

MODELO DE SIMULACIÓN DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN BINARIA BASADO EN METODOS NUMERICOS

Luis Caiza*, Marcelo Francisco Sandoval Z*, Olga L. Quintero Montoya*.

** Departamento de Ingeniería Electrónica en Control
Colegio Politécnico de la Universidad San Francisco de Quito
Cumbayá, Quito-Ecuador*

Email: l_2002_c@hotmail.com, cym152_54@hotmail.com, lquintero@usfq.edu.ec

Resumen: En este trabajo se presenta un modelo de simulación de una Columna de Destilación Binaria Ideal. Se realiza un análisis mediante el balance de materia y energía. La columna se considera constituida por diez platos, un rehervidor y un tanque de reflujo. Las ecuaciones diferenciales del sistema se resuelven por dos métodos numéricos: Euler y Runge Kutta. Las simulaciones resultantes del sistema para cada método numérico utilizado se comparan en base al tiempo de muestreo. Los resultados de las simulaciones muestran la evolución temporal de las concentraciones de los componentes que existen.

Palabras claves: destilación binaria, métodos numéricos, Euler , Runge Kutta, balance de materia y energía, concentración de sustancias, flujos de entrada y salida, plato, rehervidor, base.

1. INTRODUCCION

La destilación es probablemente el proceso más popular e importante estudiado en la literatura de ingeniería química desde mucho tiempo atrás con el afán de separar una sustancia de otras. La destilación ha sido, y muy probablemente continúe siendo, durante bastantes años más la técnica de separación más ampliamente utilizada, (aproximadamente el 90% de todas las operaciones de recuperación y purificación son destilaciones) lo que justifica que la destilación sea una de las operaciones unitarias más estudiadas en toda la historia de la industria química. Un dato que pone de manifiesto la importancia de la destilación es que sólo en Estados Unidos existen más de 40000 columnas de destilación (Humphrey, 1995).

El estudio sobre la destilación es de gran importancia ya que sus aplicaciones son muy diversas. El oxígeno puro que se utiliza en la fabricación de acero, en las naves espaciales y en aplicaciones medicinales, se produce mediante la destilación del aire previamente licuado. Las fracciones del petróleo (tales como gases ligeros, nafta, gasolina, kerosén, combustóleo, aceites lubricantes y asfalto) se obtienen en grandes columnas de destilación a las que se alimenta el crudo. Estas fracciones se procesan después para obtener los productos finales y, con frecuencia, la destilación también interviene en las etapas intermedias de este proceso.

La destilación se puede ver como un proceso para realizar la separación de una mezcla mediante los diferentes puntos de ebullición o

volatilidad de los componentes. Esta mezcla puede estar compuesta por dos o más sustancias. También se puede ver como un proceso en el cual una mezcla de dos o más compuestos es separada en sus fracciones con una pureza determinada mediante la aplicación y el retiro de calor. Cuando se quieren destilar grandes cantidades de una mezcla, se utiliza una columna de destilación debido a la pureza y cantidad que se puede lograr por medio de esta.

Dependiendo de la mezcla que se quiere separar, se puede tener una destilación primaria ó binaria. La destilación primaria corresponde a la separación de distintas fracciones de una mezcla de varios compuestos, un ejemplo de éste es la destilación de petróleo crudo. En tanto que destilación binaria, corresponde a la separación de una mezcla considerada idealmente compuesta por dos sustancias, ejemplo: separación del alcohol de agua.

Una columna de destilación es un recipiente vertical con suficiente altura para que en su interior exista un contacto entre una corriente de vapor y una de líquido. Éstas columnas, se forman por varios dispositivos como una serie de platos donde se realiza la separación de componentes; un rehervidor o intercambiador de calor; un condensador y una válvula que permita el retorno de fluido a la columna. En la parte media de la columna entra la mezcla que se va a destilar, al plato de alimentación, cuando este se llena, el líquido se desborda y comienza a llenar el plato inmediato inferior y así sucesivamente hasta llegar al rehervidor. Consecuentemente, en la parte baja de la columna se acumula la mezcla en el rehervidor, que es una tubería por la que circula un fluido a una temperatura mayor que la de la mezcla, transmitiendo el calor por contacto físico, evaporando el componente más volátil; el resto se extrae y se conoce como producto de cola o de fondo.

