

MODELADO Y SIMULACIÓN DE COLUMNAS BINARIAS DE DESTILACIÓN CON CONTROL DE INVENTARIO

Natividad Duro Carralero E-mail: nduro@dia.uned.es

Fernando Morilla García E-mail: fmorilla@dia.uned.es

Dpto de Informática y Automática, UNED, Avda. Senda del Rey, nº9, 28040 Madrid

Resumen

En este trabajo se presenta el modelo de una columna de destilación binaria, continua, con control de inventario, capaz de simular la destilación de todo tipo de mezclas, ideales y no ideales, de una forma sencilla, práctica y reutilizable. El modelo de la columna se ha subdividido en cinco submodelos básicos que representan: un plato cualquiera de la columna, un plato de alimentación, un conjunto de cabeza, un conjunto de fondo y un controlador.

Con estos submodelos se cubren dos objetivos relativos al modelado de columnas de destilación. Por un lado, conseguir el modelo que mejor se ajusta a la destilación de una mezcla dada en un punto de operación determinado. Y por otro lado, dada una columna de destilación predeterminada probar sobre ella la destilación de distintas mezclas.

El modelo de la columna se ha desarrollado en dos lenguajes de modelado bien distintos, tales como: Dymola y Simulink. Dymola porque, debido a su gran modularidad, facilita mucho la generación de distintas columnas, una vez se han modelado los submodelos comentados. Simulink porque facilita la simulación de la destilación de distintas mezclas sobre una columna predeterminada, debido a que es un lenguaje mucho más visual que Dymola.

Palabras Clave: Columna de destilación, Modelado, Control PID, Control de procesos.

1 INTRODUCCIÓN

La destilación es el método de separación de sustancias químicas puras, más antiguo e importante que se conoce. La época más activa de esta área de investigación fue entorno a los años 70, no obstante, hoy en día es un área de investigación relevante, con una gran acogida tanto en el ámbito industrial como en el universitario.

El proceso de destilación es fundamental en la elaboración de numerosos productos industriales, aunque sin duda es la industria petroquímica, el área

industrial en la cual el proceso de destilación adquiere una mayor importancia.

Las columnas de destilación utilizadas para realizar el proceso, constituyen un porcentaje significativo de la inversión que se realiza en plantas químicas y refinerías de todo el mundo. El coste de operación de las columnas de destilación es a menudo, la parte más costosa de la mayoría de los procesos industriales en los que interviene [1]. Por ello, el disponer de técnicas prácticas para modelar columnas de destilación más o menos realistas y el desarrollar sistemas de control eficaces y fiables es muy importante, a fin de conseguir, un funcionamiento eficaz y seguro de los sistemas de destilación industriales.

El objetivo de este trabajo es obtener el modelo dinámico de una columna de destilación más o menos realista, que sea capaz de destilar cualquier tipo de mezcla. La columna modelada representa una columna de destilación binaria, continua, con dos productos finales y N platos perforados ideales en su interior. (Ver Figura 1).

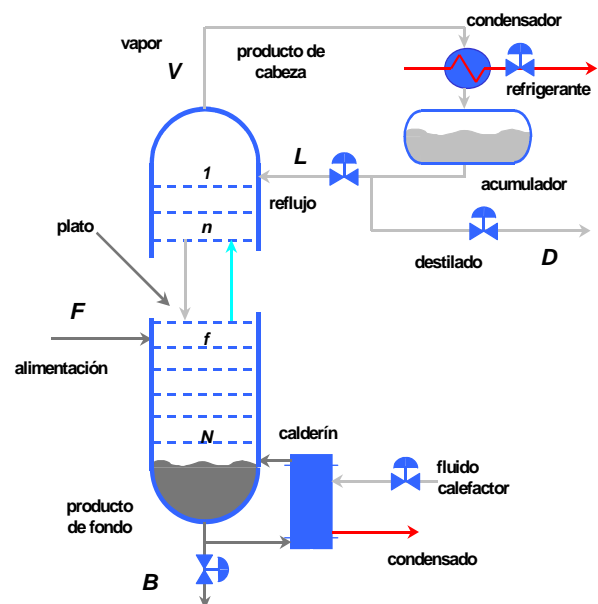


Figura 1: Columna de destilación

El modelo dinámico elegido es de tipo EMC [3], es decir, en cada etapa de equilibrio de la columna se considera que se cumplen, los balances de materia, composición y energía, además de las ecuaciones que definen el equilibrio líquido-vapor de la etapa y las relaciones hidráulicas de la misma. Sobre la columna a modelar se colocará además una estrategia de control de inventario, para regular las masas retenidas en acumulador y fondo.

