

DESARROLLO DE UN ALGORITMO EN MATLAB PARA EL DISEÑO DE COLUMNAS DE DESTILACIÓN POR EL MÉTODO DE FENSKE-UNDERWOOD-GILLILAND

Cecilia García García¹ y María del Refugio González Ponce²

RESUMEN

En este trabajo se presenta el desarrollo de un algoritmo en Matlab® para el diseño de columnas de destilación multicomponente utilizando el método corto de Fenske-Underwood-Gilliland. El algoritmo desarrollado contiene una base de datos de 176 componentes y permite el cálculo de variables de diseño como son; el número mínimo y teórico de platos, reflujo mínimo y plato de alimentación así como la distribución de los componentes clave y no clave en el domo y fondo de la torre para una mezcla multicomponente. Para demostrar la confiabilidad del uso del algoritmo se compararon los resultados obtenidos en la simulación de una destilación multicomponente con los reportados en la literatura y el software comercial Aspen Hysys®.

PALABRAS CLAVE Método Corto, Mezcla multicomponente, FUG

INTRODUCCIÓN

La destilación es un método común para la separación de mezclas líquidas con dos o más componentes y es una de las operaciones unitarias más importantes en la industria química (Luyben, 1996) lo que ha llevado al desarrollo de diversas herramientas que faciliten el diseño de torres de destilación. Para analizar o diseñar una torre de destilación existen varios métodos, y se clasifican en métodos gráficos, cortos y rigurosos. A diferencia de los métodos rigurosos que consideran la dinámica completa de la columna, los métodos cortos son modelos matemáticos que predicen el comportamiento del proceso considerando la menor cantidad de ecuaciones, generalmente realizando un balance global de materia y los balances parciales en el fondo de la columna (Narváez, 2013). Los métodos cortos son utilizados para el diseño de la torres de destilación al permitir la obtención de condiciones límite del proceso (número mínimo de etapas y

¹ Estudiante de Ingeniería Bioquímica en el Instituto Tecnológico Superior de Irapuato. Carretera Irapuato-Silao, km. 12.5 C.P: 36821, Guanajuato, Irapuato. Teléfono: (46) 2606-7900

² Docente del Instituto Tecnológico Superior de Irapuato, Carretera Irapuato-Silao, Km 12.5, C.P: 36821, Guanajuato, Irapuato, Teléfono: (46) 2606-7900; Fax: 2606-7900, Ext. 141; refugio.gonzalez@itesi.edu.mx

relación de reflujo mínima), son muy sencillos de aplicar y por lo consiguiente son de utilidad en los procesos de enseñanza-aprendizaje. Además nos permiten obtener de forma rápida valores iniciales para los procesos de optimización matemática donde la complejidad de los métodos requieren datos muy cercanos a la solución (Narváez, 2013). El método corto de diseño más utilizado es el Fenske-Underwood-Gilliland (FUG). Éste supone volatilidades relativas, flujos molares constantes en la torre, pérdidas de calor despreciables, entre otras cosas. Para alimentaciones de mezclas multicomponentes, es necesario la especificación de dos componentes clave, su distribución en el fondo y en el domo de la torre, relación de reflujo y el perfil de presiones de la torre (Figueroa, 2006). En este trabajo se utilizó el método corto de Fenske-Underwood Gilliland como herramienta de diseño de torres de destilación.

Métodos y materiales

Método de Fenske-Underwood-Gilliland (FUG)

El método de FUG está basado en cuatro ecuaciones, las cuales predicen parámetros de diseño de la columna, como lo son: la distribución de las componentes claves en el fondo y el domo de la columna, la relación de reflujo de la columna y el plato de alimentación (Toro, 2013).

