

RESUMEN

Para el diseño de columnas de destilación se utilizan diferentes métodos de cálculo basados en estimaciones aproximadas o en resolución del conjunto de ecuaciones que describe al sistema. Se planteó como objetivo implementar diversos métodos de resolución de torres de destilación, entre los cuales se escogieron los de: Fenske, Underwood y Gilliland (FUG), Hengstebeck, Lewis y Matheson, punto de burbuja de Wang y Henke y Newton Raphson. El lenguaje de programación seleccionado fue MATLAB®. Se utilizó programación orientada a objetos con el propósito de diseñar un programa modular y funcional, de código reutilizable y de encapsulamiento robusto para prevenir la diseminación de los errores de programación. Se desarrolló una interfaz gráfica de usuario amigable. Los resultados se validaron comparando los perfiles de temperaturas, composiciones y flujos molares de vapores y líquidos entre ambos métodos rigurosos, y además con el programa comercial PRO/II®. El método de Newton Raphson arrojó diferencias con el simulador inferiores al 2% en flujos de vapor, líquido y perfil de temperaturas en la columna, siendo los casos de ejemplo mezclas de hidrocarburos de 3 y de 5 componentes, modeladas con la ecuación cúbica de Peng y Robinson. El método de punto de burbuja tuvo buena correspondencia en el perfil de temperaturas, con errores menores al 1%, y en los flujos molares en la zona de rectificación, con errores menores al 2% con respecto a Newton-Raphson, sin embargo presentó desviaciones en los flujos de vapor y de líquido en las etapas de la zona de despojo en un rango de 10-20% y hasta un máximo de discrepancia de 33% en el flujo de líquido de una etapa teórica.

Palabras clave: Simulación, destilación muticomponente, rigurosos, cortos, Newton Raphson, Punto de burbuja, FUG, Hengstebeck, Lewis y Matheson.

INTRODUCCIÓN

La destilación es uno de los procesos de separación más antiguos con variadas aplicaciones a nivel industrial.

