

DESARROLLO DE UN MODULO TUTORIAL DE UNA TORRE DE DESTILACIÓN BASADO EN EL MODELO MATEMÁTICO DE SOREL

Miguel Angel Mesa Silva, Nicolas Lallemand Najar. Universidad de América, Bogotá DC

Resumen.

El proyecto consiste en el desarrollo de un modulo tutorial para la enseñanza del funcionamiento de una torre de destilación basada en el modelo matemático de Sorel, con el cual se pretende generar una herramienta alternativa que permitirá a sus usuarios tener una ayuda de aprendizaje didáctica e interactiva, la cual facilitará y hará mas breve el estudio de cómo funciona una torre de destilación que opera con mezclas binarias.

Para el desarrollo de este modulo se seleccionaron unas mezclas binarias las cuales servirán como motor de enseñanza explicando de manera clara y detallada, cada una de las etapas que intervienen en el proceso de destilación, y a su vez mostrará como se llevan a cabo los diferentes cálculos, contará con una guía teórica que permitirá tener una fundamentación mas clara de todos los modelos matemáticos, que se

utilizaron para llegar a los diferentes valores que se obtienen durante el desarrollo de los ejercicios que contiene el modulo esto con el fin de tener una opción de enseñanza practica, rápida y aplicada.

El modulo fue desarrollado con una serie de ambientes computacionales, que tienen la capacidad de dar aspectos didácticos, al software, además de hacer más fácil el uso de este.

Los resultados fueron comparados contra otro tipo de simuladores y ejemplos de textos citados en la bibliografía.

Palabras calve: destilación, modulo tutorial, Sorel.

Abstract.

This project is about a development of tutorial software for the learn of a distillation

tower work form based in the mathematic Sorel model, with this software the students has a new tool which will be easier study this aspect with binary systems.

For the development of this software was choose binary mixtures which will be the learn motor explain every steep that let the distillation process, also will show how the calculating, it have a theoretic guide that will let has a support more clear of all the mathematic models used to get the different values that is present during the exercise development that contents the software. With this software is a quick, practice and apply tool.

This tutorial has a environment that has the capacity to give didactic aspect to the software and make easier its use.

The results was compared with simulators no commercial and text examples from the bibliographic.

Key word: Distillation, tutorial software, Sorel method.

Introducción.

Este trabajo de grado tiene como propósito facilitar la comprensión de cómo es el funcionamiento de una torre de destilación que maneja sistemas binarios, mediante el uso de un modulo tutorial.

El uso y diseño de este tipo de software ha venido creciendo en las diferentes universidades, las herramientas computacionales actuales permiten que este tipo de paquetes sean diseñados sin un alto grado de programación y dan paso a grandes trabajos que se convierten en herramientas útiles para los estudiantes del futuro.

En el campo de la ingeniería química se han desarrollado varios módulos tutoriales para destilación, cinética química e intercambiadores de calor, en los cuales se ve plasmado un soporte teórico y luego la ejecución de una serie de ejercicios por medio de una herramienta computacional.

El modulo esta limitado a un rango determinado para cada una de las propiedades que se dieron como criticas, esto con el fin de divulgar datos con valores alejados de los reales. Solo maneja sistemas binarios conocidos dentro del concepto de semi-ideales.

Con este trabajo los estudiantes tienen una nueva herramienta bastante útil, gracias a el pueden, corroborar los resultados de una serie de ejercicios propuestos.

El modulo tutorial cuenta con tres casos de estudio, que a su vez son los casos más simples en los que se puede ver el funcionamiento de una torre de destilación. Para la selección de estos casos de estudio se revisaron diferentes bibliografías buscando en ellas como explicaban el diseño de una torre de destilación y como usaban las corrientes de entrada y salida, y las variables de mayor importancia para llevar a cabo este objetivo.

Este trabajo tiene como fin, generar e incentivar la creación de nuevos proyectos de este tipo en la universidad, además de optar al titulo de ingeniero químico.