La ecuación de Fenske mostrada en la ecuación 1) nos permite una rápida estimación del número mínimo de etapas de equilibrio para una separación especificada entre dos componentes clave de una mezcla multicomponente. Esta ecuación considera volatilidad relativa constante y operación de la columna en la que no se introduce más alimentación y sin retirar producto del domo o fondo de la columna.

$$N_{min} = \frac{\log\left(\frac{D_{LK}}{D_{HK}} * \frac{B_{HK}}{B_{LK}}\right)}{\log \alpha_m} \quad (1)$$

donde D_{LK} , B_{LK} , D_{HK} y B_{HK} representan los flujos molares en el destilado y fondos de los componentes clave ligero y pesado respectivamente, N_{min} el número mínimo de platos de Fenske y α_m la volatilidad relativa media en la columna.

La ecuación de Underwood nos permite determinar el reflujo mínimo, que sirve como condición límite para conocer a partir de qué valor de reflujo se puede operar la columna (Toro, 2013). Para obtener el reflujo mínimo, fue necesario resolver de manera simultánea las ecuaciones 2) y 3).

$$\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_{i,F} * z_i}{\alpha_{i,F} - \theta} = 1 - q \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^n \frac{\alpha_{i,F} * y_i}{\alpha_{i,F} - \theta} = 1 + R_{min} \quad (3)$$

donde $\alpha_{i,F}$ representa la volatilidad relativa en la alimentación, y_i y Z_i la composición en el destilado y alimentación respectivamente, θ la raíz común de las ecuaciones, n el número de componentes, R_{min} el reflujo mínimo y q la condición térmica de alimentación. Para resolver las ecuaciones anteriores se usó el método numérico de Newton Rapshon.

La ecuación empírica de Gilliland mostrada en la ecuación 4) nos permite calcular el número de etapas ideales para un reflujo real, ya que para alcanzar una separación especificada entre dos componentes clave, tanto la relación de reflujo, como el número de etapas teóricas tienen que ser superior a sus valores mínimos.

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54.4X}{11 + 117.2X} \right) \left(\frac{X - 1}{X^{0.5}} \right) \right] \quad (4)$$

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad (5)$$

En la ecuación 4) y 5) N representa el número de etapas ideales para llevar a cabo la separación y R la relación de reflujo externa.

El valor óptimo de la relación de reflujo R/R_{min} es aproximadamente 1.05. En la práctica cuando se requieren pocas etapas se diseñan para un valor de R/R_{min} de 1.50, si se desea un alto número de etapas se toma de 1.10 y para casos intermedios es comúnmente utilizado como 1.30.

Para determinar la localización del plato de alimentación se utilizó la ecuación empírica de Kirkbride mostrada en la ecuación 6).

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\left(\frac{Z_{HK}}{Z_{LK}} \right) \left(\frac{x_{LK}}{y_{HK}} \right)^2 \left(\frac{B}{D} \right) \right]^{0.206} \quad (6)$$

donde N_R y N_S son las etapas de equilibrio de la sección de rectificación y agotamiento respectivamente, D y B los flujos molares tanto del destilado como fondo y Z_{HK} , Z_{LK} , Y_{HK} y X_{LK} son las composiciones en la alimentación, destilado y fondo de los componentes clave.

Ecuaciones de Balance

Con la finalidad de determinar la distribución de los componentes tanto en el fondo como en el destilado de la torre de destilación y con ello determinar las temperaturas de burbuja y rocío fue necesario resolver los balances de materia que consisten del balance general y balances por componentes mostrados en las ecuaciones 7) y 8). Donde F se refiere al flujo de alimentación.

$$F = D + B \quad (7)$$

$$F * Z_i = D * Y_i + B * X_i \quad (8)$$

Además es necesario tomar en cuenta la fracción de recuperación del componente clave ligero en el destilado (f_{LK}) y del clave pesado en el fondo (f_{HK}) para completar el sistema de ecuaciones. Obteniendo así las ecuaciones 9) y 10).

$$F * Z_{LK} * F_{LK} = D * Y_{LK} \quad (9)$$

$$F * Z_{HK} * F_{HK} = B * X_{HK} \quad (10)$$

Algoritmo de solución en Matlab®

En la figura 1 se muestra el algoritmo desarrollado en Matlab® para el diseño de columnas de destilación de mezclas multicomponentes por el método FUG. El cuál contiene una base de datos de 176 componentes y permite el cálculo de variables de diseño como son; el número mínimo y teórico de platos, reflujo mínimo y plato de alimentación así como la distribución de los componentes clave y no clave en el domo y fondo de la torre para una mezcla multicomponentes.

