

C4

## MODELADO Y SIMULACIÓN DINÁMICA EN ECOSIMPRO DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN DE ETANOL DE LA INDUSTRIA AZUCARERA.

Rueda Ferreiro, Almudena.

Centro de Tecnología Azucarera. Universidad de Valladolid.

C/ Real de Burgos. Edificio Alfonso VIII. Planta baja s/n. 47011. Valladolid. España.

Teléfono: 983 42 35 63. FAX: 983 42 36 16.

almudena@cta.uva.es

### Resumen

*En este artículo se ha desarrollado el modelado y simulación del comportamiento dinámico de una columna de destilación, tanto la respuesta en estado estacionario como su comportamiento ante cambios en variables de entrada y perturbaciones, mediante el tratamiento de modelos físico-matemáticos. Como lenguaje de simulación se ha empleado EcosimPro y se ha tomado como objeto de trabajo una columna de destilación de etanol de la industria azucarera.*

**Palabras Clave:** Simulación, EcosimPro, modelado de sistemas orientado a objetos, operación de destilación, equilibrio líquido-vapor.

### 1 INTRODUCCIÓN

El objetivo de este trabajo es mostrar las ventajas que aporta un lenguaje de programación orientado a objetos, como EcosimPro, a la hora de modelar y simular procesos físico-químicos como la destilación. Comenzaremos con una introducción sobre los procesos de destilación y las ventajas de poder simular estas operaciones.

La destilación es probablemente una de las operaciones más ampliamente empleada en la industria química, bien para separar distintos componentes de una corriente, o en la purificación de productos intermedios o finales. Su aplicación va desde la destilación de alcohol hasta el fraccionamiento del petróleo.

La dificultad de la destilación depende de la volatilidad relativa de los componentes, por lo cual, las mezclas con puntos de ebullición próximos son más difíciles de separar por destilación.

Para llevar a cabo la operación de destilación o cualquier otra operación de separación, es necesario disponer de datos del equilibrio líquido-vapor o de correlaciones para poder estimarlos adecuadamente.

La mayor parte de las torres de destilación operan con alimentación multicomponente y en la mayor parte de los casos no se pueden aplicar aproximaciones de mezclas binarias de manera que la resolución de los balances resulta más compleja y se han desarrollado métodos simplificados.

El cálculo riguroso sólo es posible mediante programas de simulación capaces de resolver de forma numérica sistemas de ecuaciones diferenciales. La simulación de operaciones permite además estudiar el comportamiento dinámico desde el momento del arranque de la planta hasta que el estado estacionario es alcanzado.

El análisis y simulación de procesos por ordenador presenta una serie de ventajas entre las que destacan:

- La posibilidad de analizar el comportamiento de los procesos reales imponiendo unas condiciones de operación que en campo serían imposibles de llevar a cabo por motivos económicos o de seguridad.
- El estudio de procesos existentes de manera más profunda y rápida ante cualquier variación de cualquiera de las variables de entrada y perturbaciones.
- La capacidad de comparar distintas alternativas sin modificar la planta real y, en función de los resultados obtenidos, tomar una decisión.

### 2 HIPÓTESIS SOBRE EL MODELO

El modelo matemático desarrollado debe representar el comportamiento dinámico del proceso real. Debe llegarse a un compromiso entre la exactitud en el planteamiento del modelo y la similitud entre la respuesta del mismo y del proceso, en función de los medios disponibles para la resolución del modelo.

Las suposiciones realizadas son las siguientes:

1. Alimentación en un único plato.
2. La alimentación entra como líquido saturado, aunque se contempla la posibilidad de una vaporización parcial o total de ésta.
3. Se realiza una extracción lateral de alcohol neutro en el penúltimo plato.
4. No hay pérdidas de calor, la columna es adiabática.
5. El condensador es total, por lo que la composición del vapor que abandona la columna por cabeza será la misma que la de la corriente de reflujo y destilado.
6. No hay ebullición sino inyección directa de vapor de agua.
7. Se considera flujo de vapor no constante, y se calcula a partir del balance de energía planteado en cada uno de los platos.
8. La pérdida de carga total de la columna se distribuye de forma lineal entre todos los platos.
9. El flujo de líquido se calcula a partir de la fórmula de Francis para vertederos.
10. El líquido acumulado en cada plato es incompresible y se encuentra como una mezcla perfecta; la composición será la misma en todos los puntos.
11. La fase líquida y vapor que abandonan el plato se encuentran en equilibrio térmico, a la misma temperatura. También están a la misma presión.
12. La fase líquido y vapor que abandonan el plato no están en equilibrio de fases debido a que se define una eficacia de Murphree.
13. El equilibrio líquido – vapor se representa considerando:
  - Fase vapor como ideal.
  - Fase líquida no ideal: se emplea el modelo de Wilson para el cálculo del coeficiente de actividad.
14. Se desprecia el tiempo muerto en la corriente de vapor que va desde el último plato de la columna hasta el condensador, y también en la corriente de retorno del reflujo a la cabeza de la torre.
15. Se considera la dinámica del condensador en el desarrollo del modelo de la columna de destilación.
16. No se considera acumulación de vapor a lo largo del sistema.