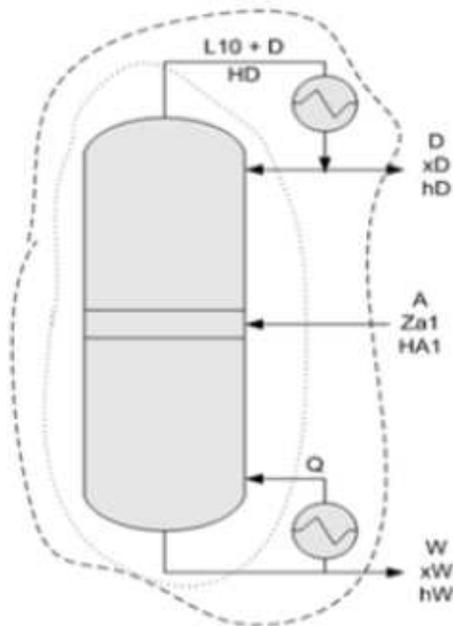
1. Modelo matemático de Sorel.

El modelo matemático de Sorel es netamente numérico, no necesita de

gráficas, solo requiere las ecuaciones correspondientes a los balances de masa y energía. El modelo es resuelto por medio de métodos iterativos, los cuales deben cumplir con las especificaciones de alimento y de destilado y residuo según el caso. El método se encuentra dividido en tres partes; la primera se encarga del cálculo de la fracción molar de vapor y de líquido en la que se descompone el flujo de alimento al momento de ingresar a la torre. La segunda etapa de este modelo permite determinar el número de etapas ideales en la zona de enriquecimiento de la torre. Por último la tercera etapa permite calcular el número de etapas ideales en la zona de agotamiento de la torre.

A continuación se presenta los balances empleados para la solución de este modelo.

Figura1. Balance de masa y energía global.



A partir de la Figura 1, se obtiene:

$$A_1 = D + W$$

$$A_1 z_{A1} = D x_D + W x_R$$

$$A_1 H_{A1} + L_{1,0} h_D + Q = (L_{1,0} + D) H_D + W h_W$$

En base a la Figura 2 se determina:

$$V_{j+1} = L_{1j} + D$$

$$V_{j+1} y_{j+1} = L_{1j} x_{1j} + D x_D$$

$$V_{j+1} y_{j+1} = (V_{j+1} - D) x_{1j} + D x_D$$

$$V_{j+1} + H_{j+1} + L_{1,0} h_D = (V_{j+1} - D) h_{1j} + (L_{1,0} + D) H_D$$

Figura 2. Balance de masa y energía en el condensador.

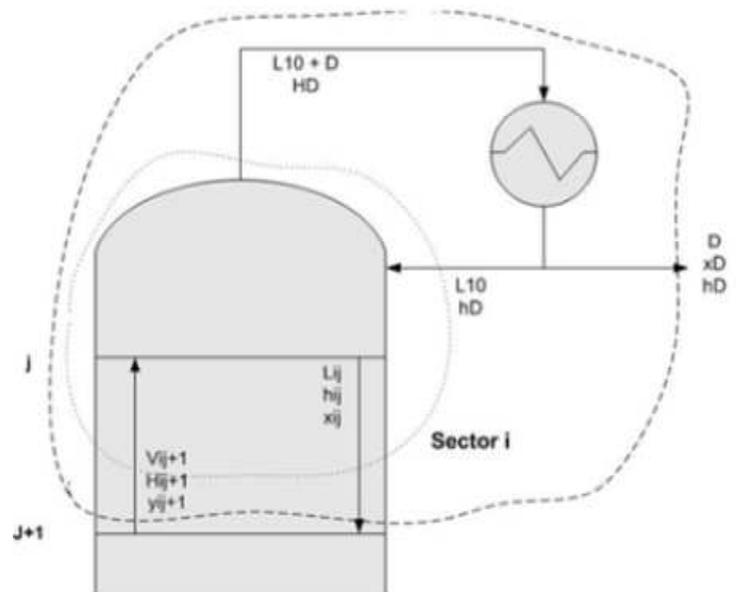
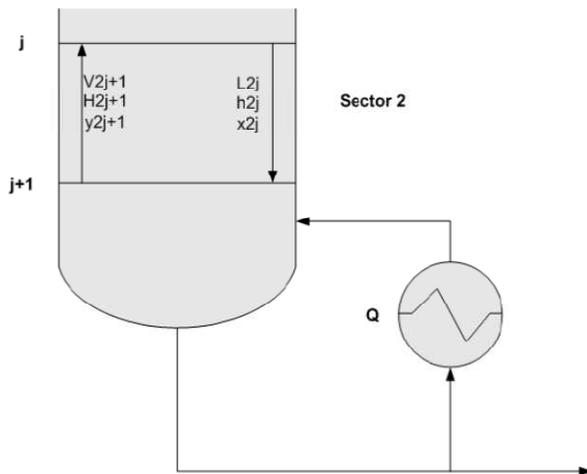


Figura 3. Balance de masa y energía en la caldera.



