

UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS ESPE-L

CARRERA DE INGENIERÍA PETROQUÍMICA

MODELO Y SIMULACIÓN DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN MULTICOMPONENTE DISCONTINUA CON RÉGIMEN DE REFLUJO VARIABLE PARA MEZCLA DE HIDROCARBUROS UTILIZANDO MÉTODOS CORTOS EN MATLAB.

AUTOR: MORENO CORRALES, ALEX SANTIAGO

DIRECTOR: Dr. Rer. Nat., PhD. RODRÍGUEZ MAECKER, ROMÁN NICOLAY





INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

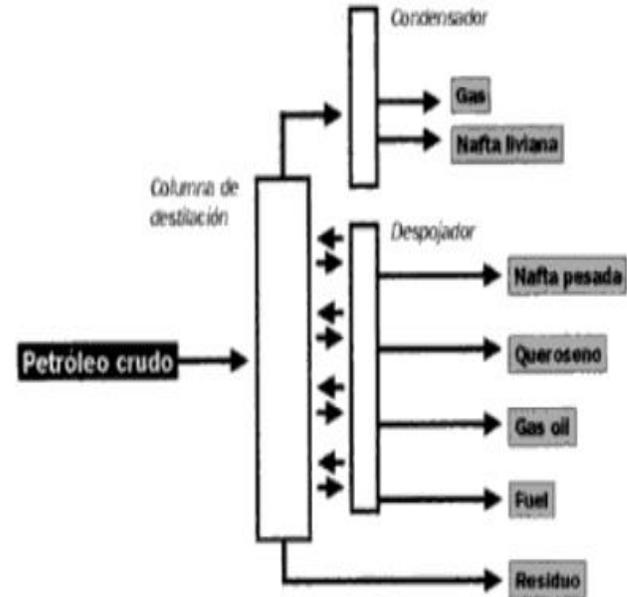
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Introducción

Destilación



Fuente: (Krell, 1982).



Introducción

Métodos cortos	Métodos rigurosos
Menor cantidad de ecuaciones (FUG)	Equilibrio, entalpía y balances de materia;
Bajo costo computacional	Alto costo computacional.
Menor tiempo de respuesta.	Excesivos tiempos de calculo computacional



INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

- Elaborar un programa de simulación de una columna de destilación multicomponente discontinua considerando un régimen de reflujo variable utilizando métodos cortos en Matlab.

OBJETIVOS

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Determinar las ecuaciones que permiten representar una columna de destilación Batch con régimen de reflujo variable para una mezcla multicomponente ideal por los métodos cortos.
- Simular el algoritmo de la columna de destilación discontinua por el método corto mediante programación en Matlab
- Evaluar los datos obtenidos de las composiciones del destilado y los fondos de la columna de destilación.
- Comparar los resultados obtenidos del proceso de destilación propuesto con las variables de salida de un simulador comercial.



INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Metodología

- Selección de mezcla**

Time	Index	Component	Mass %	Vol %	Mol %	Peak Area
3.893	301.4	propane	0.1076	0.1402	0.1884	0.935
4.205	355.6	i-butane	0.5209	0.6098	0.6918	4.578
4.473	398.9	n-butane	9.3676	10.5572	12.4418	82.325
4.609	409.7	2,2-dimethylpropane	0.0569	0.0628	0.0609	0.504
5.455	467.3	i-pentane	19.4615	20.4885	20.8231	172.220
5.985	498.9	n-pentane	21.2777	22.1645	22.7664	188.293
6.990	530.2	2,2-dimethylbutane	0.2415	0.2427	0.2163	2.146
8.048	558.1	cyclopentane	2.2320	1.9533	2.4568	20.316
8.279	563.7	2-methylpentane	8.8342	8.8234	7.9138	78.488
8.963	579.5	3-methylpentane	5.5794	5.4786	4.9981	49.571
9.905	599.3	n-hexane	8.5375	8.4456	7.6480	75.852
11.549	621.4	2,2-dimethylpentane	0.0835	0.0809	0.0644	0.745
11.718	623.5	methylcyclopentane	6.0281	5.2526	5.5294	54.868
12.023	627.1	2,4-dimethylpentane	0.3526	0.3419	0.2717	3.145
13.675	645.5	benzene	0.7012	0.5204	0.6930	6.874
14.594	654.7	cyclohexane	2.0514	1.7189	1.8817	18.673
15.620	664.4	2-methylhexane	1.5322	1.4728	1.1804	13.668
15.790	666.0	2,3-dimethylpentane	0.7966	0.7476	0.6137	7.106
16.076	668.5	1,1-dimethylcyclopentane	0.2860	0.2473	0.2249	2.603
16.632	673.4	3-methylhexane	2.0195	1.9172	1.5558	18.014
17.368	679.5	1c,3-dimethylcyclopentane	1.1578	1.0140	0.9103	10.538
17.722	682.4	1t,3-dimethylcyclopentane	1.0300	0.8972	0.8098	9.375
18.078	685.3	1t,2-dimethylcyclopentane	2.2581	1.9603	1.7754	20.554
20.002	699.7	n-heptane	2.3666	2.2579	1.8233	21.111
23.041	719.8	methylcyclohexane	2.1874	1.8544	1.7198	19.910
23.703	723.9	1,1,3-trimethylcyclopentane	0.1641	0.1431	0.1129	1.494
25.294	733.1	ethylcyclopentane	0.2943	0.2505	0.2314	2.679
30.181	758.3	toluene	0.4737	0.3564	0.3969	4.593

Se seleccionan a partir de parámetros de establecidos : componentes predominantes en la mezcla de nafta liviana seleccionada, temperaturas de ebullición no adyacentes

Figura 3. Caracterización de Nafta liviana por cromatografía de gases. Tomado de (Sinche A., 2012)