**3 MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN**

En los problemas de separación por etapas múltiples de sistemas en los que intervienen varias fases y varios componentes, es preciso proceder a la resolución simultánea, o iterativa, de cientos de ecuaciones.

Esto implica que es preciso especificar un número suficiente de variables de diseño de forma que el número de incógnitas (variables de salida) sea exactamente igual a número de ecuaciones (variables independientes).

Se presenta un esquema del proceso con el fin de seguir las explicaciones que vienen a continuación:

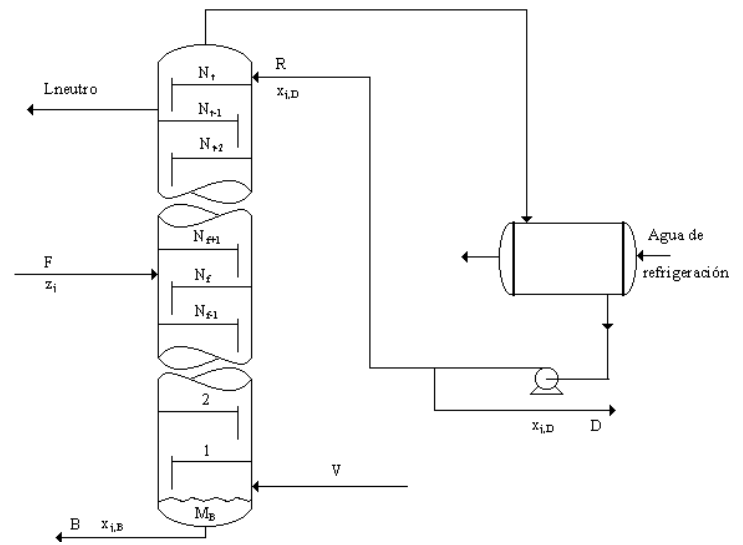


Figura 1: Esquema simplificado de la columna de destilación de alcohol neutro.

**3.1 BALANCES A LA BASE DE LA COLUMNA.**

A la base de la columna llega el líquido procedente del plato superior y el vapor de agua. El caudal de la corriente de fondo no es constante ya que es la variable manipulada para controlar el nivel de líquido en la base de la columna.

Un esquema sería el siguiente:

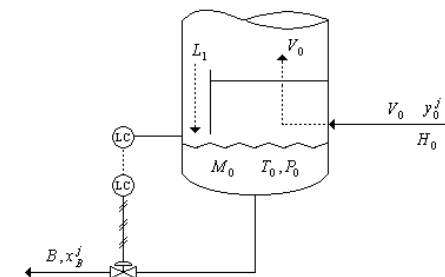


Fig. 2: Esquema del fondo de la columna.

□ *Balace global de materia:*

$$\frac{dM_0}{dt} = L_1 - B \quad (1)$$

donde:

$M_0$  = masa de líquido acumulado en la base (kg).

$L_1$  = caudal de líquido del plato 1 (kg/s).

$B$  = caudal de líquido de salida (kg/s).

□ *Balace global al componente j:*

$$\frac{d(M_0 x_0^j)}{dt} = L_1 x_1^j - B x_B^j \quad (2)$$

donde:

$x_1^j$  = fracción molar del componente j en el flujo de líquido del plato superior.

$x_0^j = x_B^j$  = fracción molar del componente j en la masa de líquido acumulado en la base y en el producto de fondo.

El balance de materia se plantea para (n-1) componentes, y la fracción molar de uno de los componentes se calcula como:

$$x_B^j = 1 - \sum_{j=1}^{j=n-1} x_B^j \quad (3)$$

□ *Balace global de energía:*

Al considerar que el flujo de vapor no es constante a lo largo de la columna, es necesario plantear el balance de energía. Como la columna se considera adiabática se obtiene:

$$\frac{d(M_0 h_0)}{dt} = L_1 h_1 - B h_0 \quad (4)$$

donde:

$h_1$  = entalpía del líquido del plato 1 (kJ/kg).

$h_0$  = entalpía del líquido de la base (kJ/kg).

□ *Presión total en la base:*

$$P_B = P_1 + \Delta P \quad (5)$$

donde:

$P_B$  = presión total en la base (bar).