Por otro lado, en la parte alta de la columna se encuentra un condensador que tiene la función de enfriar el vapor para hacerlo nuevamente líquido, este líquido puede regresarse a la columna para obtener un componente más puro por medio de una llave de reflujo o extraerse como producto de cabeza. En la columna se sitúa una serie de platos que es donde se da el contacto entre vapor y líquido y se obtiene un componente más puro.

En este trabajo se propone usar métodos numéricos para simular la evolución y el comportamiento dinámico de una columna de destilación binaria constituida por diez platos. Se considera que el plato de alimentación se encuentra en el centro, y corresponde al quinto plato, el plato tope de la columna es el décimo

plato. Se tiene también un rehervidor y un tanque de reflujo. Los fluidos de entrada, los de salida del rehervidor y del tanque, como también los fluidos que se derraman por cada plato se consideran constante. Se considera que en la columna de destilación existen únicamente dos sustancias (A y B), siendo la primera más volátil que la segunda. Se resuelve únicamente para el elemento A. El modelo del sistema se obtiene mediante el balance de materia y energía. El sistema de ecuaciones diferenciales se resuelve mediante dos métodos numéricos: Euler y Runge Kutta. Las simulaciones permiten observar cual de los dos métodos tiene una mejor respuesta cuando el tiempo de muestreo aumenta.

Este trabajo está organizado de la siguiente manera: en la Sección 2 se describe el modelo del sistema obtenido a partir del balance de materia y energía. La Sección 3 presenta la resolución del sistema usando métodos numéricos, posteriormente en la Sección 4 se detallan los resultados obtenidos con ambas estrategias de simulación. Finalmente se presentan las conclusiones.

2. FUNCIONAMIENTO DE LA COLUMNA DE DESTILACION BINARIA

La figura 1 muestra un esquema del sistema y las variables que intervienen en el proceso. Una corriente simple es alimentada como líquido saturado es decir a su punto de burbuja sobre el plato de alimentación N_F . El flujo de alimentación es F (Mol/min) y su composición es z (fracción molar del componente más volátil). El vapor que sale por el tope es totalmente condensado en un condensador y enviado hacia el tanque de reflujo, donde la retención de líquido es M_D (moles), con una composición x_D . El líquido en el tanque está a su punto de burbuja. Se bombea reflujo hacia el plato del tope (N_T) a una razón de R y expulsando a razón de D .

En la base de la columna, los productos pesados son removidos a razón de B , con una composición x_B . El vapor de ebullición es generado en un rehervidor tipo termosifón a razón de V . El líquido circula desde el fondo de la columna a través de los tubos verticales en el rehervidor de casco y tubos debido a la baja densidad de la mezcla líquido-vapor en los tubos del intercambiador. Asumiendo que el líquido en el rehervidor y en la base de la columna son perfectamente mezclados y tienen la misma composición x_B y retención total M_B (moles). La composición del vapor saliendo de la base de la columna y entrando al plato 1 es y_B . Este está en equilibrio con el líquido cuya composición es x_B .

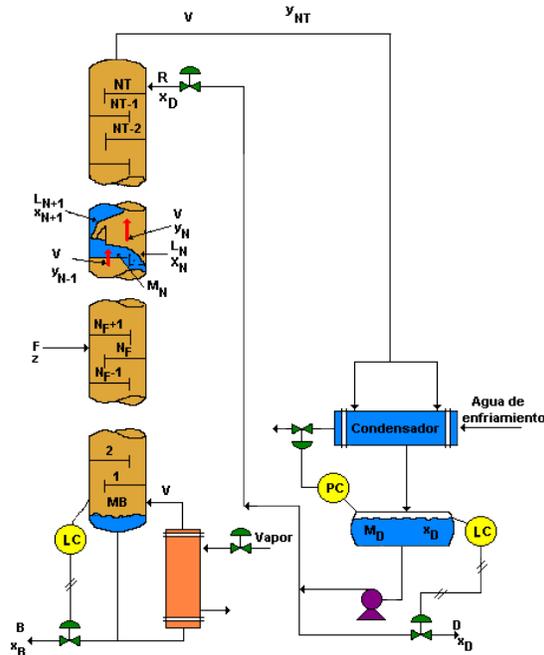


Fig. 1. Modelo de una columna de destilación binaria.