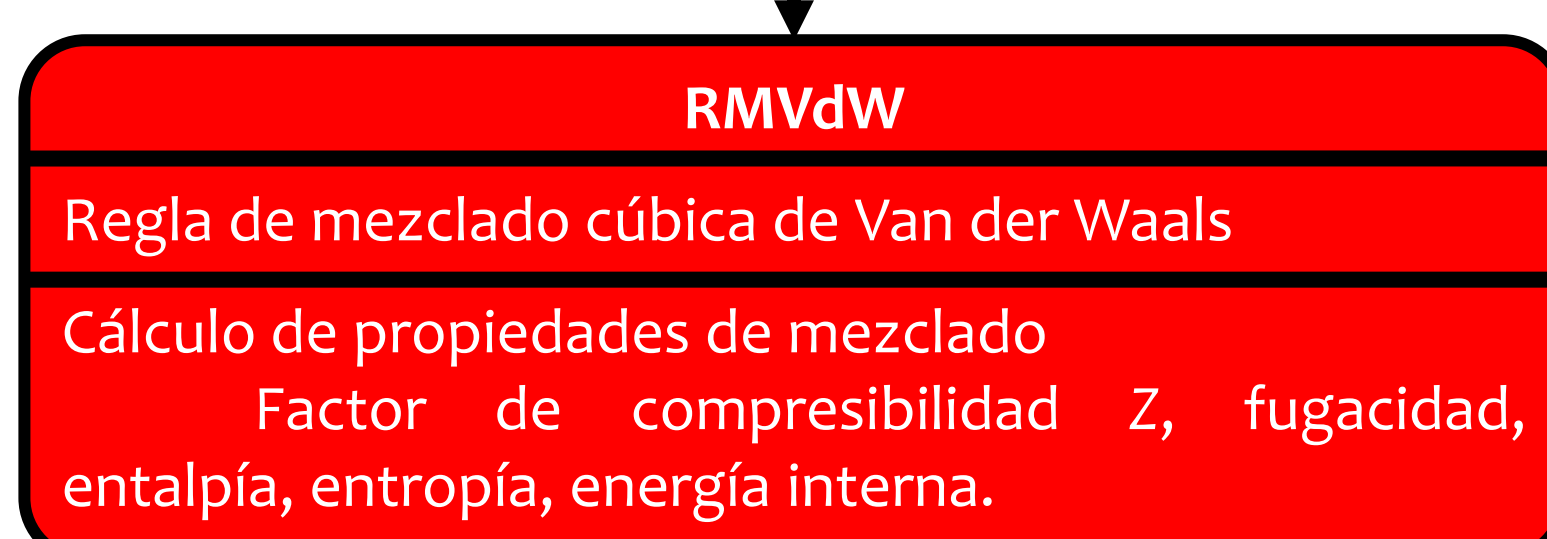
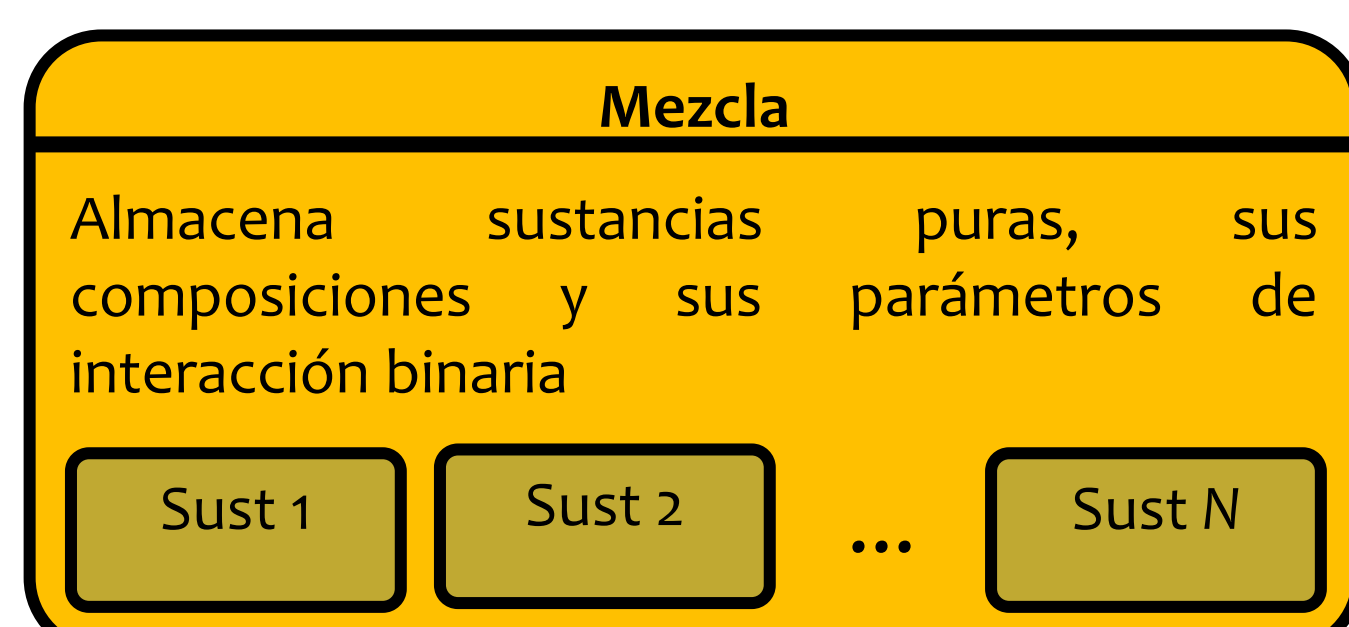
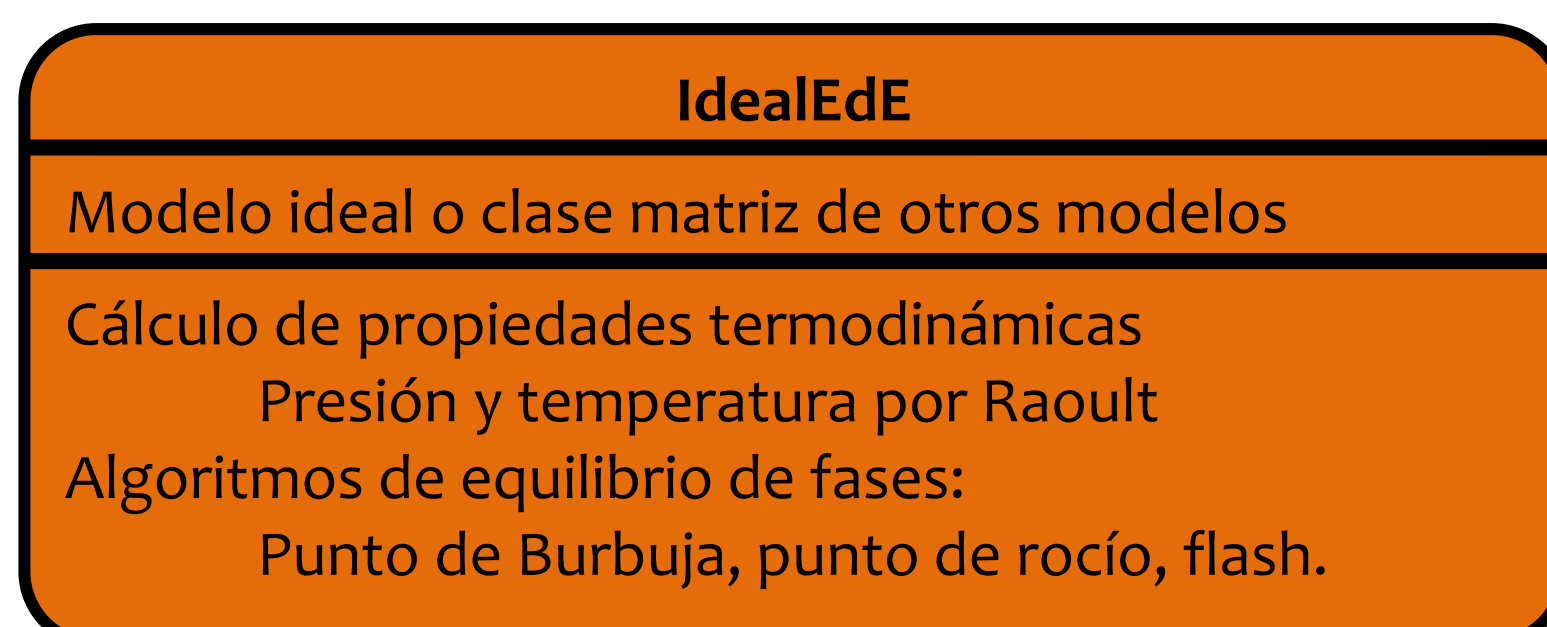
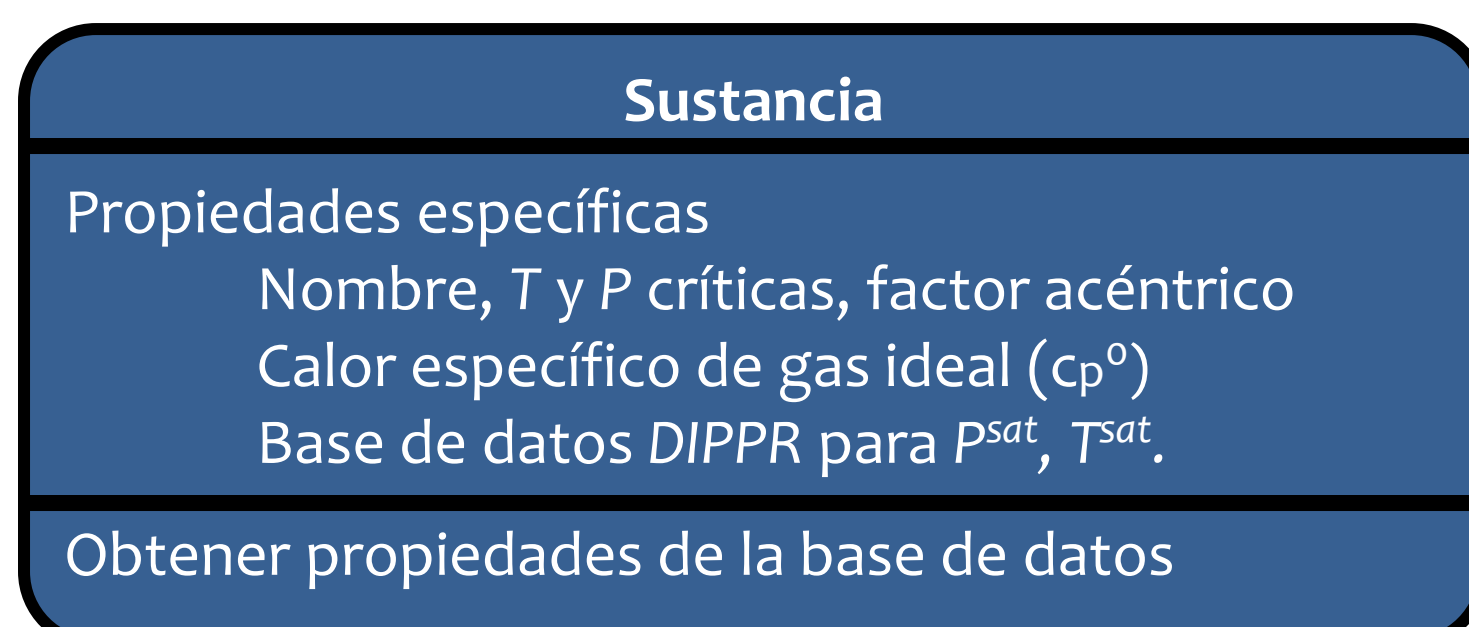
Los primeros cálculos para el diseño de destiladores partieron de simplificaciones de las relaciones de equilibrio, como los métodos gráficos y cortos. Con el álgebra computacional se pudo incrementar la cantidad de ecuaciones resueltas, favoreciendo el planteamiento de métodos de resolución para todas las etapas teóricas de las ecuaciones de balances de masa (M), condición de equilibrio (E), restricción de suma (S) de fracciones molares, así como también calor (H) intercambiado en el balance de energía, las cuales son llamadas MESH (por sus siglas en inglés).