Implementación de algoritmo de diseño

Una vez desarrollado el algoritmo de diseño, se deben realizar diversas simulaciones para conocer la efectividad del método. Los datos de entrada y salida del algoritmo se presentan en la tabla 1.

Tabla 1. Variables de entrada y salida del algoritmo de Diseño

VARIABLES DE ENTRADA			
NOMBRE	DESCRIPCIÓN	NOMBRE	DESCRIPCIÓN
n	Número de componentes	f_{LK}	Fracción de recuperación en el domo
Com	Tipo de componentes a separar	f_{HK}	Fracción de recuperación en el fondo
F	Flujo molar de alimentación	LK	Componente clave ligero
Z	Composición molar de alimentación	HK	Componente clave pesado
P	Presión de operación		
VARIABLES DE SALIDA			
NOMBRE	DESCRIPCIÓN	NOMBRE	DESCRIPCIÓN
Tr	Temperatura de rocío	N	Número de platos teóricos
Tb	Temperatura de burbuja	N_R	Etapas de la sección de rectificación
N_{min}	Número mínimo de platos	N_s	Etapas de la sección de agotamiento
R_{min}	Reflujo mínimo		

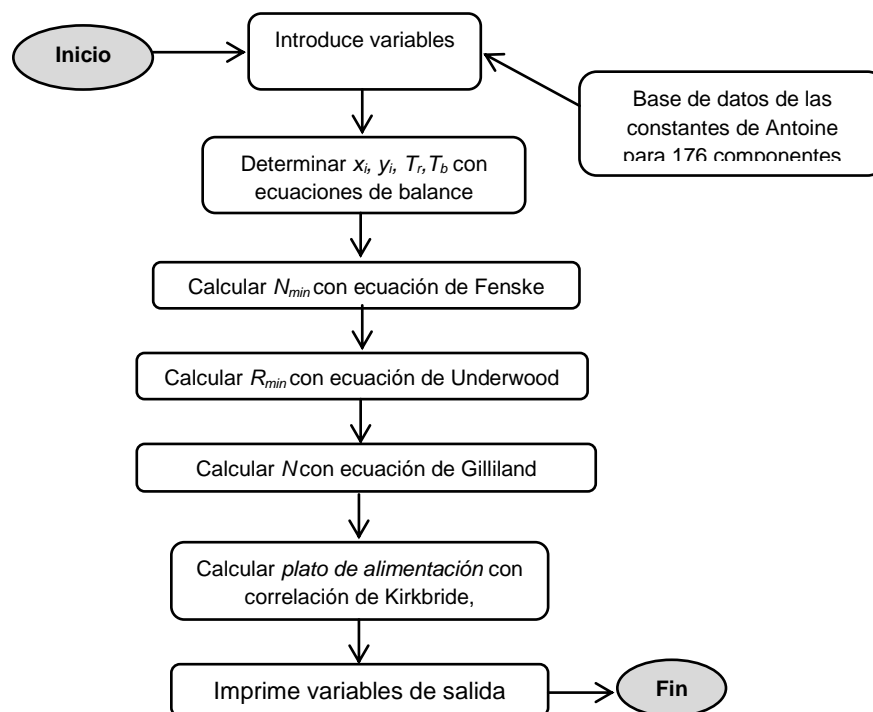


Figura 1. Algoritmo de solución del método FUG

RESULTADOS

Para comprobar la confiabilidad del algoritmo propuesto se llevó a cabo una simulación para una mezcla multicomponentes a condiciones de 80 psi y 82.2 °C, con f_{LK} y f_{HK} de 98.66 y 63.88 % respectivamente. Las condiciones de alimentación se consideraron como F de 876.3 kmol/h y composición molar (Z_i) de Isobutano 0.0137, n-butano, 0.5112, Isopentano 0.0411, n-pentano 0.0171, n-hexano 0.0262, n-heptano 0.0446, n-octano 0.3106 y n-nonano 0.0354 (Henley & Seader, 2000). Los resultados obtenidos fueron comparados con los reportados en Henley & Seader, 2000, (ver Tabla 2)

Tabla 2. Comparación de resultados del algoritmo de MATLAB® con la literatura

Variables de Salida	Algoritmo de diseño Matlab®	Henley & Seader, 2000
N_{min}	6.23	8.88
N	17.60	17.85
N_R	5.42	5.63
N_s	12.10	12.64
D	466.98	467.8
B	409.32	408.5

También se realizó una comparación de resultados del algoritmo de diseño con resultados reportados para el software Aspen-Hysys®. Para ello se llevó a cabo la simulación de una mezcla equimolar de Etanol y n-Propanol a condiciones de 24.85 °C y 1 atm, con f_{LK} y f_{HK} de 93 y 95 % respectivamente. Los resultados se muestran en la tabla 3.