La columna contiene un total de $N_T = 10$ platos teóricos. La retención de líquido en cada plato incluyendo el rebose es M_n . El líquido en cada plato es asumido a estar perfectamente mezclado, con composición x_n . La retención de vapor es asumida despreciable a lo largo de todo el sistema. Aún cuando el volumen del vapor es grande, el número de moles es usualmente pequeño debido a que la densidad del vapor es mucho más pequeña que la densidad del líquido.

Por ser un modelo ideal se asume que las pérdidas de calor desde la columna y los cambios de temperatura de plato a plato (efectos de calor sensible) son despreciables. Estas asunciones permiten que las velocidades de líquido y vapor a través de las secciones de agotamiento y rectificación sean constante.

Por otra parte también se desprecia la dinámica del condensador y el rehervidor. Esta asunción es válida en ciertos sistemas, mientras que en otros puede ser muy importante incluirlos.

En la tabla 1 se resumen cada una de las variables que intervienen en el proceso.

Tabla 1. Descripción de las variables del sistema

Composiciones de los platos	(x_n, y_n)
Flujos de líquido en los platos	(L_n)
Retenciones de líquido en los platos	(M_n)
Composición del tanque de reflujo	(x_D)

Flujos en el tanque de reflujo	(R, D)
Retención en el tanque de reflujo	(MD)
Composiciones en la base	(x_B, y_B)
Flujos en la base	(V, B)
Retención en la base	(MB)

2.1 Descripción del modelo de la columna de destilación

La simulación del modelo considera varias asunciones. En primer lugar se considera una composición ideal constituida únicamente por dos elementos A y B, el más volátil y menos volátil, respectivamente. Por otro lado se asume que la alimentación se realiza en un único plato, en el que la alimentación entra como líquido saturado, aunque se contempla la posibilidad de una vaporización parcial o total de ésta. También se supone que no hay ebullición sino inyección directa de vapor de agua. El líquido acumulado en el plato es incompresible y se encuentra como una mezcla perfecta; la composición por tanto será la misma en todos los puntos. Se supone además que la fase líquida y vapor que abandonan el plato se encuentran en equilibrio térmico, a la misma temperatura y a la misma presión. Se desprecia el tiempo muerto en la corriente de vapor que va desde el plato de la columna hasta el condensador, y también en la corriente de retorno del reflujo a la cabeza de la torre. Se considera la dinámica del condensador en el desarrollo del modelo de la columna de destilación. No se toma en cuenta la acumulación de vapor a lo largo del sistema.

El modelo dinámico usado para describir la evolución temporal de la columna de destilación binaria está representado por las ecuaciones diferenciales de las variables involucradas obtenidas a partir de los balances de materia y energía del proceso (Luyben, 1995).

Concentración en el plato n

$$M_n \frac{d(x_n)}{dt} = L_{n+1}x_{n+1} - L_nx_n + Vy_{n-1} - Vy_n - x_n(L_{n+1} - L_n) \quad (1)$$

Concentración en el tanque de reflujo

$$M_D \frac{d(x_D)}{dt} = Vy_{NT} - (R + D)x_D - x_D(V - R - D) \quad (2)$$

Concentración en la base

$$M_B \frac{d(x_B)}{dt} = L_1 x_1 - V y_B - B x_B - x_B (L_1 - V - B) \quad (3)$$

Concentración en el plato de alimentación

$$\frac{d(M_{NF} x_{NF})}{dt} = L_{NF+1} x_{NF+1} - L_{NF} x_{NF} + V y_{NF+1} - V y_{NF} + F z - x_{NF} (L_{NF+1} - L_{NF} + F_z) \quad (4)$$

Concentración en el último plato NT

$$M_{NT} \frac{d(x_{NT})}{dt} = R x_D - L_{NT} x_{NT} + V y_{NT-1} - V y_{NT} - x_{NT} (R - L_{NT}) \quad (5)$$