La demanda de la industria por métodos rigurosos es cubierta por algunos simuladores comerciales, por lo que el costo de las licencias de uso es elevado y se restringe el acceso del usuario a la lógica interna del programa para la manipulación, adaptación o mejora de los algoritmos utilizados.

El simulador sólo implementa modelos de predicción del equilibrio de fase y algoritmos de convergencia, disponibles en la literatura. Por lo tanto, la simulación computacional de procesos de destilación por métodos cortos y rigurosos es un área hacia la cual la academia puede trabajar para proveer herramientas alternativas a las comerciales.

METODOLOGÍA

Programación orientada a objetos (POO). Ofrece ventajas como encapsulamiento, facilidad de mejora continua y de reuso de código. Se usaron las estructuras *classdef* implementadas nativamente en MATLAB.



Métodos cortos y gráficos

Hengstebeck: Extensión multicomponente de McCabe-Thiele

Fenske, Underwood y Gilliland (FUG):

Cálculo N_{min} , R_{min} , distribución.

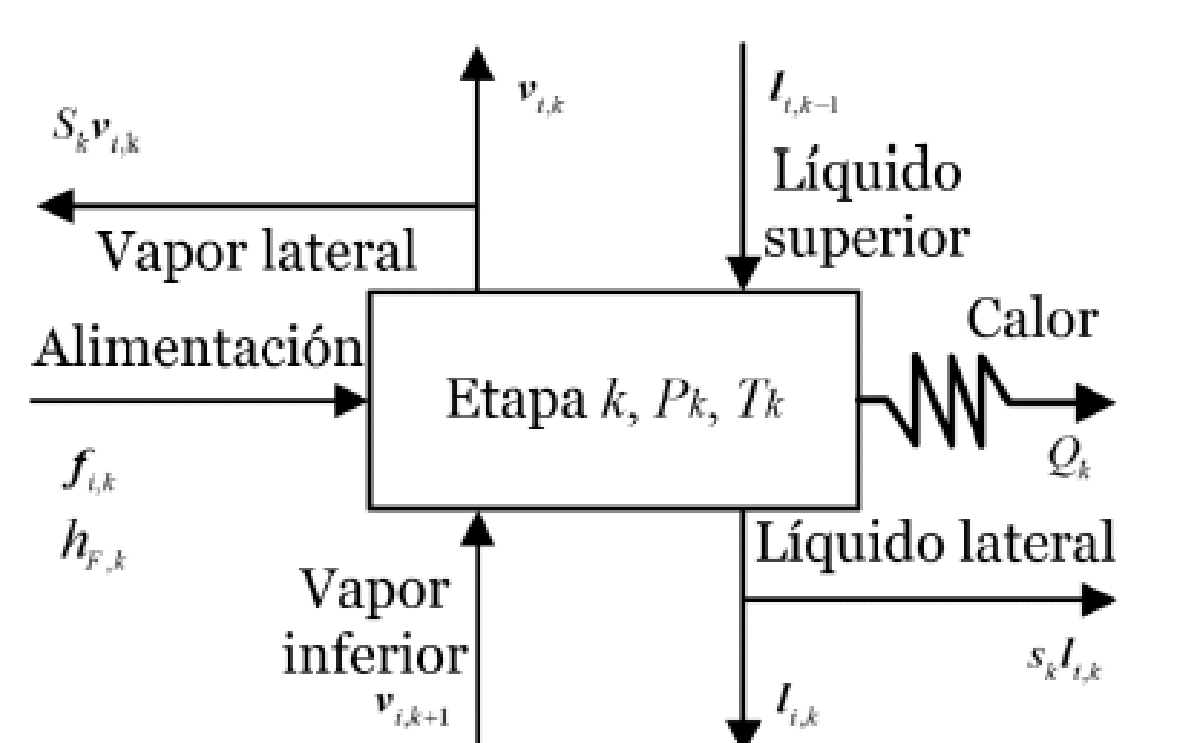
Correlación de Smoker, Jafarey.

