



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN
INGENIERÍA**

FACULTAD DE QUÍMICA

**MODELAMIENTO, SIMULACIÓN Y CONTROL
DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN DE PARED
DIVIDIDA PARA LA PURIFICACIÓN DE BIOETANOL**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN INGENIERÍA

INGENIERÍA QUÍMICA-PROCESOS

PRESENTA:

JORGE FRANCISCO MULIA SOTO

TUTOR:

DR. ANTONIO FLORES TLACUAHUAC



2010



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente	Dr. David Juarez Romero
Secretario	Dr. Amado Salvador Granados Aguilar
Vocal	Dr. Héctor F. Puebla Núñez
1 ^{er} Suplente	Dr. Martín Rivera Toledo
2 ^o Suplente	Dr. Antonio Flores Tlacuahuac

Lugar donde se realizó la tesis:

Departamento de Ingeniería Química, Universidad Iberoamericana.

TUTOR DE TESIS

Dr. Antonio Flores Tlacuahuac

Firma

In memoriam
Francisco Mulia Martínez

A mi padre, Jorge, y a mi madre, Ana, por ser adalides ciclópeos de mi vida, por secundar firmemente todas mis decisiones, y por sus enseñanzas de impavidez frente a la zozobra y de regocijo frente a la dicha. Expreso mi gratitud perenne y admiración hacia ustedes.

A mi hermana, Sarahí, que con una cándida sonrisa o una simple chanza me recuerda que las situaciones frívolas son igual de importantes que las trascendentes.

A Elena, porque con su leal compañía o sus palabras insondables convierte un momento de inopia en efímera bienandanza.

Agradezco la colaboración y apoyo brindados para el desarrollo del presente trabajo al Dr. Antonio Flores Tlacuahuac.

Manifiesto mi agradecimiento al CONACYT por la beca otorgada para realizar mis estudios de posgrado.

Índice general

Resumen	1
Objetivos	2
1. La energía y el bioetanol	3
1.1. Panorama energético actual	3
1.2. El etanol como biocombustible	11
1.2.1. Beneficios del uso del bioetanol como biocombustible	12
1.2.2. El bioetanol en el transporte	14
2. Proceso de obtención de bioetanol	16
2.1. Materias primas para la producción de bioetanol	16
2.1.1. Materiales ricos en sacarosa	16
2.1.2. Materiales ricos en almidón	17
2.1.3. Materiales lignocelulósicos	17

2.2.	Descripción del proceso	19
2.2.1.	Costos de producción	19
2.3.	Alternativas para la separación de la mezcla etanol-agua	21
2.3.1.	Integración fermentación-separación	22
2.3.2.	Destilación azeotrópica heterogénea y homogénea	24
2.3.3.	Procesos con membranas	26
2.3.4.	Adsorción	27
2.3.5.	Destilación de presión variable	28
3.	Principios de la CDPD	32
3.1.	Sensibilidad de la composición azeotrópica a la presión	32
3.2.	Integración térmica interna	33
3.3.	Modelo matemático	36
3.3.1.	Análisis de grados de libertad	44
4.	Diseño y simulación en estado estacionario de la CDPD	46
4.1.	Modelo de equilibrio termodinámico	46
4.2.	Modelo en estado estacionario	48
4.3.	Simulación en estado estacionario	50
4.3.1.	Objetivo de diseño	51

4.3.2.	Presión de operación	52
4.3.3.	Idea de diseño	52
4.3.4.	Diseño de la DPV como base de la CDPD	54
4.3.5.	Diseño de la CPDP	66
4.4.	Análisis de resultados	71
5.	Control de la CDPD	79
5.1.	Modelo dinámico	79
5.2.	Objetivos de control	80
5.3.	Respuesta a lazo abierto de la CDPD	82
5.4.	Esquema de control	91
5.4.1.	Variables manipuladas y controladas	92
5.5.	Control retroalimentado	93
5.5.1.	Sintonización de los controladores	95
5.5.2.	Localización de los sensores de temperatura	98
5.5.3.	Desempeño de controladores básicos	108
5.6.	Control prealimentado puro y control retroalimentado-prealimentado simultáneos .	119
5.6.1.	Diseño del controlador prealimentado puro	121
5.7.	Análisis de resultados	124

Conclusiones	132
Trabajo futuro	133
Nomenclatura	134
Bibliografía	136

Resumen

El etanol producido a partir de la biomasa es uno de los combustibles renovables con mejores perspectivas para usarse ampliamente. En el proceso de obtención de bioetanol el resultado es una solución acuosa de etanol. En el presente trabajo se estudia el modelamiento, simulación y control de una columna de destilación de pared dividida (CDPD) para la separación de una mezcla etanol-agua, proceso que representa una opción para la purificación de bioetanol. El modelo se establece con base en los balances de masa y energía, las relaciones termodinámicas y una expresión que representa la integración térmica interna de la CDPD. Para la parte de simulación se representa el modelo de la CDPD en el paquete comercial Aspen Plus. Finalmente se propone un esquema de control, donde se usa el paquete comercial Aspen Dynamics, para una operación razonable del proceso.

Objetivos

La separación de la mezcla etanol-agua es importante para el proceso de obtención de bioetanol, por lo cual en el presente trabajo se plantea como objetivo general:

- Estudiar la factibilidad de separar la mezcla etanol-agua hasta alta pureza por medio de un proceso de destilación empleando una columna de pared dividida.

Los objetivos particulares son:

- Establecer un modelo matemático de la columna de destilación de pared dividida (CDPD) para la separación de la mezcla en estudio.
- Diseñar y simular la CDPD para la separación de la mezcla etanol-agua.
- Establecer un esquema de control que permita la operación adecuada de la CDPD.

Capítulo 1

La energía y el bioetanol

1.1. Panorama energético actual

A lo largo de la historia gran parte de la humanidad ha sufrido importantes cambios tecnológicos, socioeconómicos y culturales. Durante el último siglo dichos cambios han traído como consecuencia una creciente demanda de energía con la cual se han cubierto las necesidades de los sectores de transporte, manufactura, agricultura y servicios residenciales. El consumo energético actual se ha cuadruplicado en comparación con aquel que se presentó en la década de 1960, y proyecciones hechas sobre datos históricos muestran un incremento constante en el consumo de energía (Figura 1.1). Actualmente alrededor del 80 % de las necesidades energéticas primarias mundiales se cubren a partir de combustibles fósiles como lo son el gas natural, el petróleo, y el carbón (ver Figura 1.2).

A pesar de que los combustibles fósiles son recursos no renovables, su uso ha sido muy intenso debido a sus bajos costos de producción y a su relativa gran abundancia. Sin embargo un problema inherente a la naturaleza de esas fuentes de energía es su limitada disponibilidad, la cual se encuentra distribuida en el planeta de manera muy irregular. La región de Medio Oriente es la más beneficiada con reservas probadas de petróleo con cerca del 60 % del total mundial, además

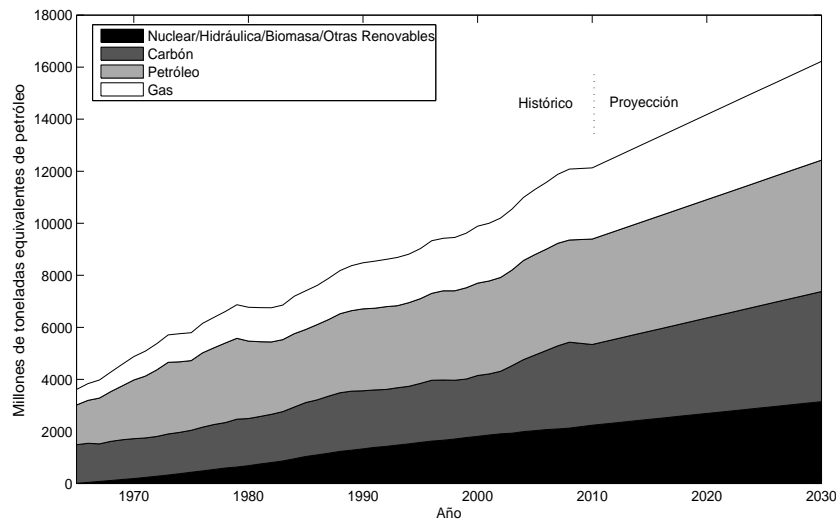


Figura 1.1: Consumo de energía primaria por tipo de combustible. (OPEC, 2009).

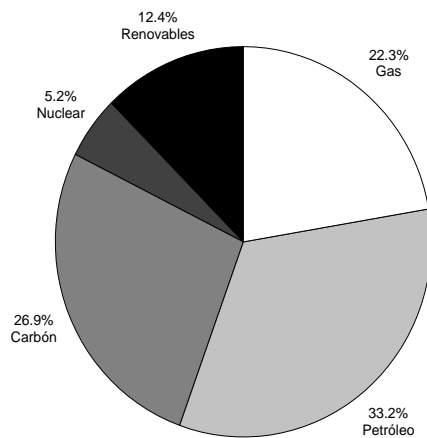


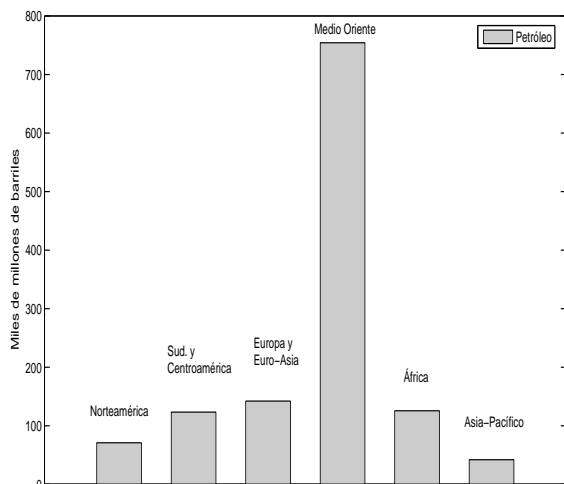
Figura 1.2: Aportación de cada tipo de combustible al consumo de energía primaria en 2007. (OPEC, 2009).

esa misma zona presenta las reservas probadas mas altas de gas natural con alrededor del 40 % del total global. Respecto al carbón las regiones con la mayor reserva probada son Europa y Asia que entre las dos tienen el 60 % de las reservas mundiales (Figura 1.3). Es la limitada disponibilidad de estos combustibles fósiles lo que provocará una reducción de su producción en un futuro.

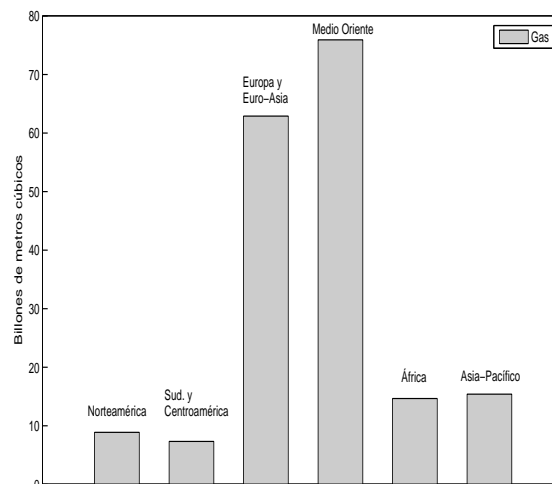
Entre todos los países productores de petróleo, México es el país que más ha consumido sus reservas. Tan solo en los últimos veinte años sus reservas probadas de crudo han disminuido en un 77 % (Figura 1.4). La disminución de las reservas en Estados Unidos, quien es el mayor consumidor mundial de petróleo crudo, no es tan significativa como en México. El caso contrastante es el del productor número uno de petróleo, Arabia Saudita, ya que a pesar de las grandes cantidades de petróleo que ha extraído sus reservas aún siguen siendo muy altas.

Es indudable todos los beneficios que el uso de los combustibles fósiles ha traído a nuestras sociedades, sin embargo uno de los principales problemas inherentes a su uso ha sido la emisión de gases de efecto invernadero. Las actividades antropógenas generan cuatro gases de efecto invernadero: CO_2 , CH_4 , N_2O , y halocarbonos. De estos cuatro gases el CO_2 es el que se encuentra en mayor volumen, y cuyo aumento de concentración en el mundo se atribuye principalmente al uso de combustibles de origen fósil. En la Figura 1.5 se muestra la emisión histórica de CO_2 por el uso de combustibles fósiles donde se observa que en tres décadas la emisión de este gas ha aumentado en alrededor del 80 %.

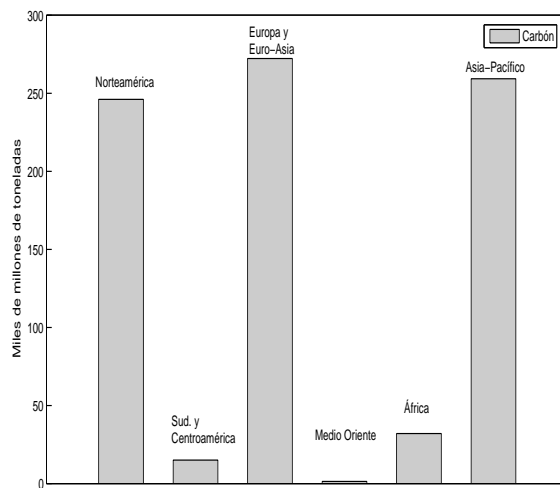
Una amplia gama de mediciones directas e indirectas confirman que la concentración de CO_2 en la atmósfera ha incrementado globalmente en cerca del 36 % durante los últimos 250 años, de un rango de 275-285 ppm en la era pre-industrial (1000-1750 D.C.) a 379 ppm en 2005 (ver Figura 1.5). Durante este periodo, la rapidez de crecimiento de la concentración de CO_2 en la atmósfera incrementó sustancialmente: el primer incremento de 50 ppm pasando el periodo pre-industrial se alcanzó en la década de 1970 después de más de 200 años, mientras que las siguientes 50 ppm se alcanzaron en sólo 30 años. Aunque el incremento parece ser pequeño, este ha sido suficiente,



(a) Petróleo



(b) Gas



(c) Carbón

Figura 1.3: Reservas probadas de combustibles fósiles.(OPEC, 2009).

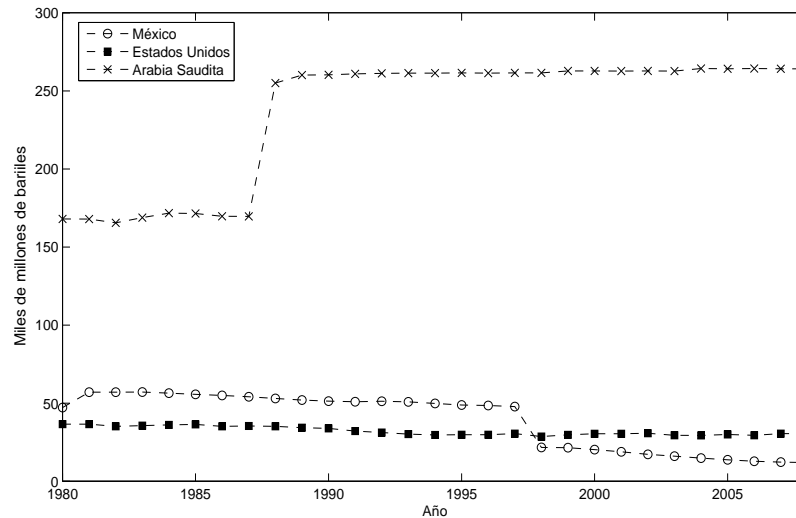
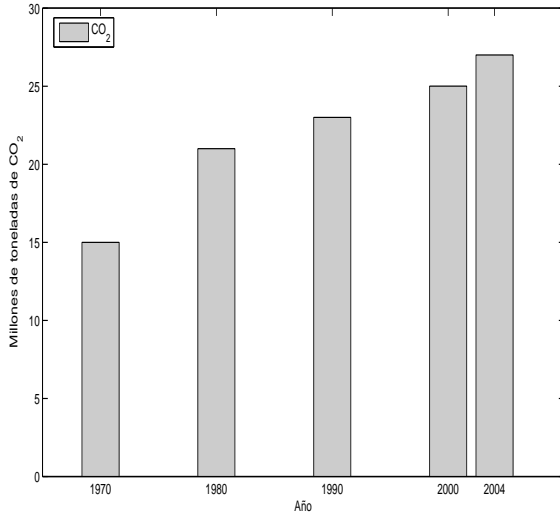


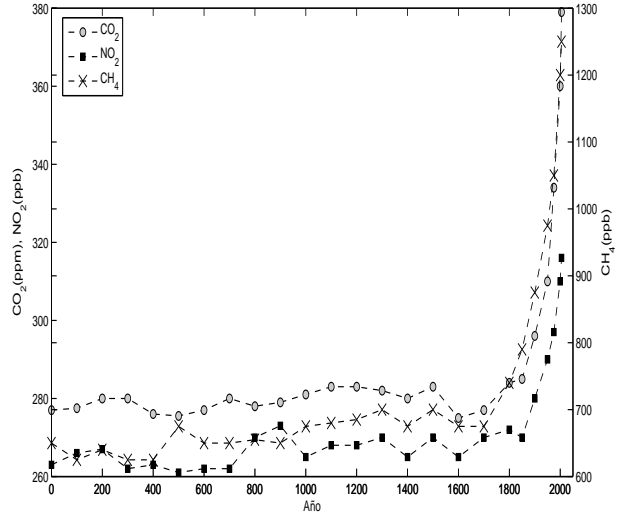
Figura 1.4: Reservas de Petróleo crudo de México, Estados Unidos y Arabia Saudita. (OPEC, 2009).

en combinación con el aumento de la concentración de los otros gases de efecto invernadero y la deforestación, para alterar el balance energético entre el sistema tierra-atmósfera dando como resultado un incremento en la temperatura de la tierra (Figura 1.6). Este cambio en la temperatura global puede ocasionar cambios climáticos los cuales pueden tener como consecuencia el incremento en el nivel del mar, desequilibrios en los ecosistemas naturales, disminución en la capacidad de producir alimentos y daños a la salud de las personas.