Con base a la Figura 3, se obtiene.

$$L_{2,i} = V_{2,i+1} + W$$

$$L_{2,i}x_{2,i} = V_{2,i+1}y_{2,i+1} + Wx_W$$

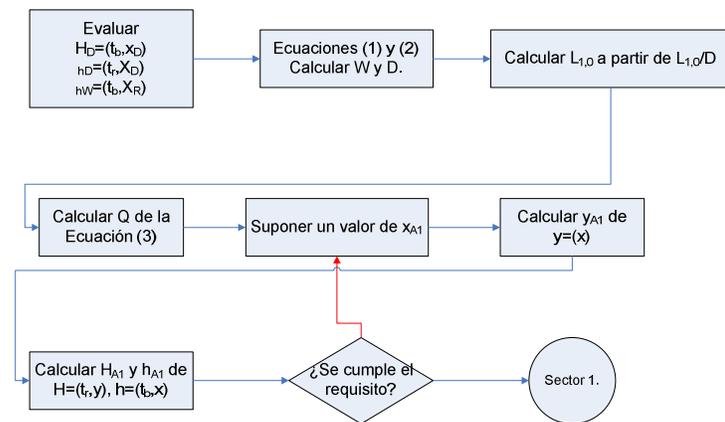
$$(V_{2,i+1} + R)x_{2,i} = V_{2,i+1}y_{2,i+1} + Wx_W$$

$$L_{2,i}h_{2,i} + Q = Rh_R + V_{2,i+1}H_{2,i+1}$$

$$V(2,i+1 + R)h_{2,i} + Q = Rh_R + V_{2,i+1}H_{2,i+1}$$

1.1 Etapas del Modelo Matemático de Sorel

Figura 4. Primera etapa del modelo de Sorel



Con las ecuaciones expuestas anteriormente se puede iniciar la primera fase del modelo matemático de Sorel. La Figura 4 muestra un esquema con los pasos a seguir para calcular la fracción molar de líquido en la que se descompone el alimento una vez ingresa a la torre. El requisito que debe cumplir el algoritmo es el siguiente:

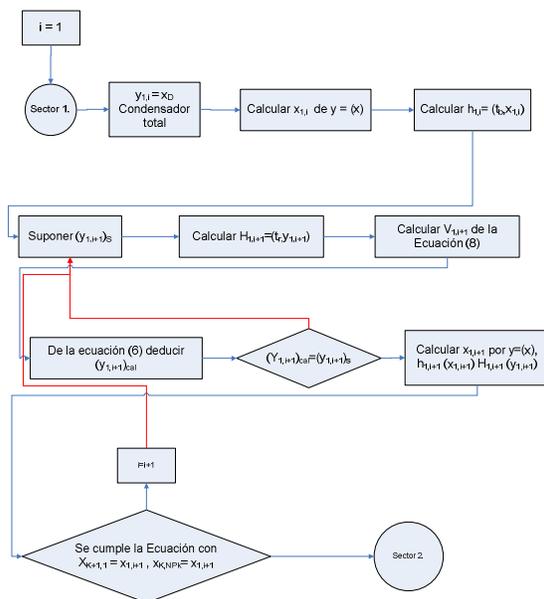
$$\frac{L_{A1}}{A_1} = \frac{y_{A1} - z_{A1}}{y_{A1} - x_{A1}} = \frac{H_{A1} - H_A}{H_{A1} - h_{A1}}$$

La Figura 5 representa la segunda fase del modelo matemático de Sorel, gracias a esta sección del algoritmo se puede calcular las fracciones molares de vapor y de líquido que abandonan cada uno de los platos de la zona

de enriquecimiento de la torre y el número de etapas ideales en dicha zona. Para resolver esta parte del modelo es necesario llevar a cabo dos iteraciones de manera simultánea.

La Figura 6 muestra el diagrama de flujo con los pasos de la última fase del modelo matemático de Sorel. Al igual que en la fase anterior se necesitan dos iteraciones dobles para calcular las fracciones molares de vapor y de líquido de los flujo que abandonan cada uno de los platos ubicados en la zona de agotamiento de la torre y el número de etapas ideales en esta zona.