En el siguiente apartado se presentan las características generales de cada uno de los submodelos que componen la columna. Con estos distintos submodelos se pretenden cubrir los dos objetivos relativos al modelado de columnas de destilación, que se han propuesto para este trabajo.

2 SUBMODELOS DE LA COLUMNA

El modelo de la columna se ha subdividido en cinco submodelos básicos, que representan: un plato cualquiera de la columna, un plato de alimentación, un conjunto de cabeza, un conjunto de fondo y un controlador PID. Repitiendo estos submodelos tantas veces sea necesario y conectándolos entre sí de forma conveniente, se obtiene el modelo de columna que se desee.

2.1 PLATO

Este submodelo representa un plato cualquiera de la columna (ver Figura 2). Y para generar el modelo de una columna de destilación concreta, debe ser repetido tantas veces como platos compongan la columna menos uno. El plato no modelado con este submodelo representa el plato de alimentación de la columna.

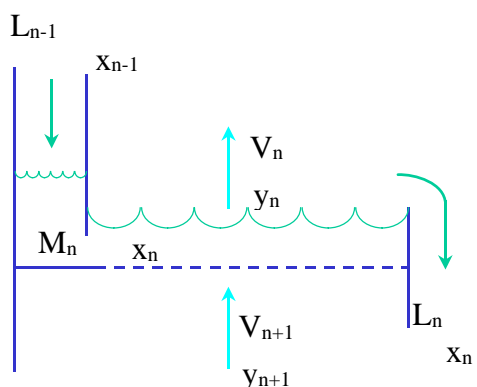


Figura 2: Un plato cualquiera

El submodelo plato viene descrito por tres grupos de ecuaciones que describen:

- a) Comportamiento dinámico de la etapa:
 - Balance de materia

- Balance de composición
- Balance de energía

- b) Equilibrio líquido-vapor de la etapa:
 - Ley de Raoult para el componente más volátil
 - Ley de Dalton
 - Ecuaciones de Van Laar
 - Fórmula de Antoine para los dos componentes de la mezcla
- c) Las relaciones hidráulicas de la etapa:
 - Caudal de líquido
 - Caudal de vapor

2.2 PLATO DE ALIMENTACIÓN

Este submodelo es un caso particular del submodelo anterior. Para describirlo se necesitan las mismas ecuaciones que en el submodelo plato, pero particularizadas para esta etapa concreta. La diferencia fundamental se encuentra en las ecuaciones que describen el comportamiento dinámico de la etapa, dado que ahora deben incluir un término referente a la alimentación de la columna.

Para modelar esta etapa se consideran como hipótesis de partida, que la temperatura del líquido de alimentación es similar a la temperatura de ebullición de la mezcla y a la temperatura del plato en el cual se introduce la alimentación.

2.3 CONJUNTO DE CABEZA

El conjunto de cabeza (ver Figura 3) consta de un condensador, un acumulador y un controlador. Este último elemento tiene como objetivo controlar la masa retenida en el acumulador, lo cual se llevará a cabo mediante la manipulación de uno de los dos caudales de salida de esta etapa (caudal de reflujo o caudal de destilado). La elección del caudal, que regula la masa retenida en el acumulador, dependerá de la estructura de control que se elija. El elemento controlador se estudiará como externo al conjunto de cabeza y será idéntico al que se colocará en el conjunto de fondo.

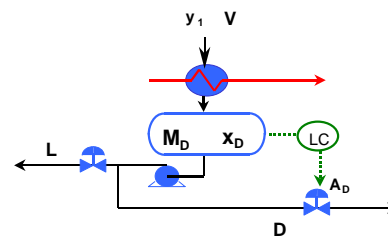


Figura 3: Conjunto de cabeza

En este submodelo se tienen de nuevo tres grupos de ecuaciones que describen el comportamiento de la

etapa. Los dos primeros modelan el comportamiento dinámico y el equilibrio líquido-vapor de la misma, utilizando las ecuaciones comentadas para el submodelo plato pero particularizadas para esta etapa concreta. El tercero modela los caudales de salida de la etapa, es decir, el caudal de reflujo que regresa a la columna y el caudal de destilado que se extrae de ella.