Metodología

- **Cálculo de composiciones**

Time	Index	Component	Mass %	Vol %	Mol %	Peak Area
3.893	301.4	propane	0.1076	0.1402	0.1884	0.935
4.205	355.6	i-butane	0.5209	0.6098	0.6918	4.578
4.473	398.9	n-butane	9.3676	10.5572	12.4418	82.325
4.609	409.7	2,2-dimethylpropane	0.0569	0.0628	0.0609	0.504
5.455	467.3	i-pentane	19.4615	20.4885	20.8231	172.220
5.985	498.9	n-pentane	21.2777	22.1645	22.7664	188.293
6.990	530.2	2,2-dimethylbutane	0.2415	0.2427	0.2163	2.146
8.048	558.1	cyclopentane	2.2320	1.9533	2.4568	20.316
8.279	563.7	2-methylpentane	8.8342	8.8234	7.9138	78.488
8.963	579.5	3-methylpentane	5.5794	5.4786	4.9981	49.571
9.905	599.3	n-hexane	8.5375	8.4456	7.6480	75.852
11.549	621.4	2,2-dimethylpentane	0.0835	0.0809	0.0644	0.745
11.718	623.5	methylcyclopentane	6.0281	5.2526	5.5294	54.868
12.023	627.1	2,4-dimethylpentane	0.3526	0.3419	0.2717	3.145
13.675	645.5	benzene	0.7012	0.5204	0.6930	6.874
14.594	654.7	cyclohexane	2.0514	1.7189	1.8817	18.673
15.620	664.4	2-methylhexane	1.5322	1.4728	1.1804	13.668
15.790	666.0	2,3-dimethylpentane	0.7966	0.7476	0.6137	7.106
16.076	668.5	1,1-dimethylcyclopentane	0.2860	0.2473	0.2249	2.603
16.632	673.4	3-methylhexane	2.0195	1.9172	1.5558	18.014
17.368	679.5	1c,3-dimethylcyclopentane	1.1578	1.0140	0.9103	10.538
17.722	682.4	1t,3-dimethylcyclopentane	1.0300	0.8972	0.8098	9.375
18.078	685.3	1t,2-dimethylcyclopentane	2.2581	1.9603	1.7754	20.554
20.002	699.7	n-heptane	2.3666	2.2579	1.8233	21.111
23.041	719.8	methylcyclohexane	2.1874	1.8544	1.7198	19.910
23.703	723.9	1,1,3-trimethylcyclopentane	0.1641	0.1431	0.1129	1.494
25.294	733.1	ethylcyclopentane	0.2943	0.2505	0.2314	2.679
30.181	758.3	toluene	0.4737	0.3564	0.3969	4.593

- La conversión de porcentaje molar a fracción molar.
- Multiplicación de la fracción molar i por la base de cálculo(100 Kmol).
- Sumatoria de los 12 compuestos seleccionados.
- Cálculo de la nueva fracción molar ($Flujo\ i / Flujo\ Total$).
- Donde i es el componente de mezcla.

Metodología

- Balance de masa global

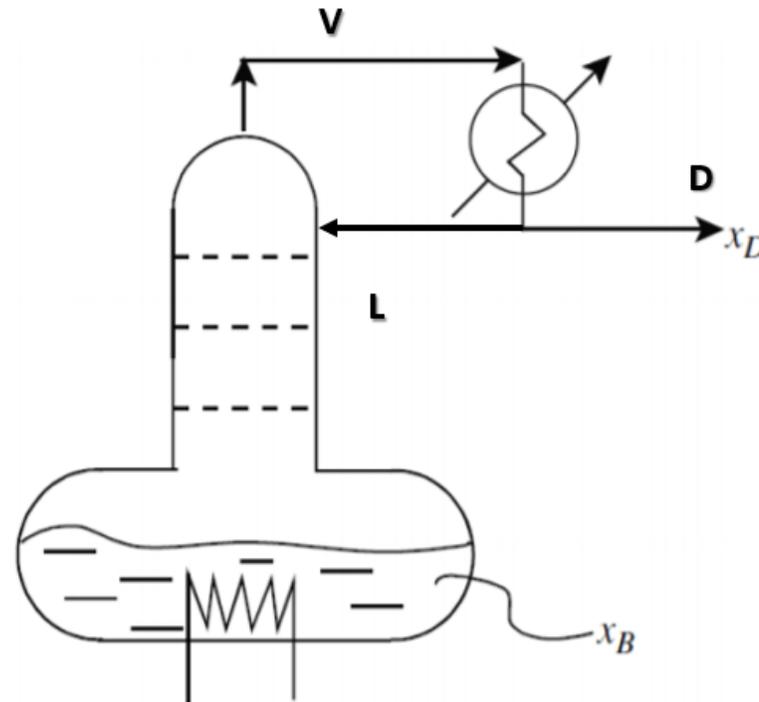
$$\frac{dB}{dt} = -D; \quad B_0 = F \quad R = \frac{L}{D}$$

- Balance de masa en el tope:

$$V = L + D$$

$$\frac{V}{D} = \frac{L}{D} + \frac{D}{D} = R + 1$$

$$D = \frac{V}{R + 1}$$



Metodología

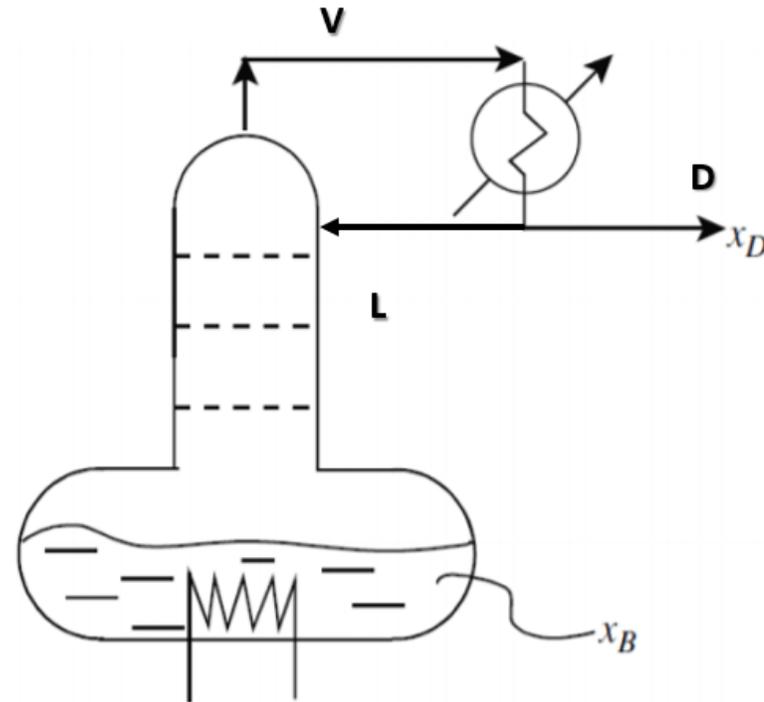
- Balance de masa por componentes

$$\frac{d[B \cdot x_f]}{dt} = -D \cdot x_D \quad x_f = x_B$$

$$B \frac{d[x_B]}{dt} + x_B \frac{d[B]}{dt} = -D \cdot x_D = \left(\frac{dB}{dt} \right) x_D$$