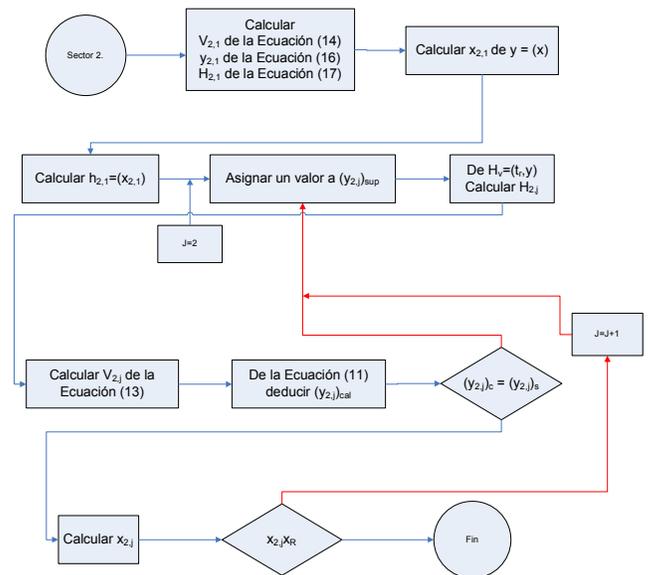
Figura 5. Segunda fase del modelo de Sorel.



La Figura 6 muestra el diagrama de flujo con los pasos de la última fase del modelo matemático de Sorel. Al igual que en la fase anterior se necesitan dos iteraciones dobles para calcular las fracciones molares de vapor y de líquido de los flujo que abandonan cada uno de los platos ubicados en la zona de

agotamiento de la torre y el número de etapas ideales en esta zona.

Figura 6. Tercera etapa del modelo de Sorel.



La Figura 6 muestra el diagrama de flujo con los pasos de la última fase del modelo matemático de Sorel. Al igual que en la fase anterior se necesitan dos iteraciones dobles para calcular las fracciones molares de vapor y de líquido de los flujo que abandonan cada uno de los platos ubicados en la zona de agotamiento de la torre y el número de etapas ideales en esta zona.

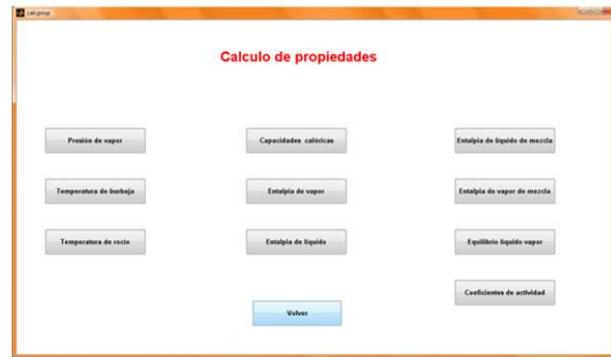
2. Construcción del modulo tutorial

La primera medida para la construcción del modulo tutorial de destilación fue la selección del software que permitiera ser la base para la respectiva programación, el programa seleccionado es Matlab 7.5; luego se procedió a la construcción de los programas encargados de dar solución al

modelo matemático de Sorel, sin embargo antes de iniciar con la construcción de las iteraciones que dan solución al algoritmo fue necesario crear una serie de programas encargados de calcular las propiedades de mezcla y de sustancias puras necesarias para llevar a cabo las iteraciones; para el cálculo de alguna de estas propiedades fue necesario crear bases de datos con las constantes requeridas para el cálculo deseado. Las propiedades que fueron programadas son: Entalpía de mezcla de líquido y de vapor, temperaturas de rocío y burbuja, capacidades calóricas, coeficientes K, presión de vapor, y coeficientes de actividad.

Cuando la programación de la solución numérica del modelo de Sorel fue desarrollada se procedió a la construcción de los ambientes computacionales que dan forma al modulo tutorial, en primera instancia se construyeron los ambientes de una de las dos partes fundamentales que conforman el modulo, la calculadora de propiedades, gracias a esta opción los usuarios tiene una herramienta funcional capaz de calcular las propiedades que fueron mencionadas con anterioridad. Esta sección cuenta con un ambiente tipo menú, el cual permite seleccionar la propiedad a calcular.

Figura 7. Calculadora de propiedades



La Figura 7 muestra el index de la calculadora de propiedades, para ingresar a la sección de cálculo de alguna propiedad hay que hacer click sobre el nombre de dicha propiedad, por otro lado la Figura 8 muestra el esquema que tienen este tipo de ambientes; en la parte izquierda están ubicadas las casillas con los datos de entrada que cada propiedad necesita para su calculo, en la parte central hay un cuadro del cual se puede seleccionar la sustancia o la mezcla involucrada en el calculo, y finalmente en la parte derecha se encuentran los botones con sus funciones respectivas y el cuadro donde se presenta la respuesta.