Tabla 3. Comparación de resultados del algoritmo de MATLAB con los reportados para Aspen-Hysys®

Variables de Salida	Algoritmo de diseño Matlab®	Aspen Hysys®
Tr (°C)	79.65	78.82
Tb (°C)	95.34	95.12
N_{min}	7.63	7.69
N	14.32	14.261
N_R	7.63	7.657
N_s	6.55	-----
D	49	48.86
B	51	51.14

CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó un algoritmo de diseño de columnas de destilación por el método FUG en el software de Matlab®, la confiabilidad de su implementación se demostró con algunas simulaciones de destilación de mezclas, en las cuales los resultados obtenidos se han comparado con los reportados tanto en la literatura como con un software comercial teniendo porcentajes de error bajos. Los resultados mostraron que la implementación propuesta nos permite el cálculo de variables de diseño preliminares para torres de destilación de mezclas tanto binarias como multicomponentes. Además el algoritmo desarrollado le brinda al estudiante la posibilidad de ejecutar complicados cálculos del campo de la destilación en cuestión de segundos, lo cual le permite realizar análisis de variables de diseño y hacer evaluaciones críticas de los resultados obtenidos facilitando la comprensión de los procesos.

REFERENCIAS

- ACEDO, J. (2006). Instrumentación y Control Avanzado de Procesos. España: Díaz de Santos.
- BEQUETTE, B. (2012). Process Dynamics: Modeling, analysis and simulation. Canada: Prentice Hall.
- BOCÁYA, L. A. (2008). "Destilación". VirtualPro, 5.
- FIGUEROA, J. (2006). "Método de Diseño de Columnas Complejas Térmicamente Acopladas". Cholula, Puebla.
- HENLEY, J., & Seader, J. (2000). Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química. México: Reverté.
- JIMÉNEZ, A. (2003). Diseño de Procesos en Ingeniería Química. España: Editorial Reverté.
- LUYBEN, W. (1996). Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers. McGraw Hill International Editions.
- NARVÁEZ, A. (2013). "Método Corto para la Destilación Discontinua Multicomponente Considerando una Política de Reflujo Variable". Revista Mexicana de Ingeniería Química, Vol. 12.
- TORO, L. A. (2013). Métodos Matemáticos Avanzados para la Modelación y Simulación de Equipos para Procesos Químicos y Biotecnológicos. Colombia: Universidad Nacional de Colombia.