Composición de vapor en la n-sima bandeja

$$y_n = \frac{\alpha \cdot x_{n-1}}{1 + (\alpha - 1) \cdot x_{n-1}} \quad (6)$$

Retención en el plato n

$$M_n = (L_{n+1} - L_n) t + M_{n0} \quad (7)$$

Retención en el condensador y reflujo

$$M_n = (V - R - D) t + M_{D0} \quad (8)$$

Retención en la Base

$$M_B = (L_1 - V - B) t + M_{B0} \quad (9)$$

Retención en el plato de alimentación

$$M_{NF} = (R - L_n + F_z) t + M_{NF0} \quad (10)$$

Retención en el último plato NT

$$M_{NT} = (R - L_{NT}) t + M_{NT0} \quad (11)$$

Para obtener las ecuaciones de continuidad de energía, solamente se necesita reemplazar las x , y , por H y h que son los calores molares de la sustancia más volátil.

3. SIMULACIÓN BASADA EN METODOS NUMÉRICOS

La estrategia basada en métodos numéricos y álgebra lineal, constituye una solución muy confiable y presenta la ventaja de no usar linealizaciones alrededor de puntos especiales de operación, ofreciendo una aproximación mediante la discretización de las ecuaciones diferenciales en cada instante de muestreo.

Considere la siguiente ecuación diferencial,

$$y' = f(y, u, t), \quad y(0) = y_0 \quad (12)$$

donde y representa la salida del sistema a controlar, u la acción de control, y t , el tiempo. Los valores de $y(t)$ en el tiempo discreto $t = nT_0$, serán llamados y_n , donde T_0 es el periodo de muestreo, y $n \in \{0, 1, 2, 3, \dots\}$. Luego, cuando se desea calcular el valor de y_{n+1} conociendo

previamente el valor de y_n , la ec.(12) deberá integrarse sobre el intervalo de tiempo $nT_0 \leq t \leq (n+1)T_0$ como se muestra a continuación,

$$y_{n+1} = y_n + \int_{nT_0}^{(n+1)T_0} f(y, u, t) dt \quad (13)$$

Existen distintos métodos de integración numérica, cada uno de ellos con sus correspondientes algoritmos para realizar el cálculo de y_{n+1} . Se puede obtener, un valor aproximado de y_{n+1} si se utilizan métodos numéricos para calcular la integral del segundo miembro de (13). Por ejemplo se puede aproximar como,

$$y_{n+1} \approx y_n + T_0 f(y_n, u_n, t_n) \quad (14)$$

$$y_{n+1} \approx y_n + \frac{T_0}{2} \{f(y_n, u_n, t_n) + f(y_{n+1}, u_{n+1}, t_{n+1})\} \quad (15)$$

donde y_{n+1} en el segundo miembro de la ec. (15) se desconoce y por lo tanto se puede estimar como indica la Ec. (14). Estas aproximaciones reciben el nombre de método de Euler y de Runge-Kutta de 2do orden, respectivamente.

4. RESULTADOS

Usando la metodología citada en la sección 3, se realizan las simulaciones, usando los dos tipos de métodos numéricos:

4.1 Simulación mediante el método de Euler

Discretizando las ecuaciones diferenciales en las cuales se describen las variables principales de la columna de destilación binaria, mediante el método de Euler se obtienen el siguiente conjunto de ecuaciones:

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{T_0} = \frac{L_{n+1,m} x_{n+1,m} - L_{n,m} x_{n,m} + V y_{n-1,m} - V y_{n,m} - x_{n,m} (L_{n+1,m} - L_{n,m})}{M_{n,m}} \quad (15)$$

$$\frac{x_{D,m+1} - x_{D,m}}{T_0} = \frac{V y_{NT,m} - (R + D) x_{D,m} - x_{D,m} (V - R - D)}{M_{D,m}} \quad (16)$$

$$\frac{x_{B,m+1} - x_{B,m}}{T_0} = \frac{L_{1,m} x_{1,m} - V y_{B,m} - B x_{B,m} - x_{B,m} (L_{1,m} - V - B)}{M_{B,m}} \quad (17)$$

$$\frac{x_{NF,m+1} - x_{NF,m}}{To} = \frac{L_{NF+1,m}x_{NF+1,m} - L_{NF,m}x_{NF,m} + Vy_{NF-1,m}}{M_{NF,m}} - Vy_{NF,m} + Fz - x_{NF,m}(L_{NF+1,m} - L_{NF,m} + Fz) \quad (18)$$

$$\frac{x_{NT,m+1} - x_{NT,m}}{To} = \frac{Rx_{D,m} - L_{NT,m}x_{NT,m} + Vy_{NT-1,m}}{M_{NT,m}} - Vy_{NT,m} - x_{NT,m}(R - L_{NT,m}) \quad (19)$$

La simulación con el método Runge Kutta se realiza utilizando la metodología descrita en la sección 3.