Como se muestra en la Figura 1.2 la energía primaria obtenida a partir de combustibles nucleares es del 5.2%. Hoy en día operan 436 reactores de fisión en más de 30 países. A raíz de los accidentes nucleares de finales de los 1970's y mediados de la década de 1980, las instalaciones de este tipo fueron obligadas a adoptar medidas de seguridad más fuertes y costosas. Aunque la energía nuclear de fisión tiene un importante desarrollo, siguen existiendo muchos cuestionamientos acerca de la disposición final de los residuos nucleares. Esto significa que la energía nuclear de fisión se sigue viendo como una fuente energética cara y peligrosa. Por su parte la energía nuclear de fusión



(a) Emisiones de CO₂ debido a la combustión de combustibles fósiles.



(b) Concentración de gases de efecto invernadero en la atmósfera.

Figura 1.5: Emisiones de CO₂ y concentración de gases de efecto invernadero en la atmósfera. (Forster *et al.*, 2007).

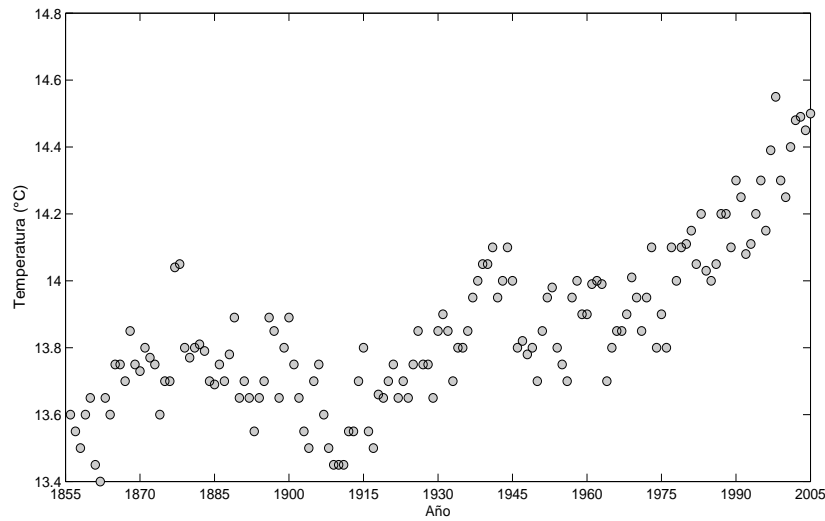


Figura 1.6: Temperatura media mundial del aire en la superficie de la tierra. (Forster *et al.*, 2007).

se ha visto como una opción no contaminante y segura, debido a que el residuo principal de la fusión deuterio-tritio es el helio el cual es un gas noble que no representa riesgo alguno para el ser humano. La principal desventaja de esta energía es que actualmente no se cuenta con la tecnología necesaria para que la energía nuclear de fusión sea empleada en forma comercial. En la actualidad el proyecto más importante enfocado a lograr el uso comercial de la energía nuclear de fusión es el denominado ITER, el cual está conformado por China, la Unión Europea, India, Japón, Corea, Rusia y Estados Unidos.

La posible caída de producción de combustibles fósiles aunado a los impactos negativos sobre el medio ambiente que conlleva su uso, son las principales razones que ha llevado al desarrollo de nuevas fuentes de energía como las denominadas renovables. El desarrollo de estas últimas actualmente se encuentran entre las políticas energéticas de algunos países con el fin asegurar la demanda de energía y mitigar los cambios climáticos.

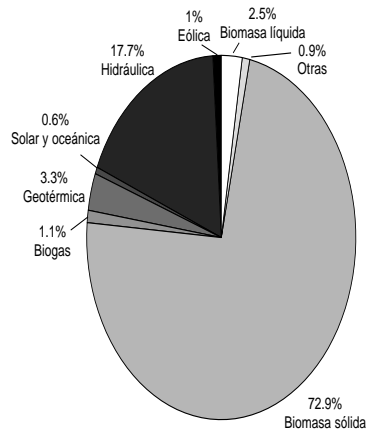
La energía renovable es aquella que se obtiene de procesos naturales que son repuestos constantemente. En sus diversas formas, esta energía se deriva directa o indirectamente del sol, o del calor generado en las profundidades de la tierra. La energía renovable se puede clasificar de la siguiente manera:

- Solar: se aprovecha la radiación solar para generar electricidad por medio de celdas fotovoltaicas o para el calentamiento de agua por medio de paneles recolectores de calor.
- Eólica: la energía cinética del aire es transformada en energía eléctrica por medio de turbinas.
- Hidráulica: se refiere al tipo de energía en el cual se aprovecha la energía cinética y potencial de la corriente de los ríos para generar electricidad.
- Oceánica: la energía derivada de las mareas, olas y corrientes oceánicas es utilizada para la generación de energía eléctrica.

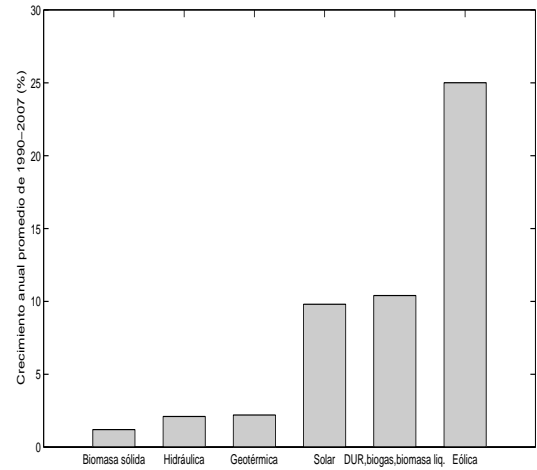
- Geotérmica: es la energía emitida de la profundidad de la tierra en forma de agua caliente o de vapor, la cual es usada para la generación de electricidad, calor o para calefacción.
- Biomasa sólida: se refiere a la materia sólida de origen biológico que puede ser usada como combustible para la generación de calor o energía eléctrica. La madera y el carbón vegetal son la biomasa sólida más importante.
- Biogas: esta fuente de energía se deriva principalmente de la fermentación anaerobia de la biomasa y es usada principalmente como combustible para producir calor.
- Biomasa líquida: en esta clasificación se incluyen combustibles y aditivos líquidos obtenidos a partir de fuentes biológicas.

Las fuentes renovables de energía cubrieron en 2007 el 12.4 % de la demanda de energía primaria mundial. La biomasa sólida es por mucho la más grande fuente de energía renovable ya que representa el 9.04 % del consumo mundial de energía, o el 72.9 % del total de la energía renovable consumida (Figura 1.7). La energía hidráulica es la segunda más importante energía renovable con una aportación del 2.19 % a la demanda mundial de energía, cifra que es el 17.7 % de la energía renovable consumida. A pesar de que la biomasa sólida es la fuente renovable más consumida en el mundo, su crecimiento anual desde 1990 se ha rezagado comparado con el crecimiento de otras energías renovables como la eólica, la biomasa líquida y la solar (Figura 1.7).

Entre los combustibles obtenidos de la biomasa se incluyen el biodiesel, bioetanol, biometanol, bio-etiliterbutileter (boiETBE) y el bio-metiliterbutileter (bioMTBE). Aunque estos biocombustibles solo aportan el 0.31 % del total de la energía renovable consumida en la planeta, en los últimos 20 años presenta un crecimiento anual del 10.4 %. De estos biocombustibles el bioetanol es el que ha tenido más uso sobre todo en Estados Unidos y Brasil, y cuyo empleo ha sido destinado principalmente al sector del transporte terrestre.



(a) Aportación de cada tipo de energía renovable al total de energía de este tipo consumida en el mundo en 2007.



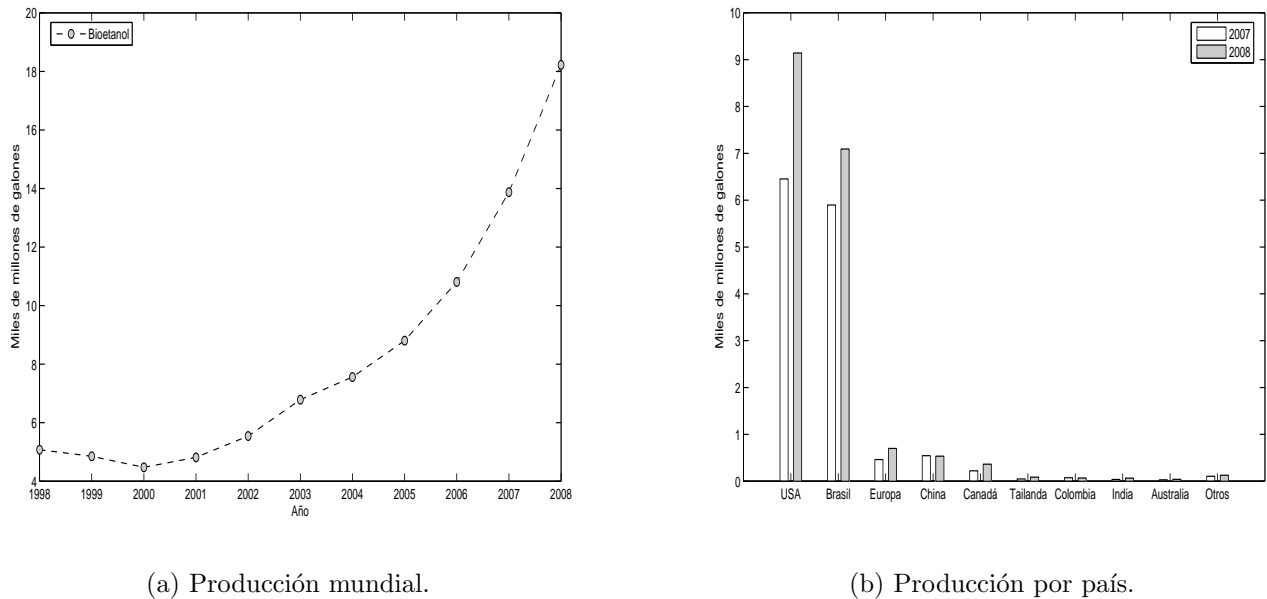
(b) Crecimiento promedio anual de las energías renovables.

Figura 1.7: Consumo y crecimiento de energías renovables. (IEA, 2009).

1.2. El etanol como biocombustible

Un biocombustible se define como aquel combustible que se obtiene a partir de recursos biológicos (biomasa). El etanol que se obtiene de la biomasa se le conoce por ese origen como bioetanol. La producción de este biocombustible ha aumentado en un 260 % en los últimos diez años (ver Figura 1.8) siendo el crecimiento en norteamérica y sudamérica el más significativo. En 2008 los Estados Unidos fueron los productores número uno de etanol con 9000 millones de galones mientras que Brasil ocupó el segundo lugar con una producción de 7000 millones de galones. La producción de estos dos países representa cerca del 90 % de la producción mundial.

De acuerdo con la Figura 1.9 el sector del transporte es el segundo sector económico que demanda la mayor cantidad de insumos energéticos. Esta situación ha sido fundamental para impulsar programas en donde el etanol sirva como combustible dentro del transporte terrestre y promover



(a) Producción mundial.

(b) Producción por país.

Figura 1.8: Producción de bioetanol. (BP, 2009; DOE, 2009).

una transición hacia sistemas de transporte sustentables. La idea fundamental de dichos programas es que el uso del bioetanol y del resto de las energías renovables, eventualmente pueda reemplazar en buena medida el empleo de los combustibles fósiles.

En algunos países el impulso a la producción de bioetanol ha sido de gran relevancia tal y como lo muestran los datos de producción por país (Figura 1.8). En 2008 en Estados Unidos existían 139 biorefinerías destinadas a la producción de bioetanol y habían 61 otras en construcción. Ese mismo año en México existía una biorefinería produciendo bioetanol.

1.2.1. Beneficios del uso del bioetanol como biocombustible

Los biocombustibles ofrecen beneficios tanto económicos como ambientales, lo que los convierte en una alternativa atractiva para el sector del transporte (Demirbas, 2009). Los beneficios económicos

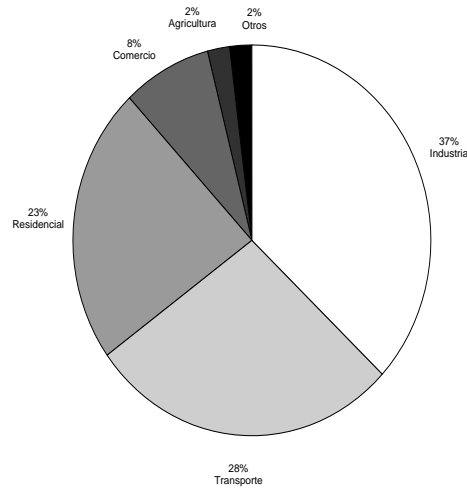


Figura 1.9: Distribución mundial del consumo final de energía por sector en 2007. (IEA, 2009).

son: diversificación del mercado de combustibles, desarrollo del mercado de los productos agrícolas, desarrollo de zonas rurales, y reducción de la dependencia de combustibles fósiles. Los beneficios ambientales son: reducción o al menos evitar el incremento de emisiones de gases de efecto invernadero, incluyendo el CO_2 , reducción de la contaminación del aire y el uso de materias primas biodegradables.

De acuerdo a Escobar *et al.* (2009) durante la combustión del bioetanol, la cantidad de CO_2 generada corresponde a la cantidad que fue capturada de la atmósfera durante el crecimiento de las plantas de las cuales se origino el bioetanol, situación que resulta en un ciclo de carbono (ver Figura 1.10). La disminución de las emisiones de CO_2 depende de la energía usada durante la producción del bioetanol así como de los productos secundarios del proceso. Por otro lado la reducción de las emisiones de otros gases como el CO , CH_4 , NO_x , SO_2 e hidrocarburos aromáticos es función de la proporción bioetanol-gasolina que se podría usar en los automóviles.

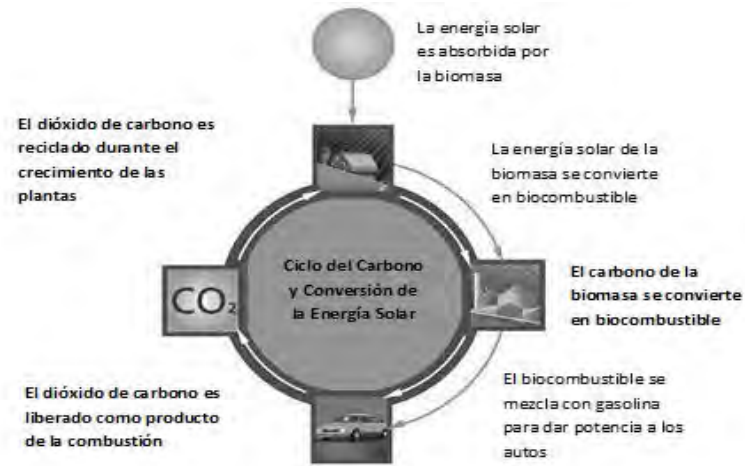


Figura 1.10: Ciclo del carbono y conversión de la energía solar. (RFA, 2008).

1.2.2. El bioetanol en el transporte

El bioetanol puede usarse en el sector del transporte directamente como combustible o en mezcla con gasolina. Además también puede servir como materia prima para la producción de aditivos oxigenantes para la gasolina como el bio-etil-terbutil-eter (bioETBE).

Actualmente, sin lugar a dudas, Brasil y Estados Unidos son los países en donde se tiene un mayor avance en el uso de bioetanol en los automóviles. En Estados Unidos el bioetanol es usado en mezclas con gasolina que van del 5 % al 85 % en bioetanol. Las mezclas de hasta 10 % en bioetanol (E10) son aprobadas para usarse en cualquier vehículo, mientras que para emplear mezclas con mayor contenido de bioetanol se requiere realizar modificaciones a los motores de los autos.

Las especificaciones del bioetanol para usarse en mezclas de 85 % bioetanol-15 % gasolina (E85) se muestran en la Tabla 1.1.

La importancia que actualmente tiene el etanol como combustible renovable y su potencial ampliación de uso en el mundo, son unas de las razones por las que en el presente trabajo se considera

un proceso en donde se involucra la separación de una mezcla etanol-agua. Esta operación forma parte del proceso de transformación de la biomasa en bioetanol como se describe en el siguiente capítulo.