Método semiriguroso de Lewis y Matheson

Métodos Rigurosos

Punto de burbuja de Wang y Henke

Newton Raphson de Naphtali y Sandholm



RESULTADOS

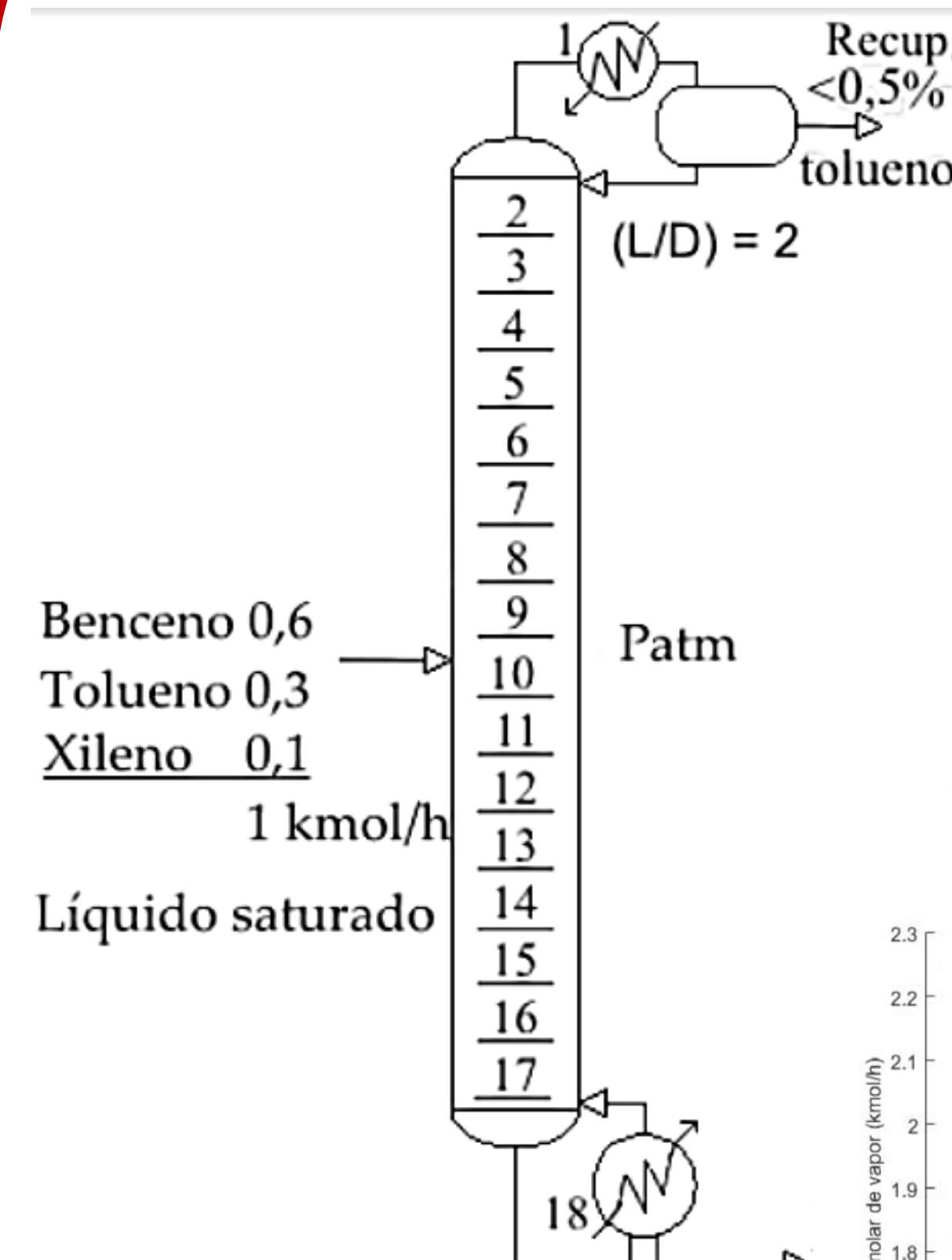


Figura 1. Ejemplo.