$P_1$  = presión total en el plato 1 (bar).

$\Delta P_n$  = pérdida de carga (bar).

### 3.2 BALANCES A UN PLATO GENÉRICO.

Las ecuaciones que representan el comportamiento de un plato genérico son las mismas para toda la columna.

Un esquema de cualquiera de estos platos sería el siguiente:

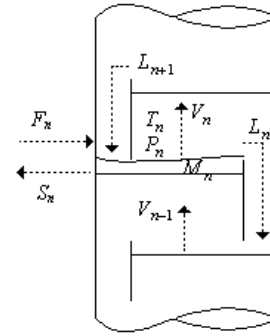


Fig. 3: Esquema de un plato genérico.

□ *Balace de materia:*

$$\frac{dM_n}{dt} = L_{n+1} + V_{n-1} + F_n - L_n - V_n - S_n \quad (6)$$

donde:

$M_n$  = masa de líquido acumulada en plato n (kg).

$L_{n+1}$  = líquido que cae al plato n del plato n+1 (kg/s).

$V_{n-1}$  = caudal vapor procedente del plato n-1 (kg/s).

$L_n$  = líquido que abandona el plato n (kg/s).

$V_n$  = caudal de vapor que abandona el plato n (kg/s).

$F_n$  = caudal de alimentación del plato n (kg/s)

$S_n$  = extracción lateral en el plato n (kg/s)

□ *Balace global al componente j:*

$$\frac{d(M_n x_n^j)}{dt} = L_{n+1} x_{n+1}^j + V_{n-1} y_{n-1}^j + F_n z_n - L_n x_n^j - V_n y_n^j - S_n x_n^j \quad (7)$$

donde:

$x_n^j$  = frac. molar del comp. j en el líquido del plato n.

$x_{n+1}^j$  = frac. molar del comp. j en la corriente líquida del plato n+1.

$y_{n-1}^j$  = frac. molar del comp. j en la corriente vapor del plato n-1.

$y_n^j$  = frac. molar del comp. j en la corriente vapor del plato n.

$z_n^j$  = frac. molar del comp. j en la corriente de alimentación del plato n.

El balance anterior se plantea para todos los componentes menos para uno que se calcula a partir de:

$$x_N^j = 1 - \sum_{j=1}^{j=n-1} x_N^j \quad (8)$$

□ *Balance de global de energía:*

$$\frac{d(M_n h_n)}{dt} = L_{n+1} h_{n+1} + V_{n-1} H_{n-1} + F_n h_f - L_n h_n - V_n H_n - S_n h_n \quad (9)$$

donde:

$h_n$  = entalpía del líquido del plato n (kJ/kg).

$h_{n+1}$  = entalpía del líquido del plato n+1 (kJ/kg).

$H_n$  = entalpía del vapor del plato n (kJ/kg).

$H_{n-1}$  = entalpía del vapor del plato n-1 (kJ/kg).

Los cambios en la entalpía específica de la fase líquida son por lo general muy pequeños comparados con la entalpía total del plato. Esto significa que, normalmente, el balance de energía se puede reducir a una ecuación algebraica a partir de la cual se calcula el flujo de vapor que abandona el plato. Por lo tanto, finalmente el balance de energía es el siguiente:

$$L_{n+1} h_{n+1} + V_{n-1} H_{n-1} + F_n h_{f,n} - L_n h_n - V_n H_n - S_n h_n = 0 \quad (10)$$

□ *Cálculo de la temperatura.*

La temperatura en cada plato no se obtiene a partir del balance de energía como ocurre en el fondo de la columna, sino que se calcula la temperatura de burbuja. La temperatura de burbuja es aquella temperatura que está en equilibrio con una composición del líquido conocida a una determinada presión también conocida.

Por lo tanto, en cada plato, el algoritmo de cálculo itera sobre la temperatura hasta que la suma de las composiciones de la fase vapor del plato N sea igual a la unidad.

$$1 - \sum_{j=1}^n y_j^N = 0 \quad (11)$$

□ *Relación de equilibrio entre fases líquido – vapor:*

$$y_{n,j}^* = \frac{g_n^j P_{n,j}^{sat}}{P_n} x_n^j \quad (12)$$

donde:

$y_{n,j}^*$  = frac. molar del comp. j en el plato n en equilibrio con  $x_n^j$ .

$g_n^j$  = coef. de actividad del comp. j en el plato n.

$P_{n,j}^{sat}$  = pres. de vapor del comp. j en el plato n (bar).

$P_n$  = presión total en el plato n (bar).

$x_n^j$  = frac. molar del comp. j en el líquido del plato n.

