

Taller 3 – Destilación Multicomponente

Nicolas Ariza, Rafael Montagut, Cristian Pineda, Deyver Rivera

Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Calle 44 # 45-67. Bogotá D.C., Colombia.
Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental,
Operaciones de separación.

Enunciado

Para la separación por destilación continua de dos corrientes de hidrocarburos, alimentación 1 y 2 respectivamente, se desea calcular el calor del condensador Q1, del rehervidor Q16, el flujo, concentración y temperatura de las corrientes de la columna compleja mostrada en la figura.

Calcule lo solicitado mediante la estrategia del punto de burbuja explicado en clase. Como valores de inicio asuma la condición de flujo molar constante y perfil lineal de temperatura para los flujos de vapor, V_j , y temperaturas, T_j en cada etapa de equilibrio.

El cálculo de los coeficientes de equilibrio podrá hacerlo con base en los ajustes de $K_{ij}=f(T_j, P_j, i)$ de Mc Williams o relaciones similares. Para el cálculo de la entalpía, por tratarse de serie homóloga, puede ignorar el calor de solución. Si lo desea podrá asumir presión constante para todas las etapas.

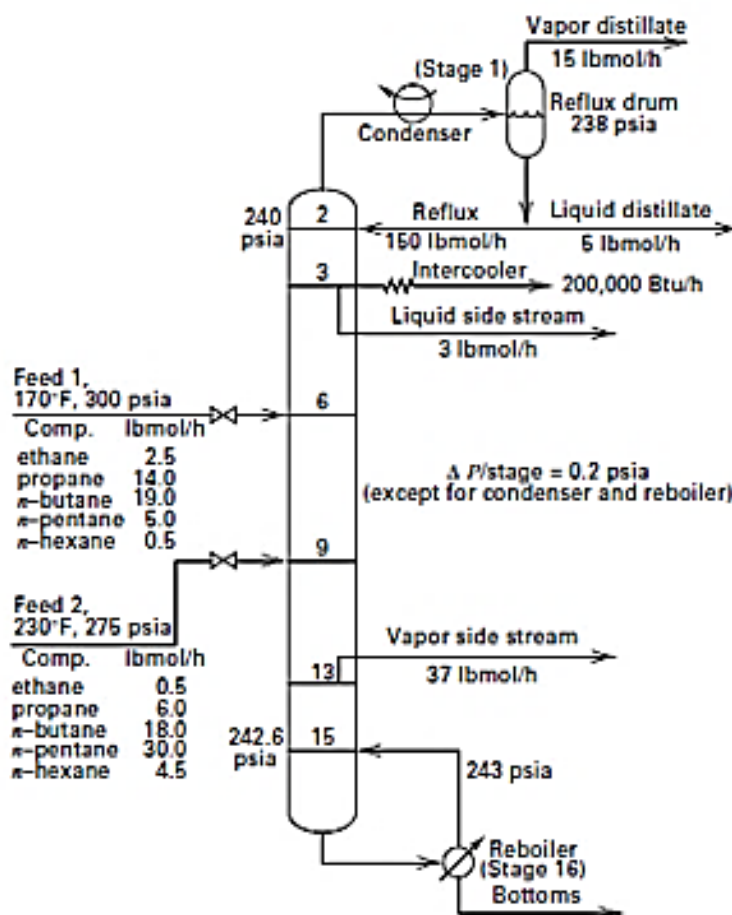


Figura 1. Diagrama de la columna.

Metodología y secuencia de cálculo

Para la solución del taller se ha desarrollado un algoritmo de Matlab que funciona bajo la metodología que se consigna a continuación.

Propiedades

- **Coeficientes de distribución K**

Debido al carácter de mezcla multicomponente que se maneja en la columna se hace difícil el cálculo de condiciones de equilibrio. Debido a esto, se ha recurrido al uso de los factores de distribución, en específico a las relaciones de McWilliams. De esta manera, los coeficientes K se determinan como función de la temperatura, de la presión y del componente de la siguiente manera:

$$\ln K = a_{T1} \frac{1}{T^2} + a_{T2} \frac{1}{T} + a_{T3}(\ln T) + a_{T4} * T + a_{T5} * T^2 + a_{T6} + a_{P1}(\ln P) + a_{P2} \frac{1}{P^2} + a_{P3} \frac{1}{P} + a_{P4}(\ln P)^2 + a_{P5}(\ln P)^3$$

En donde la presión se encuentra en psia y la temperatura en °R. Además, las constantes a_T y a_P dependen de cada componente. Los parámetros utilizados se encuentran en la siguiente tabla:

	Etano	Propano	n-Butano	n-Pentano	n-Hexano
a_{T1}	-687248.25	-970688.5625	0	-1644864	0
a_{T2}	0	0	0	0	0
a_{T3}	0	0	19.65479	0	0
a_{T4}	0	0	-0.02024	0	0.04476
a_{T5}	0	0	0	0	-0.0000233488
a_{T6}	7.90699	7.71725	-109.11067	8.3288	-15.52781
a_{P1}	-0.88600	-0.67984	-0.99838	-1.17078	-1.23197
a_{P2}	49.02654	0	0	0	0
a_{P3}	0	6.90224	0	0	0
a_{P4}	0	0	0	0	0
a_{P5}	0	0	0	0.00523	0.00718

Tabla 1. Parámetros para el cálculo de los factores K con las relaciones de McWilliams.

- **Entalpías de vaporización**

Para el cálculo de los calores latentes de vaporización se recurrió a la siguiente expresión tomada de Perry's chemical engineers' handbook 8ed (Tabla 2-150):

$$\lambda_{vap} = C_1(1 - T_r)^{C_2 + C_3 T_r + C_4 T_r^2}$$

En donde λ_{vap} está dado en J/kmol y T_r es la temperatura reducida. Los parámetros C se encuentran tabulados en la siguiente tabla:

	Etano	Propano	n-Butano	n-Pentano	n-Hexano
C_1	2.1091e7	2.9209e7	3.6238e7	3.9109e7	4.4544e7
C_2	0.60646	0.78237	0.8337	0.38681	0.39002
C_3	-0.55492	-0.77319	-0.82274	0	0
C_4	0.32799	0.39246	0.39613	0	0

Tabla 2. Parámetros para el cálculo de las entalpías de vaporización.

- **Capacidades caloríficas para la fase líquida**

Al igual a lo realizado para el caso anterior, estos valores fueron cuantificados por modelos tomados de Perry's chemical engineers' handbook 8ed (Tabla 2-153). Para este caso, se tienen dos correlaciones distintas dependiendo del compuesto.

Ecuación 1:

$$Cp_L = C_1 + C_2T + C_3T^2 + C_4T^5 + C_5T^4$$

Ecuación 2:

$$Cp_L = \frac{C_1^2}{t} + C_2 - 2C_1C_3t - C_1C_4T^2 - \frac{C_3^2t^3}{3} - \frac{C_3C_4t^4}{2} - \frac{C_4^2t^5}{5}$$

En donde Cp_L está dado en J/kmol*K, T en K y

$$t = 1 - T_r = 1 - \frac{T}{T_c}$$

Los parámetros utilizados se encuentran tabulados en la siguiente tabla:

	Etano	Propano	n-Butano	n-Pentano	n-Hexano
C ₁	44.009	62.983	191030	159080	172120
C ₂	89718	113630	-1675	-270.5	-183.78
C ₃	918.77	633.21	12.5	9.9537e-1	8.8734e-1
C ₄	-1886	-873.46	-0.03874	0	0
C ₅	-	-	4.6121e-5	0	0
	Eq 2	Eq 2	Eq 1	Eq 1	Eq 1

Tabla 3. Parámetros para el cálculo de la capacidad calorífica en la fase líquida.