2.4 CONJUNTO DE FONDO

El conjunto de fondo (ver Figura 4) consta de un calderín, del propio fondo de la columna y de un controlador. Este último elemento (que como en el caso del conjunto de cabeza se estudiará como externo al conjunto de fondo) tiene como objetivo controlar la masa retenida en el fondo de la columna, lo cual se llevará a cabo mediante la manipulación de uno de los dos caudales de salida de esta etapa (caudal de vapor o caudal de fondo).

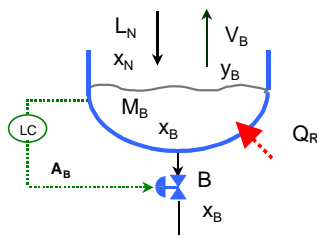


Figura 4: Conjunto de fondo

El submodelo fondo viene descrito por los mismos tres grupos de ecuaciones que describen el submodelo cabeza. La diferencia fundamental se encuentra en las ecuaciones que describen los caudales de salida de la etapa, que ahora son el caudal de vapor que asciende por la columna y el caudal de fondo que se extrae de ella.

2.5 CONTROLADOR

El controlador modelado es una versión discreta del algoritmo de control PID no interactivo, con filtro en la acción derivativa descrito en [2], que incorpora las siguientes prestaciones:

- Posibilidad de seleccionar la estructura de control del controlador (PID, PI-D o I-PD).
- Normalización de los valores de la consigna y la medida.
- Posibilidad de operar en modo manual o automático.
- Limitación de la señal de control entre los límites permitidos para esta señal en cada instante.
- Factor de filtro derivativo, con un valor fijo de 0.1.
- Mecanismo de seguimiento integral para evitar la saturación del término integral.

3 MODELO DE LA COLUMNA

Los cinco submodelos descritos en el apartado anterior, se han desarrollado tanto en Dymola como Simulink. Partiendo de ellos, la generación de un modelo cualquiera de columna de destilación, consiste en conectar los submodelos obtenidos de manera adecuada. Este hecho depende del lenguaje de modelado seleccionado, pero en líneas generales, todo modelo de columna tendrá tantos submodelos plato como platos tiene la columna menos uno, un submodelo plato de alimentación, un submodelo cabeza, un submodelo fondo, y si se implementa una estrategia de control de inventario sobre la columna, tendrá además dos submodelos controlador.

La conexión de submodelos en un lenguaje como Dymola, supone incluir en el modelo una línea de código en la cual se hace referencia a los dos submodelos que se conectan y a las variables cuya información se transmite de un submodelo a otro en esa conexión. Si una vez construido el modelo se desea incluir un nuevo plato en la columna, sólo es necesario introducir una nueva línea de código para definir el submodelo y otra para conectarlo con uno ya existente.

Este lenguaje de modelado es muy conveniente por tanto, para generar columnas de cualquier número de platos basándose en los submodelos definidos. Esto es así, porque debido a su gran modularidad es muy sencillo incluir nuevos platos en una columna ya generada. Otra de las ventajas de Dymola es que la simulación del proceso es muy rápida, lo que permite observar de forma casi instantánea el comportamiento del proceso.

La conexión de submodelos en un lenguaje como Simulink es algo más tediosa que en Dymola. Cada submodelo está representado como un bloque funcional de Simulink, que tiene una serie de entradas y salidas, que se deben unir de forma adecuada con las de sus bloques inmediatos. La simulación del proceso utilizando este lenguaje es menos rápida que en Dymola, pero mucho más visual.

4 DISEÑO DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN EN FUNCIÓN DE UNA MEZCLA DADA

Este apartado se dedica al primer objetivo del trabajo, conseguir un método efectivo para diseñar y generar el modelo que mejor se ajusta a la destilación de una mezcla dada, en un punto de operación determinado.

Para facilitar este objetivo se propone un formulario de diseño de columnas de destilación, que utiliza el

método de McCabe-Thiele. Este formulario solicita información al usuario relativa a la mezcla, a sus componentes, al dimensionamiento de la columna y al punto de operación de la destilación a realizar, y devuelve toda la información necesaria para generar el modelo. Es decir, devuelve el número de platos de la columna, la posición del plato de alimentación, y la inicialización de la columna, para que la simulación arranque desde un estado estacionario. Conocidas las características del modelo, se genera el modelo de la columna, utilizando los submodelos definidos en el apartado 2 de este trabajo.