Propiedad	Unidades	Especificación
Agua	<i>%masa</i>	1.0
Metanol	<i>%vol.</i>	0.5 máx.
Alcoholes alifáticos de cadena mayor, C3-C8	<i>%vol.</i>	2 máx.
Acidez como ácido acético	<i>mg/kg</i>	1 máx.
Cloruros inorgánicos	<i>mg/kg</i>	1 máx.
Cloro total como cloruros	<i>mg/kg</i>	2 máx.
Cobre	<i>mg/100mL</i>	0.07 máx.

Tabla 1.1: Especificaciones del etanol para combustible E85. (DOE, 2008).

Capítulo 2

Proceso de obtención de bioetanol

2.1. Materias primas para la producción de bioetanol

Un problema para la producción de bioetanol es la disponibilidad de las materias primas debido a que esta puede variar en función de la temporada del año y de la localización geográfica. De igual forma el precio de las materias primas es muy volátil lo que puede afectar significativamente los costos de producción del bioetanol.

Las materias primas para la obtención del bioetanol pueden ser clasificadas en tres tipos: (i) materiales ricos en sacarosa, (ii) materiales ricos en almidón, (iii) materiales lignocelulósicos.

2.1.1. Materiales ricos en sacarosa

En este tipo de materia prima para la obtención de bioetanol se incluyen la caña de azúcar, el betabel y el sorgo dulce. La producción de bioetanol de Brasil se basa en la caña de azúcar como materia prima. Por su parte el betabel es usado principalmente en Europa. El sorgo dulce como materia prima para la obtención de etanol aún sigue en etapa de evaluación pero es una opción prometedora (Balat *et al.*, 2008).

El proceso de producción de etanol a partir de sacarosa como materia prima es más fácil en comparación con procesos semejantes a partir de materiales almidonados y lignocelulósicos, debido a que no es necesario una hidrólisis previa de la materia prima ya que los disacáridos pueden ser rotos por los organismos fermentadores para producir bioetanol (Cardona & Sánchez, 2007).

2.1.2. Materiales ricos en almidón

En esta clasificación se incluyen el maíz y el trigo. Este tipo de materia prima para la obtención de bioetanol es usado principalmente en norteamérica y europa. La industria del bioetanol de los Estados Unidos se basa principalmente en el maíz como materia prima.

El almidón es un biopolímero y es definido como un homopolímero ya que consiste en un sólo monómero, la D-glucosa. Para producir bioetanol a partir del almidón es necesario partir las cadenas de este carbohidrato para obtener jarabe de glucosa, que puede ser convertido en bioetanol por medio de fermentación.

2.1.3. Materiales lignocelulósicos

Los materiales lignocelulósicos, como los residuos de la agricultura (e.g. zacate de maíz y paja), la madera, y los residuos orgánicos domésticos, son un material atractivo para la producción de bioetanol a gran escala debido a su gran abundancia en el planeta. Actualmente, una gran cantidad de estudios referentes a la utilización de materiales lignocelulósicos como materia prima para la producción de etanol son llevados a cabo. Para países donde el cultivo de granos energéticos es difícil o bien son una fuente de alimentación humana, los materiales lignocelulósicos son una opción importante para la elaboración de biocombustibles.

La estructura básica de toda materia lignocelulósica consiste en tres polímeros básicos: celulosa, hemicelulosa, y lignina. El mayor reto en la conversión de la biomasa lignocelulósica en bioetanol

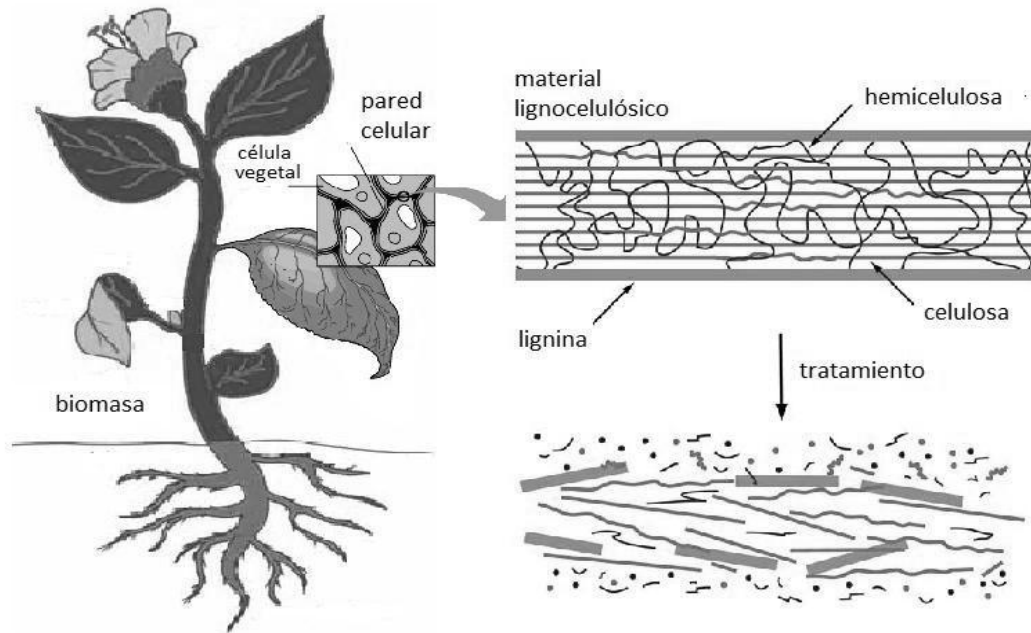


Figura 2.1: Estructura básica de los materiales lignocelulósicos y representación esquemática de su tratamiento para la fermentación. Figura adaptada de Mosier *et al.* (2005).

está en su tratamiento antes de la fermentación (ver Figura 2.1). Debido a la estructura compleja del material lignocelulósico, el tratamiento tiene que ser necesario para la degradación del material, la remoción de la lignina, la hidrólisis parcial o total de de la hemicelulosa, y la disminución de la proporción entre la celulosa cristalina y celulosa amorfa, que es la forma más apropiada para las etapas de hidrólisis subsecuentes. Posteriormente la celulosa es sometida a un proceso de hidrólisis enzimática para obtener glucosa la cual es transformada en bioetanol por medio de un proceso de fermentación. Eventualmente los azúcares liberados durante la hidrólisis de la hemicelulosa también pueden ser transformados en bioetanol (Cardona & Sánchez, 2007).

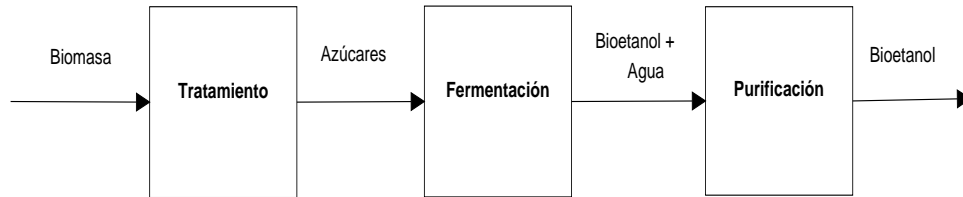


Figura 2.2: Diagrama de bloques del proceso de obtención de bioetanol.

2.2. Descripción del proceso

La producción de bioetanol se lleva a cabo mediante la fermentación de los azúcares que se obtienen de la biomasa. Gran parte de las operaciones y procesos unitarios que involucra la producción de bioetanol depende de la materia prima que se utilice. El proceso se puede representar de forma general tal y como se observa en el diagrama de bloques de la Figura 2.2. En la sección de Tratamiento el objetivo es obtener los azúcares de la biomasa, mientras que en la sección de Fermentación los azúcares producto de la etapa anterior son reducidos para dar como resultado una mezcla de bioetanol y agua, la cual tiene una composición de etanol muy baja (normalmente de entre 3-10% mol etanol). La sección de Purificación es la única parte del proceso que se puede considerar independiente de la materia prima, ya que en esta parte el principal objetivo es separar la mezcla bioetanol-agua para obtener bioetanol de alta pureza para que pueda ser utilizado como biocombustible o precursor de aditivos oxigenantes para gasolina.

2.2.1. Costos de producción

Los costos de producción del bioetanol varían ampliamente dependiendo de la materia prima, el proceso de conversión, la escala de producción y la región (Demirbas, 2009). Se puede observar en la Figura 2.3 que el bioetanol producido en Brasil es el más competitivo ante la gasolina, mientras que el producido en los Estados Unidos es más costoso. Aunque la producción de bioetanol a

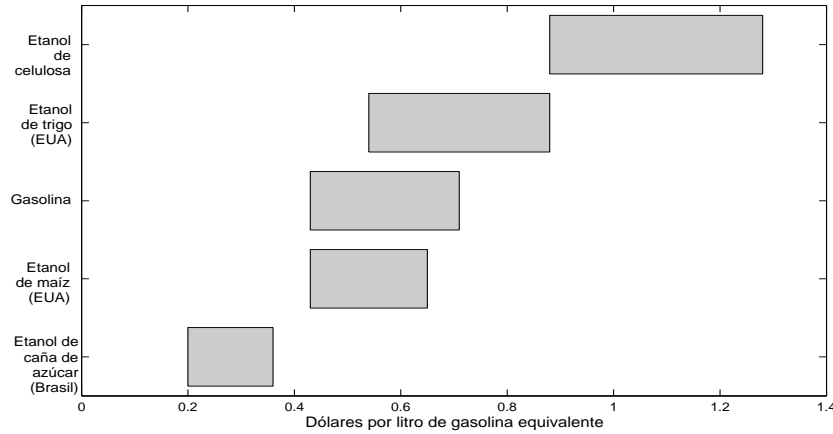
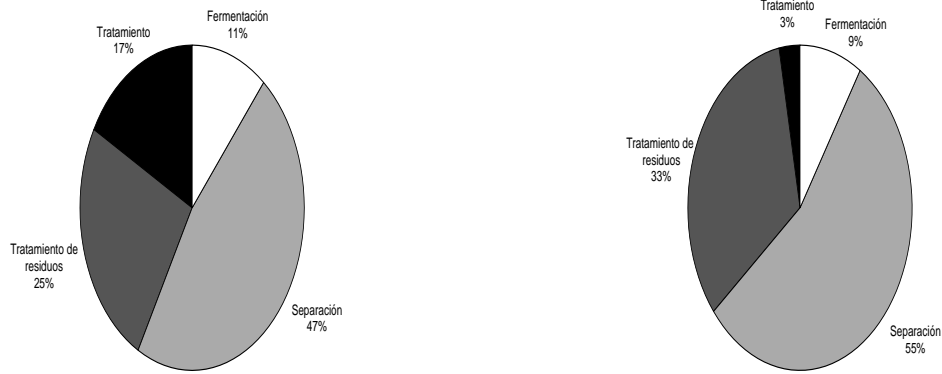


Figura 2.3: Rango de costo de producción del bioetanol y la gasolina. Escobar *et al.* (2009).

partir de materiales lignocelulósicos es una opción muy prometedora, su aplicación comercial no es factible debido a los altos costos de producción involucrados. Como en la mayoría de los procesos químicos, el costo del proceso de separación domina el costo total de producción de bioetanol debido a la alta pureza que se requiere de este para su uso como biocombustible. En la Figura 2.4 se presenta la distribución de los requerimientos energéticos para la producción de bioetanol a partir de caña de azúcar y de maíz, donde se observa que la etapa de separación es la que mayor demanda energética tiene.

La baja competitividad del bioetanol ante los combustibles fósiles, ha traído como consecuencia que la búsqueda de tecnologías económicamente viables para la producción de bioetanol, principalmente a partir de materiales lignocelulósicos, sea prioridad para algunos centros de investigación, universidades, empresas y gobiernos. En el presente trabajo se propone un proceso de destilación para separar la mezcla bioetanol-agua por medio del cual se obtenga bioetanol de alta pureza y además sea posible alcanzar un ahorro de energía. Esta última situación puede contribuir a la reducción de los costos de producción de bioetanol debido a que el proceso de separación es el que



(a) Bioetanol a partir de caña de azúcar.

(b) Bioetanol a partir de maíz.

Figura 2.4: Distribución de requerimientos energéticos en el proceso de obtención de bioetanol. Montoya *et al.* (2005).

mayor demanda energética tiene en dicho proceso de producción.

2.3. Alternativas para la separación de la mezcla etanol-agua

La última etapa del proceso de producción de bioetanol, la cual representa el costo de producción dominante, implica la separación de la mezcla etanol-agua para así obtener etanol anhidro y pueda ser considerado para usarse como biocombustible (ver Tabla 1.1). Esta etapa no es una operación sencilla debido a que la mezcla binaria en cuestión presenta un azeótropo de punto de ebullición mínimo en un rango amplio de presiones, por lo tanto un esquema convencional de destilación no es factible para lograr la separación hasta alta pureza.

La destilación azeotrópica heterogénea y homogénea, así como la destilación de presión variable son algunos procesos que se han usado para separar mezclas azeotrópicas. De igual forma para

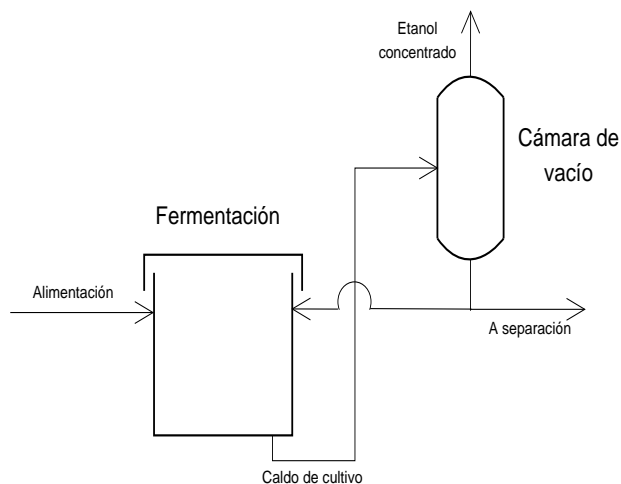
la separación de la mezcla etanol-agua se ha utilizado procesos con membranas y el proceso de adsorción de presión variable.

Dentro del proceso de obtención de bioetanol, se ha propuesto integrar la etapa de fermentación y la de separación lo cual representa una opción para la separación de la mezcla bioetanol-agua.

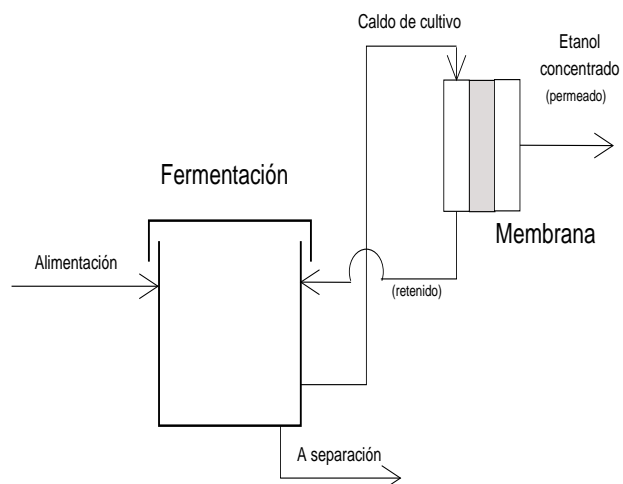
2.3.1. Integración fermentación-separación

La integración fermentación-separación es una atractiva alternativa para la mejora del proceso de fermentación, además dicha integración permite obtener una corriente con composición alta de etanol. La mejora en la fermentación se debe a que cuando el etanol es removido del caldo de cultivo, su efecto de inhibición en la reacción es disminuido o neutralizado (Cardona & Sánchez, 2007).

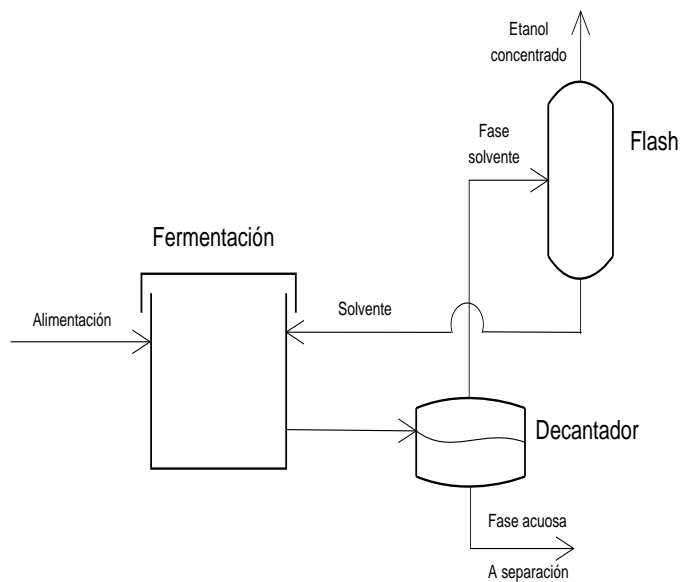
El acoplamiento de una cámara de vacío a la unidad de fermentación es una opción para la remoción parcial del etanol del caldo de cultivo. De igual manera la integración del proceso de fermentación con un módulo de membrana puede ser empleado para la separación del etanol de la mezcla de fermentación (Figura 2.5). La extracción líquido-líquido es otra operación que puede ser acoplada con la fermentación para separar el etanol de la mezcla de reacción. En esta operación se requiere que el solvente no inhiba la reacción y que favorezca la migración del etanol hacia él. En algunos trabajos se ha considerado el empleo del *n*-dodecanol y el alcohol oléico como solventes (Cardona & Sánchez, 2007). Debido a que con la integración fermentación-separación la recuperación del etanol del caldo de cultivo es sólo parcial, es necesario el empleo de otros procesos de separación para recuperar la totalidad del etanol producido por la fermentación.