- **Capacidades caloríficas para la fase vapor**

Nuevamente estos valores fueron cuantificados por modelos tomados de Perry's chemical engineers' handbook 8ed (Tabla 2-156). La correlación empleada fue la siguiente:

$$Cp_{vap} = C_1 + C_2 * \left[\frac{C_3/T}{\sinh(C_3/T)} \right]^2 + C_4 * \left[\frac{C_5/T}{\cosh(C_5/T)} \right]^2$$

En donde Cp_{vap} está dado en J/kmol*K y T en K. Los parámetros utilizados se encuentran tabulados en la siguiente tabla:

	Etano	Propano	n-Butano	n-Pentano	n-Hexano
C ₁	0.4033e5	0.5192e5	0.7134e5	0.8805e5	1.0440e5
C ₂	1.3422e5	1.9245e5	2.43e5	3.011e5	3.523e5
C ₃	1.6555e3	1.6265e3	1.63e3	1.6502e3	1.6946e3
C ₄	0.7322e5	1.168e5	1.5033e5	1.8920e5	2.369e5
C ₅	752.87	723.6	730.42	747.6	761.6

Tabla 4. Parámetros para el cálculo de la capacidad calorífica en la fase vapor.

- **Cálculo de entalpías**

Es necesario definir el valor de las entalpías de las corrientes que salen o entran a cada etapa, de esta manera:

- Para las corrientes que se encuentran como líquido saturado:

$$h_{liq,j} = \sum_i x_{i,j} \cdot C_{pL,i} \cdot (T_j - T_{Ref})$$

En este caso se ha calculado C_{pL} a la temperatura promedio entre la temperatura del plato j y una temperatura de referencia fijada (0 °F). Se ha ignorado el efecto del calor de disolución debido a que se está trabajando con una serie homóloga de compuestos.

- Para las corrientes que se encuentran como vapor saturado:

$$h_{vap,j} = \sum_i y_{i,j} \cdot \left[\lambda_{vap,i} + \int_{T_{ref}}^{T_j} C_{p_{vap},i} dT \right]$$

Se ha integrado $C_{p_{vap}}$ entre la temperatura del plato j y una temperatura de referencia fijada (0 °F). El calor de vaporización también se determinó a la temperatura de referencia.

Inicialización de variables – Suposiciones iniciales

- **Primer perfil de temperaturas**

La primera aproximación al perfil de temperaturas fue dada como un perfil recto con cambios de temperatura iguales entre platos. Sin embargo, para poder formar este perfil se requiere una temperatura máxima (rehervidor) y una mínima (condensador). Para aproximar estas temperaturas inicialmente se realizaron suposiciones para la composición de los flujos de salida U_1 y L_{16} . Cabe destacar que estas aproximaciones se hicieron sumando los flujos de entrada para cada componente e ignorando la salida V_1 y las demás salidas intermedias, sin embargo, dado a que solo se buscaban calcular fracciones y esto solo consiste en una aproximación inicial, no se recae en un error. Las composiciones supuestas para cada una de las corrientes mencionadas anteriormente están dadas en la siguiente tabla:

	Etano	Propano	n-Butano	n-Pentano	n-Hexano
U_1	3/42	17/42	20/42	2/42	0/42
L_{16}	0/58	3/58	17/58	33/58	5/58

Tabla 5. Composiciones supuestas para las corrientes líquidas de salida del condensador y rehervidor.

Ahora, dado a que ya se tiene una aproximación a estas concentraciones y la presión para estas etapas se calcula una primera aproximación a las temperaturas de saturación en cada caso con la expresión:

$$\sum_i K_{i,j}(i, T_j, P_j) \cdot x_{i,j} - 1 = 0$$

Esta expresión se resuelve con un solver variando únicamente la variable de la temperatura, de tal manera, que en cada iteración se acerque cada vez más a la convergencia.

De esta manera, se obtuvo una primera aproximación para el rehornador de 236.9343 °F y de 77.5131 °F para el condensador. Finalmente, se hallaron las temperaturas supuestas para los demás platos utilizando un salto de temperaturas uniforme entre los platos.

- **Flujos de vapor V_j de cada etapa**

Las aproximaciones se realizaron plato por plato desde el superior. Inicialmente, el valor de V_1 ya está dado como 15 lbmol/h. Para hallar V_2 se realizó un balance para el condensador, puesto que V_1 , U_1 y L_1 son conocidas, obteniendo:

$$V_2 = V_1 + U_1 + L_1$$

Para esta primera aproximación se contempló el caso de flujo molar constante, por lo que al no tener salidas ni entradas de vapor antes, los flujos V_3 , V_4 , V_5 y V_6 se suponen iguales a V_2 .

En el plato 6 se encuentra una alimentación, la que podría estar alimentando a V_6 si estuviese parcial o totalmente evaporada. Debido a esto, se han calculado las relaciones V/F o calidad (Ψ) de las corrientes de entrada (secuencia que se explicará en la siguiente sección de este documento), con lo que se determina el siguiente flujo a las entradas de la manera:

$$V_7 = V_6 - \Psi_6 * F_6 = V_8 = V_9$$

$$V_{10} = V_9 - \Psi_9 * F_9 = V_{11} = V_{12} = V_{13}$$

En el plato 13 hay una salida de vapor intermedia W , por lo que el flujo de vapor en 14 será diferente (en el contexto de la suposición de flujo constante).

$$V_{14} = V_{13} - W_{13} = V_{15} = V_{16}$$

De esta manera, ya se tiene la suposición para el flujo de vapor de cada etapa.

Estado de las corrientes de entrada

Para determinar en qué estado se encuentran las corrientes que entran a columna, este método se puede emplear de la misma manera, por lo que se determina la calidad de la ecuación mediante la siguiente ecuación:

$$\sum_i \frac{z_i \cdot [K_i(i, T, P) - 1]}{\psi \cdot [K_i(i, T, P) - 1] + 1} = 0$$

Donde ψ es la calidad; entonces se busca determinar la calidad para la cual esta ecuación se cumple usando las concentraciones, presión y temperatura de las corrientes que entran al plato 6 y 9. Dependiendo del valor que de la calidad se tendrá qué:

- Si $\psi = 0$ la corriente está en estado líquido.
- Si $\psi = 1$ la corriente está en estado de vapor.
- Si $0 < \psi < 1$ la corriente tiene fase líquida y de vapor.

Luego de definir el estado de estas corrientes se procede a determinar su entalpía de la siguiente forma:

- Si la corriente está en fase líquida:

$$H = h_{liq} = \sum_i z_i \cdot C_{p_{liq},i} \cdot (T_j - T_{Ref})$$

Donde $C_{p_{liq}}$ se determinó a la temperatura promedio.

- Si la corriente está en fase de vapor:

$$H = h_{vap} = \sum_i z_i \cdot \left[\lambda_{vap,i} + \int_{T_{ref}}^{T_j} C_{p_{vap},i} \right]$$

Donde T_j es la temperatura de la corriente de entrada y λ_{vap} se determinó a la temperatura de referencia (T_{ref}) que sería 0°F.

- Si la corriente tiene fase líquida y de vapor:

Se determina las fracciones de ambas fases de la siguiente forma:

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

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

Y luego se determina la entalpia de cada fase usando las ecuaciones anteriores, solo que y_i para la fase de vapor y x_i para la fase líquida. Posteriormente se determina la entalpia de la corriente de la siguiente forma:

$$H = h_{liq} + \psi \cdot (h_{vap} - h_{liq})$$

Cálculo de las concentraciones en cada plato

Para determinar la composición de cada componente en cada uno de los platos de la columna, se usó el método de Thomas mediante la matriz tridiagonal, usando la ecuación:

$$A_j \cdot x_{i,j-1} + B_j \cdot x_{i,j} + C_j \cdot x_{i,j+1} = D_j$$

Que en forma de matriz se ve de la siguiente forma (Sea la matriz tridiagonal $M_{i,j}$):

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & \dots & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & & 0 \\ & \vdots & & \ddots & \vdots \\ & 0 & & B_{N-2} & C_{N-2} & 0 \\ & 0 & & \dots & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\ & 0 & & & 0 & A_N & B_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i,1} \\ x_{i,2} \\ x_{i,3} \\ \vdots \\ x_{i,N-2} \\ x_{i,N-1} \\ x_{i,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \vdots \\ D_{N-2} \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix}$$

$$M_{i,j} \cdot x_{i,j} = D_j$$

Para determinar los términos de A, B, C y D, se usaron las siguientes ecuaciones:

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1$$

$$B_j = - \left[V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 + U_j + (V_j + W_j) \cdot K_{i,j} \right]$$

$$C_j = V_{j+1} \cdot K_{i,j+1}$$

$$D_j = -F_j \cdot z_{i,j}$$

Como podemos observar A solo depende de los platos, pero B, C y D depende tanto de los platos como de los componentes, por lo cual se creo una matriz tridiagonal y D para cada uno de los componentes (5 en total).