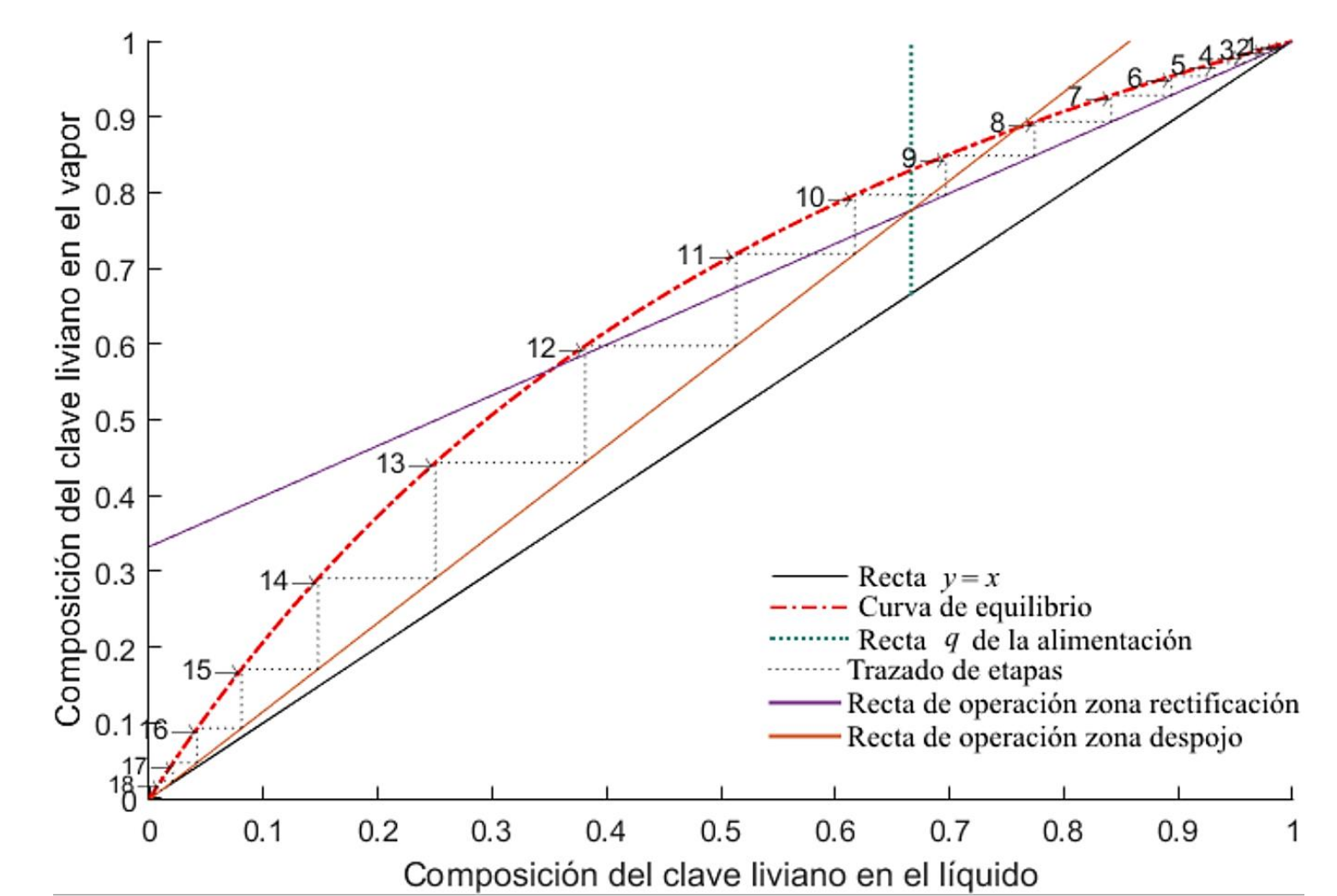


Figura 2. Solución por método de Hengstebeck

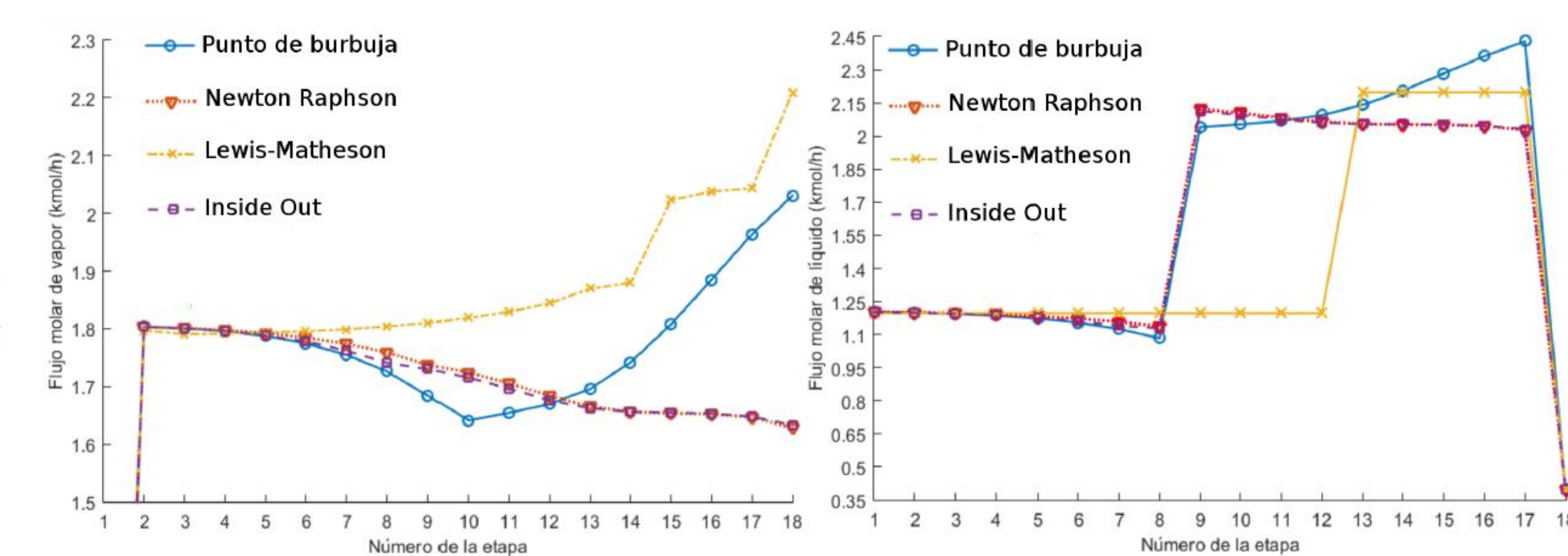


Figura 3. Flujo molar de vapor (izq) y líquido (der).