Para esta simulación se desarrollo un simulador en Matlab en el cual se reproducía el comportamiento dinámico de la columna de destilación de 10 platos durante 30 horas con base en el modelo de la sección 2. Las fig. 2,3 muestran la simulación para la concentración en el tanque de reflujo y la concentración en la base para un tiempo de muestreo de 0.01 horas, utilizando el método de Euler. Se puede observar una evolución dinámica satisfactoria. Las concentraciones en la base y en el tanque de reflujo obtenidas, son entonces adecuadas y acordes al rendimiento y desempeño de una columna de destilación binaria.

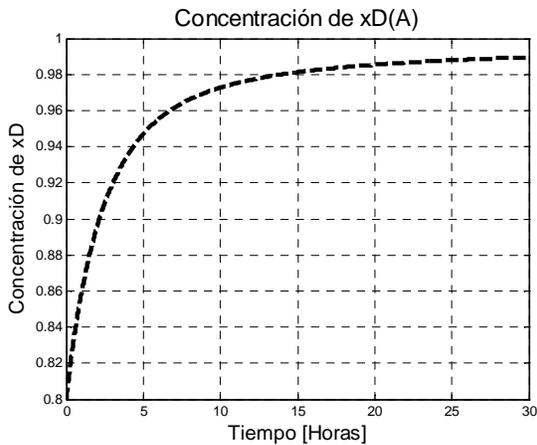


Fig. 2. Concentración de la sustancia A en el tanque de reflujo. Solución por el método de Euler con tiempo de muestreo=0.01horas

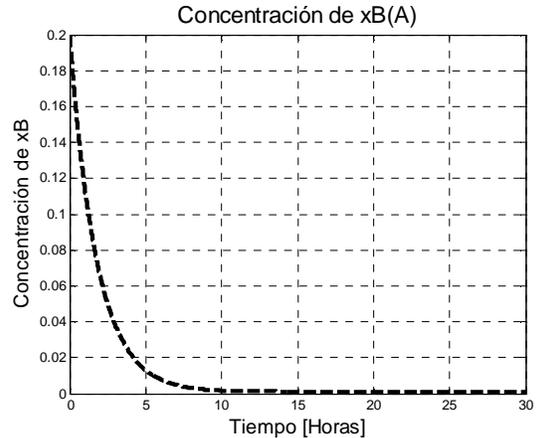


Fig. 3. Concentración de la sustancia A en la base. Solución por el método de Euler con tiempo de muestreo=0.01horas.

Por otro lado se reproducía el comportamiento dinámico de la columna de destilación de 10 platos durante 30 horas con base en el modelo de la sección 2 utilizando el método numérico de Runge Kutta. Las fig. 4,5 muestran la simulación para la concentración en el tanque de reflujo y la concentración en la base para un tiempo de muestreo de 0.01 horas, utilizando el método de Runge Kutta. Se puede observar una evolución dinámica satisfactoria, sin embargo los valores de estado estable para la concentración en el tanque de reflujo y la concentración en la base difieren ligeramente cuando se utilizan estos métodos numéricos.

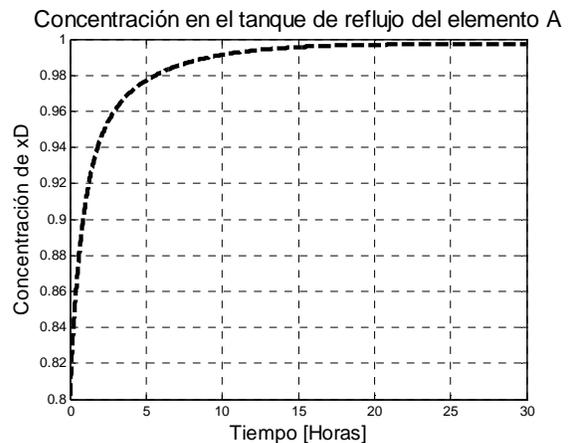


Fig. 4. Concentración de la sustancia A en el tanque de reflujo. Solución por el método de Runge Kutta con tiempo de muestreo=0.01horas.