Luego se procedió a despejar la matriz de las x, de la siguiente forma:

$$M_{i,j} \cdot x_{i,j} = D_j$$

$$M_{i,j}^{-1} \cdot M_{i,j} \cdot x_{i,j} = M_{i,j}^{-1} \cdot D_j$$

$$I \cdot x_{i,j} = M_{i,j}^{-1} \cdot D_j$$

$$x_{i,j} = M_{i,j}^{-1} \cdot D_j$$

De esta forma obtenemos la matriz de la concentración de cada plato para cada uno de los componentes.

Nota: el cálculo de la matriz inversa a las matrices tridiagonales se hizo con la función inv() de Matlab, por lo que no se entrará en especificidades sobre este cálculo.

Normalización de las concentraciones de los componentes en cada plato

Después de obtener las concentraciones por etapa de cada componente, se procede a la normalización de estas en cada etapa buscando que su suma sea igual a 1. Esto se realizó mediante la siguiente ecuación:

$$x_{i,j} = \frac{x_{i,j}}{\sum x_{i,j}}$$

Recálculo de la temperatura en cada etapa

Una vez se han normalizado cada una de las concentraciones de los componentes para cada etapa, se debe recalcular la temperatura, para esto se realiza el mismo procedimiento con el cual se obtuvo la temperatura inicial. De esta forma, con las nuevas concentraciones se usa la siguiente ecuación para hallar la temperatura en cada plato:

$$\sum_i K_{i,j}(i, T, P) \cdot x_{i,j} - 1 = 0$$

Se busca igualar esta ecuación a cero, cambiando únicamente la variable de la temperatura, de tal manera, que en cada iteración se acerque cada vez más a la convergencia.

Cálculos de las fracciones molares en fase vapor (y)

Una vez se tiene el nuevo vector de temperaturas, se debe calcular la composición en el gas partiendo del equilibrio y de las composiciones en la fase líquida calculadas anteriormente.

$$y_{i,j} = K_{i,j} \cdot x_{i,j}$$

Cálculo de calor en el condensador y rehervidor

- En el condensador

Para calcular el calor en el condensador se debe hacer el balance de energía en la primera etapa.

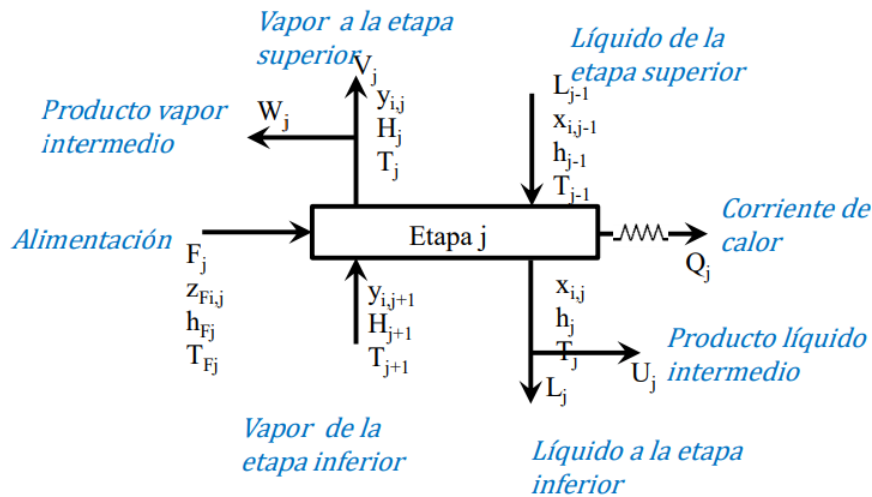


Figura 2. Corrientes de materia y/o energía en cada plato.

$$L_{j-1} \cdot h_{j-1} + V_{j+1} \cdot H_{j+1} + F_j \cdot h_{Fj} - (L_j + U_j) \cdot h_j - (V_j + W_j) \cdot H_j - Q_j = 0 \quad (1)$$

Con esta ecuación planteada desde la etapa uno, es decir, el condensador, se obtiene el calor retirado de este, teniendo en cuenta que se conocen el resto de las variables.

$$Q_C = V_2 \cdot H_2 + F_1 \cdot h_{F1} - (L_1 + U_1) \cdot h_1 - (V_1 + W_1) \cdot H_1$$

Esta ecuación es el balance general de esta etapa, sin embargo, puede ser el caso en el que algunos de los flujos que conforman el balance son iguales a cero.

- En el rehervidor

Para calcular el calor en el rehervidor se debe hacer el balance de energía para toda la torre, dado por:

$$\sum_{j=1}^N (F_j \cdot h_{Fj} - U_j \cdot h_j - W_j \cdot H_j) - \sum_{j=1}^N Q_j - V_1 \cdot H_1 - L_N \cdot h_N = 0$$

Conociendo todas las variables de dicho balance se despeja el calor en la última etapa.

$$Q_N = \sum_{j=1}^N (F_j \cdot h_{Fj} - U_j \cdot h_j - W_j \cdot H_j) - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_1 \cdot H_1 - L_N \cdot h_N$$

Cálculo de los flujos de vapor V

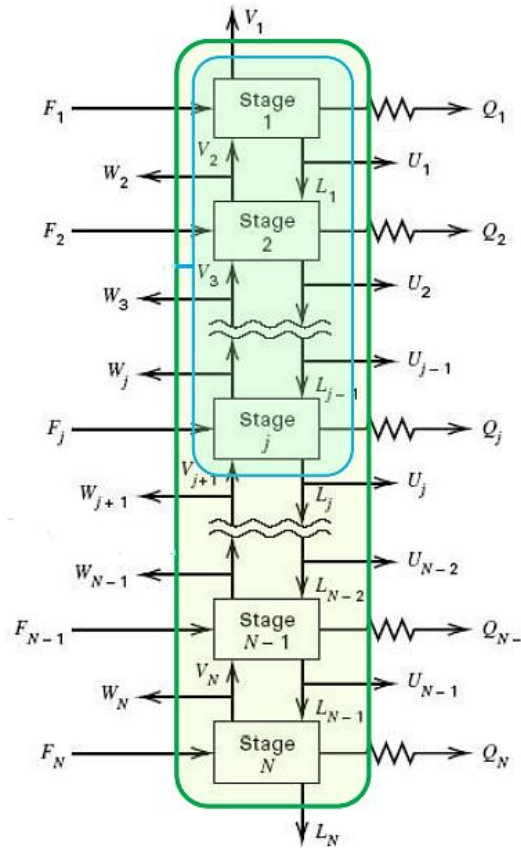


Figura 3. Diagrama de los flujos en la columna.

Realizando un balance de masa entre la etapa uno y una etapa j comprendida a lo largo de la columna (volumen de control azul de la figura 3), vemos que este se puede escribir como

$$V_{j+1} + \sum_{m=1}^j F_m = \sum_{m=1}^j U_m + \sum_{m=1}^j W_m + L_j + V_1$$

$$\rightarrow L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - W_m - U_m) - V_1 \quad (2)$$

Y reemplazando la ecuación (2) en el balance de energía por etapa (ecuación 1),

$$\left[V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \right] h_{j-1} + V_{j+1} H_{j+1} + F_j h_{Fj} - \left(V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - W_m - U_m) - V_1 + U_j \right) h_i - (V_j + W_j) H_{i,j} - Q_j = 0$$

Luego,

$$\alpha_j V_j + \beta_j V_{j+1} = \gamma_j$$

Donde

$$\alpha_j = h_{j-1} - H_j, \quad \beta_j = H_{j+1} - h_j$$

$$\gamma_j = \left[\sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \right] (h_j - h_{j-1}) + F_j (h_j - h_{Fj}) + W_j (H_j - h_j) + Q_j$$

Como sabemos que el flujo de vapor destilado es

$$V_1 = 15 \frac{\text{lbmol}}{\text{h}}$$

Tenemos el primer valor de cálculo, y reemplazando el resto de las variables en etapa de manera progresiva podemos obtener los flujos a lo largo de la columna.