$$\frac{d[x_B]}{dt} = \frac{D}{B} [x_B - x_D]$$

$$\frac{d[x_B]}{dt} = \frac{V}{B(R+1)} [[x_B - x_D]]$$



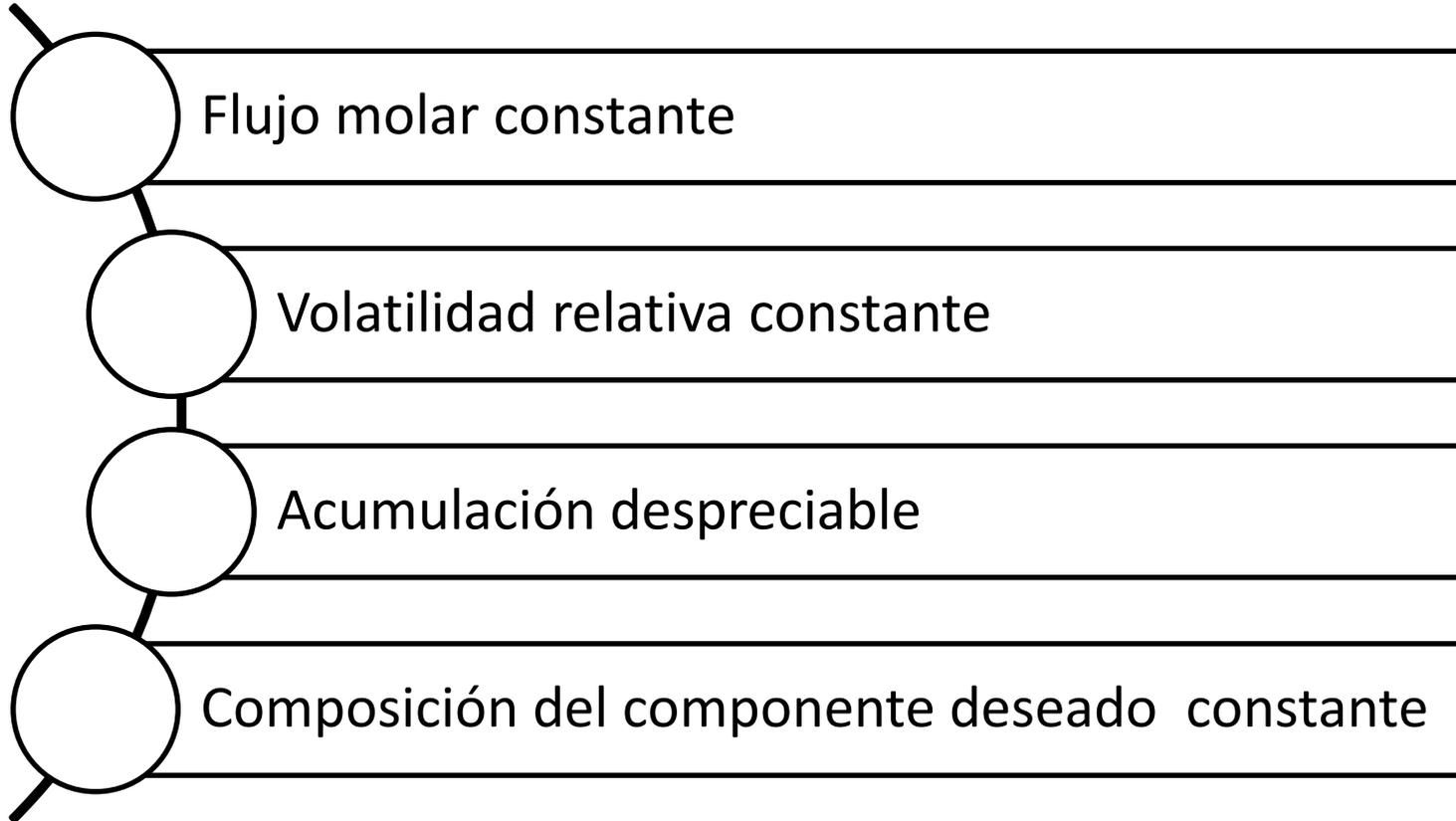
Metodología

- Ecuaciones de Fenske-Underwood-Gilliland

Ecuación de Fenske	Ecuación de Underwood	Ecuación de Gilliland
$N_{min} = \frac{\log \left\{ \left[\frac{x_D^{(i)}}{x_B^{(i)}} \right] \left[\frac{x_B^{(k)}}{x_D^{(k)}} \right] \right\}}{\log a_{i,k}}$	$\sum_{i=1}^N \frac{\alpha_{i,k} x_B^{(i)}}{\alpha_{i,k} - \phi} = 1 - q$ $R_{min} + 1 = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_{i,j} x_{i,F}}{\alpha_{i,j} - \phi}$	$Y = 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54.4X}{11 + 117.2X} \right) \left(\frac{X - 1}{X^{0.5}} \right) \right]$ $Y = \frac{N - N_{min}}{N + 1}$ $X = \frac{R - R_{min}}{R + 1}$
<p>Fuente: (Narváez García, Zavala Loría, Ruíz Marín, & Canedo López, 2017),</p>	<p>Fuente:(Banka & Dutta, 2016).</p>	<p>Fuente: (Sundaram & Evans, 1993).</p>