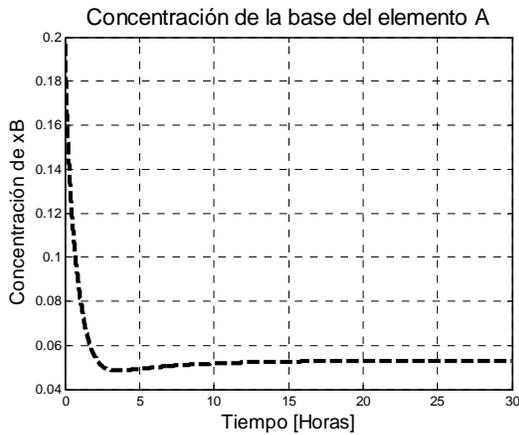


Fig. 5. Concentración de la sustancia A en la base. Solución por el método de Runge Kutta con tiempo de muestreo=0.01horas.

Las fig. 6,7 muestran la simulación para la concentración en el tanque de reflujo y la concentración en la base para un tiempo de muestreo de 0.1 horas, utilizando el método de Euler. Se puede observar una evolución dinámica satisfactoria para las concentraciones en la base y en el tanque de reflujo obtenidas.

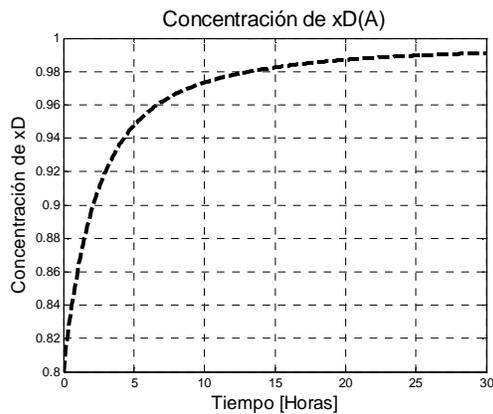


Fig. 6. Concentración de la sustancia A en el tanque de reflujo. Solución por el método de Euler con tiempo de muestreo=0.1horas

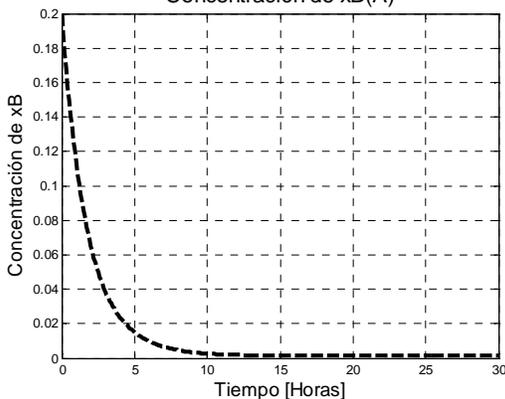


Fig. 7. Concentración de la sustancia A en la base. Solución por el método de Euler con tiempo de muestreo=0.1horas.

Las fig. 8,9 muestran la simulación para la concentración en el tanque de reflujo y la concentración en la base para un tiempo de muestreo de 0.1 horas, utilizando el método de Runge Kutta.

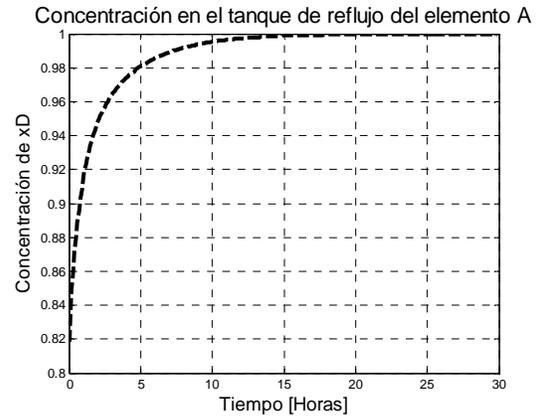


Fig. 8. Concentración de la sustancia A en el tanque de reflujo. Solución por el método de Runge Kutta con tiempo de muestreo=0.1horas.