En general, luego de obtener los parámetros α_j , β_j y γ_j para cada etapa, el flujo de vapor V puede ser calculado en cada plato como:

$$V_j = \frac{\gamma_{j-1} - \alpha_{j-1} * V_{j-1}}{\beta_{j-1}}$$

Cálculo de los flujos líquidos L

Del balance de materia vemos directamente la dependencia del flujo de líquido con las otras variables a lo largo de la columna de operación

$$\rightarrow L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - W_m - U_m) - V_1$$

Siendo posible obtener los flujos de líquido en cada una de las etapas, una vez calculados los flujos de vapor.

Criterio de finalización de la iteración

Como criterio de convergencia decidimos utilizar las diferencias entre los resultados de temperatura en cada iteración, siendo específicamente

$$\tau = \sum_{j=1}^{16} \left(T_j^{(i+1)} - T_j^{(i)} \right)^2 ; i = \text{iteraciones}.$$

En este caso, buscando el resultado más apropiado posible, le exigimos al código que

$$\tau \leq 1\text{E} - 5$$

Análisis y Resultados

Flujos molares de las corrientes

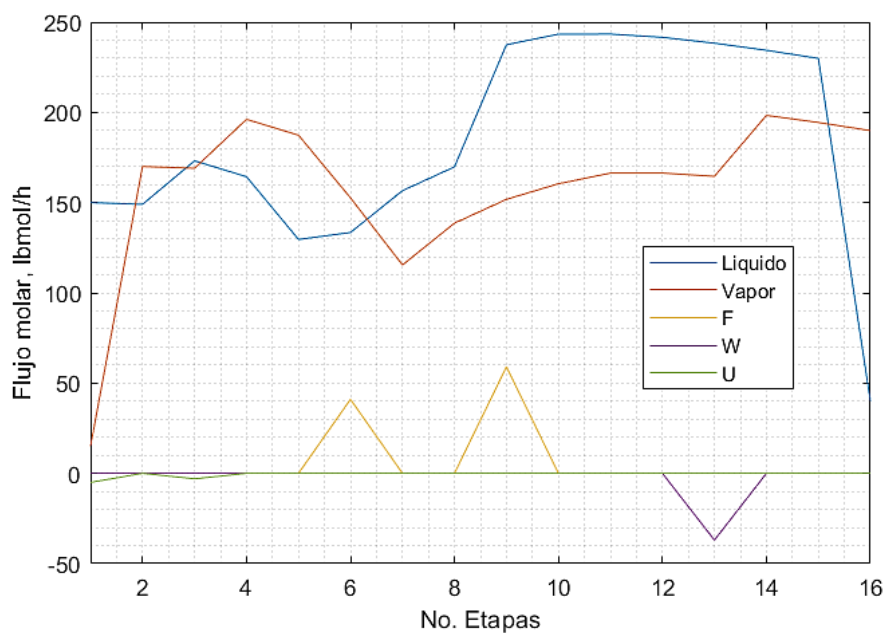


Figura 4. Flujos molares de las corrientes para cada plato.

Como podemos observar, la curva de F presenta solo dos picos en las etapas respectivas en las que ingresa el alimento (etapa 6 y 9); por otro lado, la curva U tiene sus picos en las salidas laterales de líquido (etapa 3) y el producto líquido intermedio de la etapa 1; mientras que la curva W su pico está en la salida lateral de vapor (etapa 13).

La curva de flujo de líquido comienza con la cantidad de reflujo de líquido del condensador, luego sube en la etapa 3 por el enfriamiento Inter etapas que favorece el estado líquido y el inter-enfriamiento de la etapa 3, luego presenta una caída debido a la sección de enriquecimiento en la cual el vapor despoja a la fase líquida de los componentes más livianos. Luego presenta un incremento debido a que ahora es la fase líquida la que despoja a la fase de vapor de sus componentes más pesados principalmente, como también el ingreso de la fase líquida de las alimentaciones 1 y un posterior incremento repentino por la entrada de la fase líquida de la alimentación 2, para posteriormente presentar una gran caída en la etapa 16 debido a que es esta el rehervidor y solo una pequeña parte del líquido que llega hasta allí sale de la etapa como producto de fondos.

Respecto a la curva de flujo de vapor se debe analizar de derecha izquierda debido a que conforme se sube en la columna de destilación incrementa su cantidad; comienza con el valor de recirculación de vapor que da el

rehervidor, luego presenta un decrecimiento repentino en la etapa 13 debido a la salida lateral de vapor, para después tener un incremento debido al ingreso de la fase de vapor de la alimentación 1 en las etapa 6. En seguida comienza el incremento consecutivo de vapor porque se encuentra en la sección de enriquecimiento; su mayor valor se presenta en la etapa 4 debido a que en la etapa tres hay un enfriamiento Inter etapas que disminuye la cantidad de vapor y posteriormente una caída enorme en la etapa 1 debido a que es en esta en la que sale todo el vapor de destilado y se da la condensación parcial.

Composiciones

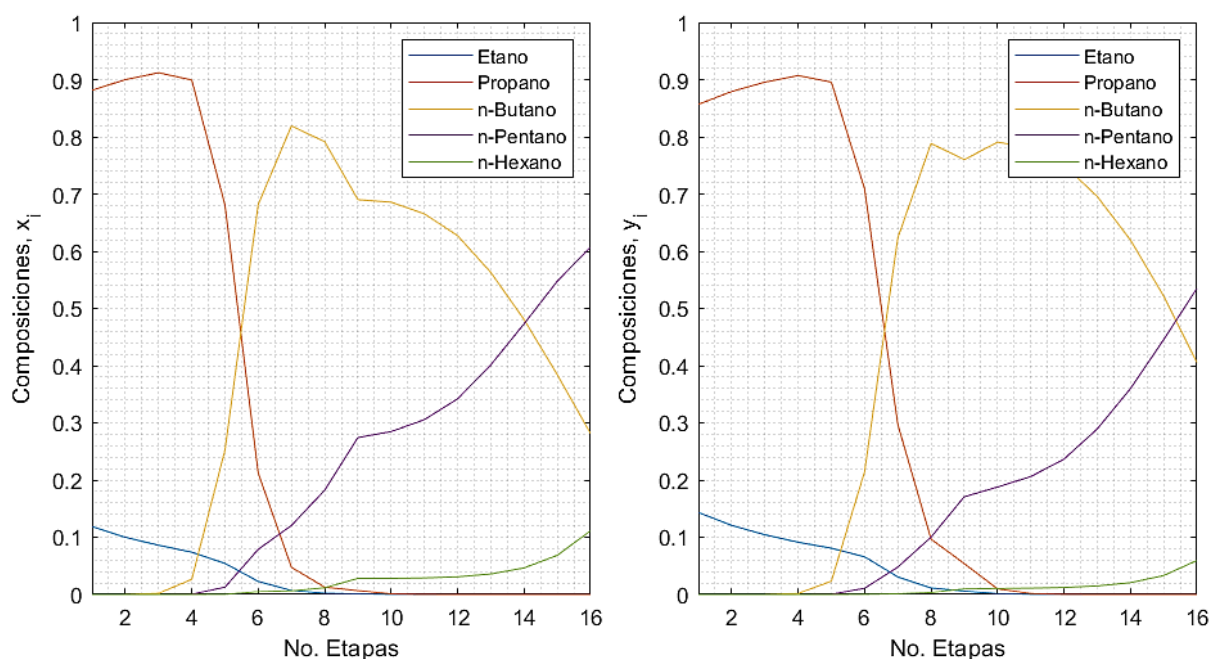


Figura 5. Composiciones a lo largo de la columna para cada componente en fase líquida y vapor.