Figura 8. Calculo de la temperatura de rocío



Luego de construir la parte correspondiente a la calculadora de propiedades, se crearon los ambientes que contienen los conceptos teóricos que envuelven la destilación continua y el modelo matemático de Sorel. Los conceptos que fueron tratados son: aspectos termodinámicos, equilibrio líquido vapor, conceptos de destilación.

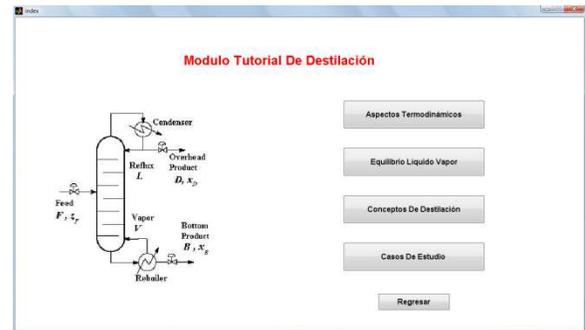
En los aspectos termodinámicos se encuentran explicados temas acerca de presión de vapor y los modelos más comunes para su cálculo, capacidad calórica, entalpías de mezcla de vapor y de líquido.

En la sección correspondiente a equilibrio líquido vapor encontramos los modelos más comunes para el cálculo de coeficientes de actividad, coeficientes de fugacidad, cálculo de la constante de equilibrio en términos termodinámicos, cálculo de temperatura de burbuja y rocío, y finalmente encontramos una secuencia para la construcción de equilibrios líquido vapor.

Por último en los conceptos de destilación se puede apreciar la nomenclatura con la cual están desarrollados los balances, la deducción de las ecuaciones fundamentales, balances de masa y energía globales, balances de masa y energía en la zona de enriquecimiento y en el condensador, balance de masa y energía en la zona de agotamiento y en el reehervidor, balance de masa y energía en la zona de alimentación.

Para hacer más fácil y didáctico el ingreso y obtención de esta información se creó un ambiente tipo menú, el cual permite ingresar a cualquiera de los tres temas y también permite ingresar a la zona de los casos de estudio. En la Figura 9 se presenta dicho ambiente.

Figura 9. Index del modulo tutorial de destilación.



Finalmente se diseñaron los ambientes de los casos de estudio, los casos de estudio como ya se había mencionado son la parte más importante del modulo, por tal razón estos ambientes computacionales son los más didácticos que posee el software. Para hacer más fácil el ingreso a cada uno de los casos de estudio se desarrolló un ambiente tipo menú que permitiera ir al caso de estudio deseado. El esquema de este ambiente es presentado en la Figura 10.

Al igual que en los ambientes de la calculadora de propiedades los espacios disponibles para los datos de entrada que requiere el modelo matemático de Sorel se encuentran en la parte izquierda.

En la Figura 11 se presenta el ambiente para el caso de estudio número, con base a este gráfico se explicarán las principales características de estos ambientes. En primer lugar hay que mencionar que los espacios para ingresar los valores que corresponden a las variables de entrada del modelo matemático de Sorel. Para evitar confusiones con la nomenclatura usada en el modulo tutorial, se instaló un botón llamado ver torre, el cual se encuentra ubicado al lado izquierdo y en la parte baja del ambiente, este botón abre un nuevo ambiente en el

cual se puede apreciar la grafica de un torre de destilación con las variables de entrada del modelo de Sorel en su respectivo lugar y con su nomenclatura respectiva.

Figura 10. Index de los casos de estudio.

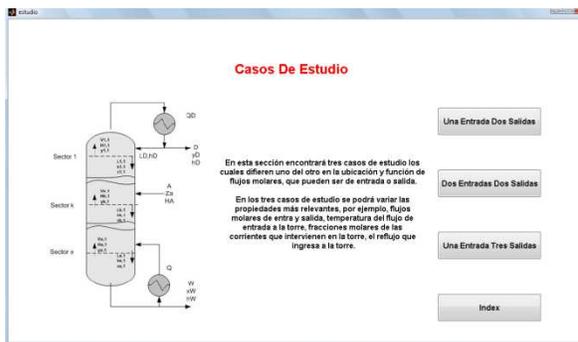


Figura 11. Ambiente computacional para el caso de estudio 2



Los botones balance de masa y balance de energía activan el cálculo de dichos balances, los resultados son presentados en los espacios vacíos que están debajo de cada botón. Por ultimo el botón resolver inicia el cálculo del número de etapas ideales según el modelo matemático de Sorel, los resultados que el modulo presenta son: Rmin, relación de reflujo mínima; Pe, platos

o etapas en la zona de enriquecimiento; Pm, platos en la zona media de la torre; Pa, platos en la zona de agotamiento y Pt, Número de platos total necesarios para la separación planteada.