Hasta el momento, el modelo de la columna no ha hecho uso del submodelo controlador. Si se desea implementar una estrategia de control de inventario sobre la columna, se deben colocar dos submodelos controlador (uno en la cabeza y otro en el fondo), y se deben ajustar sus parámetros de control. Para ajustar los parámetros de control, se deben provocar cambios en las variables seleccionadas como manipuladas y estimar los modelos que mejor se ajustan a los comportamientos de las variables que se quieren controlar, frente a los cambios provocados. Por último, obtenidos dichos modelos se deben ajustar los parámetros de control de los controladores, mediante una herramienta de ajuste seleccionada.

4.1 EJEMPLO

En este apartado se presenta la obtención del modelo de columna que mejor se ajusta a la destilación de una mezcla de Agua y Ácido Acético. El componente más volátil de la mezcla es el agua, con una temperatura de ebullición de 100°C y el componente más pesado de la misma es el ácido acético, con una temperatura de ebullición de 118.3 °C. Para el ejemplo concreto, el punto de operación seleccionado exige que: (1) las concentraciones del componente más volátil en los caudales de destilado y fondo sean del 90% y del 0.2%, respectivamente, (2) el caudal de alimentación (F) haga que la razón M_D/F sea aproximadamente de un minuto (M_D representa la masa retenida en el acumulador de la columna), (3) la relación inicial de reflujo externo (L/D) sea 3 y (4) la concentración del componente más volátil tanto en la mezcla inicial que se coloca en el calderín, como en el líquido de alimentación sea del 50%.

Una vez se ha determinado la mezcla y el punto de operación de la destilación, se diseña con ayuda del formulario propuesto la columna de destilación que mejor se ajusta al proceso a realizar. Todos los datos que solicita el formulario relativos a la mezcla y sus componentes, tales como los datos de equilibrio de la mezcla, las constantes de Antoine, las capacidades caloríficas, etcétera, se toman de [4]. Siguiendo los pasos propuestos en dicho formulario, se obtiene la

distribución de etapas de equilibrio que se muestra en la figura 5. La columna resultante tiene un total de 18 platos, siendo el sexto el de alimentación.

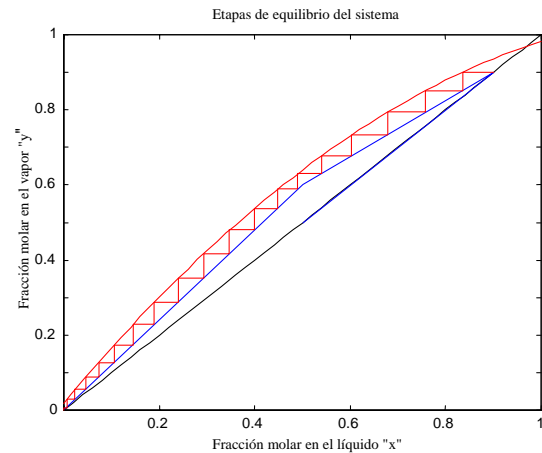


Figura 5: Etapas de equilibrio de la columna de Agua y Ácido Acético

De entre los datos solicitados por el formulario hay algunos relativos al dimensionamiento de la columna. Si la columna es conocida, estos datos son conocidos. No obstante, en el caso concreto del diseño de una columna de destilación en función de una mezcla elegida, estos datos los define el usuario generalmente en función de la velocidad que se le quiera dar a la columna y al proceso de destilación que en ella se va a realizar. Para el caso concreto de este ejemplo, se ha elegido una capacidad de 100 litros para los depósitos de acumulador y fondo, y una de 50 litros para los platos. Estos depósitos se suponen al 50% de su capacidad para una operación normal de la columna, lo que fija las aperturas de las válvulas de fondo, reflujo y destilado inicialmente al 50%.