Metodología

- **Suposiciones a considerar para el método shortcut**



Metodología

- Algoritmo para el método cortó para destilación discontinua

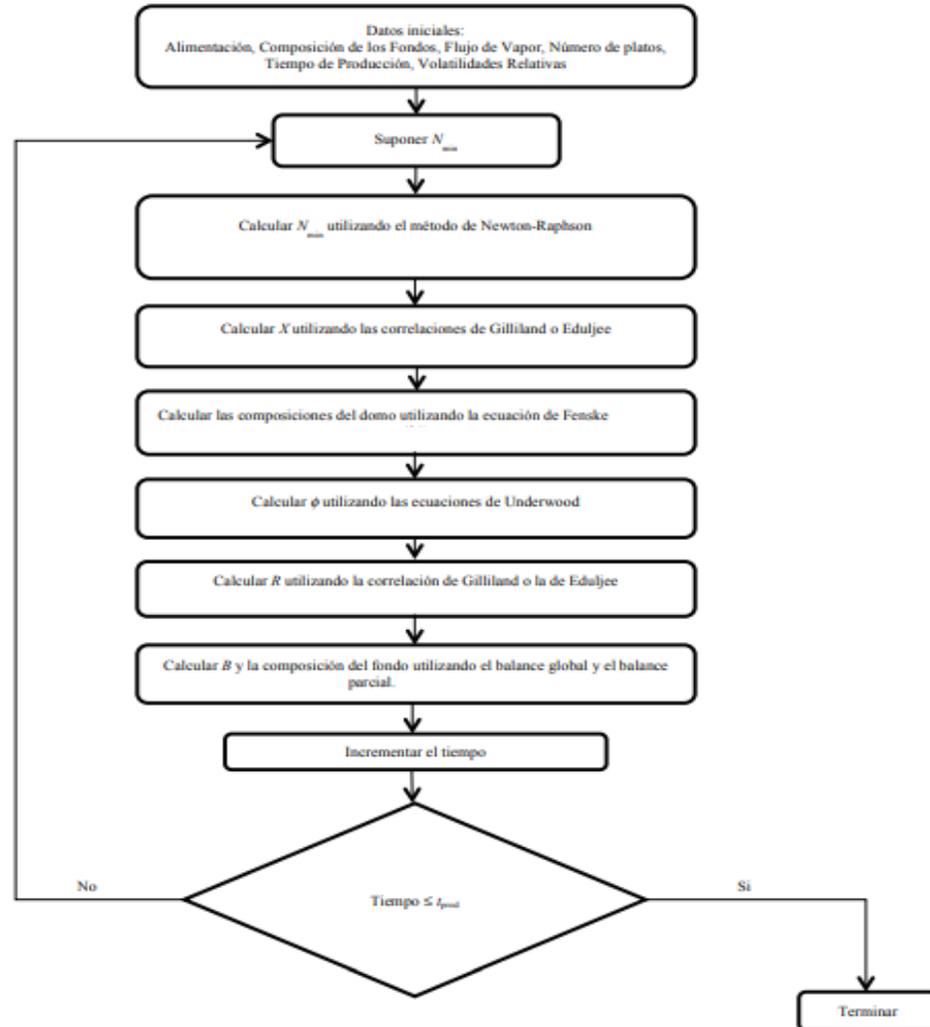


Figura 8. Algoritmo Shortcut para Destilación Batch Tomado de (Narváez García, Zabala Loría, Rocha Uribe, & Rubio Atoche, 2013)

Metodología

Ecuaciones

- Número mínimo de etapas

$$f(N_{min}) = x_D^{(1)} \left[\sum_{j=2}^N \left(\frac{x_B^{(j)}}{x_B^{(1)}} \right) \left(\frac{\alpha_{j,k}}{\alpha_{1,k}} \right)^{N_{min}} + 1 \right] - 1 = 0$$

$$f'(N_{min}) = x_D^{(1)} \left[\sum_{j=2}^N \left(\frac{x_B^{(j)}}{x_B^{(1)}} \right) \left(\frac{\alpha_{j,k}}{\alpha_{1,k}} \right)^{N_{min}} + \ln \left(\frac{\alpha_{j,k}}{\alpha_{1,k}} \right) \right]$$

$$N_{minnueva} = N_{min,anterior} - \frac{f(N_{min})}{f'(N_{min})}$$

- Correlaciones de Gilliland y Eduljee

$$Y = (0,75 - X)^{0,5668}$$

$$X = \left[1 - \frac{4}{3} \left(\frac{N - N_{min}}{N + 1} \right) \right]^{1,7643}$$

- Composición del destilado del domo

$$x_D^{(i)} = x_B^{(i)} \left[\frac{x_D^{(k)}}{x_B^{(k)}} \right] \alpha_{i,k}^{N_{min}} \quad i = 1, 2, 3 \dots n, i \neq k$$

- Determinación del reflujo mínimo Rmin

$$\sum_{i=1}^N \frac{\alpha_{i,k} x_B^{(i)}}{\alpha_{i,k} - \phi} = 1 + q \quad R_{min} + 1 = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_{i,j} x_{i,F}}{\alpha_{i,j} - \phi}$$

- Determinación del reflujo R

$$R = \frac{X - R_{min}}{1 - X}$$

Metodología

Ecuaciones

- **B Remanente**

$$\frac{dB}{dt} = -D; \quad B_o = F$$

$$\frac{\Delta B}{\Delta t} = -D$$

$$\Delta B = -D \cdot \Delta t$$

$$B_N = B_A - D \cdot \Delta t$$

$$B_N = B_A - \frac{V}{R+1} \cdot \Delta t$$

Composición del reboiler

$$\frac{d[x_B]}{dt} = \frac{V}{B(R+1)} [[x_B - x_D]]$$

$$\Delta x_B^{(i)} = \frac{D}{B} [x_B^{(i)} - x_D^{(i)}] \cdot \Delta t$$

$$\Delta x_B^{(i)} = \frac{D}{B} [x_B^{(i)} - x_D^{(i)}] \cdot -\frac{\Delta B}{D} \quad \Delta t = -\frac{\Delta B}{D}$$

$$\Delta x_B^{(i)} = [x_D^{(i)} - x_B^{(i)}] \cdot \frac{\Delta B}{B}$$

$$\Delta x_B^{(i)} = x_{B_N}^{(i)} - x_{B_A}^{(i)}$$

$$x_{B_N}^{(i)} = x_{B_A}^{(i)} + [x_B^{(i)} - x_D^{(i)}]_A * \left| \frac{B_N - B_A}{B_A} \right|$$

Metodología

- Parámetros de operación

Parámetro	Valor
Presión (mmHg)	760
Flujo de vapor(Kmol/h)	110
Alimentación(kmol)	200
Composición Deseada(%)	99
$\Delta T(H)$	0.1

Metodología

- *Simulación del proceso de destilación Batch*

1. Selección de componentes

2. Selección del paquete termodinámico

3. Corriente de alimentación

4. Columna de destilación

5. Selección del N plato y la P del condensador

6. Sección del R, Tiempo y flujo de vapor



INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Resultados

Número	Componente	Composición Molar
1	n-butano	0,13636612734578
2	i-pentano	0,22822786946696
3	n-pentano	0,24952706212968
4	ciclopentano	0,02692731772437
5	2-metilpentano	0,08673779184596
6	3-metil pentano	0,05478078261079
7	n-hexano	0,08382453840606
8	Metilciclopentano	0,06060400139415
9	ciclohexano	0,02062403686175
10	2-metilhexano	0,01293756343286
11	1t,2-dimetilciclopentano	0,01945895469222
12	n-heptano	0,01998395408941

Alimentación

Temperatura de operación

Temp C	32.1129
Pres mmHg	760
Vapor Fraction	0

Resultados

Presión de vapor

$$\log_{10} Pv = A + \frac{B}{C + T(^{\circ}\text{C})} \quad Pv = [\text{mmHg}]$$