□ *Presión total en el plato n:*

$$P_n = P_{n+1} + \Delta P \quad (13)$$

donde:

$P_n$  = presión total en el plato n (bar).

$P_{n+1}$  = presión total en el plato n+1 (bar).

$\Delta P_n$  = pérdida de carga entre el plato n y n+1 (bar).

□ *Pérdida de carga en el plato.*

La distribución de la pérdida de carga se considera lineal a lo largo de toda la columna y directamente proporcional al caudal de vapor vivo.

$$\Delta P = \left( \frac{V_0}{K} \right)^2 \quad (14)$$

donde:

$V_0$  = caudal de vapor vivo (m<sup>3</sup>/h).

$K$  = constante de proporcionalidad (m<sup>3</sup>/bar·h).

□ *Caudal de líquido que abandona el plato n:*

Se calcula a partir de la fórmula de Francis para vertederos segmentados:

$$h_{ow} = 664 \cdot \left( \frac{Q}{L_w} \right)^{2/3} \quad (15)$$

donde:

$h_{ow}$  = alt. de líq. sobre la cresta del vertedero (mm).

$Q$  = líquido que cae del vertedero (m<sup>3</sup>/s)

$L_w$  = longitud del vertedero (m).

Así, el flujo de líquido que cae de un plato al inferior es:

$$Q_n = 1.8482 L_w (h_{ow,n})^{1.5} \quad (16)$$

donde:

$Q_n$  = líquido que abandona el plato n (m<sup>3</sup>/s).

$L_w$  = longitud del vertedero (m).

$h_{ow,n}$  = alt. del líq. sobre la cresta del vertedero (m).

Se calcula a partir de la siguiente expresión:

$$h_{ow,n} = \frac{Vol_n - V_{plato}}{A_{plato}} \quad (17)$$

donde:

$Vol_n$  = volumen de líquido en el plato n (m<sup>3</sup>).

$V_{plato}$  = volumen del plato (m<sup>3</sup>).

$A_{plato}$  = área activa del plato (m<sup>2</sup>).

□ *Caudal de vapor que abandona el plato n:*

Como ya se ha dicho anteriormente, el flujo de vapor que va hacia el plato siguiente se calcula a partir del balance de energía en estado estacionario:

$$V_n = \frac{L_{n+1}h_{n+1} + V_{n-1}H_{n-1} + F_n h_{f,n} - L_n h_n - S_n h_n}{H_n} \quad (18)$$

#### 4 MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO DEL CONDENSADOR.

El vapor que sale del último plato entra en el condensador donde condensa totalmente. Se trata de un condensador horizontal que utiliza como fluido refrigerante agua de proceso que circula por la carcasa.

A la hora de realizar la simulación se fija el caudal de refrigerante y su temperatura de entrada (20°C).

Un esquema sería:

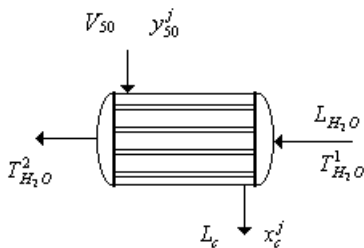


Fig. 4: Esquema del condensador de cabeza de la columna.

□ *Balance global de materia:*

$$\frac{dM_c}{dt} = V_{50} - L_c \quad (19)$$

donde:

$M_c$  = masa de condensado acumulada en el condensador (kg).

$V_{50}$  = vapor procedente del plato 50 (kg/s).

$L_c$  = flujo de condensado (kg/s).

□ *Balance global al componente j:*

Al producirse la condensación total del vapor que sale del último plato de la columna, la composición del condensado es la misma que la del vapor.

$$x_c^j = y_{50}^j \quad (20)$$

□ *Balance de energía:*

- a la masa de condensado:

se supone que la temperatura de salida es igual a la de entrada, con lo que se tendrá un líquido saturado y no se plantea este balance.

- a la masa de refrigerante:

$$\frac{d(M_r h_r)}{dt} = L_r (h_r^i - h_r) + Q \quad (21)$$

donde:

$M_r$  = masa de refrigerante (kg).

$h_r$  = entalpía del refrigerante (kJ/kg).

$h_r^i$  = entalpía de entrada del refrigerante (kJ/kg).

$L_r$  = flujo de condensado (kg/s).

$Q$  = calor transferido en la condensación (kJ/s).

□ *Cálculo del caudal de condensado:*

$$L_c = \frac{Q}{I} \quad (22)$$

donde:

$\lambda$  = calor latente de la mezcla (kJ/kg).

□ *Cálculo del calor transferido:*

$$Q = UA(\Delta T)_{ln} \quad (23)$$

donde:

$U$ : coeficiente global de transmisión de calor (kJ/m<sup>2</sup>s)

$A$ : área de transmisión de calor (m<sup>2</sup>).