Con los datos obtenidos se construye el modelo de la columna, tanto en Dymola como en Simulink, y se procede al ajuste de los controladores. Para controlar la masa retenida en el acumulador se utilizará el caudal de destilado y para controlar la masa retenida en fondo el caudal de fondo. Como método de ajuste se utiliza la herramienta multivariable [6], obteniendo como resultado los parámetros de control que se muestran en la Tabla 1:

CABEZA		FONDO	
K_P	-0.03	K_P	-0.19
T_I	31	T_I	39
T_D	0	T_D	0

Tabla 1: Parámetros de control de la columna diseñada para la mezcla de Agua y Ácido Acético

A continuación, sólo queda comprobar el buen comportamiento de la columna. Para ello, se provocan cambios en los dos grados de libertad que le quedan a la columna tras colocar sobre ella una estrategia de control de inventario. Estas variables son la apertura de reflujo y el caudal de calor que se aporta al calderín.

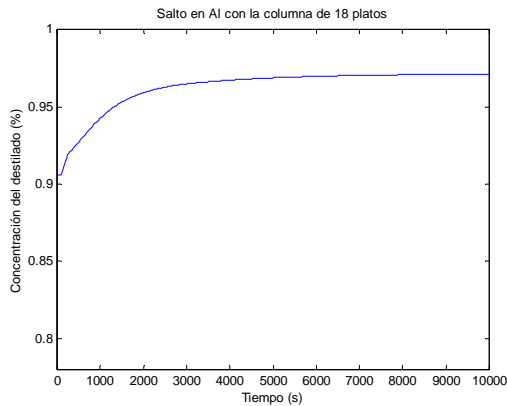


Figura 6.a: Concentración del destilado para un cambio en la apertura de reflujo

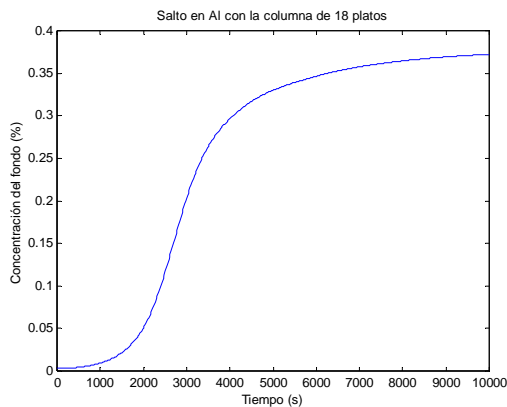


Figura 6.b: Concentración del fondo frente a cambio en la apertura de reflujo

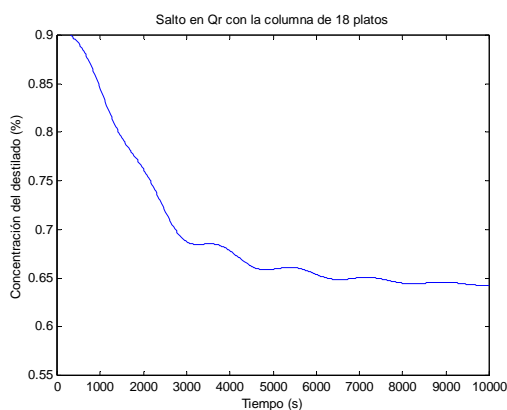


Figura 7.a: Concentración del destilado frente a cambio en el caudal de calor que se cede al calderín

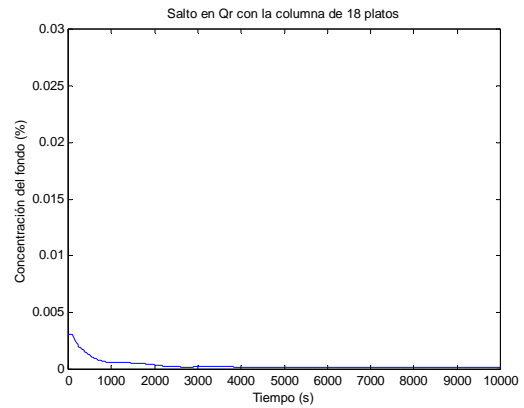


Figura 7.b: Concentración del fondo frente a cambio en el caudal de calor que se cede al calderín

En las figuras 6.a y 6.b se muestran las concentraciones de cabeza y fondo, cuando se provoca un salto positivo del 10% en la apertura de reflujo y en las figuras 7.a y 7.b las concentraciones de cabeza y fondo, cuando se provoca un salto positivo del 10% en el caudal de calor que se aporta al calderín.