PROPIEDADES				
Nº	Componente	P.VAPOR [mmHg]	T.Ebullicion [°C]	
1	n-Butano	28.819747	-0.489907	
2	i-Pentano	19.000773	27.830255	
3	n-Pentano	16.787549	36.060267	
4	Ciclopentano	13.713740	49.250747	
5	2-Metilpentano	11.618135	60.209248	
6	3-Metilpentano	11.070061	63.270531	
7	n-Hexano	9.988879	68.709951	
8	Metilciclopentano	9.682572	71.849892	
9	Ciclohexano	8.197585	80.749851	
10	2-Metilhexano	7.111103	90.051559	
11	1t,2-dimetilciclopentano	7.012081	91.869531	
12	n-Heptano	6.109072	98.427660	

Volatilidad relativa

Nº	Componente	V.Relativa
1	n-Butano	1.516767
2	i-Pentano	1.000000
3	n-Pentano	0.883519
4	Ciclopentano	0.721746
5	2-Metilpentano	0.611456
6	3-Metilpentano	0.582611
7	n-Hexano	0.525709
8	Metilciclopentano	0.509588
9	Ciclohexano	0.431434
10	2-Metilhexano	0.374253
11	1t,2-dimetilciclopentano	0.369042
12	n-Heptano	0.321517

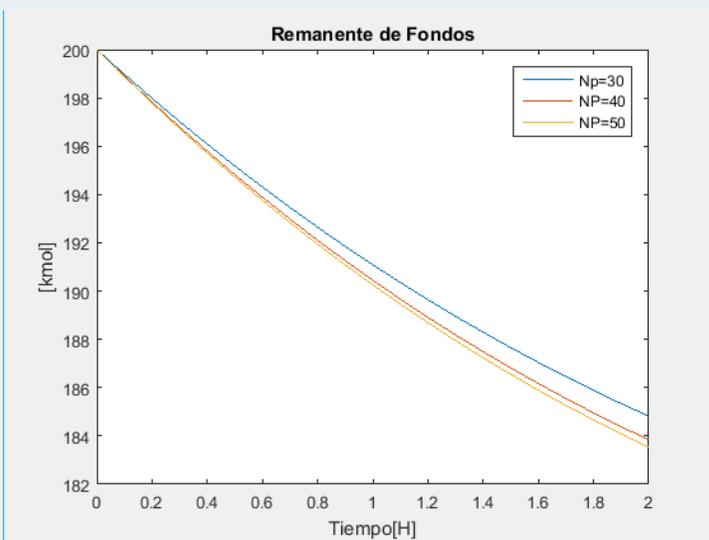


Resultados

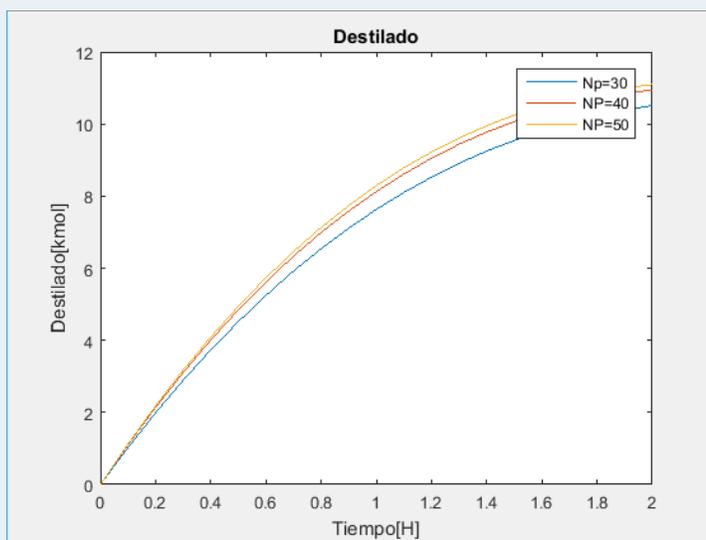
Elemento	Evaluación	Evaluación	Evaluación
	1	2	3
NP	30	40	50
Tiempo (H)	2	2	2
Alimentación (Kmol)	200	200	200
Remante Total (Kmol)	184.815	183.833	183.5275
Destilado Total (Kmol)	10.515	10.947	11.0929
Número Mínimo (Nmin)	12.7601-14.478	12.7601-14.6522	12.7601-14.7103
Reflujo (R)	9.7302-19.923	8.9685-19.0962	8.7684-18.8325
Reflujo Mínimo (Rmin)	8.7523-16.9468	8.7523-18.1638	8.7523-18.6155
XB1	0.0665	0.0617	0.0601
XD1	0.99	0.99	0.99
Ø	1.3632-1.4332	1.3632-1.4385	1.3632-1.4403

