

Algoritmo en Matlab para determinar el perfil temperatura-composición en columnas de absorción de platos

Gladys Angela Quevedo Contreras

Escuela de Ingeniería Química. Facultad de Ingeniería. Universidad Rafael Urdaneta.
Maracaibo, Venezuela.

Correo electrónico: gladys.quevedo@uru.edu

Recibido: 11-12-2019

Aceptado: 21-01-2020

Resumen

Este trabajo presenta una adaptación a la estrategia de programación matricial para el cálculo etapa por etapa que resuelve el perfil temperatura composición aplicado a una columna de absorción de platos por el método de Suma de Flujos (SR). El algoritmo manipula las ecuaciones de la columna agrupándolas en conjuntos correspondientes a cada etapa para cada componente, a continuación se agrupó la información en forma matricial para optimizar el código de programación de la herramienta de cálculo. Cada grupo es tratado en conjunto al emplear matrices tridiagonales a partir de ecuaciones MESH desarrolladas en bucles, partiendo de suposiciones de perfil iniciales para las variables de partición. El método seleccionado se evalúa para sistemas considerados ideales de uso común industrial y reportado en las referencias. Los resultados de la programación son satisfactorios, con errores que oscilan entre 0 y 6%, lo que permite al ingeniero estimar la eficiencia de operación por etapas al comparar con los valores esperados.

Palabras clave: Suma de flujos (SR), programación, matriz tridiagonal, ecuaciones MESH, absorción.

Matlab Algorithm to temperature-composition profile determination on plate absorption columns

Abstract

This work presents a matrix programming strategy adaptation for the stage-by-stage calculation that solves the composition-temperature profile, applied to an absorption column through plates by Sum Rates (SR) method. The algorithm manipulates the equations of the column grouping them into sets corresponding to each stage for each component, then the information is grouped in matrix form to optimize the programming code of the calculation tool. Each group is treated together by using tridiagonal matrices from MESH equations developed in loops, based on initial profile assumptions for the partition variables. Selected method is evaluated for systems considered ideal and of common industrial use and so reported in the references. Developed tool's results are satisfactory, with errors in 0% to 6% range, what allows the engineer to estimate the operating efficiency in stages by comparing with expected values.

Key words: Sum rates (SR), programming, tridiagonal matrix, MESH equations, Absorption

Introducción

El uso de métodos rigurosos en la determinación de variables de las principales operaciones unitarias, no necesariamente ha estado permanentemente ligada a la existencia de computadoras ni mucho menos a la programación optimizada en cuanto a tiempos de ejecución, por lo que su implementación ha sido de difícil ejecución incluso para columnas a escala piloto. Esto trajo como consecuencia que los métodos Henley [1, Pág. 611] “aproximados y empíricos” se constituyeran como la piedra angular en el diseño, los métodos rigurosos solo se usaban para revisión de la propuesta final.

Ha sido la evolución de las computadoras y la comprensión de los mecanismos de optimización de código lo que ha expandido la aplicación de métodos rigurosos, para evitar el trabajo que muchas veces se prolongaba en cuanto al tiempo de ejecución; en consecuencia, las inexactitudes de los métodos aproximados han disminuido la tendencia a su aplicación. En la actualidad, los métodos rigurosos han pasado a ser la herramienta fundamental de diseño, quedando como único papel de los métodos aproximados el proporcionar a estos, una estimación inicial o según Henley [1, Pág. 611] “para el estudio de diseños preliminares”.

Las ecuaciones que describen las Operaciones Unitarias de múltiples etapas, se agrupan en balances de materia, relaciones de equilibrio, sumatoria de fracciones molares y balance de energía (entalpía), a este grupo se le conoce como Sistema de Ecuaciones MESH. Estas ecuaciones en primera instancia han sido resueltas por métodos clásicos etapa por etapa como Lewis-Matheson (1932) y Thiele-Geddes (1933), aplicables a columnas convencionales. En la actualidad, la solución pasa por la implementación componente a componente, dada la forma en que se agrupan y se resuelven los sistemas de ecuaciones. El presente estudio pretende realizar una adecuada implementación en cuanto a código y tiempos de ejecución se refiere de un método adecuado para la determinación de perfiles en Absorción de columnas de platos.