$(\Delta T)_{ln}$ : diferencia logarítmica de temperaturas.

#### 5 MODELO DEL EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR

Como ya se ha mencionado anteriormente, es necesario disponer de correlaciones para poder calcular el coeficiente de actividad de la relación de equilibrio entre las fases líquido-vapor. Para ello se analiza cada una de las fases:

▪ Fase vapor:

El sistema con el que se trabaja está compuesto mayoritariamente por etanol y agua cuyo comportamiento se aleja bastante de la idealidad. Sin embargo, la presión a la que se opera es muy próxima a la atmosférica, por lo que se puede simplificar el equilibrio admitiendo una fase vapor ideal y aplicado la ecuación de los gases ideales para su cálculo.

▪ Fase líquida:

En este caso, no se puede suponer un comportamiento ideal ya que las mezclas líquidas etanol-agua son fuertemente polares y los coeficientes de actividad se alejan mucho de la unidad.

Como no se dispone de una ecuación de estado que represente adecuadamente la fase líquida, la fugacidad de los componentes de la fase líquida se calculará a partir de los coeficientes de actividad.

Por todo lo anteriormente expuesto, se va a considerar la fase vapor como ideal y la fase líquida no ideal, utilizando para su cálculo el modelo de Wilson.

Los coeficientes de actividad en fase líquida según el modelo de Wilson se calculan a partir de la siguiente expresión:

$$\ln g_i = -\ln \left( \sum_{j=1}^m x_j \Lambda_{ij} \right) + 1 - \sum_{k=1}^m \frac{x_k \Lambda_{ki}}{\sum_{j=1}^m x_j \Lambda_{kj}} \quad (24)$$

donde:

$x_j$  = frac. molar del componente j en la fase líquida.

$\Lambda_{kj}$  = parámetros de interacción binaria.

$$\Lambda_{ij} = \frac{V_j^L}{V_i^L} \exp \left( \frac{-I_{ij}}{RT} \right) \quad (25)$$

$$\Lambda_{ii} = \Lambda_{ii} = 1 \quad (26)$$

donde:

$V_j^L$ ,  $V_i^L$  = volúmenes molares de los componentes j e i como líquidos puros a la temperatura T. Dependen ligeramente de la temperatura, pero para facilitar los cálculos se ha considerado un valor constante.[8]

R = constante de los gases ideales (cal/mol·K)

T = temperatura (K).

$I_{ij}$  = constantes de interacción binaria.[7]

## 6 PUERTOS Y LIBRERÍA DE PROPIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS

### 6.1 PUERTOS

Finalmente, los componentes modelados son:

- columna de destilación
- condensador total
- tuberías de vapor
- fuentes de vapor vivo y de alimentación
- sumideros

Una vez modelados los distintos componentes, se definen una serie de puertos cuya misión es conectar los diversos componentes. A través de dichos puertos se pasan los valores de las variables definidas en ellos de unos componentes a otros.

Las variables pueden estar definidas como REAL, EQUAL, SUM, etc.

Los puertos utilizados son:

- Puerto vapor.
- Puerto líquido.
- Puerto gas.

A continuación se presenta el código .el del puerto gas:

```

-----
PORT gas (SET_OF(Chemical)Mix)

SUM REAL W RANGE 0.,Inf "Flujo másico (Kg/h)"
SUM IN REAL Wi[Mix] RANGE 0.,Inf "Flujo másico
componente (Kg/h)"
EQUAL OUT REAL C[Mix] RANGE 0.,1.
"Concentraciones (% 1 en peso)"
REAL x[Mix] RANGE 0.,1. "Concentración (frac
molar:% 1 moles)"
EQUAL REAL P RANGE 0.,Inf "Presión (bar)"
REAL T RANGE -273.,Inf "Temperatura (°C)"
EQUAL OUT REAL H "Entalpía específica (KJ/Kg)"
SUM IN REAL f_energ "Flujo de entalpía (KJ/h)"
REAL Rho_g RANGE 0.,Inf "Densidad (Kg/m^3)"
REAL F RANGE 0.,Inf "Flujo volumétrico (m3/h)"

CONTINUOUS
1. = SUM (j IN Mix ; C[j])
EXPAND(j IN Mix EXCEPT setofElem(Mix,1))
Wi[j] = C[j] * W
W = SUM(j IN Mix;Wi[j])
H = entalp_gas (Mix,T,x)
f_energ = W * H
Rho_g = dens_gas (Mix,T,P,x)
F = W/Rho_g

-- relación entre concentración en peso (C) y en fracción
molar (x)
EXPAND (j IN Mix)
x[j] = (C[j]/Mmolec[j]) / SUM (i IN Mix;
(C[i]/Mmolec[i]))
    
```

END PORT

## 6.2 LIBRERÍA DE PROPIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS

Para realizar la simulación es necesario implementar previamente una serie de propiedades físicas de cada uno de los componentes de forma individual, así como de funciones de propiedades medias de mezclas y constantes globales.