5 MODELADO DE LA COLUMNA PREDETERMINADA

Este apartado se dedica al segundo objetivo del trabajo, que consiste en modelar una columna de destilación predeterminada, para probar sobre ella la destilación de distintas mezclas. La columna de destilación seleccionada para este trabajo es la planta destiladora UOP3CC de Armfield, adquirida por el Departamento de Informática y Automática de la UNED.

Modelar una columna concreta significa ajustar los submodelos diseñados en el apartado 2 de este trabajo, a las especificaciones de la columna a modelar. En el caso concreto de esta columna, tan sólo el plato de alimentación sufre una pequeña modificación en cuanto al modelado se refiere. Este submodelo incorpora el modelo de la bomba de alimentación de la columna, que restringe el caudal de líquido que puede entrar en la misma.

La columna seleccionada consta de 8 platos, siendo el quinto el plato de alimentación. Las dimensiones de acumulador, calderín y platos son conocidas [5], por lo que se conocen las limitaciones de cada uno de los elementos. El esquema Simulink de la columna resultante es el mostrado en la figura 8. En él se muestran: un bloque que representa la columna propiamente dicha, en cuyo interior se modelan los 8 platos, el conjunto de cabeza y el conjunto de fondo, dos bloques controlador como los descritos en el apartado 2.5 y una serie de bloques auxiliares que representan las entradas y salidas del sistema.

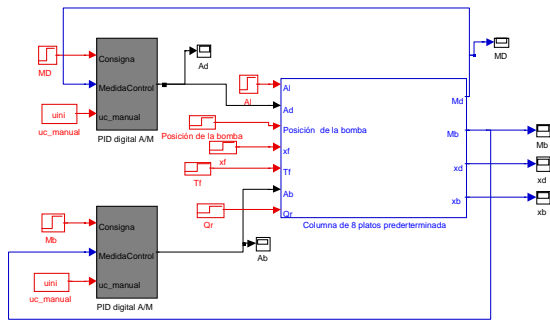


Figura 8: Esquema Simulink de la columna UOP3CC

Una vez diseñada la columna para probar sobre ella distintas mezclas, sólo es necesario inicializar los parámetros de cada uno de los bloques que la forman. Para ello, se ha desarrollado un programa Matlab que solicita al usuario información de la mezcla, de los componentes que la forman, de la posición inicial de las válvulas y bombas del sistema, de las calidades de los productos que se desean conseguir al destilar y del dimensionamiento de la columna, devolviendo los valores iniciales de las variables necesarias.

Inicializada la columna y del mismo modo que en el apartado 4, se deben ajustar los parámetros de los controladores colocados. Tras ello, se puede proceder a la simulación de la mezcla.

5.1 EJEMPLO

En este apartado, se presenta el resultado de la simulación del proceso de destilación de la mezcla de Agua y Ácido Acético en las mismas condiciones que en el ejemplo 4.1, pero utilizando para ello la columna predeterminada recién modelada.

Cada uno de los platos de una columna de destilación representa una etapa de equilibrio de la misma. En el ejemplo 4.1, parte de las variables que describen este equilibrio (concentración y temperatura) eran inicializadas debido a la aplicación del método de McCabe-Thiele, como método de diseño de la columna. En el caso de este ejemplo la columna ya está diseñada, y por lo tanto se debe fijar un criterio de inicialización de las variables que describen el equilibrio de la etapa. Para ello, se ha supuesto que tanto acumulador, como fondo y platos inicialmente están al 50% de su capacidad. Por otro lado, las concentraciones y temperaturas de cada plato se han calculado por interpolación, a partir del conocimiento de las concentraciones y temperaturas de las etapas de cabeza y fondo.

El resto de las variables necesarias para realizar el proceso se inicializan en función de las especificaciones de la columna, pero siempre situando la destilación de la mezcla en el mismo punto de operación que en el ejemplo 4.1, para poder

comparar la simulación del proceso en ambas columnas.

De la inicialización de las variables, se observa que con la columna predeterminada no es posible realizar la destilación de la mezcla seleccionada, en ese punto de operación. Esto es debido, a que la destilación que se desea realizar, requiere una potencia calefactora superior a la que la columna es capaz de suministrar con la resistencia que posee. De las especificaciones de la columna se sabe que la resistencia calefactora puede suministrar una potencia de entre 0 y 2 KW. Y de la inicialización de la columna se deduce, que la potencia necesaria para realizar el proceso en las condiciones fijadas es superior a 4 KW.