(a) Separación de etanol del caldo de cultivo por vacío.



(b) Separación de etanol del caldo de cultivo por membrana.



(c) Separación de etanol del caldo de cultivo por extracción.

Figura 2.5: Esquemas de integración fermentación-separación.

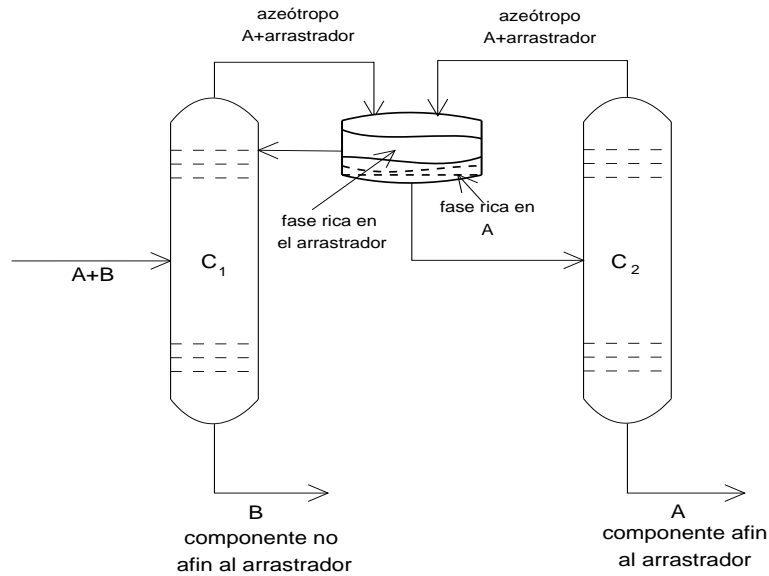


Figura 2.6: Configuración convencional para la destilación azeotrópica heterogénea.

2.3.2. Destilación azeotrópica heterogénea y homogénea

En estos dos procesos de separación es necesario la adición de un tercer componente para modificar las propiedades de la mezcla azeotrópica y lograr la separación. Se denomina destilación azeotrópica heterogénea cuando el tercer componente solo es parcialmente soluble en uno de los componentes de la mezcla a separar y forman un nuevo azeótropo, el cual durante la condensación forma dos fases líquidas: una fase rica en el componente afín al arrastrador, mientras que la otra fase es rica en el agente de separación (ver Figura 2.6). Esta situación permite separar, en una primera columna el componente que no es afín al arrastrador, y posteriormente en una segunda columna el compuesto afín al arrastrador es recuperado. Black (1980) y Luyben (2006a) abordan este proceso para la separación de la mezcla etanol-agua.

Por otro lado en la destilación azeotrópica homogénea el tercer componente, llamado en este caso disolvente, modifica las volatilidades relativas de los componentes en la mezcla original sin

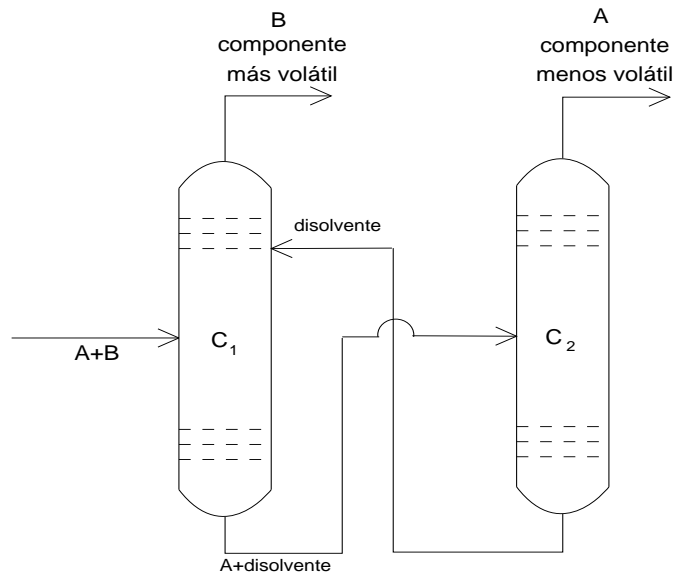


Figura 2.7: Configuración convencional para la destilación azeotrópica homogénea.

provocar la formación de nuevos azeótropos y además es capaz de disolverse en la mezcla original. En este proceso en la primera columna se recupera el componente más volátil de la mezcla original mientras que en una segunda columna es recuperado el disolvente y el componente menos volátil de la mezcla original (Figura 2.7). Para la separación de la mezcla etanol-agua la destilación azeotrópica homogénea ha sido estudiada en los trabajos de Black (1980), Knapp & Doherty (1992), Uyazán *et al.* (2006) y Dias *et al.* (2009).

La principal desventaja de estos dos procesos para la separación de la mezcla etanol-agua es que las sustancias que son adicionadas al sistema (e.g. benceno, monoetilenglicol, n-pentano) tienen impactos negativos sobre el ambiente o sobre la salud de las personas, además de los costos de adquisición de esas sustancias. Otro punto en contra del uso de un tercer componente es que existe la posibilidad de que el etanol sea contaminado por este agente de separación.

Recientemente se ha explorado la posibilidad de utilizar los denominados líquidos iónicos como

disolventes en la destilación azeotrópica homogénea. Los líquidos iónicos están constituidos por un catión orgánico y un anión inorgánico, y a diferencia de las sales convencionales, generalmente presentan un punto de fusión muy bajo. Además tienen una presión de vapor prácticamente no medible, su viscosidad es relativamente baja y son térmicamente estables hasta cierta temperatura. Estas características los hace ser atractivos sustitutos de los solventes orgánicos empleados en la destilación azeotrópica homogénea. Jork *et al.* (2004) presentan un trabajo donde abordan la separación de la mezcla etanol-agua por medio de la destilación azeotrópica homogénea empleando un líquido iónico como disolvente, y Ge *et al.* (2008) evalúan varios líquidos iónicos como posibles disolventes para la separación de esa misma mezcla. El diseño implicando en la formación de un líquido iónico, además del alto costo de manufactura de estos solventes, son factores que pueden dificultar su uso en procesos a nivel industrial.

2.3.3. Procesos con membranas

El proceso con membranas más estudiado para la separación de la mezcla etanol-agua es la pervaporación. El tipo de membranas que se usan para este proceso son las de polivinil alcohol, las cuales presentan una alta selectividad ya que favorecen el paso del agua a través de ellas y tienen una gran capacidad de retención para el etanol así como para otros solventes orgánicos.

En la pervaporación la alimentación y el retenido son líquidos en el lado de la sección de alta presión de la membrana, mientras que el permeado es retirado como vapor en la sección de baja presión de la membrana (ver Figura 2.8). El proceso ocurre en modo adiabático por lo que genera una caída de temperatura a causa del calor de vaporización involucrado durante el cambio de fase. Debido a que los flujos a través del módulo de separación disminuyen con el descenso de la temperatura, una unidad convencional de pervaporación consiste en una serie de módulos de membranas con intercalentamiento entre ellos. Aunque es posible emplear únicamente la pervaporación para separar una mezcla, se ha propuesto usarla en combinación con la destilación

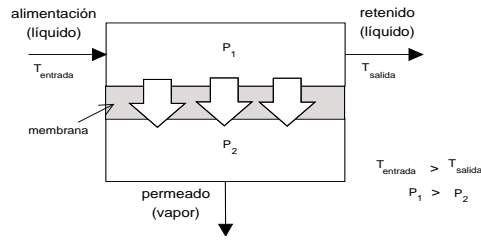


Figura 2.8: Proceso de pervaporación.

para dicho fin (Figura 2.9). Luyben (2009) presenta un trabajo donde propone un sistema híbrido destilación-pervaporación para la separación de la mezcla etanol-agua

A pesar de los buenos resultados usando herramientas de simulación y experimentos a nivel planta piloto (Tsuyumoto *et al.*, 1997), la aplicación de las membranas a nivel industrial puede presentar ciertas dificultades debido a la baja eficiencia de las membranas, la cantidad y el tamaño de los módulos requeridos para alcanzar una separación, y en algunos casos a la falta de materiales adecuados para la manufactura comercial de la membrana.

2.3.4. Adsorción

El proceso de adsorción tiene como agente de separación un adsorbente. La selectividad a adsorber uno de los componentes de la mezcla (con base en el tamaño molecular o propiedades de difusión), capacidad de desorción, así como el área disponible para la adsorción son factores fundamentales para tener una separación efectiva. Para la separación etanol-agua se ha propuesto utilizar tamices moleculares de zeolita como material adsorbente.

Para la separación de la mezcla etanol-agua usando zeolitas como agente de separación se usa el proceso denominado adsorción de presión variable. Primero una mezcla gaseosa de etanol-agua pasa por el lecho a alta presión. En esta etapa el agua, gracias al pequeño tamaño de los poros de la zeolita, es adsorbida y el etanol se recolecta como producto puro. En la segunda etapa el

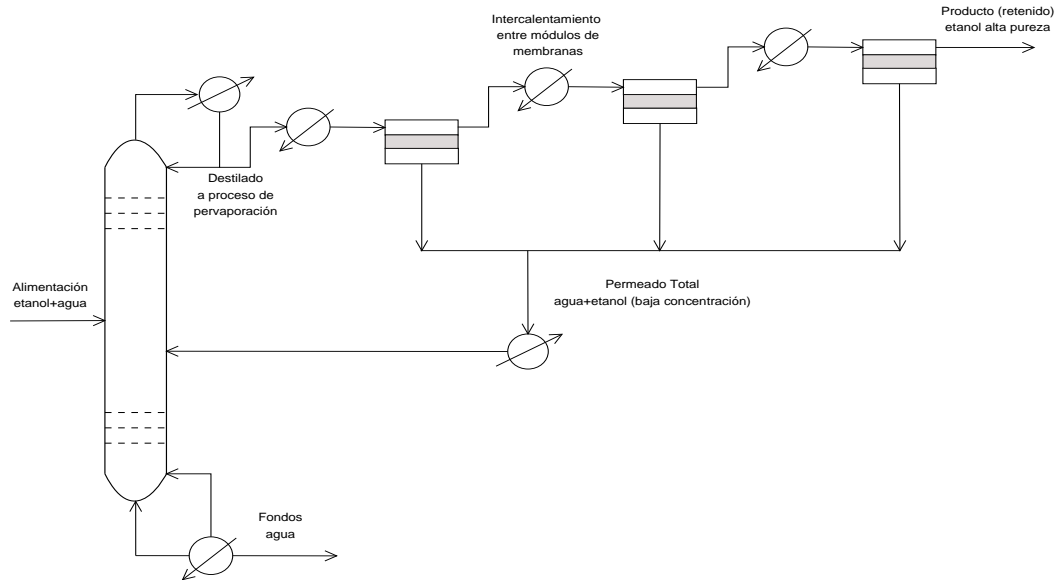


Figura 2.9: Representación esquemática de un proceso híbrido destilación-pervaporación para la obtención de etanol de alta pureza.

objetivo es desorber el agua del lecho, situación que se logra gracias a una reducción en la presión de operación (Figura 2.10). Para lograr estos ciclos en el proceso de adsorción de presión variable se han propuesto diversos esquemas los cuales emplean dos o más lechos adsorbentes.

Resultados a nivel simulación e industrial (ver Simo *et al.*, 2008) muestran que con este proceso es posible obtener etanol anhidro. Su principal desventaja es que los tamices moleculares de zeolita presentan una baja superficie activa comparada con otros adsorbentes (Keller, 1995) lo cual podría repercutir en el tamaño de los lechos y en la eficiencia de la separación.

2.3.5. Destilación de presión variable

Este proceso de separación involucra un esquema de dos columnas cada una operando a una presión diferente. Ese cambio en la presión puede alterar la volatilidad relativa de los componentes, y para

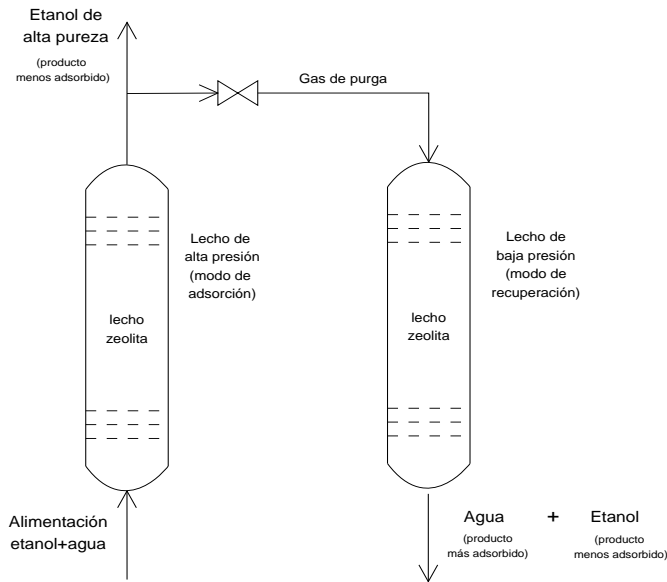


Figura 2.10: Representación esquemática de un proceso de adsorción de presión variable para la separación de una mezcla etanol-agua.

una mezcla azeotrópica binaria resulta en un cambio en la composición del azeótropo lo cual permite la separación de la mezcla.

En la primera columna se recupera uno de los componentes como fondos, mientras que en el destilado se tiene una corriente con una composición cercana al azeótropo a la presión de operación de esa columna. Posteriormente ese destilado se alimenta a la segunda columna, la cual opera a diferente presión, donde se recupera el otro componente como fondos y el destilado, con composición cercana al azeótropo a la presión de operación, es reciclado a la primera columna. La secuencia de las columnas depende de la composición de la mezcla a separar y de la sensibilidad de la composición del azeótropo con la presión.

Por ejemplo, suponga el caso donde la composición azeotrópica de una mezcla formada por A y B a una presión P_1 es de X_1 de A , mientras que a P_2 es de X_2 de A , donde P_2 es mayor a P_1 y X_1 es mayor a X_2 . Si la composición de A en la corriente de alimentación a la primera columna (F_1)

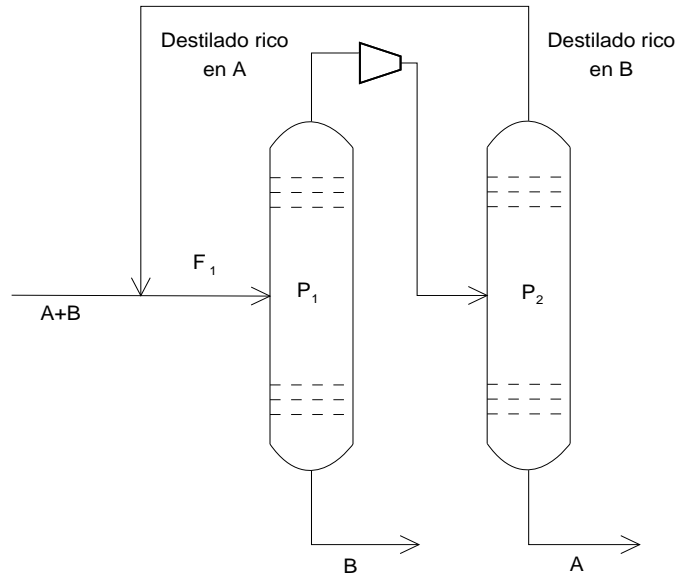


Figura 2.11: Configuración convencional para la destilación de presión variable.

es menor a X_1 entonces la secuencia de las columnas y las corrientes quedarían como se muestra en la Figura 2.11.

Aplicaciones comerciales conocidas de la destilación de presión variable para la separación de mezclas azeotrópicas incluyen a la mezcla tetrahidrofurano-agua, acetonitrilo-agua, metanol-metil etil cetona y metanol-acetona. Black (1980) fue el primero en explorar este método de separación para la mezcla etanol-agua, sin embargo debido a la baja sensibilidad a la presión de la composición del azeótropo que forma dicha mezcla, la separación por destilación de presión variable resulta en un proceso de alta demanda energética (Huang *et al.*, 1999).

En la Tabla 2.1 se presentan las principales ventajas y desventajas de los procesos de separación presentados como alternativas para la separación de la mezcla en estudio.

El proceso para la separación etanol-agua propuesto en este trabajo tiene como fundamento el cambio de presión para poder lograr la separación, además de la integración térmica interna para

disminuir la demanda energética del proceso. Como se describió anteriormente ya existen algunos procesos para la separación etanol-agua, sin embargo lo que se busca es proponer un proceso que no involucre ningún agente contaminante y que además sea competitivo en el aspecto energético frente a otros procesos de separación usados para el mismo propósito.

