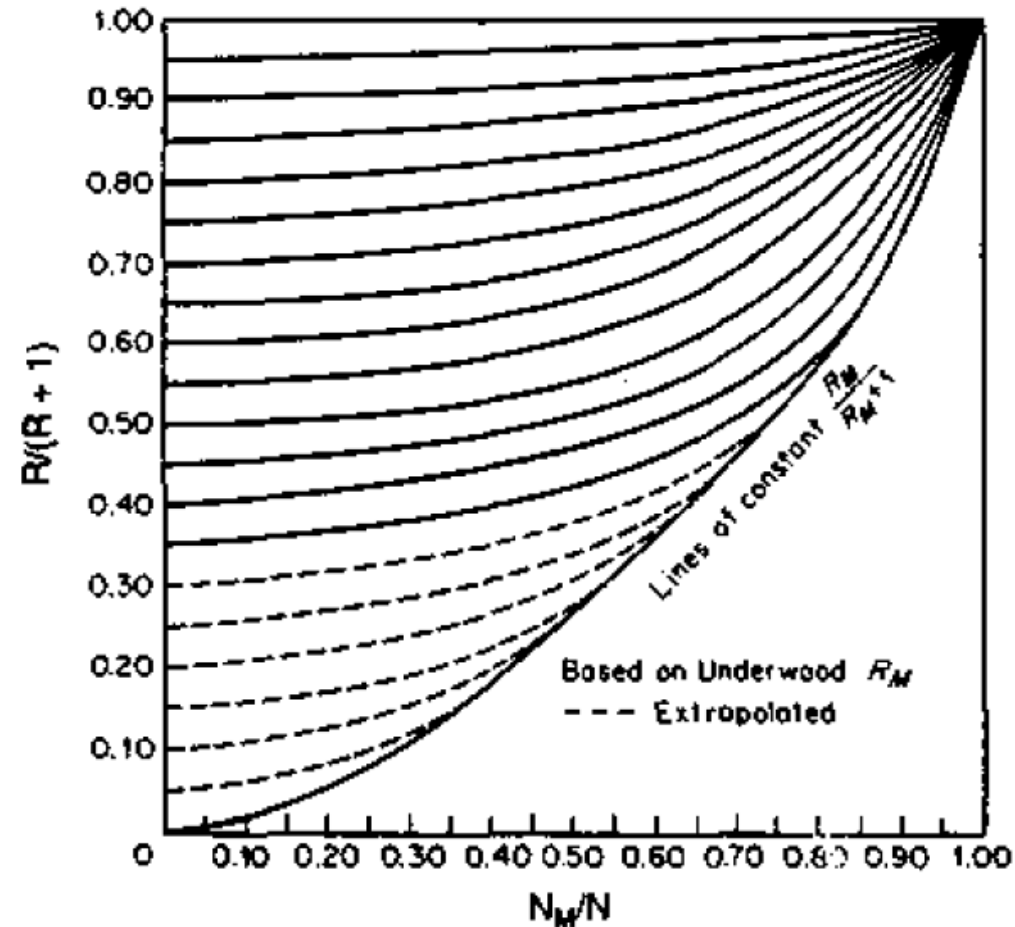
$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1}$$



Cálculo de N_p a R_{op}

Existen correlaciones gráficas que permiten obtener el Número de Platos a partir del Roperativo

Correlación de Erbar-Maddox



Plato de alimentación

Ecuación de Kirkbride:

$$\frac{Nr}{Ns} = \left\{ \frac{z_{hk,F}}{z_{lk,F}} * \left(\frac{x_{lk,W}}{x_{hk,D}} \right)^2 * \frac{W}{D} \right\}^{0,206}$$

N_F se ubicará donde se corten las curvas de enriquecimiento y agotamiento

Getting Started

- **Look at what you are trying to accomplish**
- **Product quality or purity, stabilize products, split across a mixture for later processing**
- **Plan a little with pencil and paper if needed – map rates and profiles (material balance)**
- **Get to know the system and what we are separating – what components go where**
- **Get to know the feed, get a feel for the equilibrium**
- **Start simple and then move to more difficult product conditions**
- **There may be a composition or recovery goal but let float what the operator might turn to meet the goal such as duty or reflux**

Estimates

- **Some systems require better estimates than common hydrocarbon mixtures**
- **Presence of water – especially if the K-value method allows greater mixing of water to the hydrocarbon other than minor solubility**
- **Non-ideal systems such as Alcohol/Hydrocarbon**
- **The more complex the column – exchangers, side equipment, side products, more than one feed – the more the estimates required**
- **The wider the boiling mixture, the greater the need for estimates – temperatures and heat effects in the column mean shifts in flows**
- **Narrow split between key components but with the presence of light components and non-condensables**



¿PREGUNTAS?