Resultados

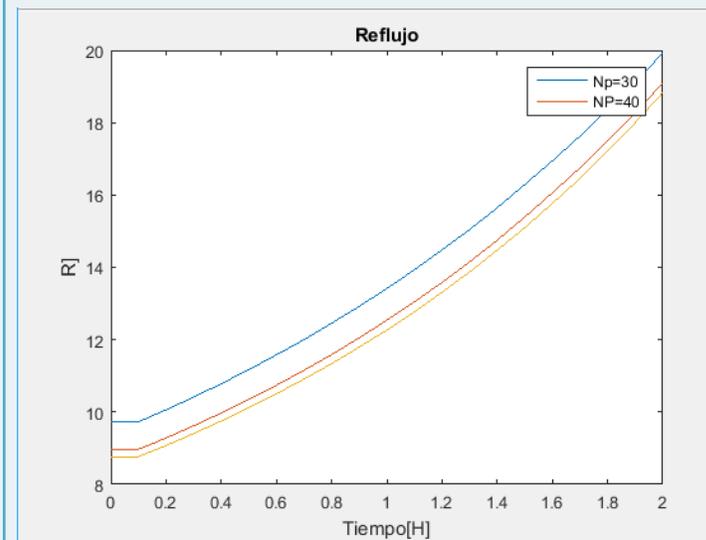
Gráficas Evaluaciones



Variación del remanente en los fondos



Variación del flujo de destilado

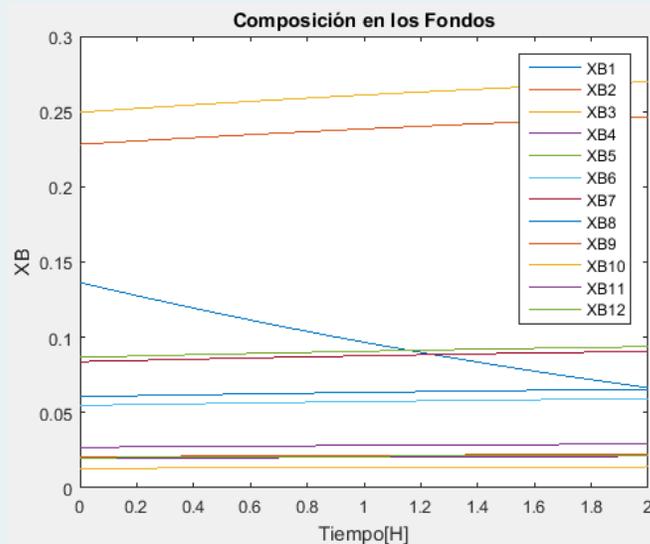


Variación del reflujo

Resultados

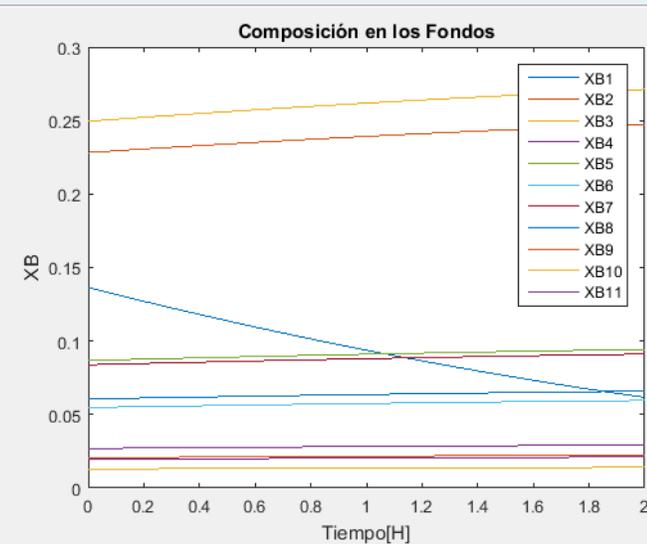
Gráficas Evaluaciones

Evaluación 1: NP=30



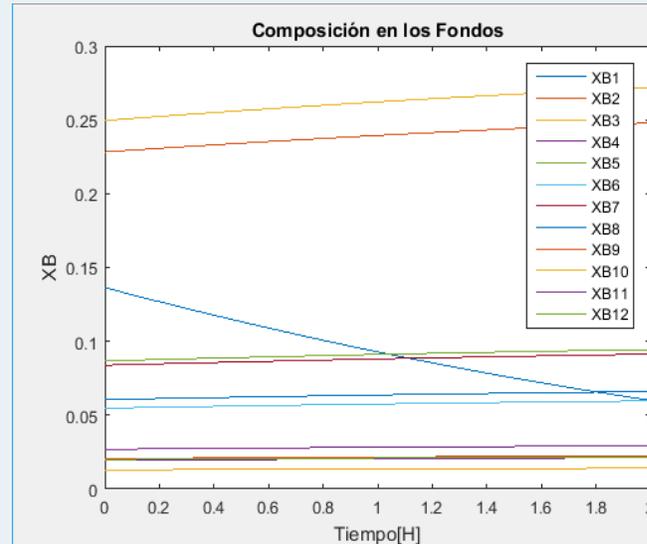
Variación de la composición del Fondo

Evaluación 2: NP=40



Variación de la composición del Fondo

Evaluación 3: NP=50

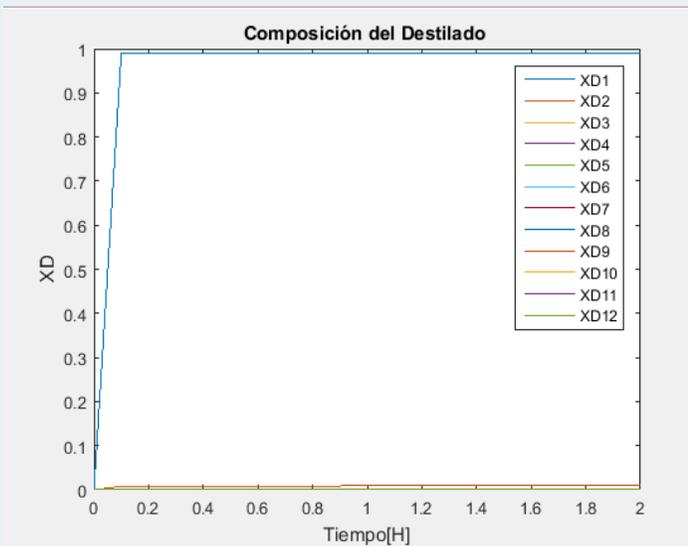


Variación de la composición del Fondo

Resultados

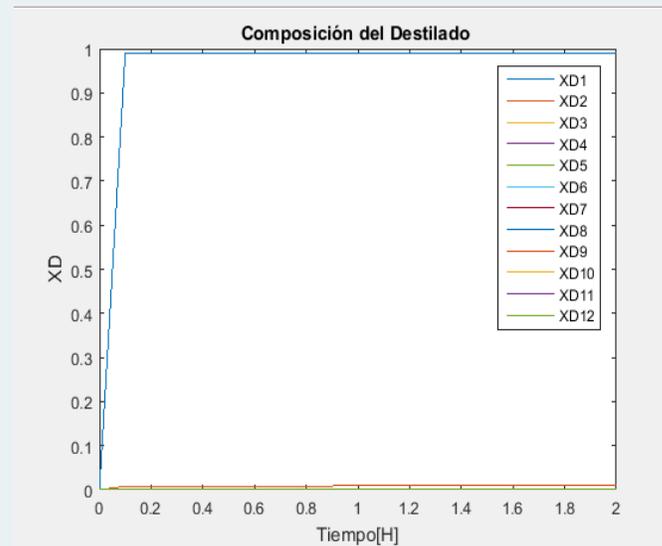
Gráficas Evaluaciones

Evaluación 1: NP=30



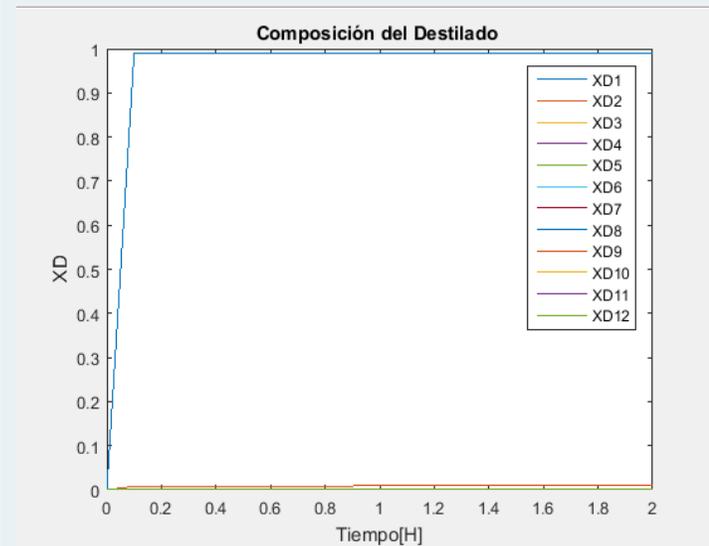
Variación de la composición del Destilado