Proceso de separación	Ventajas	Desventajas
Destilación azeotrópica homogénea y heterogénea	Amplio conocimiento de su uso a nivel industrial.	Alto consumo energético e introducción de un tercer componente.
Procesos con membranas	Bajo consumo energético.	Baja eficiencia de membranas, y en algunos casos falta de materiales adecuados para su manufactura comercial.
Adsorción	Bajo consumo energético.	Baja eficiencia de materiales adsorbentes.
Destilación de presión variable	No es necesaria la adición de un tercer componente.	Alto consumo energético.

Tabla 2.1: Principales ventajas y desventajas de los procesos de separación presentados para la separación de la mezcla etanol-agua.

Capítulo 3

Principios de la CDPD

La columna de destilación de pared dividida (CDPD) propuesta en el presente trabajo para la separación etanol-agua, se basa en dos conceptos fundamentales: la sensibilidad a cambios de presión de la composición azeotrópica de la mezcla etanol-agua y la integración térmica interna. Bajo el primer concepto la separación de la mezcla en estudio es posible y bajo el último se puede alcanzar un ahorro de energía.

3.1. Sensibilidad de la composición azeotrópica a la presión

La sensibilidad a la presión de la composición de mezclas azeotrópicas se conoce desde mediados del siglo XIX (Knapp & Doherty, 1992), y ha sido ampliamente aprovechada en los procesos de destilación de presión variable para la separación de diversas mezclas azeotrópicas (ver Capítulo 2). El cambio en la presión altera la volatilidad relativa de los componentes, y para una mezcla azeotrópica binaria resulta en un cambio en la composición del azeótropo lo cual permite la separación de la mezcla.

A diferencia de la destilación de presión variable en donde se involucra una configuración de dos

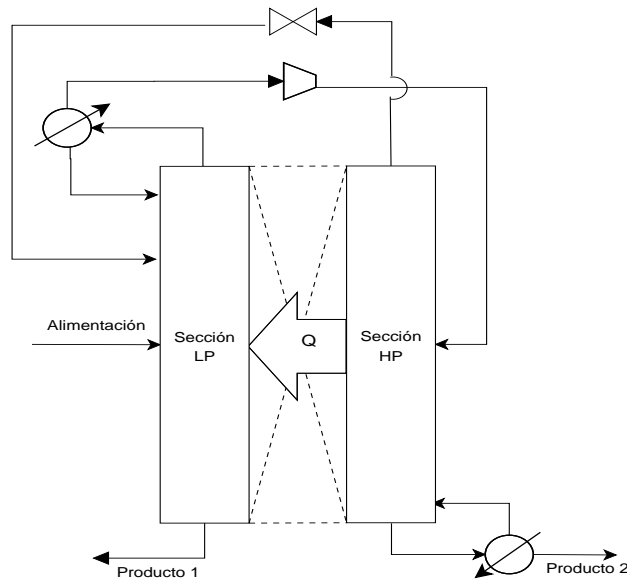


Figura 3.1: Diagrama de flujo de conceptualización de la CDPD.

columnas, cada una operando a diferente presión, la CDPD está conceptualizada bajo el esquema de una sola coraza la cual contiene una pared que divide dos secciones, la de alta presión (HP) y la de baja presión (LP). Para el ajuste de presión entre las secciones de la CDPD son necesarios una válvula y un compresor. Las secciones de la CDPD son análogas a las columnas involucradas en un proceso de destilación variable. En la Figura 3.1 se presenta el diagrama de flujo conceptualizado de la CDPD y en la Figura 3.2 la configuración real de la CDPD.

3.2. Integración térmica interna

Las columnas de destilación son conocidas por su alto requerimiento energético. Para efectuar la separación de una mezcla se tiene que proporcionar calor a alta temperatura en el rehervidor y después tiene que ser removido a baja temperatura en el condensador. Para mejorar la eficiencia energética se han propuesto métodos que tienen como fundamento volver a utilizar o reincorporar

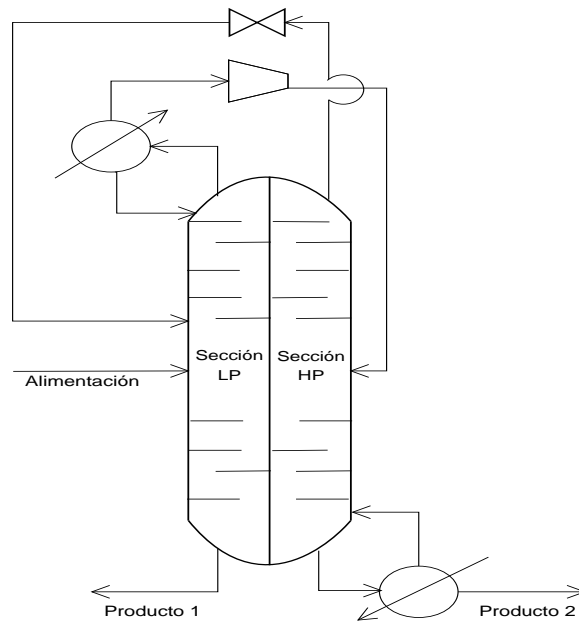


Figura 3.2: Configuración real de la CDPD.

la energía removida del proceso. Entre los métodos más importantes está el uso del principio de bomba de calor, el diseño pinch, y la integración térmica interna.

La CDPD propuesta usa la integración térmica interna para reducir el consumo energético. El método fue propuesto por Mah *et al.* (1977) al cual llamó destilación con reflujo y vaporización secundarios. La propuesta de este proceso de separación es que en una columna de destilación exista intercambio de calor entre la sección de agotamiento y la de rectificación, en donde cada una de ellas opera a diferente presión. Esta diferencia de presión es la que proporciona la fuerza motriz para que pueda existir la transferencia de energía entre las secciones. En la Figura 3.3 se muestra el esquema de este proceso al que actualmente se le conoce como columna de destilación con integración térmica interna (CDITI). Desde 1985 el estudio tanto teórico como experimental de este tipo de columnas ha sido ampliamente explorado por Nakaiwa y colaboradores. Nakaiwa *et al.* (2003) y Naito *et al.* (2000) confirmaron por medio de evaluación experimental a gran escala las

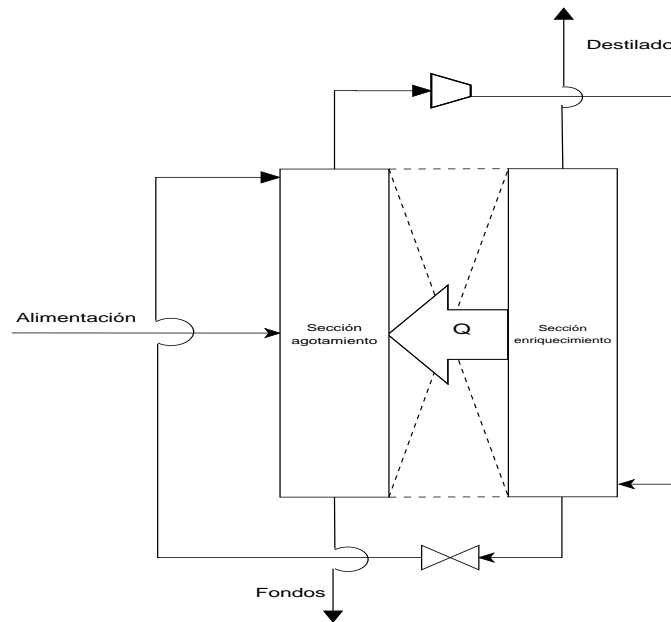


Figura 3.3: Configuración de la CDITI.

ventajas energéticas de este tipo de acoplamiento térmico en las columnas de destilación.

La CDPD utiliza el concepto de integración térmica interna entre toda la sección de alta presión y toda la de baja presión. Al igual que en la CDITI, la diferencia de presión hace que exista una fuerza motriz de temperatura a lo largo de las secciones permitiendo de esta forma el intercambio de calor. Debido a esta integración térmica interna cierta cantidad de calor de la sección de alta presión es transferida a la de baja presión, lo cual provoca un flujo de líquido a través de la primera y un flujo de vapor en la segunda. Como consecuencia, en la sección de baja presión no se requiere el rehervidor mientras que en la de alta presión se prescinde del condensador, situación que puede representar un potencial ahorro de energía.

Hasta donde se sabe, se han reportado pocos trabajos donde se aborde el esquema de destilación que se propone en el presente trabajo. Huang *et al.* (2008) propusieron una configuración similar a la CDPD para la separación de una mezcla azeotrópica, sin embargo esa configuración sólo

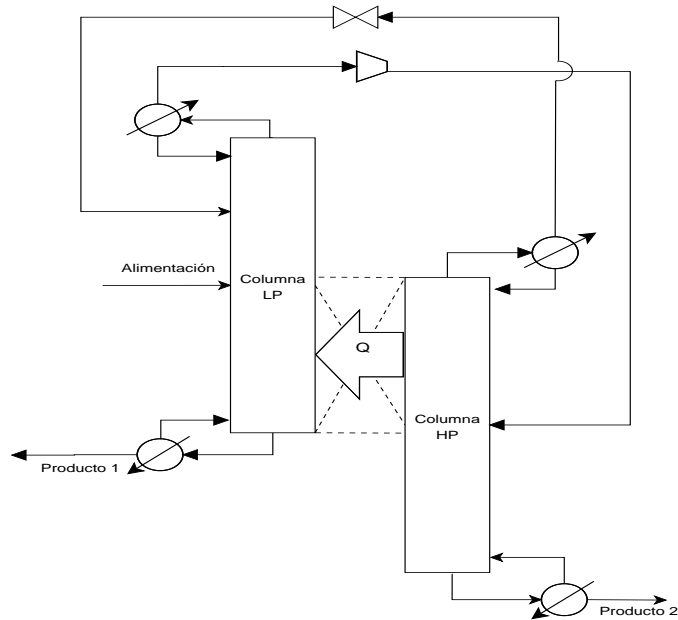


Figura 3.4: Configuración con integración térmica parcial.

considera integración térmica parcial entre la sección de alta y baja presión (Figura 3.4), por lo cual tanto el rehervidor como el condensador son requeridos en ambas secciones. Nakaiwa *et al.* (2003) también reportan resultados sobre este tipo de destilación donde hay integración térmica interna parcial. El presente trabajo contribuye en: explorar la posibilidad de obtener etanol anhidro con el uso de la CDPD, estudiar como la integración térmica interna total presente en la CDPD puede reducir los requerimientos energéticos para la separación de la mezcla etanol-agua y examinar la operabilidad de la CDPD bajo el esquema de control propuesto.

3.3. Modelo matemático

El modelo matemático dinámico de la CDPD para la separación de una mezcla binaria es derivado a partir de los balances de energía y de masa (total y por componente), de las relaciones de

equilibrio termodinámico, y de la relación que determina la integración térmica entre las secciones de la columna. Se realizan las siguientes suposiciones para el modelo: se desprecia la dinámica de la fase vapor, mezclado perfecto del líquido y vapor en todas las etapas, en todas las etapas se alcanza el equilibrio líquido-vapor, la caída de presión es despreciable en cada sección, se desprecia la hidráulica del flujo de líquido y el condensador es parcial.

La CDPD tiene N etapas incluyendo el condensador y el rehervidor de la sección de baja y alta presión, respectivamente. Debido a que se propone una integración térmica interna etapa a etapa, cada sección de la CDPD tiene $\frac{N}{2}$ etapas. Las etapas son contadas de arriba hacia abajo en cada sección de la columna. Todos los símbolos están definidos en la sección de Nomenclatura.

- Condensador. (Figura 3.5).

- Balance total de masa

$$\frac{dM_1^{LP}}{dt} = V_2^{LP} - V_1^{LP} - L_1^{LP} \quad (3.1)$$

- Balance de masa por componente ($i = 1, \dots, N_c - 1$)

$$\frac{d(M_1^{LP} x_{i,1}^{LP})}{dt} = V_2^{LP} y_{i,2}^{LP} - V_1^{LP} y_{i,1}^{LP} - L_1^{LP} x_{i,1}^{LP} \quad (3.2)$$

- Balance de energía

$$\frac{d(M_1^{LP} h_1^{LP})}{dt} = V_2^{LP} H_2^{LP} - V_1^{LP} H_1^{LP} - L_1^{LP} h_1^{LP} + Q_1^{LP} \quad (3.3)$$

- Etapa k en la sección LP ($k = 2, \dots, \frac{N}{2} - 1$). (Figura 3.6).

- Balance total de masa

$$\frac{dM_k^{LP}}{dt} = F_k^{LP} + f_k^{LP} + V_{k+1}^{LP} + L_{k-1}^{LP} - V_k^{LP} - L_k^{LP} \quad (3.4)$$

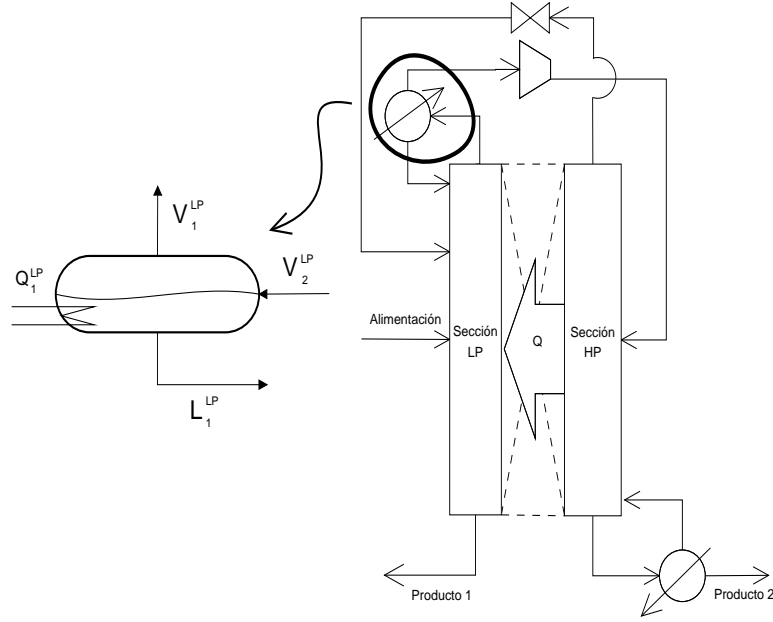


Figura 3.5: Condensador sección LP.

- Balance de masa por componente ($i = 1, \dots, N_c - 1$)

$$\frac{d(M_k^{LP} x_{i,k}^{LP})}{dt} = F_k^{LP} y_{F_{i,k}}^{LP} + f_k^{LP} x_{f_{i,k}}^{LP} + V_{k+1}^{LP} y_{i,k+1}^{LP} + L_{k-1}^{LP} x_{i,k-1}^{LP} - V_k^{LP} y_{i,k}^{LP} - L_k^{LP} x_{i,k}^{LP} \quad (3.5)$$

- Balance de energía

$$\frac{d(M_k^{LP} h_k^{LP})}{dt} = F_k^{LP} H_{F_k}^{LP} + f_k^{LP} h_{f_k}^{LP} + V_{k+1}^{LP} H_{k+1}^{LP} + L_{k-1}^{LP} h_{k-1}^{LP} - V_k^{LP} H_k^{LP} - L_k^{LP} h_k^{LP} + Q_k^{LP} \quad (3.6)$$

- Etapa $\frac{N}{2}$ en la sección LP. (Figura 3.7).

- Balance total de masa

$$\frac{dM_{\frac{N}{2}}^{LP}}{dt} = F_{\frac{N}{2}}^{LP} + f_{\frac{N}{2}}^{LP} + L_{\frac{N}{2}-1}^{LP} - V_{\frac{N}{2}}^{LP} - L_{\frac{N}{2}}^{LP} \quad (3.7)$$

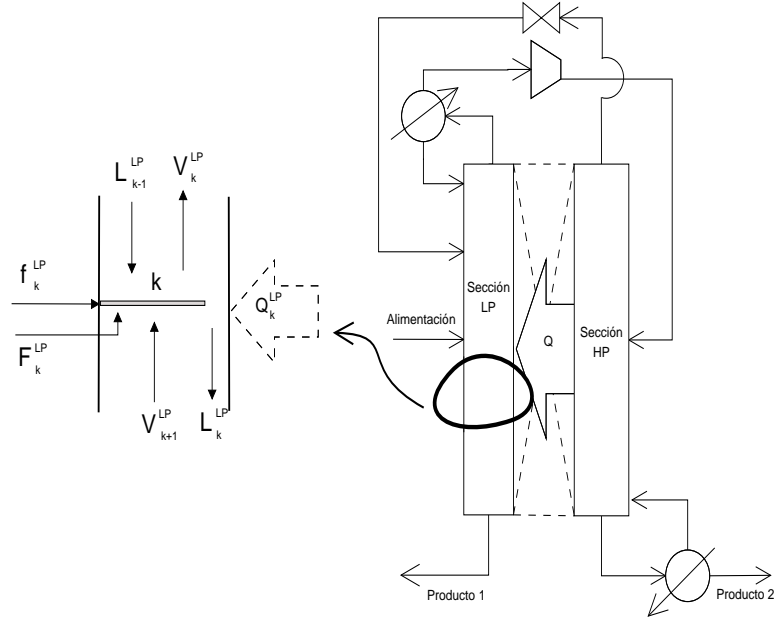


Figura 3.6: Etapa sección LP.