Con base en la relación que tiene el peso molecular con el punto de ebullición de la sustancia, es de esperarse que

$$T_{eb.}^{Etano} < T_{eb.}^{Propano} < T_{eb.}^{n-Butano} < T_{eb.}^{n-Pentano} < T_{eb.}^{n-Hexano}$$

Es decir, que los efluentes livianos (la parte superior de la columna) estarán mayoritariamente compuestos por los componentes de etano y propano, y en el destilado líquido, de la parte inferior de la columna, encontraremos los componentes de butano, pentano y hexano fundamentalmente, tal como se ve en el comportamiento de las composiciones. Sin embargo, vemos que la composición del butano alcanza un máximo alrededor de la etapa 7, esto es debido a que en las primeras etapas deben haber trazas (casi nada) de butano debido a su punto de ebullición, a medida que se va descendiente en la columna de destilación incrementa la composición, en especial entre las etapas 4 y 7, consecuencia de la alimentación de la etapa 6, donde el componente principal es el butano con una composición $z_{F,6,butano} = 46.34\%$, después de esta alimentación desciende un poco y se estabiliza en la etapa número 9, donde hay otra alimentación con un $z_{F,9,butano} = 30.51\%$, no obstante, a medida que siguen incrementando las etapas encontraremos un incremento en las composiciones de las sustancias más pesadas, como pentano y hexano, provocando, en consecuencia, la disminución en la composición del butano. En general, para los otros dos extremos vemos que las composiciones del etano y propano disminuyen con el aumento de las etapas, mientras que las del pentano y

hexano son siempre crecientes, con un descenso en la pendiente en la etapa 9, producto de la alimentación en dicha etapa.

Por otro lado, en la figura 5 se puede ver cómo la composición del vapor es menor a la del líquido para el pentano y hexano, mientras que en el caso del etano la fracción del líquido es mayor y en el caso del propano a partir de la etapa 3 también se tiene una fracción del líquido mayor a la de vapor; este comportamiento se debe a los valores que adquiere el coeficiente de reparto (K) empleado para el equilibrio de fases, donde se puede observar que para el Pentano y Hexano este tiene un valor que oscila entre 0 y 1, mientras que para el etano y propano, por lo general, se encuentra por encima de la unidad. En el caso del butano, por debajo de la etapa 8 el coeficiente K es menor a 1, siendo la razón por la cual la composición de vapor es menor en estas etapas, pero por encima de estas la composición del vapor tiene un valor mayor.

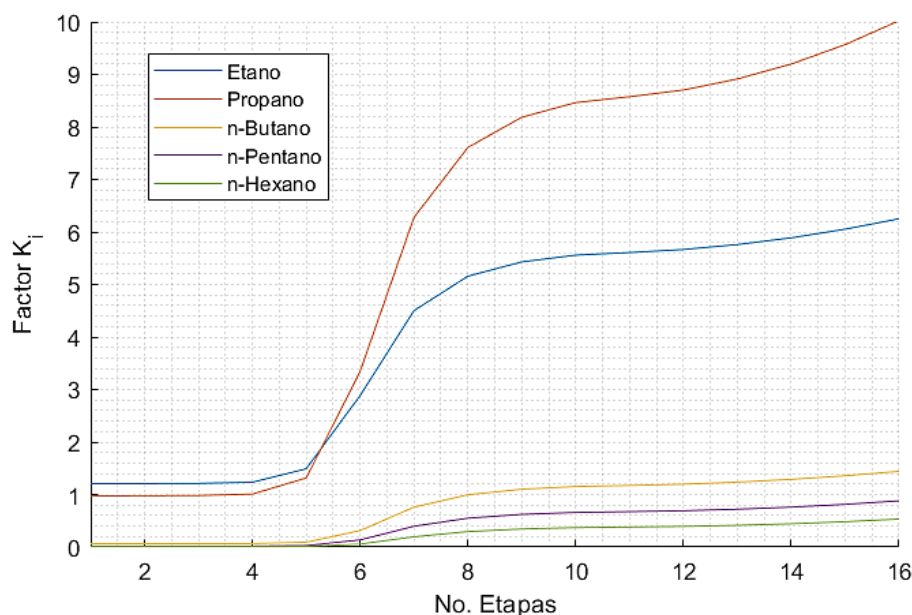


Figura 6. Coeficientes K a lo largo de la columna para cada componente.

Teniendo en cuenta que las composiciones serán $x_{i,j} = \frac{L_{i,j}}{L_j}$ y $y_{i,j} = \frac{V_{i,j}}{V_j}$, podemos construir las gráficas de los flujos molares de cada una de las sustancias. Como se puede observar en la figura 5 de los flujos de vapor, en la etapa 1 hay un descenso súbito como consecuencia del condensador parcial que disminuye el flujo de vapor recirculado del condensado, así mismo, en los flujos líquidos hay un descenso súbito en la etapa 16 provocado por el rehervidor, que evapora parte del flujo del líquido en dicha etapa. Además, se puede ver el cambio en pendiente visto en las gráficas de composición para el pentano y hexano, donde resulta evidente el incremento repentino del producto de la alimentación en la etapa 9 y el perfil cóncavo hacia abajo para el n-butano.

En la figura 7 de los flujos molares de cada sustancia, vemos que las salidas de líquido apenas perturban el perfil, debido a que los flujos que los productos intermedios líquidos retirados son muy bajos (3-6 lbmol/h) comparados con el flujo manejado en esas etapas (>50 lbmol/h), pero para el flujo de vapor, en especial para el de butano, se alcanza a ver un pequeño cambio producto de los producto intermedios de vapor de la etapa 13, dado a que este flujo de salida de vapor tiene una magnitud muy considerable.

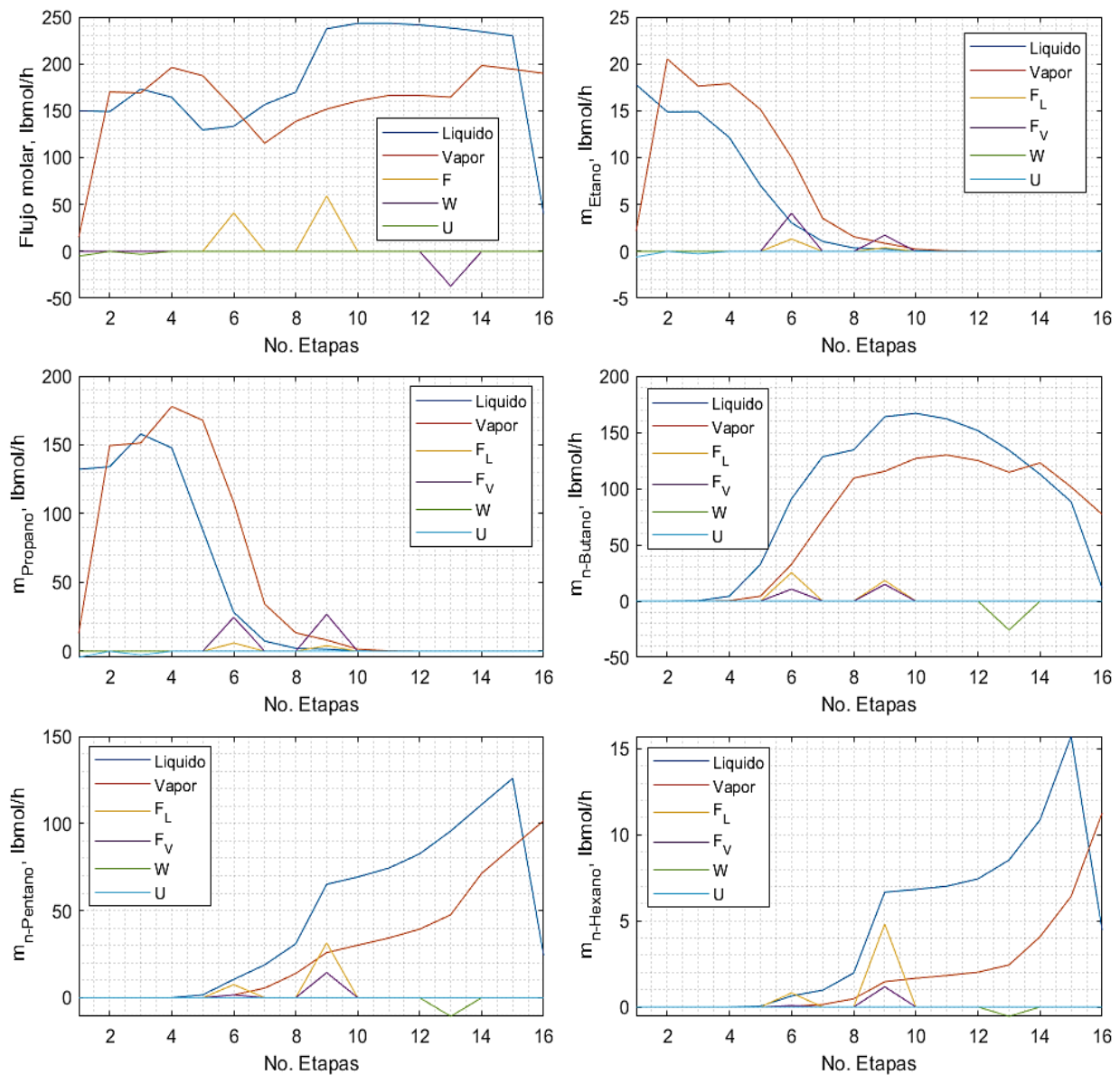


Figura 7. Composiciones a lo largo de la columna para cada componente cada corriente.