Fundamentos Teóricos

El conocimiento asociado a las Operaciones Unitarias la mayoría de las veces pasa por la incorporación de métodos aproximados de análisis que consideran como volumen de control zonas de los sistemas estudiados o el sistema global en sí. Sin embargo, la determinación de factores como eficiencia a nivel de ejercicio de la ingeniería química o evaluación de sistemas a escala en funcionamiento, pasa por el estudio etapa a etapa que a su vez incorpore el estudio componente a componente para el caso de evaluación de la composición. Es así como surge la necesidad de implementar métodos rigurosos, los cuales a partir de sistemas de evaluación simultánea de balances de masa, ecuaciones de equilibrio, sumatoria de composiciones y balance de entalpía, logran una descripción de los perfiles de variación de las principales variables de proceso a lo largo de las múltiples etapas de equilibrio

El modelo MESH desglosa todas las posibles variantes que se pueden presentar en una de las etapas del proceso. Es así, como partiendo de esta información, en coordinación con estas ecuaciones, a través de un algoritmo de cálculo riguroso, es posible establecer una descripción del comportamiento interno de la torre, mecanismo que no se aplica en la literatura representativa asociada al estudio de esta Operación Unitaria, en la cual proponen entender una columna como un arreglo en contracorriente de etapas ideales de separación, sin embargo, ninguno concreta esta apreciación a través de un algoritmo de cálculo que se fundamente en este principio y lo haga a través de un código que optimice procesos de cálculo y por tanto tiempos de ejecución. Además, como afirma Perry [2, Pág. 13-47] “el tiempo y costo para obtener dichas soluciones es muy bajo, en comparación con el costo de las soluciones manuales”.

Finalmente, a través de la especificación de las variables mencionadas, y el planteamiento del número de ecuaciones determinadas, incorporando el método seleccionado en la presente investigación, será posible establecer el perfil temperatura composición en columnas de absorción de platos para los

sistemas especificados, lo cual representa un aporte a la comprensión y estudio de esta Operación Unitaria de importancia industrial.

Parte Experimental

Seleccionar en función de sus ventajas el método óptimo para la determinación del perfil temperatura composición en columnas de absorción de platos.

En la actualidad, existen un conjunto de métodos potentes, flexibles y fiables para ordenadores que resuelven empleando matrices, de forma simultánea todas o al menos algunas de las ecuaciones que describen el sistema. Los algoritmos existentes se clasifican entonces en función del tratamiento dado a las ecuaciones de balance de masa, relaciones de equilibrio de fases, suma de composiciones y entalpía (MESH o mass equilibrium sum enthalpy), entre los cuales destacan: Los que manipulan las ecuaciones secuencialmente o por subconjuntos, como la suma de los flujos SR (Burningham y Otto, 1967) y el Punto de Burbuja BP (Wang y Henke, 1966). Se realizó un análisis detallado de la metodología propuesta por estos métodos, así como las ventajas que presentarían al ser aplicados a los métodos de absorción, iniciando por la determinación de sus características y estableciendo una secuencia que oriente la selección.

Asimismo, estimar las propiedades que caracterizan el equilibrio de fases líquido-vapor y de entalpías, es de gran importancia en las separaciones basadas en la diferencia relativa de volatilidades: evaporaciones flash, destilación, absorción, extracción, entre otras. La disponibilidad de ordenadores facilita dar una solución rigurosa al diseño o seguimiento de la implementación a través de técnicas rigurosas, asociadas a los modelos de etapas de equilibrio para torres de múltiples etapas y componentes, llegándose a afirmar incluso Perry [2, Pág. 3-74] “hasta un grado de exactitud limitado exclusivamente por la precisión de los datos de entalpía y equilibrio de fases”. Lo anteriormente planteado, ratifica la importancia de establecer la vía de especificación termodinámica, como parte de las delimitaciones de la programación.

Programar el método seleccionado para la determinación del perfil de temperatura composición en columnas de absorción de platos.

Seleccionado el método más adecuado, se procedió a su implementación a través de un algoritmo programado en Matlab. Antes de programar, se realizó un análisis que promoviera la generalización adecuada de las líneas de código, expandiendo la programación a columnas de cualquier tamaño y componentes con mínimos tiempos de ejecución.