- Balance de masa por componente ($i = 1, \dots, N_c - 1$)

$$\frac{d(M_{\frac{N}{2}}^{LP} x_{i, \frac{N}{2}}^{LP})}{dt} = F_{\frac{N}{2}}^{LP} y_{F, \frac{N}{2}}^{LP} + f_{\frac{N}{2}}^{LP} x_{f, \frac{N}{2}}^{LP} + L_{\frac{N}{2}-1}^{LP} x_{i, \frac{N}{2}-1}^{LP} - V_{\frac{N}{2}}^{LP} y_{i, \frac{N}{2}}^{LP} - L_{\frac{N}{2}}^{LP} x_{i, \frac{N}{2}}^{LP} \quad (3.8)$$

- Balance de energía

$$\frac{d(M_{\frac{N}{2}}^{LP} h_{\frac{N}{2}}^{LP})}{dt} = F_{\frac{N}{2}}^{LP} H_{F, \frac{N}{2}}^{LP} + f_{\frac{N}{2}}^{LP} h_{f, \frac{N}{2}}^{LP} + L_{\frac{N}{2}-1}^{LP} h_{\frac{N}{2}-1}^{LP} - V_{\frac{N}{2}}^{LP} H_{\frac{N}{2}}^{LP} - L_{\frac{N}{2}}^{LP} h_{\frac{N}{2}}^{LP} + Q_{\frac{N}{2}}^{LP} \quad (3.9)$$

- Etapa 1 en la sección HP. (Figura 3.8).

- Balance total de masa

$$\frac{dM_1^{HP}}{dt} = F_1^{HP} + f_1^{HP} + V_2^{HP} - V_1^{HP} - L_1^{HP} \quad (3.10)$$

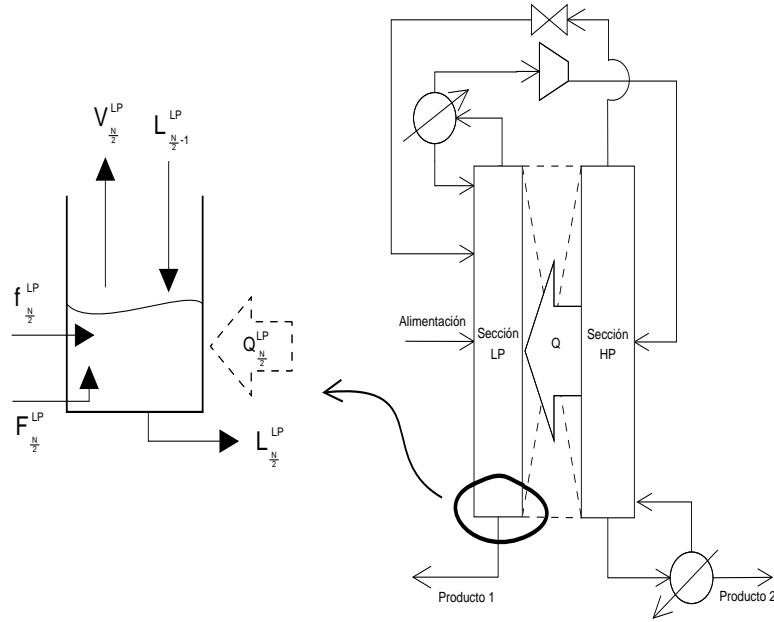


Figura 3.7: Fondo sección LP.

- Balance de masa por componente ($i = 1, \dots, N_c - 1$)

$$\frac{d(M_1^{HP} x_{i,1}^{HP})}{dt} = F_1^{HP} y_{f,i,1} + f_1^{HP} x_{f,i,1} + V_2^{HP} y_{i,2}^{HP} - V_1^{HP} y_{i,1}^{HP} - L_1^{HP} x_{i,1}^{HP} \quad (3.11)$$

- Balance de energía

$$\frac{d(M_1^{HP} h_1^{HP})}{dt} = F_1^{HP} H_{F_1} + f_1^{HP} h_{f_1} + V_2^{HP} H_2^{HP} - V_1^{HP} H_1^{HP} - L_1^{HP} h_1^{HP} + Q_1^{HP} \quad (3.12)$$

- Etapa k en la sección HP ($k = 2, \dots, \frac{N}{2} - 1$). (Figura 3.9).

- Balance total de masa

$$\frac{dM_k^{HP}}{dt} = F_k^{HP} + f_k^{HP} + V_{k+1}^{HP} + L_{k-1}^{HP} - V_k^{HP} - L_k^{HP} \quad (3.13)$$

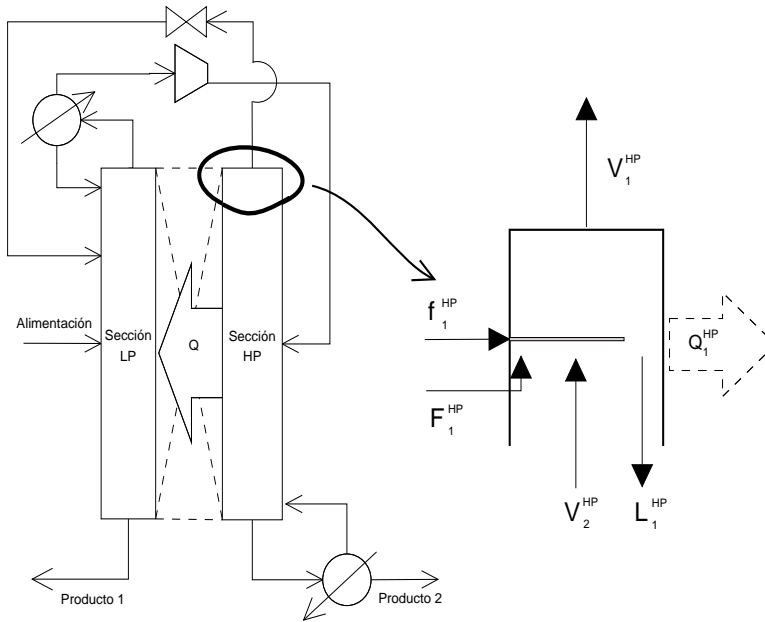


Figura 3.8: Etapa 1 sección HP.

- Balance de masa por componente ($i = 1, \dots, N_c - 1$)

$$\frac{d(M_k^{HP} x_{i,k}^{HP})}{dt} = F_k^{HP} y_{f_i,k} + f_k^{HP} x_{f_i,k} + V_{k+1}^{HP} y_{i,k+1} + L_{k-1}^{HP} x_{i,k-1} - V_k^{HP} y_{i,k} - L_k^{HP} x_{i,k} \quad (3.14)$$

- Balance de energía

$$\frac{d(M_k^{HP} h_k^{HP})}{dt} = F_k^{HP} H_{F_k} + f_k^{HP} h_{f_k} + V_{k+1}^{HP} H_{k+1}^{HP} + L_{k-1}^{HP} h_{k-1}^{HP} - V_k^{HP} H_k^{HP} - L_k^{HP} h_k^{HP} + Q_k^{HP} \quad (3.15)$$

- Rehervidor. (Figura 3.10).

- Balance total de masa

$$\frac{dM_{\frac{N}{2}}^{HP}}{dt} = L_{\frac{N}{2}-1}^{HP} - V_{\frac{N}{2}}^{HP} - L_{\frac{N}{2}}^{HP} \quad (3.16)$$

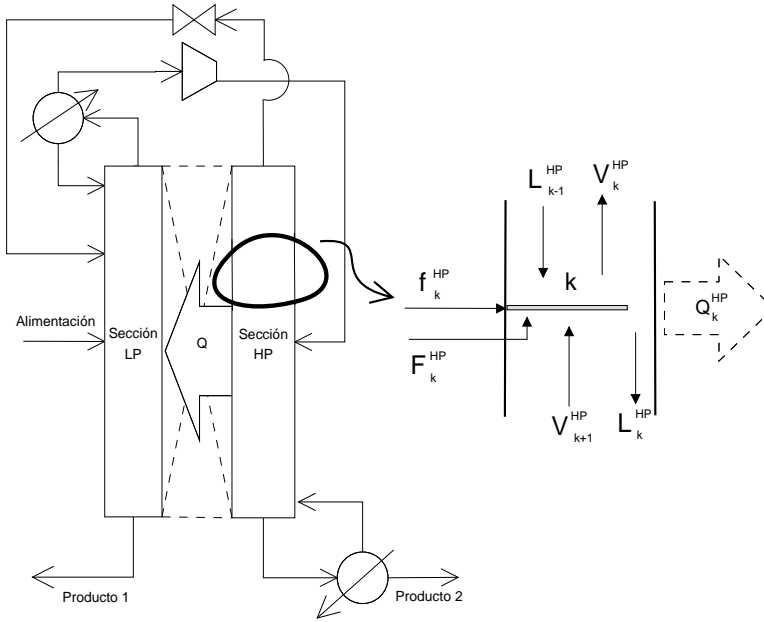


Figura 3.9: Etapa sección HP.

- Balance de masa por componente ($i = 1, \dots, N_c - 1$)

$$\frac{d(M_{\frac{N}{2}}^{HP} x_{i,\frac{N}{2}}^{HP})}{dt} = L_{\frac{N}{2}-1}^{HP} x_{i,\frac{N}{2}-1}^{HP} - V_{\frac{N}{2}}^{HP} y_{i,\frac{N}{2}}^{HP} - L_{\frac{N}{2}}^{HP} x_{i,\frac{N}{2}}^{HP} \quad (3.17)$$

- Balance de energía

$$\frac{d(M_{\frac{N}{2}}^{HP} h_{\frac{N}{2}}^{HP})}{dt} = L_{\frac{N}{2}-1}^{HP} h_{\frac{N}{2}-1}^{HP} - V_{\frac{N}{2}}^{HP} H_{\frac{N}{2}}^{HP} - L_{\frac{N}{2}}^{HP} h_{\frac{N}{2}}^{HP} + Q_{\frac{N}{2}}^{HP} \quad (3.18)$$

- Equilibrio líquido-vapor ($i = 1, \dots, N_c$, $k = 1, \dots, \frac{N}{2}$ y $s = LP, HP$)

$$y_{i,k}^s = K_{i,k}^s x_{i,k}^s \quad (3.19)$$

$$K_{i,k}^s = \frac{\gamma_{i,k}^s P_{i,k}^{sat,s}}{\phi_{i,k}^s P^s} \quad (3.20)$$

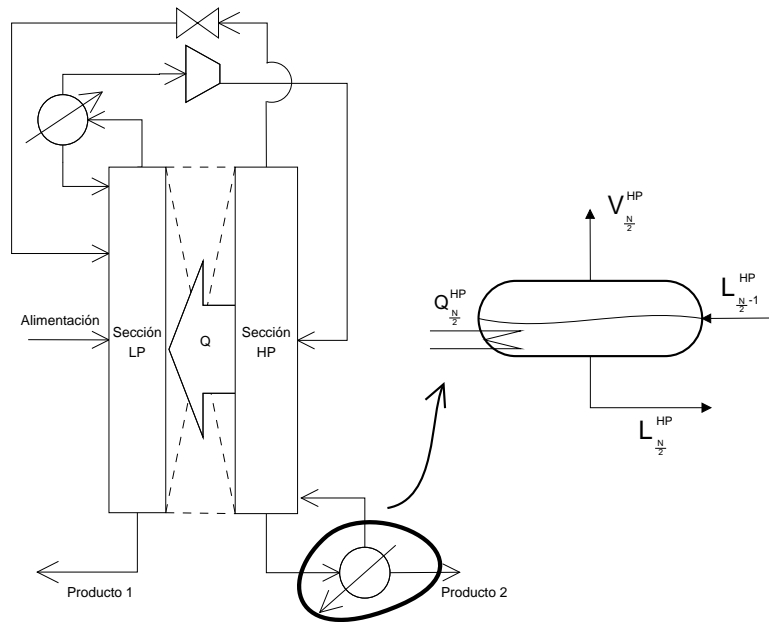


Figura 3.10: Rehervidor sección HP.

- Suma de composiciones ($i = 1, \dots, N_c$, $k = 1, \dots, \frac{N}{2}$ y $s = LP, HP$)

$$\sum_i^{N_c} x_{i,k}^s = 1 \quad (3.21)$$

$$\sum_i^{N_c} y_{i,k}^s = 1 \quad (3.22)$$

- Integración térmica interna ($k = 2, \dots, \frac{N}{2}$)

$$Q_k^{LP} = -Q_{k-1}^{HP} = UA_k(T_{k-1}^{HP} - T_k^{LP}) \quad (3.23)$$

Se supone el empleo de un proceso de compresión isoentrópico para el destilado de la sección de baja presión, y una expansión isoentálpica para el destilado de la sección de alta presión. El primer

producto es el líquido de la etapa $\frac{N}{2}$ en la sección de baja presión y el segundo producto es el líquido proveniente del rehervidor de la sección de alta presión.

3.3.1. Análisis de grados de libertad

Con el modelo propuesto realizamos un análisis de grados de libertad, suponiendo que:

- Se trata de un mezcla binaria.
- El número de etapas totales se conoce.
- Sólo hay una alimentación a la CDPD, se conocen sus propiedades y la etapa de alimentación.
- La presión en cada sección de la columna son conocidas.
- Los valores del producto UA se conocen para cada etapa.

Se analizan los grados de libertad sección por sección. Esta forma de hacer el análisis resulta conveniente con fines de diseño tal y como se describirá en el siguiente capítulo. Para la sección LP se muestra el análisis en la Tabla 3.1 y para la sección HP en la Tabla 3.2. Como se puede observar cada sección tiene un grado de libertad por lo tanto se necesita especificar dos parámetros para resolver el modelo que define la CDPD. Posibles parámetros a especificar son : la carga térmica del rehervidor, la carga térmica del condensador, el flujo del producto 1, el flujo del producto 2, el flujo del destilado en la sección LP, el flujo del destilado en la sección HP, la relación destilado-alimentación en la sección LP, la relación destilado-alimentación en la sección HP, la relación de reflujo en la sección LP, y la relación de vaporización en la sección HP.

Variables		Ecuaciones	
Masa retenida en cada etapa (M_k)	$\frac{N}{2}$	Balance total de masa	$\frac{N}{2}$
Composiciones en cada etapa (x_k, y_k)	N	Balance de masa por componente	$\frac{N}{2}$
Temperatura en cada etapa (T_k)	$\frac{N}{2}$	Balance de energía por etapa	$\frac{N}{2}$
Calor intercambiado por etapa ($Q_k, k \neq 1$)	$\frac{N}{2} - 1$	Integración térmica interna por etapa	$\frac{N}{2} - 1$
Flujo de líquido por etapa (L_k)	$\frac{N}{2}$	Equilibrio líquido-vapor	$\frac{N}{2}$
Flujo de vapor por etapa (V_k)	$\frac{N}{2}$	Suma composiciones líquido	$\frac{N}{2}$
Carga térmica condensador	1	Suma composiciones vapor	$\frac{N}{2}$
Total	$\frac{7N}{2}$	Total	$\frac{7N}{2} - 1$

Tabla 3.1: Grados de libertad en la sección LP.

Variables		Ecuaciones	
Masa retenida en cada etapa (M_k)	$\frac{N}{2}$	Balance total de masa	$\frac{N}{2}$
Composiciones en cada etapa (x_k, y_k)	N	Balance de masa por componente	$\frac{N}{2}$
Temperatura en cada etapa (T_k)	$\frac{N}{2}$	Balance de energía por etapa	$\frac{N}{2}$
Calor intercambiado por etapa ($Q_k, k \neq \frac{N}{2}$)	$\frac{N}{2} - 1$	Integración térmica interna por etapa	$\frac{N}{2} - 1$
Flujo de líquido por etapa (L_k)	$\frac{N}{2}$	Equilibrio líquido-vapor	$\frac{N}{2}$
Flujo de vapor por etapa (V_k)	$\frac{N}{2}$	Suma composiciones líquido	$\frac{N}{2}$
Carga térmica rehervidor	1	Suma composiciones vapor	$\frac{N}{2}$
Total	$\frac{7N}{2}$	Total	$\frac{7N}{2} - 1$

Tabla 3.2: Grados de libertad en la sección HP.