Temperaturas, entalpías y flujos de calor

El perfil de temperaturas se presenta como una curva suave de baja pendiente en los platos superiores y en los inferiores, pero con un gran cambio en la zona ubicada alrededor de las alimentaciones, ya que solo del plato 5 al plato 10 hay un salto de aproximadamente 210 °F.

La gráfica de la temperatura (Figura 8) presenta en general dos zonas con una caída de la temperatura relevante, una de ellas alrededor del plato 12 y otra, la mencionada anteriormente, ubicada alrededor de las corrientes de entrada.

La primera caída de la temperatura, la cual se da aproximadamente desde el plato 15 al 11 se debe, entre muchos otros factores, al flujo de salida W en el plato 13, ya que claramente este implica una salida de energía.

La segunda zona de caída de temperatura, la cual presenta el mayor cambio de esta variable está directamente relacionada con las corrientes de entrada, ya que estas, además de su condición de saturación cercana a líquido, generan un mayor flujo de masa alrededor de la zona, el cual también requiere ser calentado.

Por otro lado, en la parte inferior izquierda del gráfico de temperaturas se encuentra un comportamiento casi constante de la temperatura (etapas 4 a 1).

El gráfico derecho de la figura 8 representa la evolución del perfil de temperaturas con cada iteración. Aquí se puede notar una muy rápida convergencia al perfil de temperaturas final (gráfico izquierdo de la figura 8) a pesar de partir desde el perfil lineal planteado inicialmente.

Cabe resaltar que en este diagrama se consigna solo hasta la quinta iteración, aunque se usaron muchas más, esto se debe a que desde allí hasta la última iteración el cambio de las variables es muy pequeño y su ubicación en el diagrama complicaría la observación de los datos.

(Nota: para evitar confusiones se aclara que igualmente los datos reportados como definitivos sí usan los datos de la última iteración, puesto que son los que tienen el menor valor de error).

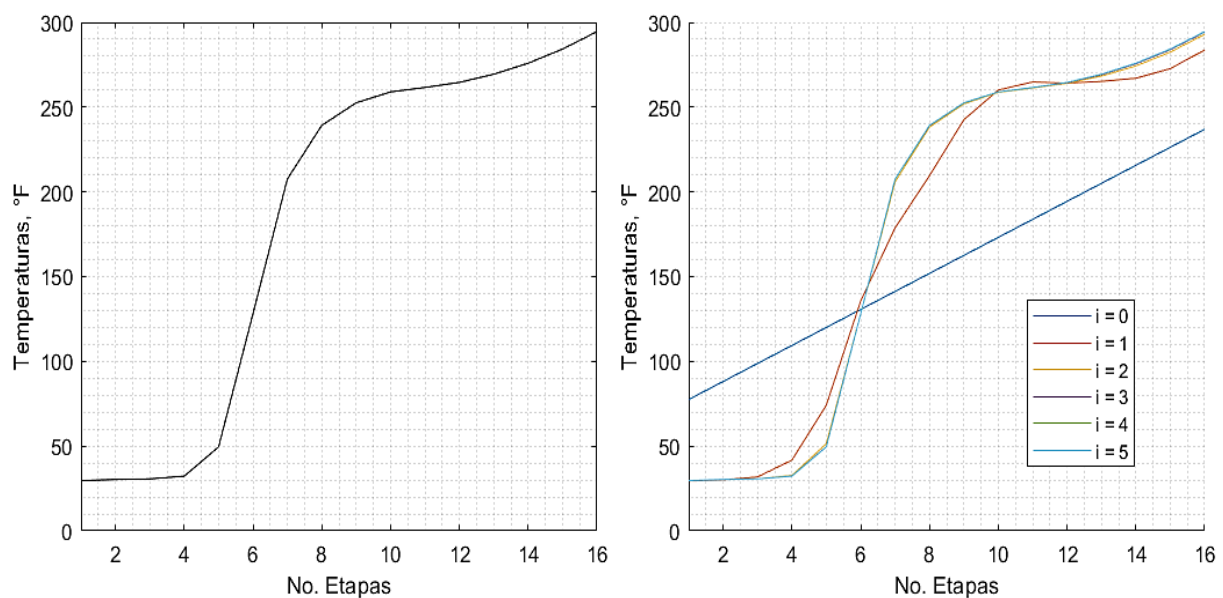


Figura 8. Perfil de temperaturas a lo largo de las etapas y su evolución con cada iteración.

Adicionalmente, en la figura 9 se presenta, en paralelo con la temperatura, el comportamiento de las entalpías del líquido y el vapor de salida de cada etapa, las cuales, tal como se esperaba y debido a su relación directa con la temperatura, tienen un comportamiento muy similar al perfil de temperaturas, siendo en cada caso mayor la entalpía del vapor.

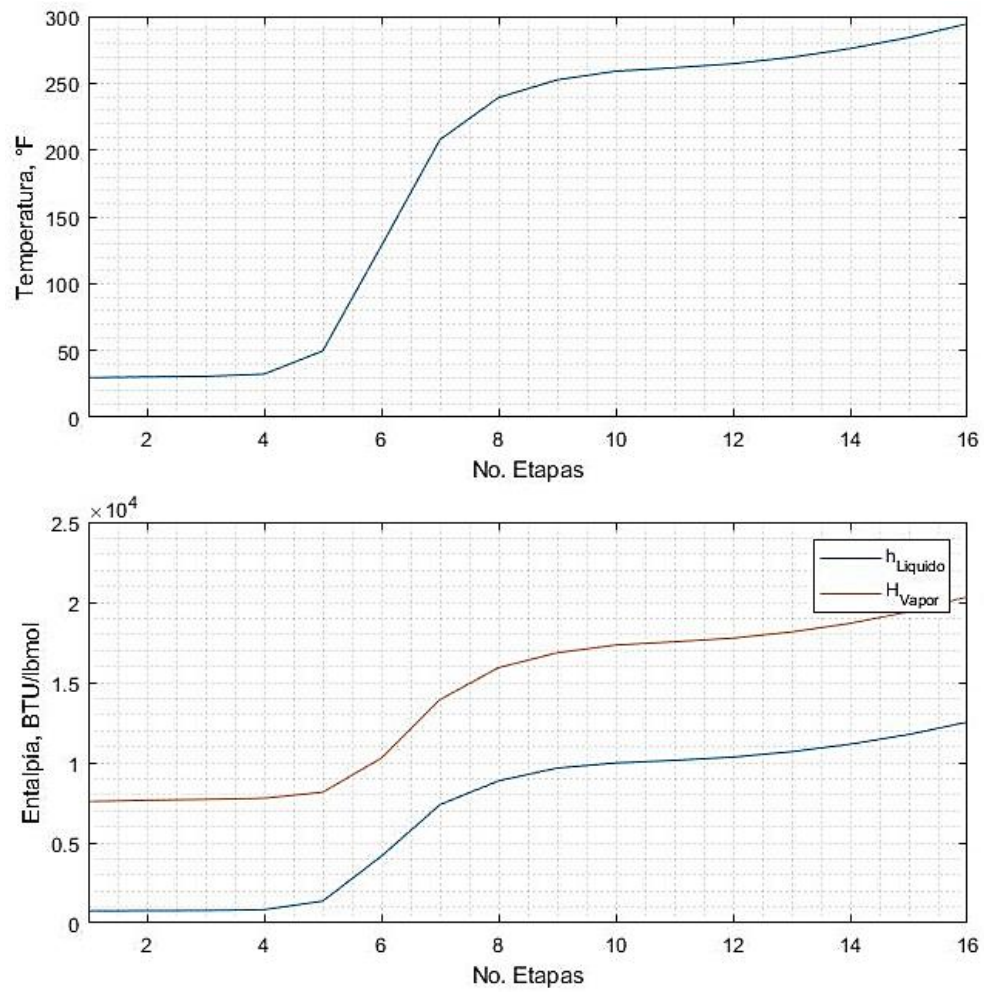


Figura 9. Perfiles de entalpía a lo largo de los platos.