Validar la programación del método seleccionado respecto a los resultados publicados por autores reconocidos en el área.

Una vez programado el algoritmo, se consideraron ejemplos reportados en referencias reconocidas con la finalidad de evaluar la implementación del algoritmo propuesto y hacer seguimiento de las principales variables que describen la operación de una columna de absorción.

Resultados

Seleccionar en función de sus ventajas el método óptimo para la determinación del perfil temperatura composición en columnas de absorción de platos.

Analizados los principales métodos rigurosos propuestos para la implementación de las ecuaciones MESH y considerando que los componentes químicos presentes en la mayoría de los absorbentes y desorbentes cubren un intervalo relativamente amplio de volatilidades respecto al asociado a la destilación, por lo que el uso del método BP para la solución de las ecuaciones MESH suele fallar ya que, el cálculo de la temperatura de las etapas mediante el cálculo del punto de burbuja es demasiado

sensible a la composición de la fase líquida y el balance de energía de la etapa es mucho más sensible a la temperatura de las etapas que a los flujos interetapas. En estos casos se puede aplicar con resultados satisfactorios el método de la suma de caudales (SR), junto con la formulación de la matriz tridiagonal para resolver las ecuaciones.

En general, los valores de las constantes K y las entalpías molares de las ecuaciones MESH son como establece Perry [2, Pág. 13-52] “funciones complejas implícitas de la temperatura y presión de la etapa y de las fracciones molares en equilibrio”. En el desarrollo del algoritmo del método, tal y como plantea Henley [1, Pág. 619] si “los valores K dependen de las composiciones, estos valores deben usarse para estimar los nuevos valores K”.

Es conveniente resaltar que la mayoría de los procesos de absorción se asumen isobáricos por lo que resaltaría la dependencia de la temperatura y la composición. Sin embargo, Wankat [4, Pág. 29] describe que esta dependencia es característica de los sistemas no ideales pero que “por fortuna los valores de K son aproximadamente independientes de la composición” lo que permite la linealidad de las ecuaciones asociadas a la matriz tridiagonal relacionada a las composiciones. Considerando la necesidad de generar coeficientes para la matriz tridiagonal en el cálculo de las temperaturas, es posible detectar la necesidad de linealización por el método de Newton-Raphson.

Programar el método seleccionado para la determinación del perfil de temperatura composición en columnas de absorción de platos.

Dado un conjunto de valores iniciales establecidos para las variables de partición Temperatura (Tj) y Flujo de Vapor (Vj), los cuales según Perry [2, Pág. 13-47] pueden ser determinados para el caso de temperatura “por interpolación lineal entre las temperaturas de tope y fondo” y para el caso del flujo de vapor “al suponer flujo molar constante que asciende desde el fondo”, es posible implementar el algoritmo del método SR partiendo del conocimiento de las variables que caracterizan la alimentación como presión, temperatura, flujo y composición, así como la presión de las etapas y los flujos de extracción laterales o de calor. Es de resaltar que muchos de los pasos concuerdan con el método BP.

Burningham y Otto [5] manifiestan que el uso de la matriz tridiagonal proporciona los resultados más precisos para la absorción de gases debido a que es sencillo de programar y requiere el menor tiempo de ejecución en comparación a otros algoritmos. Las ecuaciones M modificadas incorporando la definición de la constante K se muestran a continuación:

$$L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1} + K_{i,j+1}x_{i,j+1} + F_j z_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)K_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad (1)$$