Capítulo 4

Diseño y simulación en estado estacionario de la CDPD

4.1. Modelo de equilibrio termodinámico

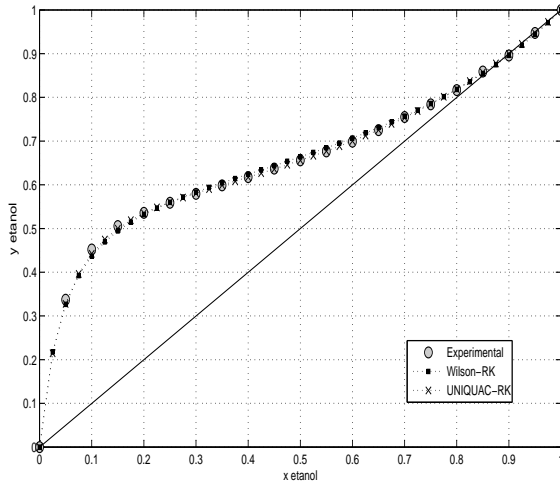
El cálculo de propiedades termodinámicas es esencial en la simulación de procesos. Para el caso de columnas de destilación, en muchas ocasiones los resultados de las simulaciones no reflejan lo que está ocurriendo realmente en el proceso y en la mayoría de los casos esto se debe a la incorrecta predicción del equilibrio líquido-vapor (Kister, 2002). Es por esta razón que en el presente trabajo se busca emplear un modelo termodinámico que sea capaz de representar en buena forma el equilibrio líquido-vapor entre el etanol y el agua, incluido el punto azeotrópico que presenta la mezcla en estudio.

Debido a la naturaleza no-ideal de la fase líquida de la mezcla etanol-agua no es adecuado suponer una solución ideal, además tampoco es posible que la ecuación de gas ideal reproduzca en buena forma el comportamiento de la fase gas cuando se trabaja a presiones altas.

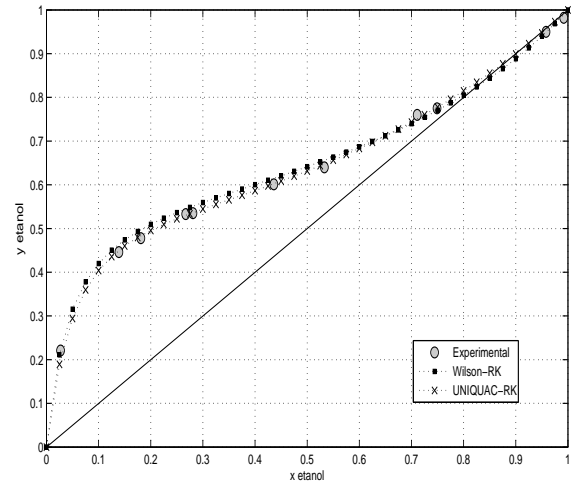
Para la fase líquida se puede usar un modelo de energía libre en exceso (e.g. Wilson, NRTL, UNIQUAC) los cuales toman en cuenta las interacciones entre los componentes de la mezcla pero

tienen una deficiencia ante las variaciones de presión. Por su parte la conducta de la fase vapor puede ser bien representada a altas presiones por ecuaciones cúbicas de estado (e.g. Peng-Robinson, Redlich-Wong) sin embargo muchas veces presentan dificultades para representar mezclas líquidas donde hay fuertes interacciones, como es el caso de la mezcla etanol-agua. Para solucionar los inconvenientes de los modelos de energía libre en exceso y de las ecuaciones cúbicas de estado se ha propuesto usar reglas de mezclado, las cuales permiten usar de forma simultánea los modelos de energía libre en exceso y las ecuaciones cúbicas de estado, para predecir el equilibrio de mezclas con fuertes interacciones a altas presiones (ver Orbey & Sandler, 1998). Aunque pareciera que las reglas de mezclado son el camino a seguir para predecir el equilibrio líquido-vapor de la mezcla etanol-agua en el presente trabajo, como se puede ver en la Figura 4.1 resultados experimentales de equilibrio líquido-vapor de la mezcla en estudio son reproducidos de forma muy aceptable por los modelos Wilson/Redlich-Wong, para la fase líquida y vapor respectivamente, y UNIQUAC/Redlich-Wong. Los resultados de los modelos fueron obtenidos usando el paquete comercial Aspen Plus 2006.5 y los experimentales fueron tomados de Gmehling *et al.* (1988).

La sensibilidad de la composición azeotrópica de la mezcla etanol-agua a los cambios de presión es fundamental para lograr la separación de dicha mezcla. En consecuencia es primordial que el modelo termodinámico a elegir para la simulación pueda predecir en buena forma el punto azeotrópico así como la tendencia que tiene cuando ocurre un cambio de presión. En la literatura se encuentran reportados pocos datos experimentales de la composición azeotrópica de la mezcla etanol-agua a altas presiones, mientras que a presión atmosférica así como a presiones por debajo de ésta dichos datos son reportados con más frecuencia. Los datos experimentales publicados muestran que a mayor presión menor es la composición de etanol en el punto azeotrópico, tal y como se muestra en la Figura 4.2. En esa misma Figura se observa que el azeótropo tiende a desaparecer a bajas presiones. Barr-David & Dodge (1959) determinan experimentalmente una composición azeotrópica de 0.756 fracción mol etanol a 70.8 atm, y Griswold *et al.* (1943) determinan que arriba de 275°C (arriba de 95.3 atm) el azeótropo desaparece. Es importante resaltar que la mezcla etanol-agua



(a) Presión= 1.0 atm



(b) Presión= 5.08 atm

Figura 4.1: Comparación de datos experimentales con modelo Wilson/Redlich-Wong y UNIQUAC/Redlich-Wong.

es menos sensible a los cambios de presión en comparación con otras mezclas azeotrópicas, las cuales presentan la misma tendencia a los cambios de presión (Figura 4.3). En la Figura 4.2 se puede observar que la combinación Wilson/Redlich-Wong tiene una predicción más aceptable del punto azeotrópico que aquella que se calcula con UNIQUAC/Redlich-Wong. Por lo tanto se elige Wilson/Redlich-Wong para el cálculo de las propiedades termodinámicas en la simulación.

4.2. Modelo en estado estacionario

Para la simulación en estado estacionario se optó por utilizar el simulador comercial Aspen Plus 2006.5. Este paquete no contiene un modelo predeterminado que represente la CDPD, por lo cual se buscó que con los modelos predeterminados se pudiera representar la CDPD.

La primera posibilidad que se probó fue representar cada etapa de la CDPD con una etapa flash,

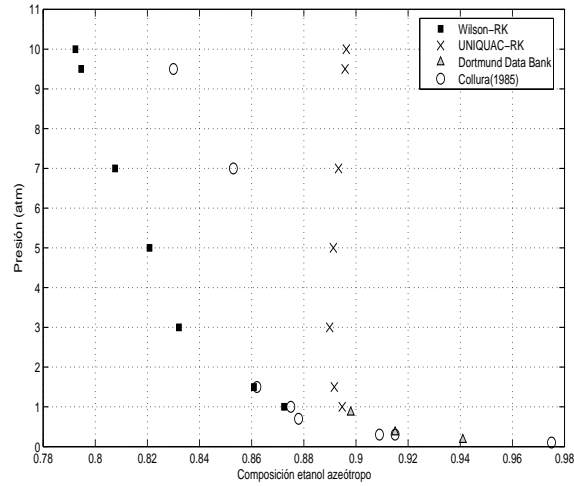
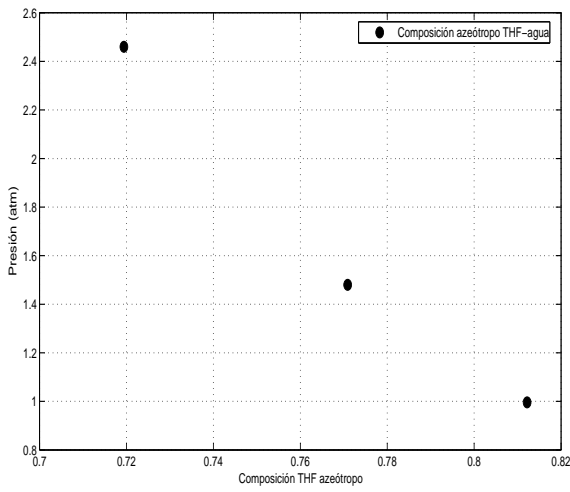
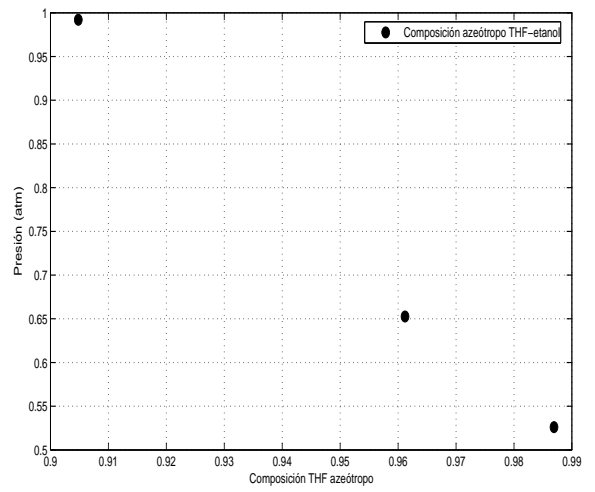


Figura 4.2: Variación de la composición azeotrópica de la mezcla etanol-agua con la presión.



(a) THF-agua



(b) THF-etanol

Figura 4.3: Variación de la composición azeotrópica con la presión de la mezcla THF-agua y THF-etanol. (Gmehling & Bolts, 1996).

modulo que en Aspen Plus se denomina *FLASH2*. Sin embargo se encontró que esta representación resulta impráctica ya que el número de conexiones tanto de flujos de materia como de energía aumenta conforme lo hace el número de etapas de la CDPD.

La otra opción es representar la sección HP y la LP de la CDPD como dos columnas de destilación independientes entre las cuales hay una conexión térmica, situación que representa la física de la integración térmica interna. Esta idea fue tomada de los trabajos de Campbell *et al.* (2008) y de Gadalla *et al.* (2007) sobre la CDITI, sin embargo ambos reportes no proporcionan detalles de como conectar térmicamente ambas columnas en Aspen Plus. Esta última opción descrita es la que se utilizó para simular la CDPD en Aspen Plus.

Para cada sección se utilizó el módulo denominado *RadFrac* y para conectar térmicamente ambas columnas se utilizó la opción de gastos energéticos laterales (*side duties*). Esta característica de simulación permite introducir el flujo de calor transferido o recibido en cada etapa, lo cual hace posible representar la integración térmica interna de la CDPD. Por otro lado, el compresor se modeló con el módulo *Compr* y la válvula con el *Valve*.

4.3. Simulación en estado estacionario

Como se describió en el Capítulo 2, la mezcla etanol-agua a separar proviene de un proceso de fermentación el cual produce composiciones de mezcla que son función de aspectos que van más allá del marco del presente trabajo, por lo tanto sólo se determinó que la composición de la mezcla etanol-agua de la mezcla tenía que ser baja, lo cual está de acuerdo con la composición etanol-agua obtenida de procesos de fermentación. En la Tabla 4.1 se muestran las propiedades de la mezcla a separar.

Corriente	Alimentación
Presión (atm)	1
Fracción vapor	0.5
Flujo(kmol/h)	100
Fracción mol etanol	0.2
Fracción mol agua	0.8

Tabla 4.1: Propiedades corriente de alimentación.

4.3.1. Objetivo de diseño

EL objetivo de diseño de la CDPD es el siguiente:

- Obtener etanol de alta pureza para que pueda ser empleado como biocombustible.

De acuerdo a las especificaciones reportadas por el Departamento de Energía de los Estados Unidos, se requiere etanol con una composición mayor a 99% en peso (equivalente a 97.5% mol). Además se buscará recuperar, en medida de lo posible, la mayor parte del etanol alimentado al proceso.

El diseño de la CDPD se realiza de forma heurística, es decir, se estudia la factibilidad de separar la mezcla etanol-agua con el proceso propuesto. En el presente trabajo no se busca obtener condiciones óptimas de operación, para lo cual se tendría que recurrir a técnicas matemáticas rigurosas como la optimización no-lineal, la optimización mixta-entera no-lineal o la optimización dinámica mixta-entera no-lineal.

Suposiciones principales para el diseño

El diseño de la CDPD se sustenta en dos suposiciones fundamentales:

- La diferencia de las composiciones azeotrópicas presentes en las secciones de la CDPD es

suficiente para realizar la separación de la mezcla etanol-agua.

- El calor transferido entre las secciones de la CDPD es constante.

El diseño de la CDPD para la separación de la mezcla etanol-agua se realizó siguiendo el procedimiento que se describe a continuación y que se representa en la Figura 4.4.

4.3.2. Presión de operación

Con el fin de llevar a cabo la separación de la mezcla en estudio, es necesario la presencia de cierto rango de separación en la composición azeotrópica presente entre las secciones de la CDPD, por lo cual para la sección LP se seleccionó una presión de operación de 1 atm mientras que para la sección HP una de 10 atm. Como se muestra en la Figura 4.5, la composición azeotrópica de la mezcla etanol-agua cambia de 87.2 % mol a 1 atm hasta 79.4 % mol a 10 atm. Aunque no es muy grande la diferencia es suficiente para llevar a cabo la separación.

4.3.3. Idea de diseño

Como paso previo al diseño de la CDPD se diseña el mismo sistema pero sin integración térmica interna, por lo tanto realmente se está diseñando un esquema de destilación de presión variable (DPV) donde cada columna tiene su propio rehervidor y condensador. Posteriormente este diseño será la base para la CDPD. El cambio de un esquema sin integración térmica interna a uno con dicha integración es parte las ideas de diseño de una CDITI propuesta por Gadalla *et al.* (2007), mientras que el resto de las ideas de diseño son parte del presente trabajo.

Una vez establecida la presión, las propiedades de la corriente de alimentación, el número de etapas y la etapa de alimentación, cada columna de la DPV tiene dos grados de libertad. Se eligieron la relación de reflujo y la relación destilado-alimentación como los dos parámetros a especificar en

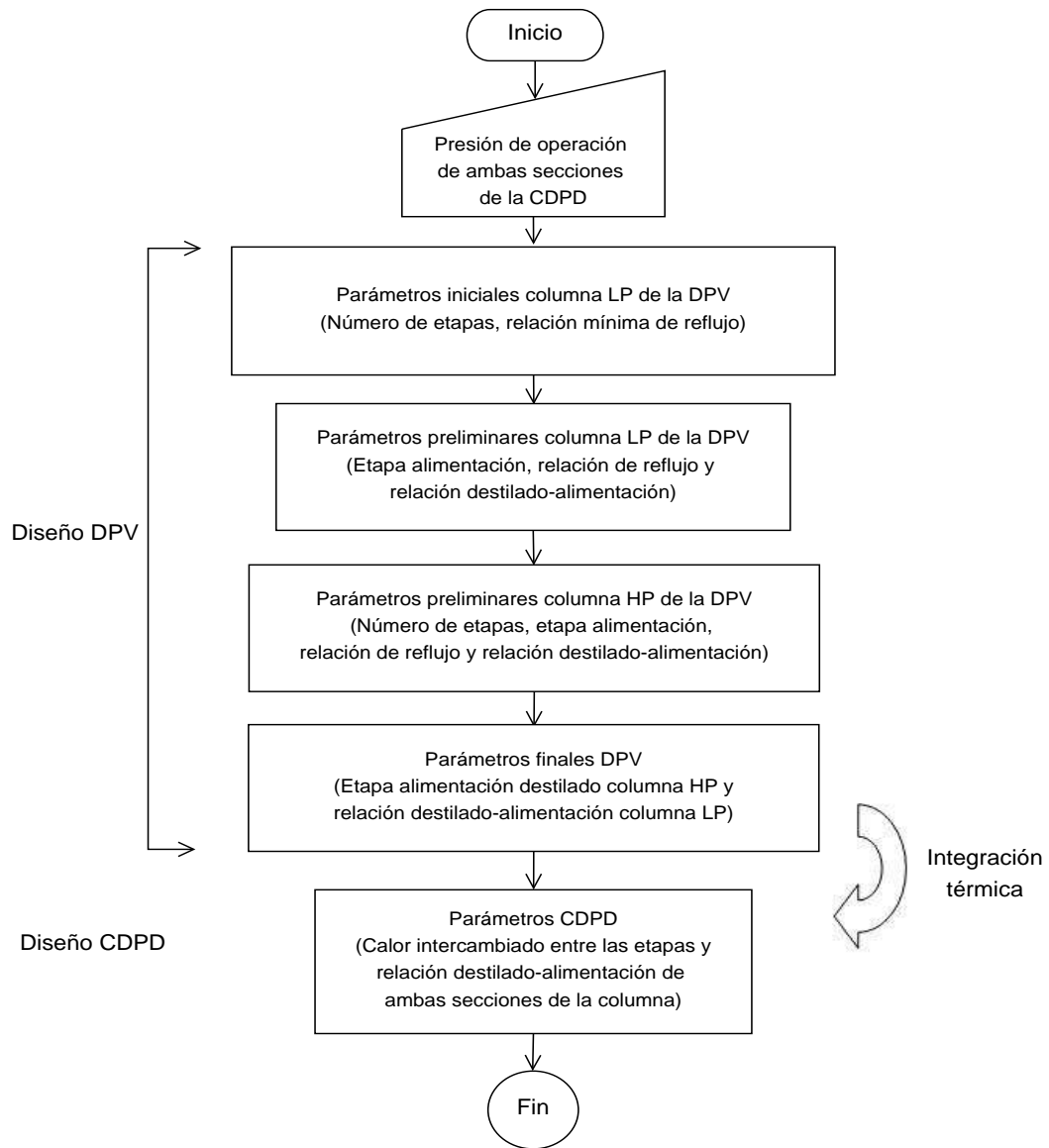
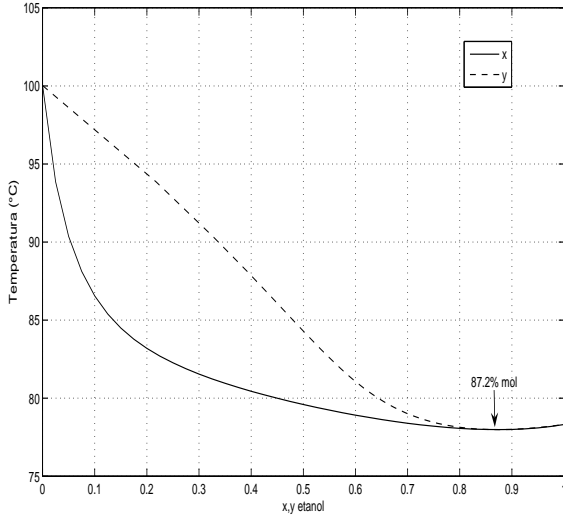
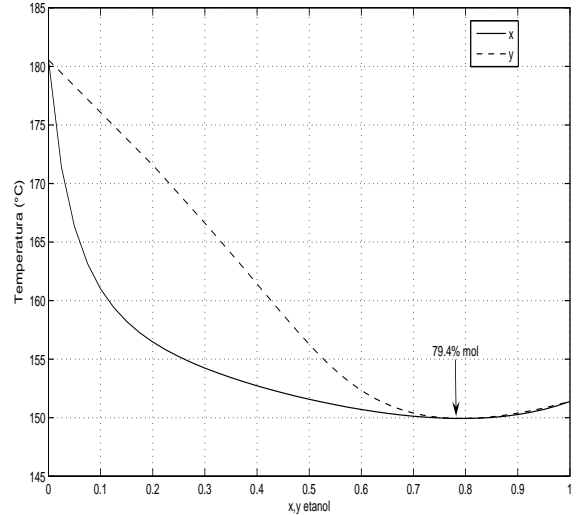


Figura 4.4: Procedimiento empleado para el diseño de la CDPD.