Para ello se ha desarrollado una librería en la que se calculan a partir de los argumentos correspondientes (temperatura, presión, concentraciones), bien en forma de ecuaciones o de tablas, las siguientes propiedades:

- Presión de saturación.
- Temperatura de saturación.
- Densidad del líquido.
- Densidad del vapor.
- Calor específico del líquido.
- Calor específico del vapor.

A continuación se presenta en ejemplo del cálculo de la capacidad calorífica del vapor de etanol:

```
-----
FUNCTION REAL cp_v_etoh (REAL T)
DECLS
  REAL Cp_vapor
BODY
  Cp_vapor=((A_cp_etoh+B_cp_etoh*(T+273.15)+
  C_cp_etoh*(T+273.15)**2+
  D_cp_etoh*(T+273.15)**3)/(Mmolec_EtOH)
  RETURN Cp_vapor
END FUNCTION
-----
```

Además en esta librería se definen en un enumerado (sentencia ENUM del código de EcosimPro) los componentes químicos del proceso:

```
-----
--Componentes genéricos
ENUM Chemical = {H2O, azucar, marco, impz, CaO,
CaOH2, O2, N2, CH4, C3H8, CO, CO2, EtOH, PrOH, Iso}
--Subgrupo de componentes de la destilación
SET_OF(Chemical)destila = {H2O,EtOH,PrOH}
SET_OF(Chemical)agua = {H2O}
-----
```

## 7 COMPONENTE COLUMNA

Es el componente principal y contiene todas las ecuaciones del modelo matemático descrito anteriormente, implementadas en EcosimPro.

Es un componente definido con tres puertos de entrada (uno de vapor y dos de líquido), y tres puertos de salida (dos de líquido y uno de gas)

-----  
PORTS

IN	vapor	vapor_in
IN	liquido(destila)	alim_in
IN	liquido(destila)	reflujo_in
OUT	liquido(destila)	neutro_out
OUT	gas(destila)	vapor_out
OUT	liquido(destila)	fondo_out

-----

Otro aspecto importante de este componentes son los datos a partir de los cuales se pueden cambiar las condiciones de partida del proceso:

```
-----
REAL vplato      "Volumen del plato (m³)"
REAL aplato      "Área del plato (m²)"
REAL lw          "Longitud de la presa del plato(m)"
REAL Efm         "Eficacia de Murphry"
REAL PER         "Cte para calcular la pérd carga"
REAL r_col       "Radio int de la columna (m)"
REAL altbase_max "Altura máx de la base (m)"
REAL lneutro     "Caudal de alcohol neutro (m³/s)"
REAL P_cab       "Presión en cabezas fija (bar)"
REAL refbase     "Referencia del nivel en %"
REAL kbasepi     "Ganacia del PI"
REAL Tibasepi    "Tiempo integral (s)"
REAL rangob1     "Rango superior (1.11e-2m³/s)"
REAL rangob2     "Rango inferior (0m³/s)"
REAL autobase    "Automático"
REAL manbase     "Manual"
-----
```

Dentro de todas las sentencias del código .el, resulta de especial interés la sentencia EXPAND\_BLOCK, ya que gracias a ella todas las ecuaciones que se repiten en cada uno de los platos de la columna únicamente se implementan una vez y se expanden para los n-platos.

A continuación se muestra un ejemplo del código:

```
-----
EXPAND_BLOCK (i IN destila)
  EXPAND_BLOCK (n IN 2,k-1)
gamma[i,n]=exp(-log(SUM(j IN destila; x_l[j,n]*A[i,j,n]))
+1 - SUM(k IN destila; (x_l[k,n]*A[k,i,n]) / SUM(j IN
destila; x_l[j,n]*A[k,j,n])))
y_v[i,n]=Efm*(y_eq[i,n]-y_v[i,n-1])+y_v[i,n-1]
  END EXPAND_BLOCK
END EXPAND_BLOCK
-----
```

## 8 RESULTADOS

Los datos de partida para realizar la simulación fueron los siguientes:

- N° de platos de la columna: 50
- Caudal:  $5.56 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$  (20  $\text{m}^3/\text{h}$ )
- Componentes (porcentajes en peso):
  - Etanol: 11.7 % (14.71°GL)
  - Agua: 86.75 %
  - Propanol: 1.55%
- Temperatura: 87.76°C
- Presión: 1 bar
- Caudal de vapor vivo: 2  $\text{m}^3/\text{s}$
- Presión: 1.77 bar
- Temperatura: 210 °C.