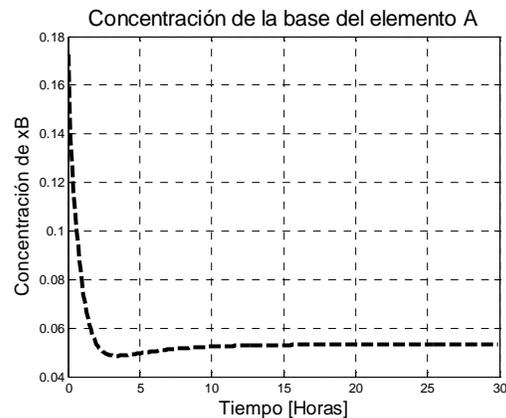


Fig. 9. Concentración de la sustancia A en la base. Solución por el método de Runge Kutta con tiempo de muestreo=0.1horas.

Puede observarse que el desempeño del simulador mejora, al usar el método numérico de Runge Kutta, respecto a la propuesta anterior. Finalmente se realizó un simulador en Matlab en el cual se aumenta el tiempo de muestreo para el modelo dinámico de la columna de destilación de 10 platos. Las fig. 10,11 muestran la simulación para la concentración en el tanque de reflujo y la concentración en la base para un tiempo de muestreo de 0.3 horas (18 horas), utilizando el método de Euler. Se puede observar una evolución dinámica satisfactoria para la concentración en la base. Sin embargo el método de Euler diverge para este tiempo de muestreo tal como muestra la figura de la concentración en el tanque de reflujo.

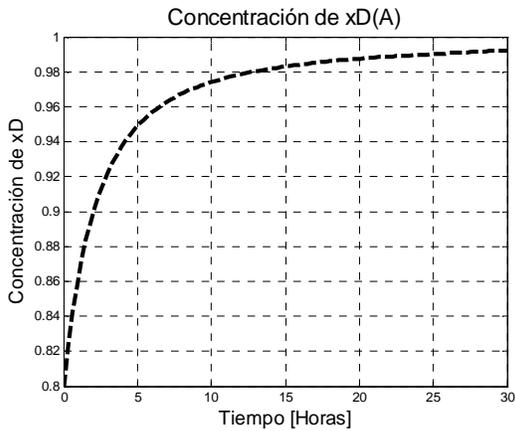


Fig. 10. Concentración de la sustancia A en el tanque de reflujo. Solución por el método de Euler con tiempo de muestreo=0.3horas.

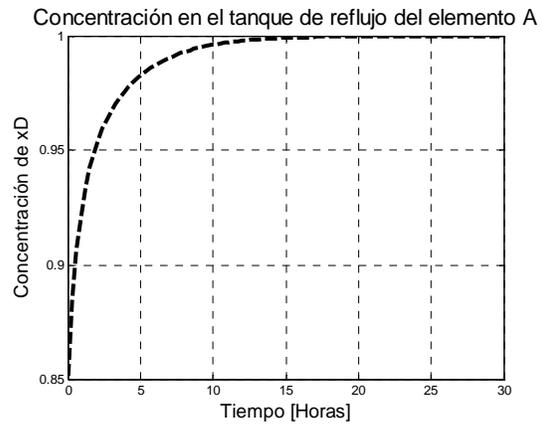


Fig. 12. Concentración de la sustancia A en el tanque de reflujo. Solución por el método de Runge Kutta con tiempo de muestreo=0.3horas.

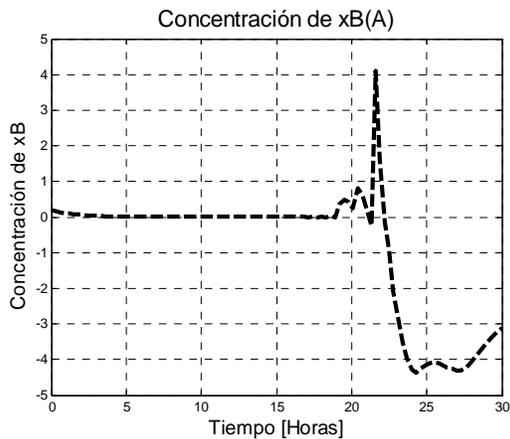


Fig. 11. Concentración de la sustancia A en la base. Solución por el método de Euler con tiempo de muestreo=0.3horas.