No obstante, y por comparativa con el ejemplo anterior, se ha simulado la destilación de la mezcla suponiendo que la columna predeterminada es capaz de suministrar esa potencia. De este modo y como en el ejemplo anterior, una vez inicializada la columna se procede al ajuste de los controladores provocando para ello cambios en sus aperturas de fondo y destilado. Utilizando la herramienta de ajuste [6], se obtienen los parámetros de control que se muestran en la Tabla 2.

CABEZA		FONDO	
K_P	-1	K_P	-1
T_I	15	T_I	40
T_D	0	T_D	0

Tabla 2: Parámetros de control de la columna predeterminada, para la mezcla de Agua y Ácido Acético

A continuación y como se hacía en el ejemplo anterior, queda comprobar el buen comportamiento de la columna. Para ello, se provocan cambios en los dos grados de libertad que le quedan a la misma, tras colocar sobre ella una estrategia de control de inventario. Los cambios provocados son los mismos que en el ejemplo 4.1, un salto positivo del 10% en la apertura de reflujo y un salto de la misma magnitud en el caudal de calor que se cede al calderín. No obstante, hay que tener en cuenta para la interpretación de las gráficas, que a diferencia de lo que ocurría en el ejemplo 4.1, la columna predeterminada no alcanza las especificaciones de calidad que se exigía para los productos de salida.

En las figuras 9 y 10 se muestran los comportamientos de las concentraciones de cabeza y fondo, cuando se provocan dichos cambios en la columna.

De la comparación de estas figuras con las figuras 6 y 7 se puede concluir, que la destilación de la mezcla obtiene productos más puros cuando se realiza con la columna de 18 platos, que cuando se realiza con la

columna predeterminada de tan sólo 8 platos. Esto es así, debido a que la columna de 18 platos ha sido diseñada específicamente para el proceso de destilación seleccionado y representa la mejor columna posible para realizarlo.

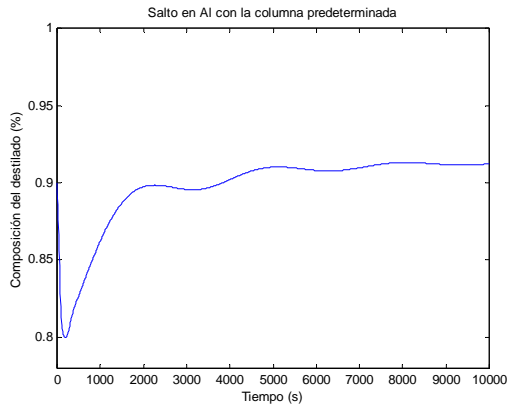


Figura 9.a: Concentración del destilado frente a cambio en la apertura de reflujo

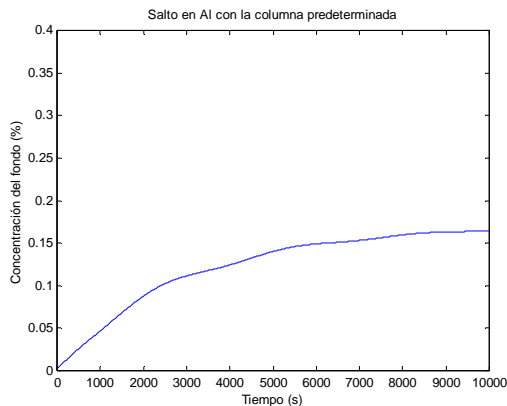


Figura 9.b: Concentración del fondo frente a cambio en la apertura de reflujo

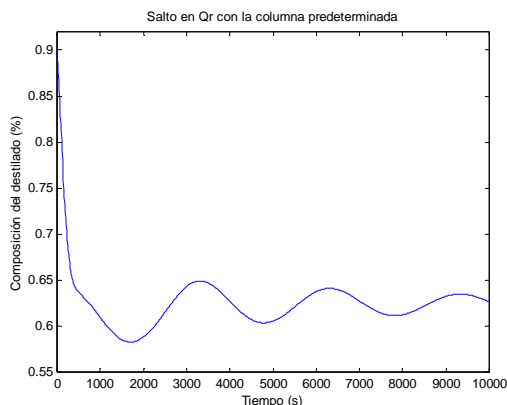


Figura 10.a: Concentración del destilado frente a cambio en la potencia calefactora