### 8.1 VALORES Y PERFILES EN ESTADO ESTACIONARIO

Los resultados una vez alcanzado el estado estacionario son:

- *Fondo de la columna:*
  - Caudal: 23.6  $\text{m}^3/\text{h}$
  - Composiciones:
    - etanol: 2.26 % (2.7 °GL)
    - agua: 96.34 %
    - propanol: 1.39 %
  - Temperatura: 102.85 °C
  - Presión: 1.85 bar
- *Extracción lateral de alcohol neutro:*
  - Caudal: 2.6  $\text{m}^3/\text{h}$
  - Composiciones:
    - etanol: 94.4 % (96.4 °GL)
    - agua: 5.4%
    - propanol:  $1.4 \cdot 10^{-6}$  %
  - Temperatura: 88.5 °C
  - Presión: 1.51 bar

En la figura (5) que se muestra a continuación se observa como la concentración de etanol (componente más volátil) tiende a cero en los platos del fondo de la columna, y aumenta a medida que se asciende en la columna (como máximo se puede alcanzar la composición azeotrópica):

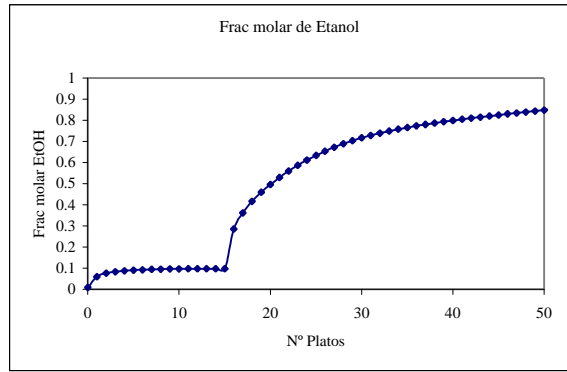


Figura 5: Perfil de concentración de etanol en estado estacionario.

En cuanto al propanol (fig. 6), se observa que se acumula en unos platos por encima de la alimentación, en la zona donde la concentración de etanol es de aproximadamente 80°G.L:

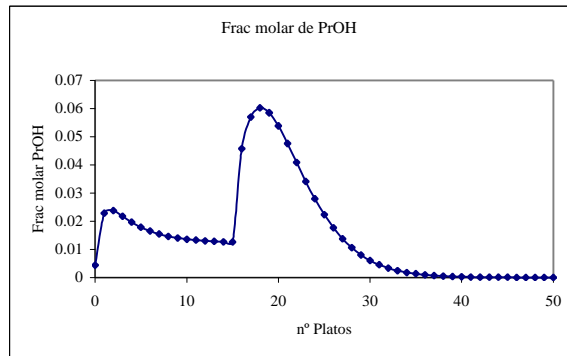


Figura 6: Perfil de concentración de propanol en estado estacionario.

En el perfil de temperatura (fig.7) se observa como ésta va disminuyendo a medida que se asciende en la columna.

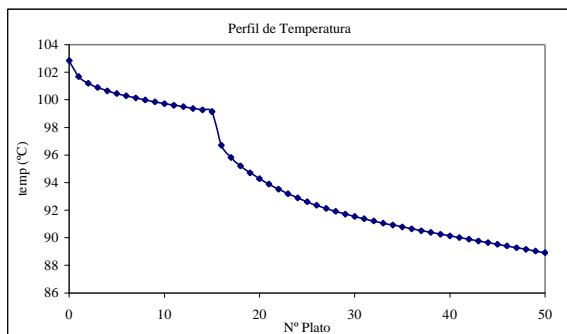


Figura 7: Perfil de temperatura en estado estacionario.



## 8.2 RESPUESTA DINÁMICA ANTE UN AUMENTO DEL 10% EN EL CAUDAL DE VAPOR VIVO

Los resultados obtenidos al aumentar el caudal de vapor vivo en un 10% una vez alcanzado el estado estacionario (2500 s) son los siguientes:

En la figura que se presenta a continuación, se observa como la concentración de etanol en cabeza aumenta y en el fondo disminuye.

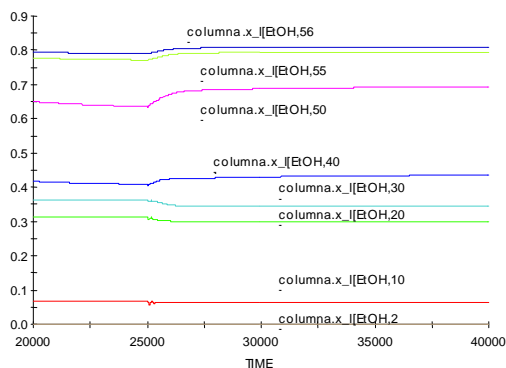


Figura 8: Perfil de concentración de etanol ante un aumento de vapor vivo del 10%.