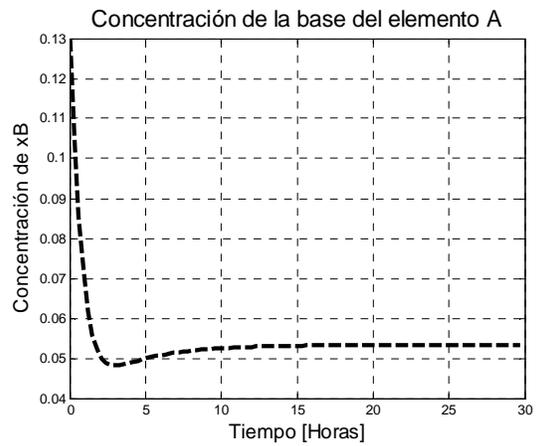


Fig. 13. Concentración de la sustancia A en la base. Solución por el método de Runge Kutta con tiempo de muestreo=0.3horas.

Las fig. 12,13 muestran la simulación para la concentración en el tanque de reflujo y la concentración en la base para un tiempo de muestreo de 0.3 horas, utilizando el método de Runge Kutta. Las concentraciones en la base y en el tanque de reflujo obtenidas, son adecuadas y acordes al rendimiento y desempeño de una columna de destilación binaria para las condiciones iniciales dadas. La observación más importante es que el simulador que utiliza el método numérico de Runge Kutta para la resolución del sistema, no diverge para este tiempo de muestreo, al contrario la respuesta del simulador es satisfactoria y presenta resultados coherentes para las concentraciones simuladas.

4. CONCLUSIONES

El análisis de una columna de destilación binaria permite entender el comportamiento dinámico de las concentraciones de los componentes. La concentración del elemento más volátil (A) de la base disminuye, en tanto que las concentraciones del plato y del tanque de reflujo aumentan hacia un valor estable; además, la concentración en el tanque de reflujo es mayor que los otros dos. De esta manera se observa que el elemento más volátil se concentra en el tanque de reflujo, mientras que el menos volátil en la base de la columna, como se espera. La solución de las ecuaciones diferenciales mediante métodos numéricos provee resultados parecidos y satisfactorios cuando el tiempo de muestreo es pequeño. A medida que éste va incrementando, hay una diferencia entre los resultados obtenidos por Euler y los correspondientes resultados obtenidos por Runge Kutta. Los resultados por éste último no varían mucho, pero los obtenidos por Euler

cambian considerablemente con el tiempo de muestreo, hasta un punto en donde los resultados divergen o ya no son coherentes. El tiempo de muestreo al que el método de Euler diverge es 0.3 horas ó de 18 minutos.

REFERENCIAS

- Humphrey, J., Separation processes: playing a critical role. *Chemical Engineering Progress* 1995, 91, (10), 43-54.
- Luyben, William L. *Process Modeling Simulation and Control for Chemical Engineers*. New York, McGraw-Hill 1999.
- S.G.Shinsky ,*Sistemas de control de procesos Tomo I*, México 1996
- Himmelblau, D. *Balances de Materia y Energía*. Prentice Hall, 1988.
- Rekalitis, G. *Balances de Materia y Energía*. Ed. Interamericana, 1986.
- Scaglia, G., Quintero O., Mut, V., & di Sciascio, F. (2008). Numerical methods based controller design for mobile robots mobile robots. Published online by Cambridge University Press 23 Jun 2008.
- Quintero, O., Scaglia. G., di Sciascio, F. & Mut, V. (2008c). Numerical Methods Based Strategy and Particle Filter State Estimation For Bio Process Control. *IEEE International Conference on Industrial Technology, IEEE ICIT2008*.
- Quintero, O., Scaglia. G., Amicarelli, A. & di Sciascio, F. (2008). Bio Process Control Strategy based on Numerical Methos and Linear Algebra: Second Approach. *Modellin Identification and Control MIC 2008 IAESTED Conference, Insbruck Austria February 11-13*.