3. MODELOS Y SUPOSICIONES EMPLEADAS EN LA CONSTRUCCIÓN MATEMÁTICA DEL MODELO TUTORIAL.

A continuación se dan a conocer los modelos empleados para el calculo de las propiedades necesarias y las suposiciones del caso.

Para el cálculo de la presión de vapor, capacidades calóricas y las entalpias de vaporización, se utilizaron polinomios y las constantes fueron obtenidas del manual del ingeniero químico.

Para el cálculo de las entalpias de mezcla se tomaron en cuenta las siguientes suposiciones:

- Se tomo el principio de mezcla total
- Se calcula Cp de mezcla a partir del principio de mezcla ideal.
- Para las entalpias de mezcla de vapor no se toma en cuenta el calor sensible.
- El calor de disolución de mezcla se tomo a disolución infinita.

Las temperaturas de burbuja y rocío se obtuvieron cumpliendo el objetivo que involucra la constante de constante de equilibrio y la fracción molar de las sustancias involucradas.

Para finalizar los coeficientes de actividad fueron calculados por medio de la ecuación

de Van Laar. No se calcularon coeficientes de fugacidad, de este modo se asume que la fase de vapor es ideal a lo largo de la torre.

4. COMPARACIÓN DE LOS DATOS OBTENIDOS FRENTE A FUENTES EXTERNAS.

Los datos que arrojo el modulo tanto en al sección de la calculadora de propiedades como en los diferentes casos de estudio fueron confrontados con un simulador no comercial y datos recopilados de artículos y bibliografías. En primer lugar se presentan la comparación de datos para la calculadora de propiedades.

Tabla 1. Tabla comparativa para la presión de vapor.

Sustancia	Prom T (K)	Prom Pt (KPa)	Prom Pm (Kpa)	%	Desviación Std
Metanol	282,78	21,2783	21,7403	0,0217	33,0757
Benceno	289,31	21,2783	21,3350	0,0027	32,5120
Etanol	296,46	21,2783	21,7264	0,0211	32,8663
Tolueno	311,88	21,2783	21,2915	0,0006	32,6541

En la Tabla 1 se presentan la comparación de los datos calculados para la presión de vapor, Pt es la presión de vapor que se encuentra reportada en el manual del ingeniero químico en el capítulo 2, por otro lado Pm la presión de vapor calculada por el modulo. El porcentaje de error es muy bajo para todas las sustancias, lo cual dice que el cálculo de

la presión de vapor fue programado con éxito.

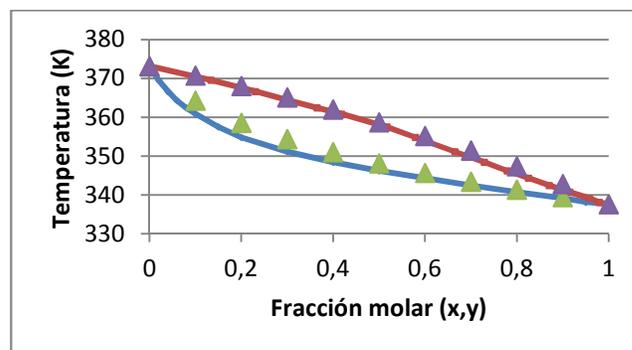
Tabla 2. Tabla comparativa para la capacidad calórica.

Sustancia	Prom T (K)	Prom Pt (KPa)	Prom Pm (KPa)	%	Desviación Std
Benceno	374,5375	160,4135	161,43075	0,63414239	32,98003167
Agua	323,786667	75,5533	75,5851	0,04208947	0,372892335

Al igual que para la presión de vapor el error reportado en la Tabla 2 es muy pequeño, a pesar de que solo se hace el estudio para dos sustancias se puede concluir que el modelo establecido para el cálculo de las capacidades calóricas es efectivo.