Las variables de partición son la temperatura y el flujo de vapor a las cuales se les asignan valores iniciales partiendo de criterios previamente establecidos, valores que según Walas [6, Pág. 407] determinan “la velocidad e incluso la posibilidad de convergencia del procedimiento iterativo”. El establecimiento de dos bucles secuenciales en el algoritmo obedece a que como establece King [3, Pág. 594] “los caudales globales se determinan mas por los balances por componentes que por los balances entálpicos, donde las temperaturas se determinan mas por los balances entálpicos que por los de composición”. Es así como en un bucle preliminar se acoplan todas las subrutinas de estimaciones termodinámicas, composiciones, flujos entre otros.

```
while sum(( (Tj-Tj0) ./Tj) .^2)+sum(( (Lj-Lj0) ./Lj) .^2)+sum(( (Vj-Vj0) ./  
Vj) .^2)>=1e-10 && k<=100  
k=k+1;  
Tj0=Tj;  
Vj0=Vj;  
Lj0=Lj;  
Kij=estimaciondeK(N,CC,Tj,K1i,K2i,K3i,K4i);
```

```

Xij=estimaciondeX(N,CC,Zij,Fj,Uj,Wj,Vj,Lj,Kij);
Lj=calculodeL(N,Lj,Xij);
Vj=calculodeV(N,Lj,Fj,Uj,Wj);
Xij=normalizarX(N,Xij);
Yij=calculodeY(N,CC,Kij,Xij);
Yij=normalizarY(N,Yij);
Tj=calculodeT(N,CC,Uj,Wj,Vj,Lj,Fj,Tj,TFj,Qj,Xij,Yij,Zij,Ai,Bi,Ci,ai,-
bi,ci);
End

```

La selección del mecanismo de estimación de propiedades termodinámicas como la entalpía así como la constante de equilibrio resultan esenciales según los grupos funcionales presentes en los compuestos estudiados. Una perspectiva matricial para la estimación de X simplifica la estructura de la codificación como se muestra a continuación en código Matlab.

```

function varargout=estimaciondeX(varargin)
for j=2:N
for m=1:j-1
    A(:,j)=A(:,j)+Fj(m)-Uj(m)-Wj(m);
end
    A(:,j)=A(:,j)+Vj(j)-Vj(1);
end
for i=1:CC
for j=1:N
    B(i,j)=- (Lj(j)+Uj(j)+Kij(i,j)*(Vj(j)+Wj(j)));
end
end
for i=1:CC
for j=1:N-1
    C(i,j)=Vj(j+1)*Kij(i,j+1);
end
end
for i=1:CC
for j=1:N
    D(i,j)=-Fj(j)*Zij(i,j);
end
end
for i=1:CC
    TD=zeros(N);
    TD(1,1)=B(i,1);
    TD(1,2)=C(i,1);
for r=2:N-1
    TD(r,r-1)=A(i,r);
    TD(r,r)=B(i,r);
    TD(r,r+1)=C(i,r);
end
    TD(N,N-1)=A(i,N);
    TD(N,N)=B(i,N);
    Xij(i,:)=(TD^-1*D(i,:))';
end
varargout{1}=Xij;
end

```

Validar la programación del método seleccionado respecto a los resultados publicados por autores reconocidos en el área.

Es de resaltar que la mayor parte de la bibliografía aborda teóricamente el método SR sin desarrollar aplicaciones al respecto, de los trabajos consultados solo Henley [1] y Perry [2] plasman un modelo de aplicación, los cuales se emplean a continuación para validar la programación desarrollada.

Discusión de Resultados

Una vez ejecutado el algoritmo, se obtuvieron los siguientes resultados, los cuales se proceden a comparar con porcentaje de error respecto a los obtenidos en la publicación.

Tabla 1. Perfil temperatura y flujo de vapor como variables de partición de programa propuesto en comparación con Henley [1]

Etapa	T (°F) Publicado	T (°F) Calculado	% error	V (lbmol/h) Publicado	V (lbmol/h) Calculado	% error
1	150	151,11	0,74	530,53	530,69	0,03
2	157	158,38	0,88	660	678,26	2,76
3	159	160,45	0,91	680	693,56	1,99
4	159	160,08	0,68	700	700,32	0,04
5	155	156,23	0,79	720	708,40	1,61
6	143,7	143,85	0,1	800	727,60	9,05

Las Tablas 1 y 2 muestran los resultados obtenidos al ejecutar el método SR para las variables de partición T y V, así como los perfiles de composición del Gas Pobre respectivamente, se observa como para el caso de un sistema de absorción sencillo, sin corrientes laterales tipo flujo o calor, los errores obtenidos son satisfactorios al comparar con los valores publicados.