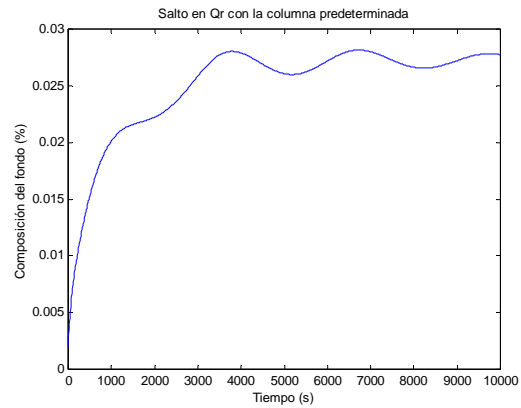


Figura 10.b: Concentración del fondo frente a cambio en la potencia calefactora

6 CONCLUSIONES

En este trabajo se ha presentado una metodología de modelado y simulación de columnas de destilación. Una vez seleccionada la mezcla que se desea destilar y a partir del conocimiento de muy pocos datos, se obtiene la columna más conveniente para la realización del proceso.

El modelo de columna presentado, se basa en una serie de hipótesis que en general se cumplen en la mayoría de los procesos industriales. El modelo seleccionado es un modelo dinámico de tipo EMC, en el que además se ha incorporado una estrategia de control de inventario. Este modelo se ha implementado en dos lenguajes de modelado, Dymola y Simulink. El primero es ventajoso por la sencillez que presenta la incorporación de un nuevo plato en un modelo ya existente. El segundo es ventajoso de cara a experiencias futuras de prueba de distintas estrategias de control sobre el modelo, y también para la prueba de la destilación de distintas mezclas en una columna dada.

Tanto el modelo como la metodología, se han probado con resultados satisfactorios para distintas mezclas, tales como: Agua y Ácido Acético, Acetona y Agua, Etanol y Agua, etcétera. En el ejemplo 4.1 se presentan los resultados obtenidos para la primera de ellas.

Otro de los objetivos cubiertos en el trabajo, ha sido la generación del modelo de la columna UOP3CC de Armfield y la prueba sobre ella de la destilación de distintas mezclas. En el ejemplo 5.1 se muestran los resultados de la simulación del proceso de destilación de la mezcla de Agua y Ácido Acético, en las mismas condiciones que en el ejemplo 4.1, para poder comparar resultados. De la comparativa lógicamente se concluye, que la columna modelada para realizar la destilación da lugar a productos de mayor pureza,

que cuando se realiza la destilación sobre la columna predeterminada.

Un objetivo pendiente es la prueba de estrategias de control multivariable predictivo sobre la columna predeterminada modelada. Para ello, se utilizarán los dos grados de libertad que le quedan a la columna, tras colocar sobre ella una estrategia de control de inventario. De este modo además de controlar las masas retenidas en cabeza y fondo, se controlarán también las calidades de los productos de fondo y destilado.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por la CICYT mediante el proyecto TAP 96-0404.

Los autores quieren agradecer el apoyo que en los aspectos químicos han recibido de M. Gil Rodríguez, que desarrolla su actividad investigadora en el Dpto. de Ingeniería Sanitaria y Ambiental de la E.T.S. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos de la Universidad Politécnica de Madrid.

Referencias

- [1] Acedo, J., González, D., Cifuentes, F., González, R. y Resano, J.J. (1998). Curso sobre control de procesos destinado a operadores jefes y operadores de panel. REPSOL PETROLEO.
- [2] Dormido, S., Morilla, F., (1999) Controladores PID. Fundamentos y Sintonía. Informe interno del Dpto. de Informática y Automática (UNED)
- [3] Levy, R.S., Foss, A.S., Grens, E.A., (1969) Response modes of a Binary Distillation Column. Industrial Engineering Chemical Fundamentals. Vol. 8, pp. 765-776.
- [4] Perry, R.H., (1992) Manual del Ingeniero Químico. 6ª Edición. Ed. McGraw-Hill Book Company.
- [5] Manual de instrucciones de la Planta UOP3CC de Armfield.
- [6] Vázquez, F., Morilla, F. (1999) An iterative Method for Tuning Decentralized PID Controller. Proceeding of the 14th World Congress of IFAC, 1999, pp. 491-496.