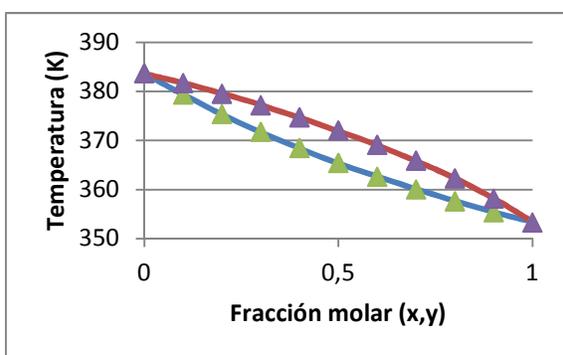
A continuación se comparan los equilibrios que son construidos por el software y equilibrios que fueron encontrados en la bibliografía.

Figura 12. Comparación del equilibrio metanol agua



La Figura 12 muestra el equilibrio citado en una fuente teórica, el cual corresponde a las líneas, por otro lado los triángulos representan los puntos calculados por el modulo tutorial. En esta comparación lo que se quiere es medir la exactitud de los modelos para calcular la presión de vapor, y las temperaturas de burbuja y rocío.

Figura 13. Comparación del equilibrio tolueno benceno.



En las Figuras 12 y 13 se presentan los equilibrios teóricos y calculados por el modulo. Las presiones de vapor para estas sustancias son calculadas con eficiencia, las líneas y puntos de los equilibrios inician y terminan en la misma parte. El comportamiento de las líneas de reparto de líquido y vapor tienen prácticamente el mismo comportamiento para el sistema tolueno benceno, por otro lado para el sistema metanol agua, la línea de reparto de vapor tiene el mismo comportamiento que los puntos calculados por el modulo, sin embargo la línea de reparto de líquido tiene una desviación con respecto a los puntos calculados.

Con base a lo anterior la forma en que los coeficientes de actividad y la constante de equilibrio fueron calculados, es la adecuada, el comportamiento de las líneas con respecto a los puntos calculados por el modulo son óptimos. La suposición hecha con respecto al vapor es acertada, las líneas de reparto de vapor con respecto a los puntos calculados son los mismos, sin embargo para zona de líquido se pueden llegar a presentar algunas diferencias, esto se presenta debido al modelo seleccionado para el cálculo de los coeficientes de actividad, el cual no es preciso para todas las sustancias seleccionadas.

Para corroborar el número de platos ideales que calcula el modulo tutorial para una mezcla específica se hace una comparación de este valor con obtenidos de diferentes bibliografías y de un simulador no comercial.

Tabla 3. Benceno – Tolueno usando simulador no comercial.

Método	F (Kmol/h)	z	y	x	P (KPa)	T (K)	N*R min	P m	P s
Sorel	500	0,4	0,9	0,1	150	300	1,5	7	8
sorel	500	0,4	0,9	0,1	300	300	1,5	8	9
sorel	500	0,4	0,9	0,1	400	300	1,5	8	10
sorel	500	0,4	0,9	0,1	400	400	1,5	8	11
sorel	500	0,4	0,9	0,1	101	300	1,5	7	8

En la Tabla 3 se dan a conocer los valores que fueron ingresados al simulador no comercial y al modulo tutorial. En la tabla Pm son el número de etapas calculadas por el modulo y Ps son las etapas calculadas por el simulador. Los datos son muy cercanos en con cierto tipo de condiciones en los datos de entrada. Es importante aclarar que el simulador no tiene opción de ingresar la temperatura de alimentación a la torre.

En la Tabla 4 se presenta una nueva comparación de datos calculados por el modulo frente a la bibliografía específica. En este caso los resultados son muy buenos frente a los teóricos. En este caso la temperatura y la calidad del alimento son conocidas, lo cual hace que esta comparación sea más específica que la presentada en la Tabla 3.

A partir de las graficas y tablas presentadas anteriormente se puede concluir:

Tabla 4. Benceno tolueno frente a bibliografía.