Evaluación 2: NP=40



Variación de la composición del Destilado

Evaluación 3: NP=50

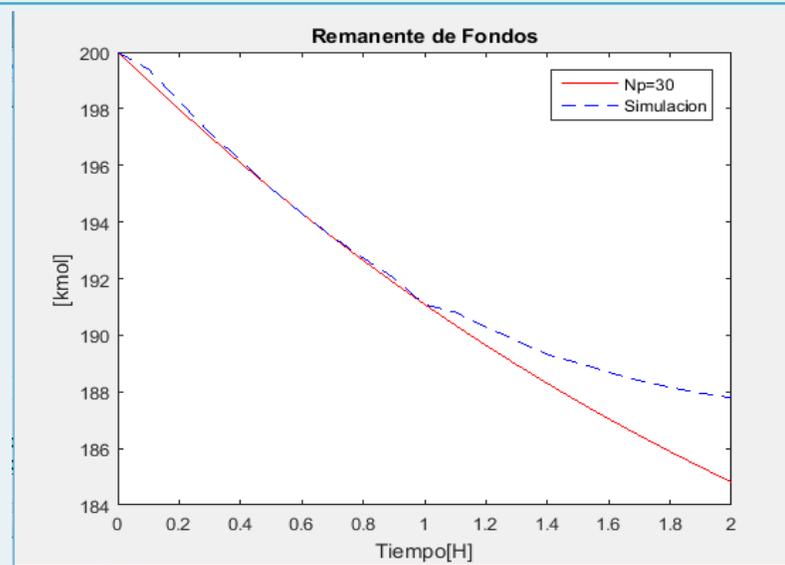


Variación de la composición del Destilado

Resultados

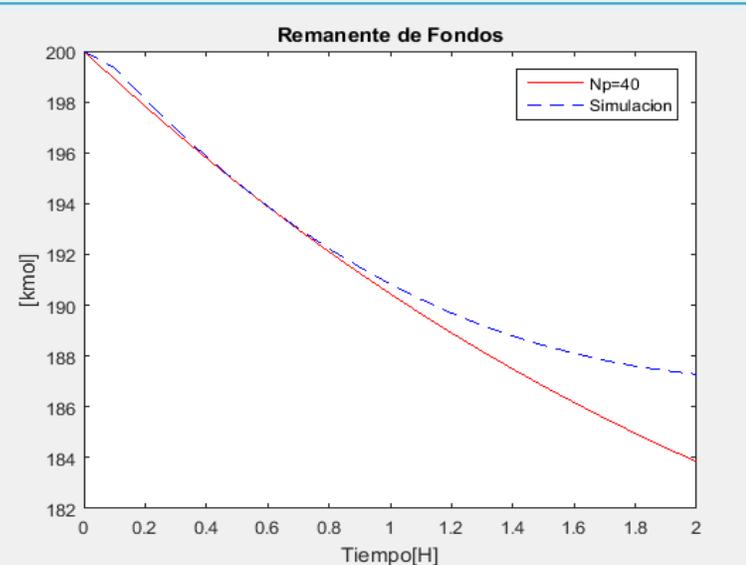
Comparación de evaluaciones 1 y 2 vs simulador

