

**CAPÍTULO 5.**  
**CONCLUSIONES**

Este trabajo ha tenido como objetivos el análisis y modelado del proceso de purificación de estireno mediante adsorción en alúmina y el análisis del cambio de escala del sistema, dado que se trata de un proceso actualmente operativo a escala industrial en una empresa productora de caucho sintético, pero que opera controlado de un modo empírico. Cualquier deseo de optimización del proceso o de estudios de comparación con procesos alternativos se facilita sustancialmente si se dispone del modelo matemático y los parámetros que describen el sistema.

El estireno y la alúmina empleados en este trabajo han sido suministrados por Dynasol Elastómeros, siendo los mismos que dicha empresa emplea en su proceso industrial. El estireno está fabricado por Repsol Química y contiene alrededor de 150 mg/kg de agua y 15 mg/kg de TBC y la alúmina es de la marca Compalox AN/V-825.

Las principales conclusiones obtenidas en este trabajo han sido las siguientes:

### **1. Estudio de los equilibrios de adsorción**

En una primera etapa se han realizado experimentalmente los equilibrios de adsorción poniendo en contacto distintas cantidades de estireno y alúmina y dejando el tiempo suficiente para que se alcance el equilibrio. Así se determinó que la relación entre la cantidad de soluto en el líquido y la adsorbida en el sólido, en el rango de concentraciones de trabajo, eran proporcionales y se podían relacionar según las siguientes expresiones:

- Equilibrio agua-alúmina:

$$q \text{ (kg/kg)} = 2,659 \times 10^{-4} C \text{ (mg/kg)} \quad (r^2 = 0,98)$$

- Equilibrio TBC-alúmina:

$$q \text{ (kg/kg)} = 6,424 \times 10^{-4} C \text{ (mg/kg)} \quad (r^2 = 0,98)$$

## 2. Modelado matemático

A partir de un diseño experimental en las instalaciones de laboratorio, se han llevado a cabo distintos experimentos variando la velocidad del fluido, cuyos resultados han sido empleados para estimar parámetros del modelo.

El modelo matemático que ha conseguido describir el sistema objeto del presente estudio, ha sido un modelo ampliamente utilizado en la bibliografía y comúnmente denominado *Modelo de porosidad única*. En este modelo se ha considerado una resistencia global a la transferencia de materia expresada como combinación de resistencias individuales en la película líquida y en los poros. Los parámetros asociados al modelo que también han sido determinados en este trabajo han sido los siguientes:

- Difusividad molecular:
  - Para el agua en estireno se ha obtenido mediante la ecuación de Olander un valor de:

$$D_{H_2O} = 1,84 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$$

- Para el TBC, mediante la ecuación de Wilke-Chang:

$$D_{TBC} = 1,02 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$$

- Coefficiente de dispersión axial: se ha obtenido a partir de correlaciones experimentales recogidas en la bibliografía por Levenspiel (1999).
- Coefficiente de transferencia de materia en la fase líquida: en la bibliografía existen diversas correlaciones para obtener el valor del número de Sherwood en función de los números de Reynolds y Schmidt. Teniendo en cuenta las condiciones experimentales los mejores ajustes se han obtenido con la correlación de Wilson-Geankoplis (1966):

$$Sh = \frac{1,09}{\epsilon_e} Re^{1/3} Sc^{1/3}$$

- 
- Difusividad en los poros: este valor se ha obtenido para el caso de cada compuesto estimándolo con la herramienta gEST que permite estimar parámetros de un modelo a partir de unos datos experimentales, para lo que se han empleado las curvas de ruptura obtenidas en los ensayos a escala de laboratorio. Los valores obtenidos han sido los siguientes:

- Para el agua, con una desviación de 7,05 mg/kg:

$$D_p = 6,101 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$$

- Para el TBC, con una desviación de 0,77 mg/kg:

$$D_p = 3,961 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$$

Estos valores han resultado ser del mismo orden que valores encontrados en la bibliografía para sistemas semejantes.

### **3. Análisis del cambio de escala**

En este apartado del trabajo, la primera etapa ha consistido en la validación del modelo matemático. Para ello se han llevado a cabo el diseño y la construcción de una planta piloto de adsorción en la propia fábrica que produce caucho sintético. En ella, se han realizado distintos experimentos que han sido comparados con las predicciones realizadas por el modelo matemático obtenidas mediante el simulador de procesos gPROMS, deduciéndose que el modelo es capaz de predecir los resultados a esta nueva escala, consiguiéndose así la validación del modelo y los parámetros cinéticos.

### **4. Simulación del proceso operativo a escala industrial**

Finalmente, una vez obtenido y validado el modelo matemático y los parámetros que describen el proceso de purificación de estireno mediante adsorción en alúmina, ha sido posible realizar la simulación del proceso operativo a escala industrial.

En este último apartado existían algunos datos de la planta industrial para el caso de la adsorción de agua que han podido ser comparados con la simulación realizada a partir del modelo observándose que los datos de planta coinciden satisfactoriamente con los de la simulación.

Respecto a la adsorción del TBC no existe ningún dato experimental de la planta industrial. Comparando las simulaciones de los procesos de adsorción para ambos compuestos sobre la alúmina se puede observar que el compuesto que primero aparece a la salida de la columna es el agua, luego controlando la cantidad de agua a la salida de las columnas se puede garantizar que el estireno sale también sin TBC. En cualquier caso, disponer del modelo y los parámetros para ambos sistemas facilita la optimización del proceso o la evaluación de su rendimiento frente a posibles alternativas tecnológicas.