Método	F (Km ol/h)	z	y	x	P (K Pa)	T (K)	N* R min	P m	P b	Fuente
Mc Thi ele	100	0,5	0,9	0,1	10,1	36,5	1,5	5	4,9	Artículo
Mc Thi ele	100	0,45	0,95	0,1	10,1	30,0	1,5	8	7,3	Artículo
Mc Thi ele	100	0,45	0,95	0,1	10,1	30,0	1,5	8	7	Geankoplis
Mc Thi ele	350	0,44	0,97	0,023	10,1	29,3,15	1,5	1,1	1,1	Mc Cabe
P Sav arit	100	0,45	0,95	0,1	10,1	30,0	1,5	8	7,6	Geankoplis
N	100	0,42	0,91	0,1	10,1	35,3,15	0,7	9	7	Artículo

- El soporte termodinámico del modulo es aceptable, los modelos seleccionados fueron programados con éxito, lo cual genera datos coherentes.
- Las propiedades necesarias para el cálculo de etapas ideales según el modelo de Sorel, aportan valores óptimos frente a datos teóricos.
- Los coeficientes de actividad pueden presentar alguna discrepancia para algunos sistemas debido a la falta de exactitud que aporta el modelo de Van Laar.
- Finalmente el modelo de Sorel programado bajo la plataforma de Matlab arroja una serie de datos satisfactorios, lo cual genera una herramienta didáctica y diferente para estudiantes de ingeniería química.

5. Conclusiones.

Se conformo un modulo tutorial con las características y propiedades necesarias para la conformación de una

herramienta computacional, que cuente con un enfoque didáctico y de ayuda en el desarrollo académico y a su vez permita mayor facilidad en la asimilación de los conceptos que son estudiados.

Se generaron una serie de algoritmos de solución tanto del modelo matemático de Sorel como de los demás cálculos requeridos por este modelo, con el fin de obtener una solución que contemple todos los requerimientos que exige este método de cálculo numérico riguroso.

Se desarrolló un módulo tutorial de destilación basado en el modelo de Sorel, con tres casos de estudio que el usuario puede utilizar de forma interactiva y visualizar por medio de ellos los resultados que desee. Además está provisto de una calculadora de propiedades, que brinda al usuario una herramienta extra con fines prácticos.

Se evaluó el módulo tutorial con el fin de confrontar la veracidad de las respuestas que este genera, esta validación se estableció contra los datos teóricos principalmente, con el fin de tener la certeza de que se había implantado un algoritmo de solución que funciona correctamente, obteniendo una serie de resultados satisfactorios.

Finalmente Matlab fue la herramienta computacional que se seleccionó como plataforma del módulo tutorial ya que cuenta con todas las necesidades que se requerían para la conformación del módulo tutorial, teniendo la capacidad de resolver los algoritmos que se programaron y a su vez contribuyendo con la generación de interfaces gráficas

que fueron de gran ayuda durante el desarrollo de este proyecto.

6. Bibliografía.

- DOUGLAS, James. Conceptual Design of Chemical Processes. McGraw-Hill, Inc., 1988.
- GEANKOPLIS C. J., Procesos de transporte y operaciones unitarias, México, Cecsca, 1998.
- HENLEY E. J., Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química, México, Reverté S.A., 2000.
- KING, C. Judson. Separation Processes, Second Edition. McGraw-Hill, Inc., 1980.
- MARCHAND Patrick, Graphics and GUIs with Matlab, New York, Chapman & Hall/CRC, 2003.
- MARCILLA GOMIS, A., Introducción a las operaciones de separación, Madrid, Espagráfica, 1998.
- McCABE L. Warren, Operaciones unitarias en ingeniería química, España, McGraw Hill, 1991.

- MODELAMIENTO DE LA TORRE DE DESTILACIÓN ETANOL-AGUA DE LA UNIVERSIDAD DE AMERICA Y PLANTEAMIENTO DE UN SISTEMA DE CONTROL. Desarrollado por Sonia Calderon y Irina Bernal Castro, 2006.
- PERRY H. Robert, Chemical Engineers Handbook, New York, McGraw-Hill, 1999.
- SIMULADOR DE PROCESOS DE DESTILACIÓN H&M. Elaborado por Mauricio Satizábal Barragán y Helbert Yate Carrillo, 1997
- SIMULACION DE UNA COLUMNA DE DESTILACION DE PROPILENO. Elaborado por Argemiro Romero Carrasquilla, 1997.
- TREYBAL Robert E., Operaciones de transferencia de masa, México, McGraw Hill, 1981.
- VACA M., A. Aplicación de las técnicas de colocación en el diseño de columnas de destilación Petilyuk, en: Revista Mexicana de ingeniería química, volumen 5, No. Su1, (2006).
- YANG Won Y., Applied numerical methods using Matlab, New Jersey, Wiley-Interscience, 2005.