Tabla 2. Perfiles composición del Gas Pobre de programa propuesto en comparación con Henley [1]

Componente	Gas Pobre Publicado (lbmol/h)	Gas Pobre Calculado (lbmol/h)	% error
Metano	147,64	147,64	0
Etano	276,03	276,07	0,014
Propano	105,42	105,56	0,13
n-Butano	1,18	1,17	0,85
n-Pentano	0,21	0,21	0
n-Dodecano	0,05	0,05	0
Total	530,53	530,69	0,03

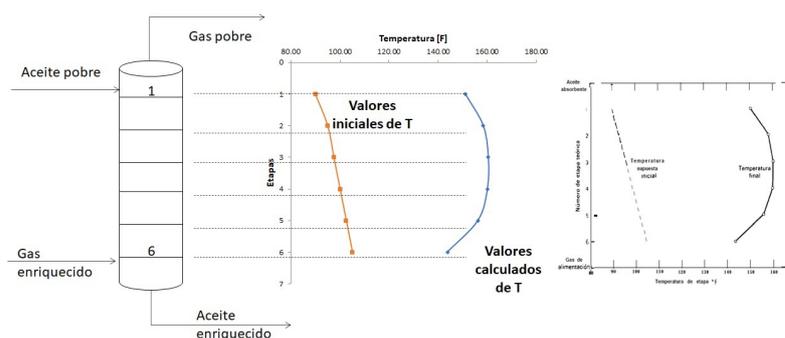


Figura 1. Perfil Temperatura por etapas de programa propuesto en comparación con Henley [1]

La figura 1 muestra el error cometido en la suposición inicial del perfil de temperaturas en ambos casos, así como la adecuada convergencia en los resultados finales. Debido al sustancial grado de absorción y elevado calor correspondiente, las temperaturas de las etapas son considerablemente mayores que las temperaturas de las dos corrientes de entrada, lo que se evidencia con el comportamiento parabólico del perfil. El calor es absorbido tanto por la corriente de vapor como por la de líquido y la etapa de temperatura máxima se encuentra prácticamente en el punto medio de la columna. En el lado derecho de la Figura, se observó el perfil publicado por el autor el cual coincide en forma y valores lo que ratifica lo satisfactoria de la programación.

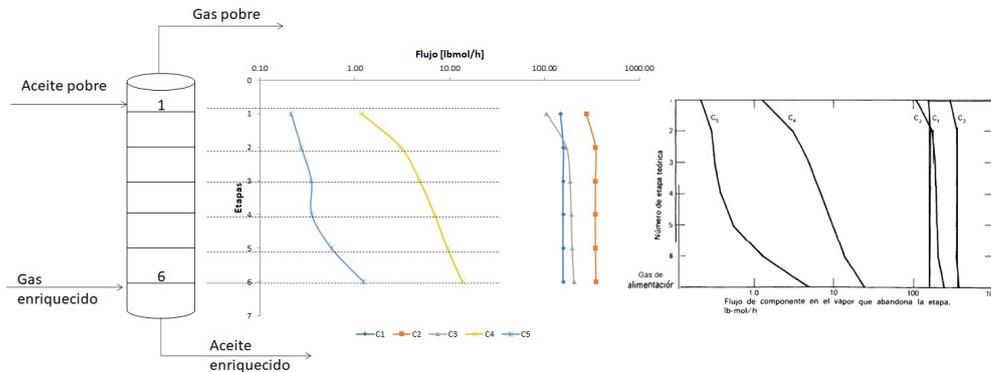


Figura 2. Perfil Flujos por componentes y por etapas de programa propuesto en comparación con Henley [1]

En la figura 2 puede apreciarse como la absorción de C1 y C2 se produce casi exclusivamente en las etapas de cabeza y cola. La absorción de C3 transcurre a lo largo de toda la columna, pero principalmente en las dos primeras etapas. La absorción de C4 y C5 transcurre a lo largo de toda la columna, pero principalmente en el fondo, donde el vapor entra por primera vez en contacto con el aceite absorbente y se presenta el mayor gradiente de concentración que promueve la transferencia de masa.

Análisis similar se realizó para los resultados reportados por Perry [2], en la Tabla 3 se muestran los resultados para el perfil de temperatura y flujo de vapor (variables de partición).

