

## Experimentación Numérica del Proceso de Destilación Discontinua Convencional Considerando Incertidumbres

Investigación

Zavala-Loría, J.C.<sup>\*</sup>, Narváez-García, A., Elvira-Antonio, N., Robles-Heredia, J.C., Anguebes-Franseschi, F.,  
Córdova-Quiroz, A.V., Ruiz-Marín, A.

Universidad Autónoma del Carmen, Dependencia Académica de Ingeniería y Tecnología, Facultad de Química,  
Cuerpo Académico de Ingeniería Química Aplicada. Cd. del Carmen, Cam., Col. Burócratas. C.P. 24180. Tel:  
(938)-3811018 Ext.: 2103.

<sup>\*</sup>Email: jzavala@pampano.unacar.mx

### Introducción

La destilación discontinua, por lotes o batch es una operación unitaria comúnmente utilizada en la industria química para separar pequeños volúmenes de mezclas y obtener productos de alto valor agregado (Zavala-Loría, 2004). La gran mayoría de las veces este proceso ha sido considerado determinístico en naturaleza, sin embargo, en muchas situaciones realistas no se puede negar la asociación de incertidumbres.

En este trabajo se presenta la manera en la que las incertidumbres deben ser tratadas para el modelado de una columna de destilación discontinua convencional. Se aborda la solución del modelo matemático de la columna de forma rigurosa, se consideran las incertidumbres con respecto a los parámetros del modelo resultantes de la imposibilidad de modelar en forma exacta el comportamiento físico del sistema, se modelan los perfiles de volatilidad relativa para cada plato haciendo uso de las ecuaciones del movimiento geométrico browniano (para mezclas ideales) y el proceso de reversión de la media geométrica (para mezclas complejas) y los resultados son utilizados para el modelado y simulación de una columna de destilación discontinua convencional. En particular, se presenta un caso de experimentación numérica del proceso utilizando una mezcla ideal de pentano-hexano.

### Consideración y caracterización de Incertidumbres

Para modelar un sistema bajo incertidumbre, se debe establecer una descripción cuantitativa de las variaciones esperadas lo cual permite modelar el sistema con incertidumbres. Una de las incertidumbres que se pueden tomar en cuenta son aquellas con respecto a los parámetros del modelo  $\delta$  (Rico Ramírez et al., 1994). La incertidumbre de la que se hace mención en este trabajo resulta de la imposibilidad de modelar en

forma exacta el comportamiento físico del sistema, lo cual tiene relación con la volatilidad relativa. Las incertidumbres en parámetros estáticos tanto como en parámetros binarios de iteración de métodos de contribución de grupo como el de Wilson pueden ser modeladas utilizando técnicas probabilísticas y modelado estocástico. El modelado probabilístico o estocástico utiliza un procedimiento que involucra los siguientes pasos (Diwekar y Robin, 1989): Especificar las incertidumbres de parámetros del modelo en términos de distribuciones de probabilidad, Muestrear la distribución de los parámetros especificados en una moda iterativa, Propagar los efectos de las incertidumbres a través del modelo y Analizar los resultados de salida.

### Resultados y discusión

La experimentación numérica para la mezcla pentano-hexano utilizó los siguientes datos: 100 kmol de una mezcla equimolar procesados en una columna de destilación discontinua de 10 platos teóricos a una presión de 0.99 atm y para una pureza especificada en el destilado de 0.98. Entonces la razón de vapor de la columna es de 50 kmol h<sup>-1</sup> y la acumulación molar es de 2 kmol y asumida como constante para cada plato y el tanque de acumulación. El tiempo de operación del proceso es de 2 h.

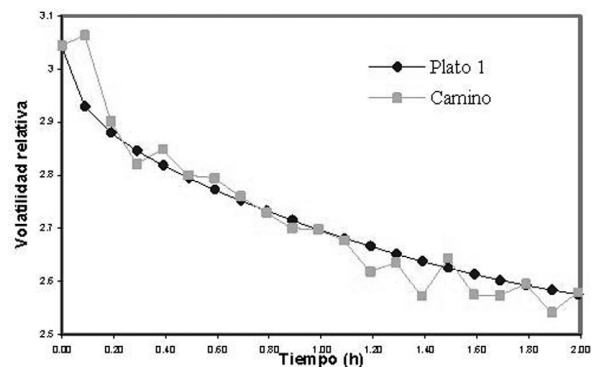


Figura 1. Comportamiento (primer plato) de la Vol. Rel. modelada como un proceso de Ito.

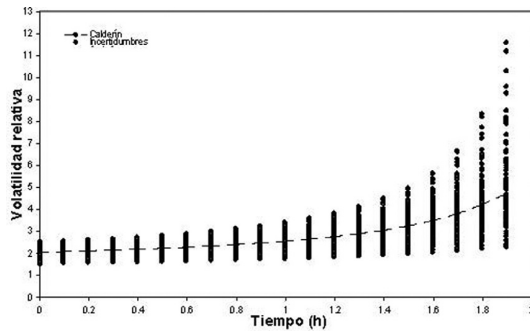


Figura 2. Dinámica de la volatilidad relativa para el calderín.

Las figuras demuestran que la volatilidad relativa puede ser modelada como un proceso de Ito. Este problema se aborda considerando que en la actualidad, con el afán de acercarse más a la realidad no puede dejarse de considerar la variabilidad o el error de las variables de estudio en el proceso. Lo cual como ya fue mencionado, lleva a considerar la dinámica de la columna ya no como un problema determinístico sino como un problema estocástico.

## Referencias

- [1] Diwekar, U.M., & E. S. Rubin (1989), *Technical Reference Manual for Stochastic Simulation in ASPEN*. Prepared by Center for Energy and Environmental Studies, Casnegie Mellon University, Pittsburgh for U.S. Department of energy, Morgantown Energy research center, VW.
- [2] Rico-Ramírez, V., Diwekar, U. M., & Morel, B. (2003). *Computers and chemical engineering*, 27, 1867-1882.
- [3] Zavala Loría, J.C. (2004), *Optimización del Proceso de Destilación Discontinua*, Tesis Doctoral presentada en el Instituto Tecnológico de Celaya, Guanajuato, México.

**Artículo recibido:** 13 de octubre del 2007

**Aceptado para publicación:** 8 de diciembre del 2007