

**Título de la Tesis: “Modelado y diseño óptimo del sector de membranas de pervaporación en procesos híbridos con destilación.”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Daviou, María Carolina**

**Director: Dra. Ana María Eliceche**

## **Resumen**

En esta Tesis se presenta el modelado riguroso de procesos de pervaporación a partir del ajuste de parámetros con datos experimentales, para implementar la simulación y el diseño de los módulos de membrana, que luego son aplicados en la optimización de un proceso híbrido con destilación.

El modelo que describe la transferencia de masa a través de la membrana requiere la determinación de distintos parámetros que son específicos del sistema a separar, a la vez que la selección de la membrana más apropiada para alcanzar un dado trabajo de separación es una etapa fundamental en el estudio del proceso de pervaporación. Por lo tanto, en primer lugar se llevan a cabo tareas experimentales con distintas membranas comerciales y no comerciales con el objetivo de ajustar tales parámetros a partir de los datos experimentales obtenidos.

Debido a que el desarrollo de las tecnologías de membrana es muy reciente, no se encuentran modelos de equipos disponibles en los simuladores comerciales que representen en forma rigurosa los procesos de membrana. Por lo tanto, una vez ajustado el modelo, se ha incorporado un módulo de pervaporación como una unidad de usuario en un simulador comercial.

La utilización de procesos integrados de destilación/pervaporación permite simplificar la estructura de los procesos de separación convencionales, a la vez que ofrece alternativas atractivas desde el punto de vista económico y ambiental. La implementación de la unidad de usuario en un simulador comercial ha permitido estudiar el proceso híbrido con rutinas de simulación de columnas de destilación disponibles en el mismo. Se contemplan distintas estrategias de intercambio calórico entre módulos de membrana y un novedoso procedimiento para realizar el cálculo automático del área efectiva requerida para separar una mezcla dada, mediante la resolución de un sistema diferencial algebraico. Finalmente, se ha realizado la simulación y optimización del proceso híbrido aplicando las estrategias de diseño desarrolladas.

Como se demuestra en esta Tesis, la implementación de los procesos híbridos reduce los costos totales con respecto al proceso convencional de separación, a la vez que se obtiene una mayor pureza de los productos a separar.

**Título de la Tesis: “Modelado y diseño óptimo del sector de membranas de pervaporación en procesos híbridos con destilación.”**

**Doctorado en Ingeniería Química**

**Autor: Daviou, María Carolina**

**Director: Dra. Ana María Eliceche**

### **Abstract**

In this Thesis, the rigorous modeling of pervaporation processes is presented, in order to be able to implement the simulation and design of membrane modules to be applied to the optimization of a hybrid process with distillation.

The model describing the mass transfer through the membrane requires the determination of different parameters, specific to the system to be treated. Besides, the selection of the most appropriate membrane for a given separation task is a key stage for the study of the pervaporation process. Thus, experimental work is carried out using commercial and non-commercial membranes, for adjusting the parameters from the experimental data.

As the development of membrane technologies is quite recent, there are no models of membrane processes available in any simulation software. Then, once the parameters are obtained, a user-defined rigorous model for the simulation of pervaporation processes is embedded into a commercial simulation package.

Combined distillation/pervaporation processes allow simplifying the structure of conventional processes, and also offer attractive alternatives from the economic and environmental point of view. Implementing the user model in the commercial simulator has been useful for studying the hybrid process using the available models for distillation columns. Different strategies for heat exchanging between the modules are considered. Also, a novel procedure to find the required membrane area for a given separation task is presented, solving a differential-algebraic model. Finally, the whole process is simulated and optimized using the developed strategies.

As shown in this Thesis, the implementation of hybrid processes reduces the total cost when compared to conventional separation processes, giving a higher purity of the products.