Evaluación 1: NP=30



Variación de la composición del fondos

Evaluación 2: NP=40

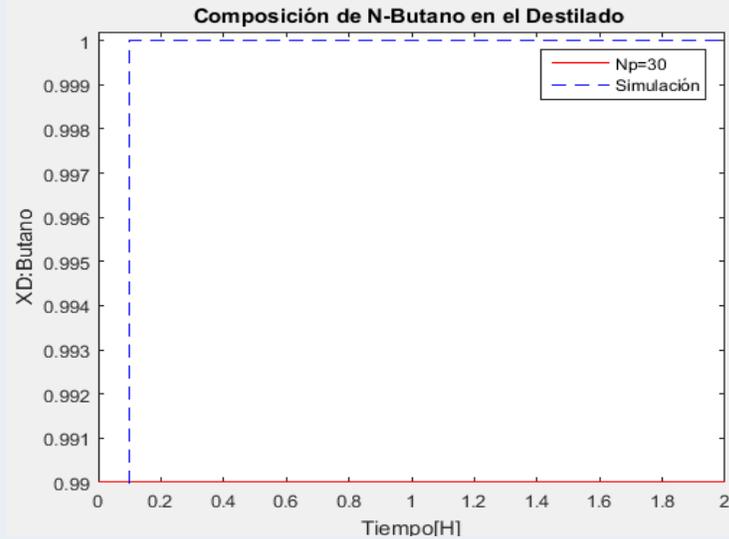


Variación de la composición del Fondo

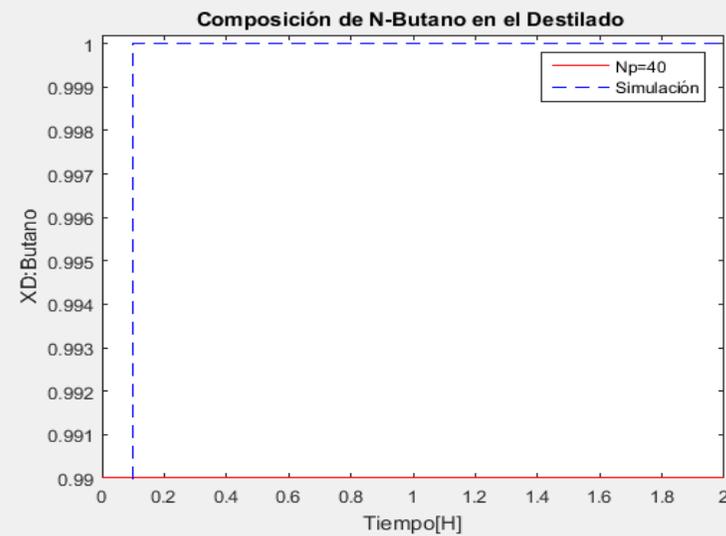
Resultados

Comparación de Evaluaciones 1 y 2 vs simulador

Evaluación 1: NP=30



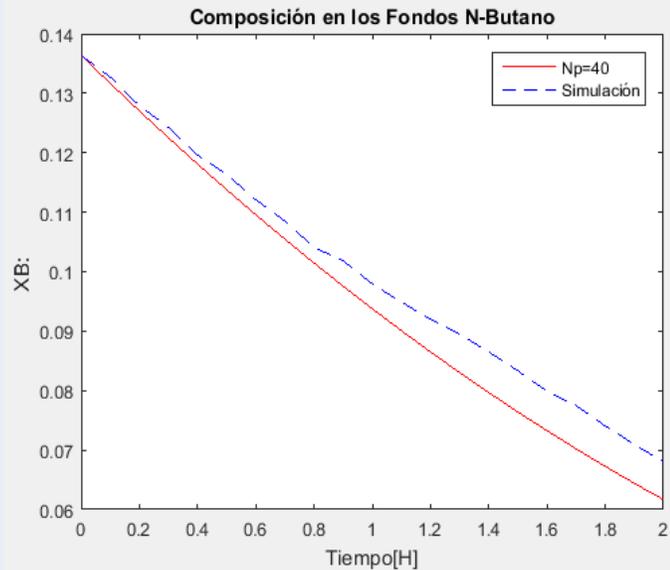
Evaluación 2: NP=40



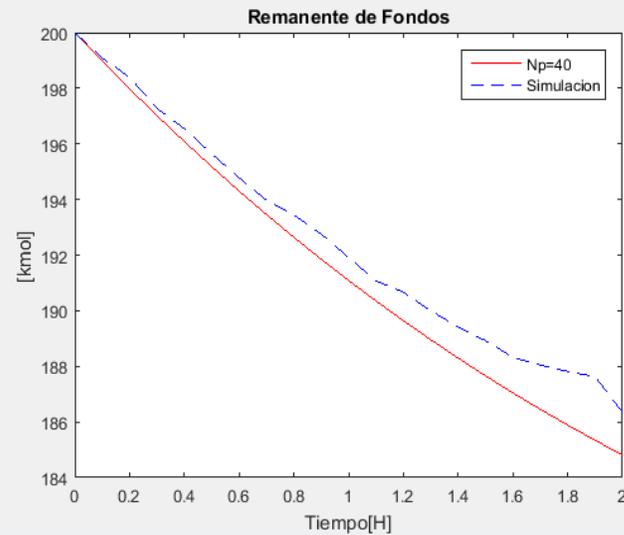
Resultados

Comparación de Evaluación vs simulador

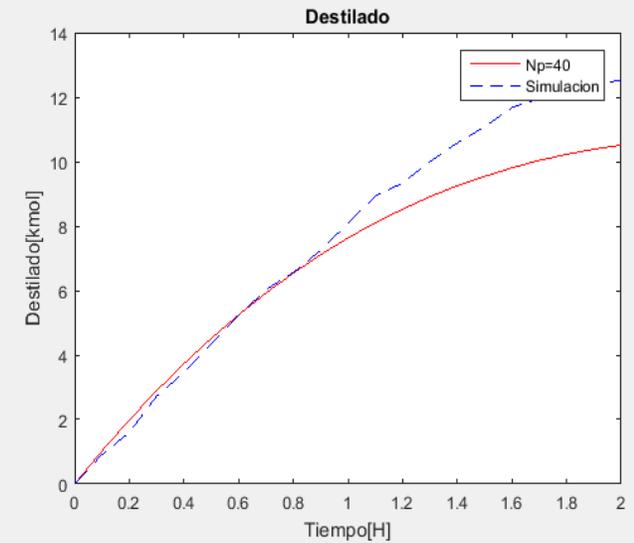
Composicion



Remanente



Destilado



INTRODUCCIÓN

OBJETIVOS

METODOLOGÍA

ANÁLISIS DE RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES



Conclusiones

- Al realizar el modelamiento de las ecuaciones que representan el comportamiento de una columna de destilación Batch por métodos cortos, se puede evidenciar que los parámetros utilizados para la representación son menores en comparación con otros métodos más complejos que establecen diferentes condiciones para su representación.
- Al realizar las pruebas con la función programada en Matlab para el cálculo del número mínimo de etapas se obtuvo un tiempo de respuesta menor a comparación con la función Newton Raphson preestablecida por Matlab.
- Luego de haber realizado las pruebas se determinó que en la columna de destilación Batch con 30 platos presentó una relación de reflujo de 19.923 a un número mínimo de etapas de 14.478, con un flujo de destilado de 10.515 kmol y un remanente en los fondos de 184.815 kmol; asimismo, se determinó que una columna de destilación Batch con 40 platos requiere un reflujo de 19.0962 a un número de etapas mínimas de 14.6522, con un flujo de destilado de 10.947 kmol y un remanente en los fondos de 183.833 kmol; y al incrementar el número de platos de una columna de destilación Batch a 50 el reflujo es de 18.8325, el número mínimo de etapas es de 14.7103, al comparar las evaluaciones se concluye que a un mayor número platos, la columna de destilación Batch se necesita un menor reflujo con un mayor su número mínimo de etapas al culminar el tiempo de operación.

CONCLUSIONES

- Al comparar las composiciones de salida del componente clave ligero en los fondos de todas las evaluaciones realizadas, se determina que, a un mayor número de etapas las composiciones de los fondos son menores, con un mayor flujo de recuperación del componente clave ligero de la mezcla.
- La resolución del modelo matemático que involucró programación para el proceso de destilación Batch para una mezcla multicomponente, permite determinar los resultados con un margen de error menor al 10%, siendo el factor determinante el flujo de vapor.

Recomendaciones

- Se recomienda crear funciones de cálculo para cada una de las ecuaciones que representan el algoritmo de método corto dentro del programa, ya que el proceso es interactivo y repetitivo a fin de simplificar las líneas de código.
- Se recomienda validar el modelo matemático con volatilidades relativas variables ya que en una columna de destilación Batch real la existe variación de temperatura a lo largo de la columna de destilación.
- Se recomienda realizar un modelo matemático de una columna de destilación Batch, que permita la recuperación de productos por la región intermedia de la columna.

**GRACIAS
POR SU
ATENCIÓN**