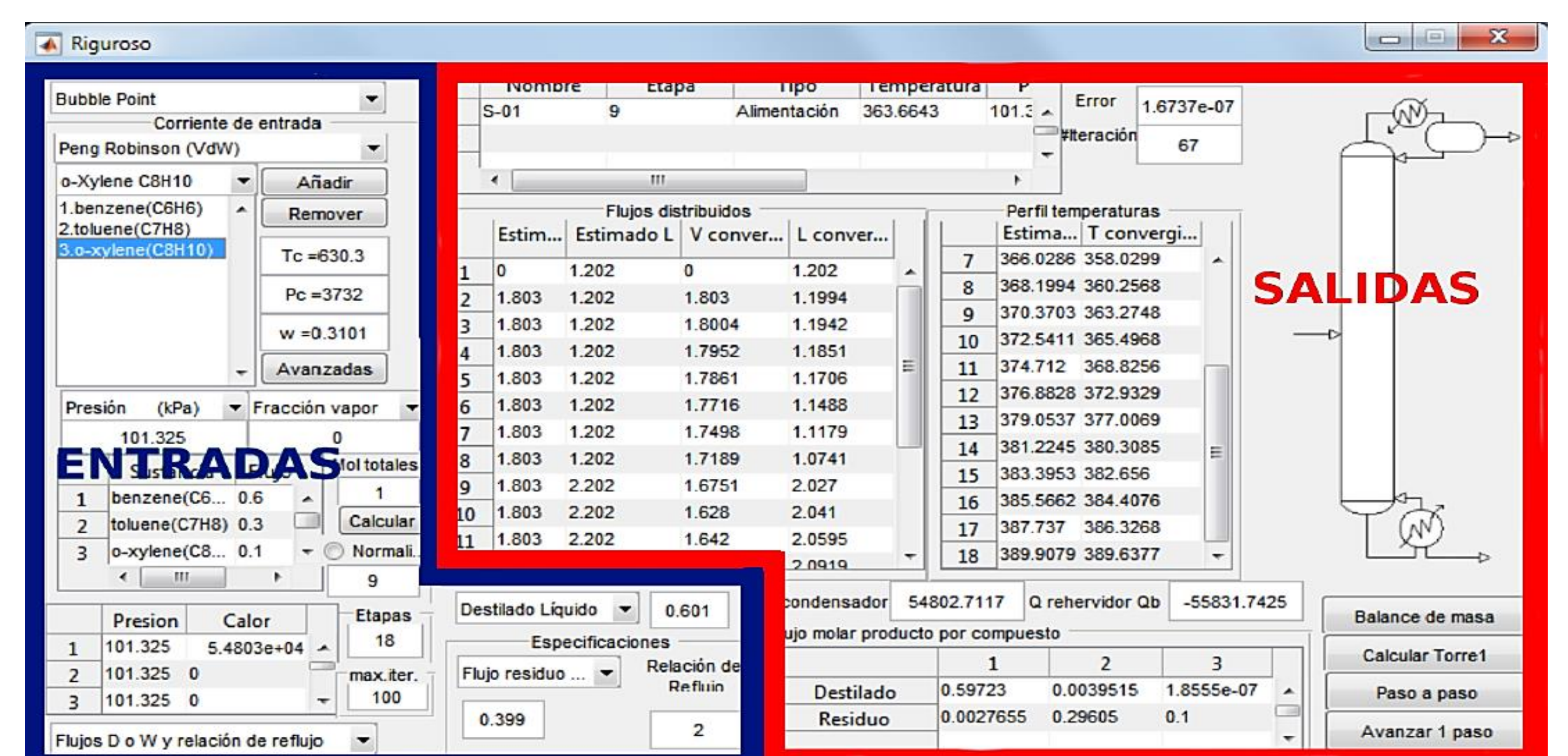


Figura 4. Interfaz gráfica de usuario.

CONCLUSIONES

- Se programaron cinco modelos para simular destilación: FUG (cortos), Hengstebeck, Lewis-Matheson, Punto de Burbuja (PB) y Newton-Raphson (NR).
- Se implementó un modelo termodinámico basado en tres ecuaciones cúbicas, Soave, Peng Robinson y Gasem et al. Su diseño genérico y modular facilita extenderlo a otras.
- Se integró una interfaz gráfica de usuario para brindar facilidad de uso.
- Se compararon los resultados de Punto de Burbuja y Newton Raphson con los obtenidos usando PRO/II®.

Tabla 1. Errores típicos y máximos para los métodos de cálculo

| Modelo | Desviación Típica Zona rectificación | Desviación Típica Zona despojo | Desviación máxima |
|----------------|--------------------------------------|--------------------------------|-------------------|
| Lewis-Matheson | 1 - 4 % | 10 - 15% | 50% |
| PB | 1 - 2 % | 4 - 10% | 33% |
| NR | 0,5 - 1 % | 0,5 - 1 % | 2 % |

REFERENCIAS

- Hengstebeck, R. (1961). Distillation: principles and design procedures. Reinhold Publishing.
- Naphtali, L. y Sandholm, D. (1971). AIChE J., 17 (1), 148
- Shiras, R. (1950). Industrial and Engineering Chemistry, 42 (5), 871.
- Treybal, R. (1988). Operaciones de transferencia de masa. 2da. edición. McGraw-Hill.
- Wang, J. y Henke, G. (1966). Hydrocarbon Processing, 45 (8), 156.