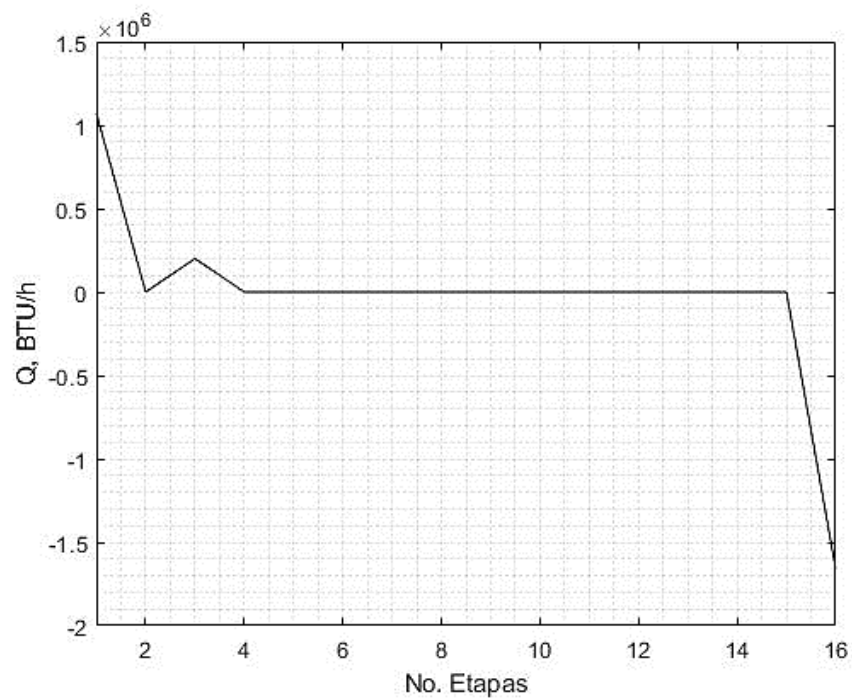


Figura 10. Flujos de calor por etapa.

En la figura 10 se presenta el comportamiento de los flujos de calor para cada etapa, los cuales, al ignorar las pérdidas, valen 0 para la mayoría de las etapas, exceptuando al rehervidor, condensador y el inter-enfriamiento de la etapa 3. Cabe destacar que estos valores están contabilizados como flujo de calor de salida de la etapa, por o que en el rehervidor se tiene un valor negativo. Para el rehervidor y condensador se encontró:

$$Q_1 = 1.0712 * 10^6 \text{ btu/h}$$

$$Q_{16} = -1.6608 * 10^6 \text{ btu/h}$$

Evolución del método y error

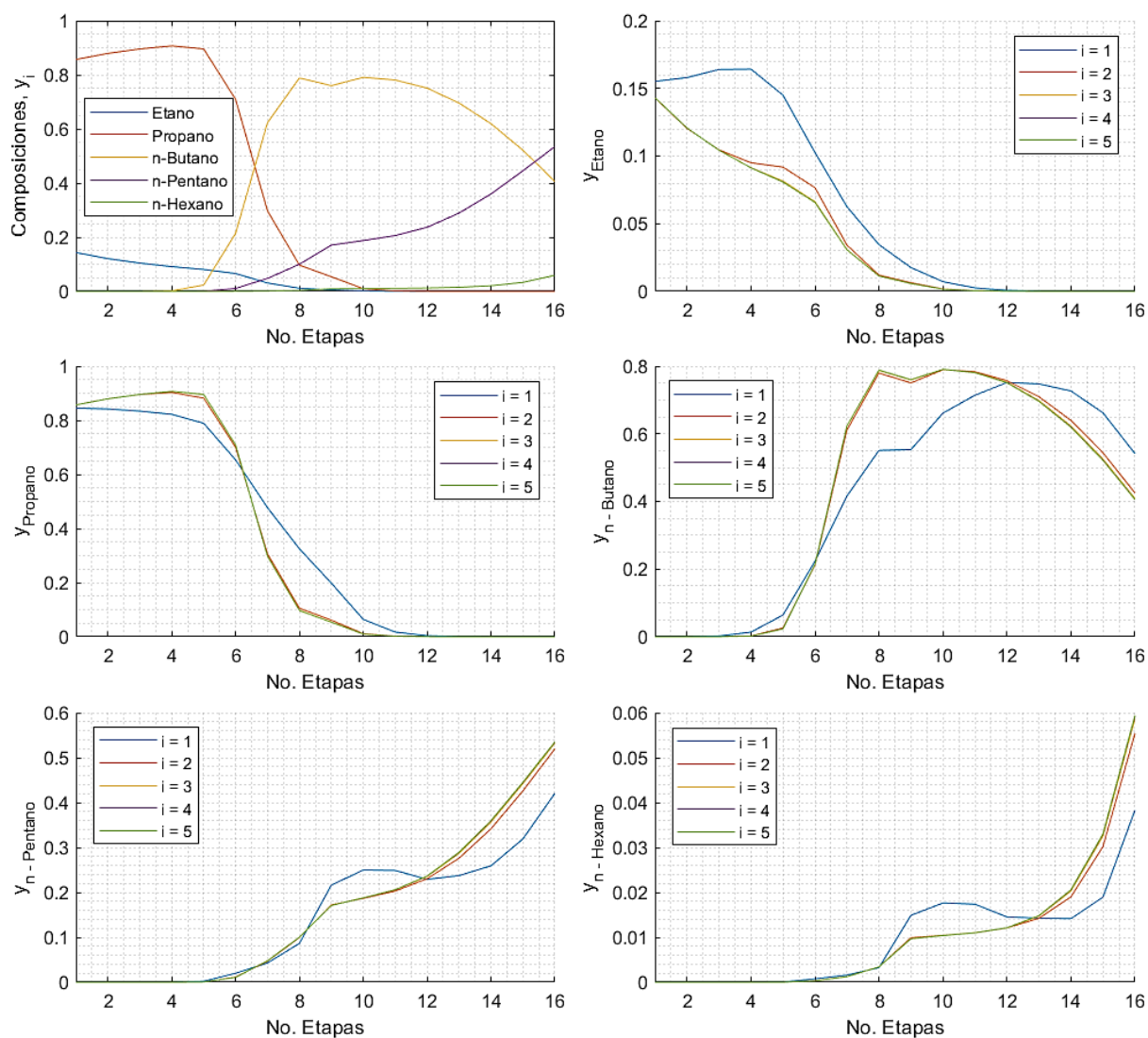


Figura 11. Evolución de la concentración en la fase de vapor con las iteraciones.