Tabla 3. Perfil temperatura y flujo de vapor como variables de partición de programa propuesto en comparación con Perry [2]

Etapa	T (°F) Publicado	T (°F) Calculado	% error	V (lbmol/h) Publicado	V (lbmol/h) Calculado	% error
1	84,6	85,18	0,69	323,9	311,20	3,92
2	85,5	86,36	1	367,7	365,06	0,718
3	86,3	87,65	1,56	371,3	368,60	0,73
4	85,3	89,64	5,08	374,7	372,00	0,72
5	86,0	90,31	5,01	388,6	389,85	0,32
6	86,6	90,65	4,67	393,0	393,52	0,13
7	85,2	87,58	2,79	398,2	398,16	0,01
8	92,7	93,42	0,77	410,4	410,69	0,07

La Tabla 3 muestra los resultados obtenidos al ejecutar el método SR para las variables de partición T y V, se observa como para el caso de un sistema de absorción más complejo como el planteado por el autor, que incluye aceite recuperado y extracciones laterales de calor, los errores obtenidos son satisfactorios al comparar con los valores publicados, aunque un poco más elevados que los obtenidos para un sistema simple.

Tabla 4. Perfiles composición del Gas Pobre de programa propuesto en comparación con Perry [2]

Componente	Gas Pobre Publicado (lbmol/h)	Gas Pobre Calculado (lbmol/h)	% error
Metano	312,3	299,50	4,09
Etano	11,8	11,39	3,47
Propano	0,2	0,21	5
n-Butano	0	0	0
n-Pentano	0	0	0
n-Dodecano	0	0,03	-
Total	323,9	311,20	3,92

La Tabla 4 muestra los valores de flujo a la salida de Gas Pobre de la torre obtenidos al aplicar el método SR para cada componente, se observa como los porcentajes de error son menores al 5% para un sistema complejo con corrientes laterales de incorporación de aceite secundario y extracción de calor, lo que incrementa la complejidad de los balances a incorporar en las matrices tridiagonales.

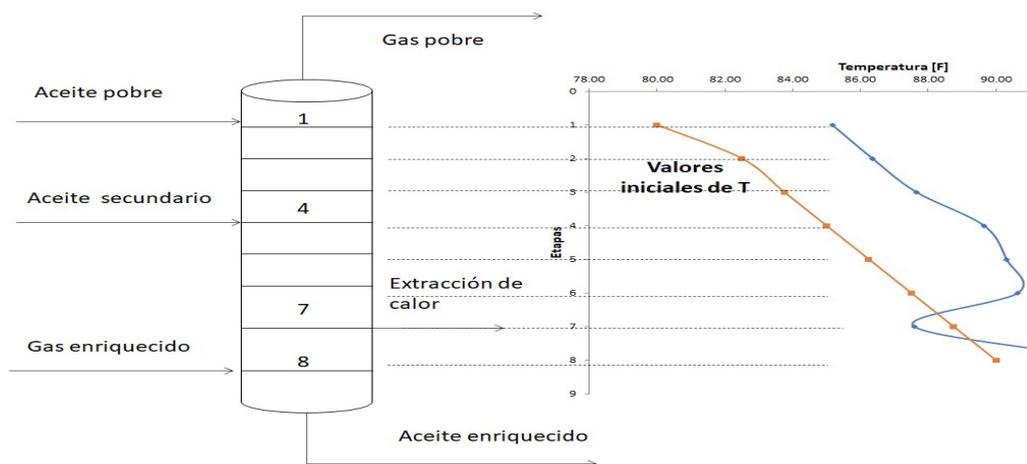


Figura 3. Perfil Temperatura por etapas de programa propuesto en comparación con Perry [2]

La figura 3 muestra el error cometido en la suposición inicial del perfil de temperaturas y la adecuada convergencia de los resultados finales. Debido al sustancial grado de absorción y elevado calor correspondiente, las temperaturas de las etapas varían considerablemente respecto a las dos corrientes de entrada, resaltando que la tendencia se desvirtúa hacia la disminución en la etapa 7 dada la extracción lateral de calor reportada en esta etapa.