En cuanto la temperatura (fig.9), aumenta en todos los platos de la columna:

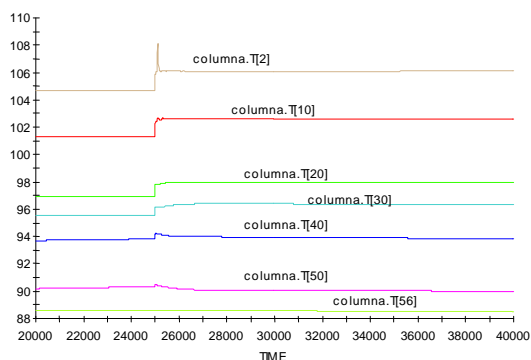


Figura 9: Perfil de temperatura ante un aumento de vapor vivo del 10%.

## 9 CONCLUSIONES

EcosimPro es un lenguaje que se adapta bien al modelado de sistemas de esta clase.

A continuación se presenta un resumen de los problemas y soluciones a la hora de simular una columna de destilación:

- Los balances de materia y energía deben realizarse en todos los platos de la columna y a todos los componentes. Al ser una columna de 50 platos, el número de ecuaciones diferenciales que deben resolverse es considerable. Ecosim permite formular cada uno de estos balances con una única ecuación mediante el empleo de la sentencia EXPAND\_BLOCK.
- Los caudales de vapor que abandonan cada plato no se han supuesto constantes, sino que se calculan a partir del balance de energía en estado estacionario. Esta forma de abordar el modelado hace que la temperatura de burbuja en cada plato se calcule de forma iterativa de manera que las fracciones de los componentes en la fase vapor sumen la unidad. Ecosim al hacer la partición del modelo, detecta un bucle en cada uno de los platos y escoge como variable para romper cada lazo precisamente la temperatura en cada plato.
- La formulación del cálculo del equilibrio líquido-vapor (modelo de Wilson) también se hace más sencillo al emplear la sentencia EXPAND\_BLOCK.
- La columna actualmente está modelada para tres componentes (agua, etanol y propanol), y con 50 platos. Sin embargo, el aumentar el número de componentes no implicaría ningún cambio en el modelo de la columna y bastaría con añadir los nuevos componentes en el enumerado (sentencias ENUM y SET\_OF) y sus propiedades físicas. Lo mismo ocurriría si se quisiera modificar el número de platos, el plato donde se introduce la alimentación o añadir o quitar extracciones laterales.

## Agradecimientos

Este trabajo se ha desarrollado dentro del proyecto "Simulación de factorías azucareras para optimización del proceso y entrenamiento de personal" (FEDER TAP 1FD97-1450) realizado en el Centro de Tecnología Azucarera de la Universidad de Valladolid. Agradecimientos a todos los participantes en el mismo.

## Referencias

- [1] A. ARCE – A. BLANCO – A. CORREA – J.M. CORREA – J. TOJO. *"Predicción del equilibrio líquido-vapor: sistemas alcohol-agua"*. Revista Afinidad XLV, 413, Enero-Febrero, 1988.
- [2] ACEDO SÁNCHEZ, JOSÉ. *"Presión flotante en columnas de destilación."* Revista Ingeniería Química. Marzo 1989. Pgs.187-194.

- [3] C.J.KING. "Procesos de separacion." Editorial Reverté 1980.
- [4] Coulson & Richardson. "Chemical Engineering"
- [5] E.J. HENLEY – J.D. SEADER. "Operaciones de separación por etapas de equilibrio en Ingeniería Química." Editorial Reverté 1988
- [6] F. WILCOX, ROBERT – L. WHITE JACOBS. "Selecting the proper model to simulate vapor-liquid equilibrium". Chem. Eng. October 27, 1986. Pgs.141-144.
- [7] J. Gmehling - U. Onken. "Vapor-Liquid Equilibrium Data Colletion". Ed. Dechema. Chemistry Data Series
- [8] Robert C.Reid, John M.Prausnitz, Bruce E.Poling "The Properties of Gases & Liquids" McGraw-Hill 4ª Edition 1988
- [9] VALDERRAMA, DIEGO – HENNING, ROBERTO H. "Simulación rigurosa de una columna de destilación para sistemas multicomponentes" Revista Ingeniería Química. Octubre 1984. Pgs.351-361.