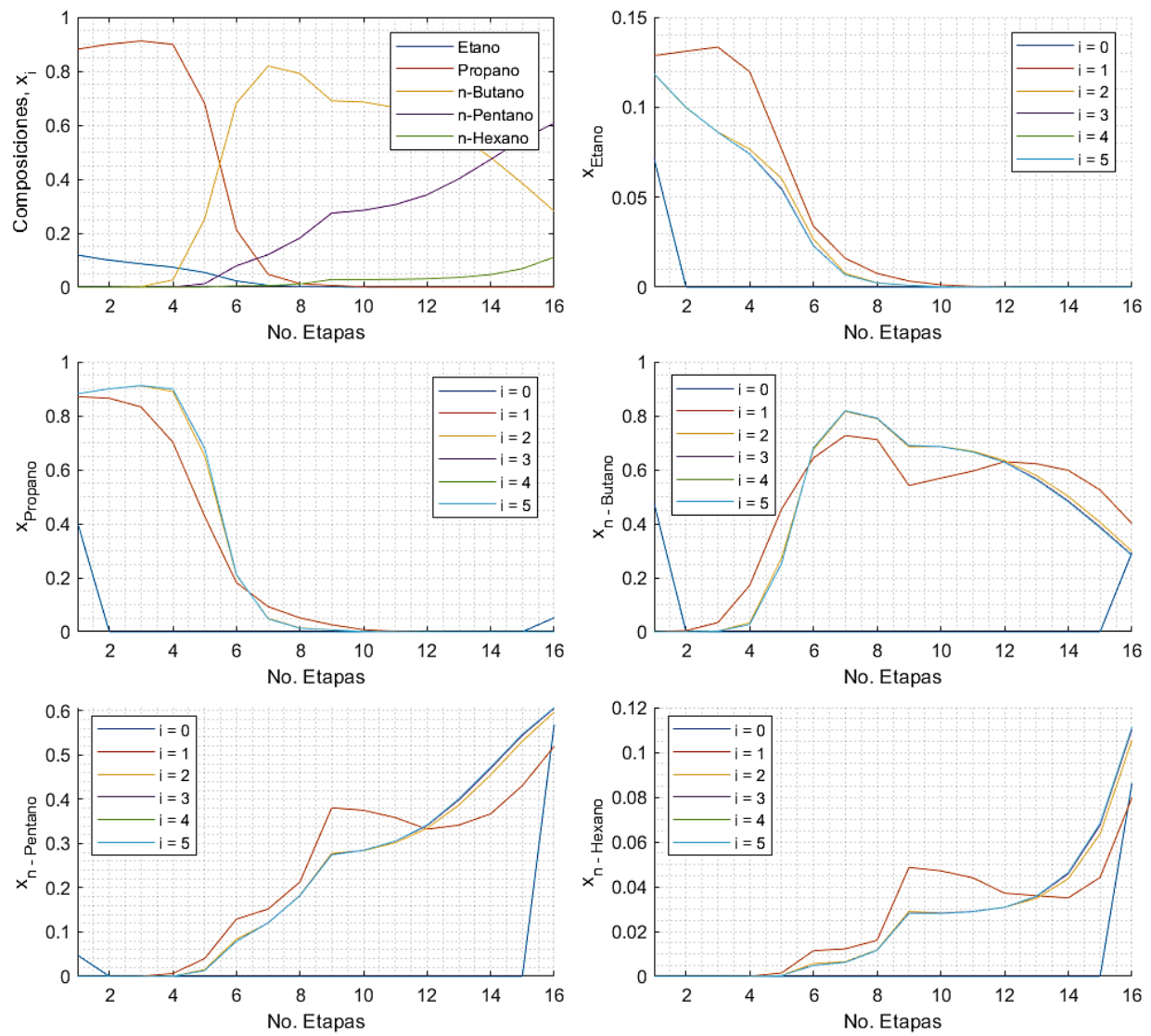


Figura 12. Evolución de la concentración en la fase líquida con las iteraciones.

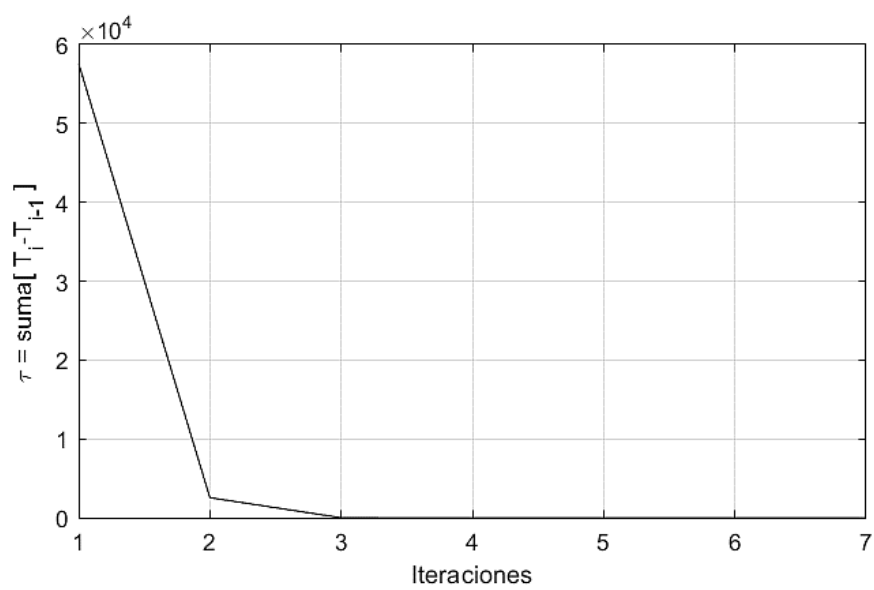


Figura 13. Evolución del error cuadrático con las iteraciones.

En la figura 11 se muestran los perfiles para cada uno de los componentes respecto a sus composiciones en los flujos de vapor dentro de la torre. Así mismo, la primera gráfica muestra el perfil de concentraciones en el gas para cada uno de los componentes una vez se han realizado todas las iteraciones, es decir, se ha llegado a la convergencia respecto al proceso. Este mismo concepto se aplica para la figura 12, sin embargo, estas son para la composición en el líquido. En cada una de las gráficas que muestran como cambia la composición a medida que aumentan las iteraciones, se puede observar que las variables en la primera iteración, las cuales se hacen a partir de datos asumidos inicialmente, son muy distintas de los datos finales, sin embargo, esto no significó un problema al momento de realizar el procedimiento, incluso si se observa el cambio de la iteración cero a la dos, se denota que los datos calculados son certeros, tanto que se puede decir que a partir de la iteración cinco los datos no cambian significativamente, por lo tanto, es un proceso bastante preciso si se tiene en cuenta la poca cantidad de iteraciones realizadas comparadas con su respectivo error, esto se demuestra en la figura 13, además de contar con un valor del error significativamente bajo en dicha iteración.

Cabe resaltar que los resultados obtenidos respecto a las composiciones, los cuales se muestran en las figuras 11 y 12, muestran que estos son acertados respecto a lo esperado, pues los compuestos con menor peso atómico, de los cuales se espera mayor volatilidad poseen mayores composiciones respecto a las etapas ubicadas en la cima de la torre, lo mismo sucede en una mayor composición de los componentes con menor volatilidad ubicados en la base de esta, pues a medida que se baja en la columna se deben encontrar los compuestos más pesados.

Conclusiones

Como se pudo observar, el método converge rápidamente, al cabo de 3 iteraciones la diferencia de los resultados entre las iteraciones era prácticamente nula, de hecho, con la primera iteración la función de error se reduce en ~ 50000 unidades, pasando un valor de $\tau = 57580$ a $\tau = 2558.89$, siendo evidencia de la eficiencia del algoritmo de cálculo. Sin embargo, se cree que el parámetro τ , utilizado para detener las iteraciones, no garantiza el hecho de que los datos calculados sean realmente correctos. Esto debido a que no se cuentan con datos experimentales o similares a estos que puedan corroborar el procedimiento realizado. Por otro lado, si bien el método está basado en los balances de materia y energía, se piensa que pueden haber otras formas de obtener dichos datos, se recomendaría realizar estos cálculos por medio de programas o simuladores que estén enfocados en solucionar este tipo de problemas, los cuales se espera tengan más herramientas, y por lo tanto, una mayor confianza al momento de obtener resultados los cuales se usen para casos aplicados a la vida real, como por ejemplos el diseño u optimización de una torre, todo esto con el fin de evitar posibles errores. A pesar de lo señalado, se ha encontrado un método bastante eficiente para la solución de columnas complejas.

Referencias

Green, D. W. (2019). Perry's chemical engineers' handbook. McGraw-Hill Education.

Mark L. McWilliams, Charleston, W.Va. (1973). An equation to relate k-factors to pressure and temperature.