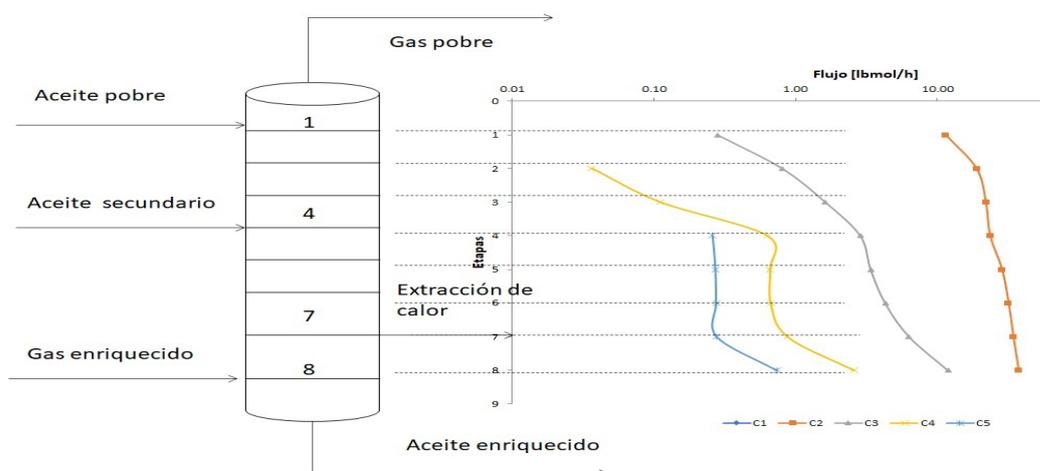


Figura 4. Perfil Flujos por componentes y por etapas de programa propuesto en comparación con Perry [2]

En la Figura 4 puede apreciarse como la absorción de C1 y C2 se produce casi exclusivamente en la etapa inicial, aunque es más representativa a lo largo de la torre para el caso del C2. La absorción de C3 transcurre a lo largo de toda la columna, pero principalmente en las cuatro primeras etapas y en el fondo. La absorción de C4 y C5 transcurre a lo largo de toda la columna, pero principalmente en el fondo, donde el vapor entra por primera vez en contacto con el aceite absorbente y se presenta el mayor gradiente de concentración que promueve la transferencia de masa. Para el caso del C4, este no está presente en la primera etapa por lo que su absorción se ha completado a este nivel y para el C5, no está presente en las etapas 1, 2 y 3 por lo que su absorción se ha completado a este nivel.

Conclusiones

Los métodos rigurosos constituyen la herramienta óptima para el diseño y verificación del comportamiento interno de una torre de absorción, lo cual no es posible obtener con métodos tradicionales asociados al estudio de esta operación unitaria.

El método de suma de flujos (SR) resulta ser el método riguroso de aplicación preferente para el caso de torres de absorción en las cuales los componentes presenten un intervalo representativo de temperaturas de ebullición con tendencia a la idealidad, como es el caso del sistema de hidrocarburos reportado en las publicaciones asociadas a la demostración del método.

La programación del método se ve optimizada por los mecanismos propios del lenguaje matricial M de Matlab; evaluar las propiedades y almacenarlas en matrices genéricas, facilita el desarrollo de los bucles de matrices tridiagonales. El desarrollo y la programación del método en comparación con los datos reportados en la bibliografía, resultaron satisfactorios, con errores que oscilan entre 0 y 6%.

Referencias Bibliográficas

- [1] Henley, E. (Reverté). Operaciones de separación por etapas de equilibrio en Ingeniería Química. México (2000).
- [2] Perry, R (McGraw Hill.). Manual del Ingeniero Químico. Madrid. España (2001).
- [3] King, J (Repla). Procesos de Separación. México (1989).
- [4] Wankat, P. (Pearson). Ingeniería de Procesos de Separación. Naupalcal de Juarez. México (2008).

[5] Burningham, D y Otto, F. Which Computer Design for Absorbers?.Hydrocarbon Processing. Vol 46, N° 10, (1967), 163-170.

[6] Walas, S. (Butterworth-Heinemann). Chemical Process Equipment.USA (1990).