(a) Presión= 1.0 atm.



(b) Presión= 10.0 atm.

Figura 4.5: Diagrama T-x-y de la mezcla etanol-agua.

cada columna de la DPV.

4.3.4. Diseño de la DPV como base de la CDPD

Parámetros iniciales de la columna LP de la DPV

Dado el arreglo de intercambio de calor entre las etapas de la CDPD, se requiere que ambas columnas del esquema de la DPV tengan el mismo número de etapas. Bajo la ruta de diseño propuesta se tiene que determinar o fijar el número de etapas en la primera columna y de forma automática el número de etapas de la segunda queda determinado.

La primera columna de la DPV debe tener la misma presión de operación que la sección LP de la CDPD. En esta columna el objetivo es obtener como destilado una corriente cercana a la composición azeotrópica a 1 atm y como fondos una corriente de alta pureza en agua.

Para tener una idea aproximada del número de etapas que se requieren para alcanzar dicha separación en la primera columna de la DPV se utilizó el método gráfico de McCabe-Thiele. Está de más mencionar que el resultado arrojado por este método es un valor aproximado del número de etapas, sin embargo es un buen punto de partida.

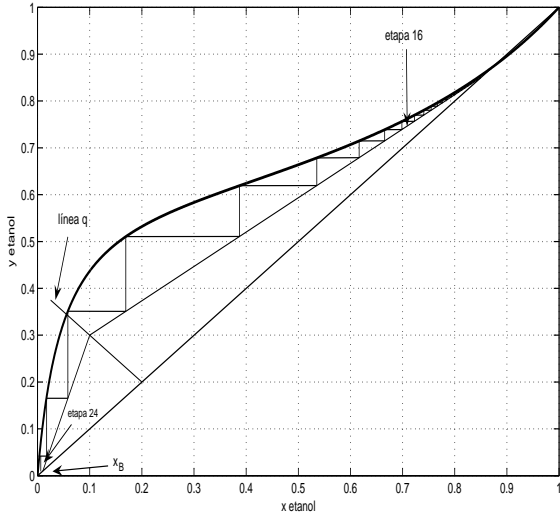
Las condiciones de la corriente de alimentación a esta primera columna de la DPV se encuentran en la Tabla 4.1. En esta columna se busca un destilado con una composición de 85 % mol en etanol (composición cercana a la azeotrópica), un fondo con 99 % mol en agua y recuperar la mayor parte del etanol en el destilado. Con el método gráfico de McCabe-Thiele es posible determinar el número máximo (relación de reflujo cercana a la mínima) y el mínimo de etapas (relación de reflujo muy grande) que se requieren para alcanzar la separación deseada. En la Figura 4.6 se observa que el máximo corresponde a 24 y el mínimo a 11. Se decidió utilizar 30 etapas para esta columna de la DPV que es un número de etapas cercano al máximo, situación que corresponde a un reflujo cerca del mínimo el cual se relaciona con la condición de cargas térmicas mínimas en el rehervidor y condensador. Además industrialmente se acostumbra sobredimensionar columnas de destilación para que presenten menos problemas de operación y control. Por supuesto esta acción incrementa los costos de inversión.

Para conocer la relación de reflujo mínima se usa la línea de operación que es tangente a la curva de equilibrio en la zona de enriquecimiento (ver Figura 4.7). Dicha línea está representada por la siguiente ecuación.

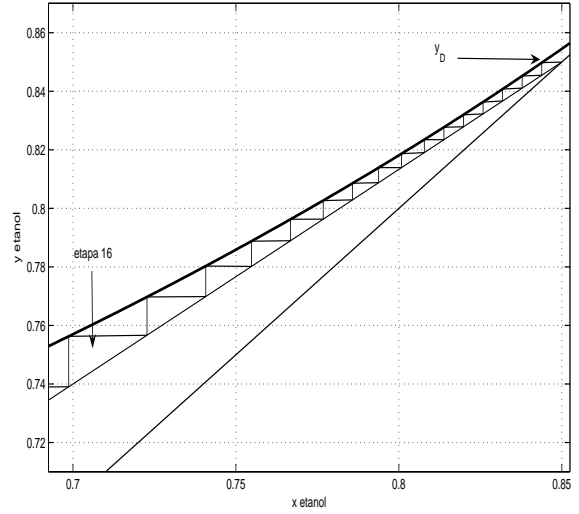
$$y_{n+1} = \frac{R_{min}}{R_{min} + 1}x_n + \frac{y_D}{R_{min} + 1} \quad (4.1)$$

donde R_{min} es la relación mínima de reflujo, y_D es la fracción mol del etanol en el destilado, y x_n y y_n son las coordenadas de la línea de operación. Por lo tanto la relación mínima de reflujo es de 2.0, valor que se toma como inicial para proceder con las simulaciones.

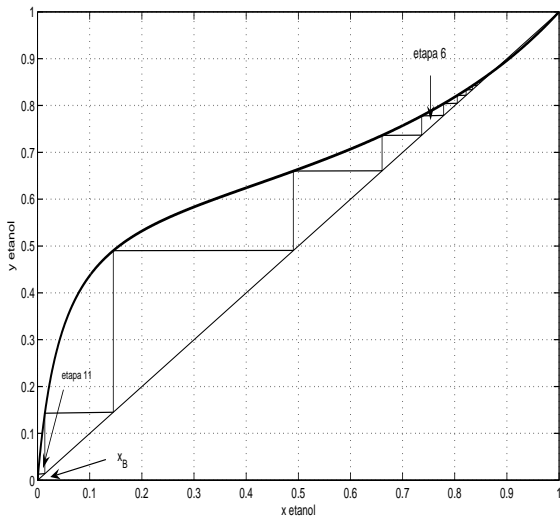
4. Diseño y simulación en estado estacionario de la CDPD



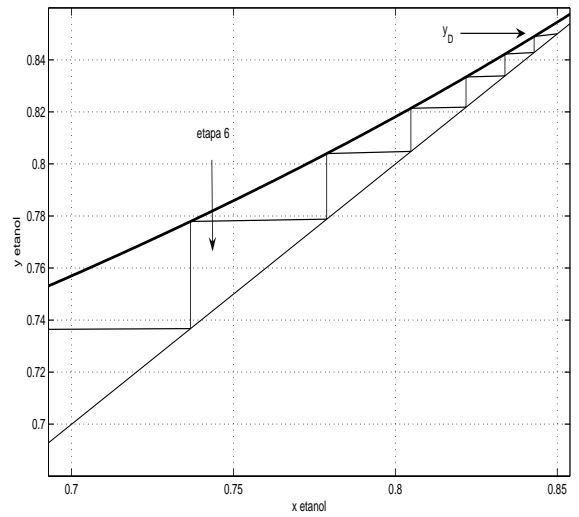
(a) Número de etapas con relación de reflujo cercano al mínimo.



(b) Acercamiento zona azeótropo.



(c) Número mínimo de etapas.



(d) Acercamiento zona azeótropo.

Figura 4.6: Diagrama de McCabe-Thiele.

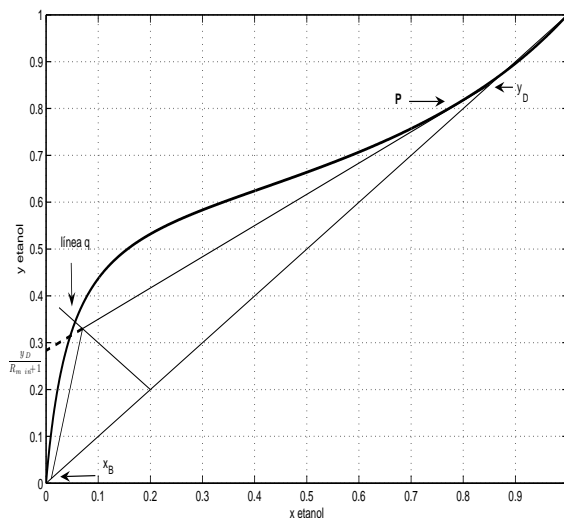


Figura 4.7: Relación de reflujo mínimo.

Se eligió la relación destilado-alimentación (RDA) como el segundo parámetro de diseño debido a el corto rango de valores que puede tomar (0 – 1). Esto simplifica realizar un barrido de valores para alcanzar los objetivos de diseño de manera más simple.

Parámetros preliminares de la columna LP de la DPV

Para la columna LP de la DPV se decidió utilizar 1.75 veces el valor del reflujo mínimo determinado anteriormente. Debido a que en esta columna se busca una corriente de fondo casi pura en agua entonces se esperaría que todo el etanol se recupere en el destilado, por lo que como valor inicial de la RDA se toma 0.20. Con estos valores iniciales se hace una prueba de sensibilidad para determinar cual es la etapa más conveniente para la alimentación. Como se puede observar en la Figura 4.8 a partir de la etapa 23 se tienen valores grandes de composición de agua en el fondo de la columna, se alcanza una composición cercana a la azeotrópica en el destilado y la carga térmica del rehervidor está en la zona de valores bajos. Por estas razones se decide que la etapa

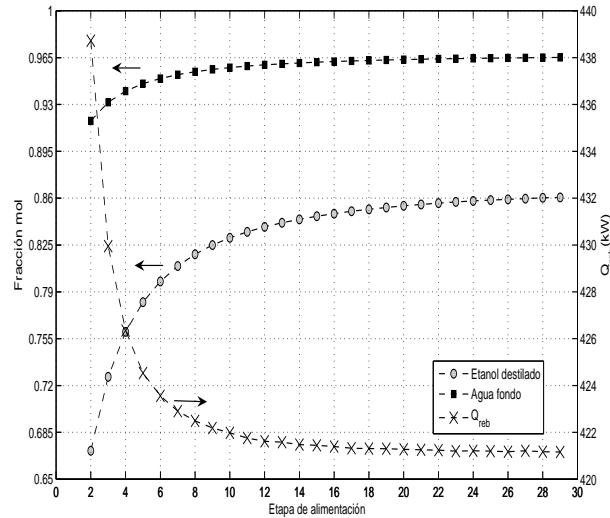


Figura 4.8: Sensibilidad de la columna LP de la DPV a la etapa de alimentación.

de alimentación más conveniente es la número 23.

El siguiente paso es establecer la RDA para lo cual se usa nuevamente un análisis de sensibilidad. Los resultados se muestran en la Figura 4.9. Se observa que con una RDA de 0.23 se alcanza un fondo puro en agua, se conserva un destilado con composición azeotrópica y la carga térmica del rehervidor se mantiene en la zona de valores bajos. Por lo tanto, se decide usar el valor de 0.23 para la RDA.

Ahora que el diseño preliminar de la columna LP de la DPV está completo se prosigue con el diseño de la columna HP de la DPV, la cual que tiene como alimentación el destilado de la columna LP.

Parámetros preliminares de la columna HP de la DPV

Al igual que la columna LP, la columna HP de la DPV opera a la misma presión que su contraparte en la CDPD, en consecuencia la presión a la que opera la columna HP es de 10 atm. La alimentación

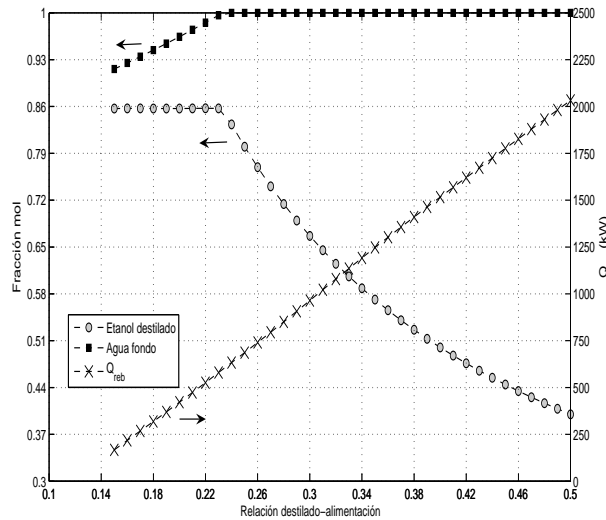


Figura 4.9: Sensibilidad de la columna LP de la DPV a la relación destilado-alimentación.

a esta columna es el destilado de la columna LP después de pasar por un proceso de compresión isoentrópico en donde la corriente pasa de 1 atm a 10 atm. Las características de esta corriente de alimentación se muestran en la Tabla 4.2.

Debido a la configuración de la integración térmica se determina que la columna HP tiene 30 etapas, el mismo número que la columna LP. En la columna HP se busca un destilado con una composición de 82 % mol en etanol (composición cercana a la azeótropica) y un fondo con mínimo 99.5 % mol en etanol. Como valor inicial de la RDA se elige 0.8 debido a la composición de etanol que se busca en el destilado, mientras que para la relación de reflujo se usa como valor inicial 1.75 el mínimo determinado para la columna LP. Con estos valores iniciales se hace una prueba de sensibilidad para determinar cual es la etapa más conveniente para la alimentación. Como se observa en la Figura 4.10 entre las etapas 4-14 se obtienen composiciones de etanol similares tanto en el destilado como en el fondo. Además en este mismo rango no hay una gran diferencia entre las cargas térmicas requeridas para la separación. Con estos resultados sólo se logró delimitar la zona

Corriente	Destilado preliminar columna LP
Temperatura (°C)	218.8
Presión (atm)	10
Fracción vapor	1
Flujo(kmol/h)	23
Fracción mol etanol	0.857
Fracción mol agua	0.143

Tabla 4.2: Destilado del diseño preliminar de la columna LP después del proceso de compresión.

en la que puede ser conveniente colocar la etapa de alimentación, por lo que para determinar una etapa puntual se supone que debido a la composición de la alimentación (ver Tabla 4.2) se espera que la columna HP presente composiciones similares en etapas alejadas de la 1, por lo tanto se elige la etapa 14 como la etapa de alimentación.

Los resultados para la sensibilidad de la columna HP a la RDA se muestran en la Figura 4.11. Se observa que con una RDA de 0.8 se alcanza un fondo puro en etanol y se conserva un destilado con composición cercana a la azeotrópica. Para esta columna se observa claramente que la carga térmica del rehervidor no es mínima como en la columna de baja presión. Por lo tanto, se decide mantener el valor de 0.8 para la RDA.

La composición de etanol en los fondos de la columna HP es aceptable cuando se usa una relación de reflujo de 3.5, sin embargo se desea que esta composición sea mayor a 99.5% mol aunque la carga térmica del condensador aumente. Con esto se busca asegurar que cuando se alimente el destilado de esta columna a la columna LP se conserve la alta pureza en etanol en los fondos de la columna HP. En la Figura 4.12 se observa que a una relación de reflujo de 4.6 se alcanza una composición de etanol mayor a la fijada y que la carga térmica del rehervidor no aumenta tan drásticamente comparada con la que se presenta cuando se usan relaciones de reflujo mayores. Por lo tanto, se elige una relación de reflujo de 4.6 para la columna HP.

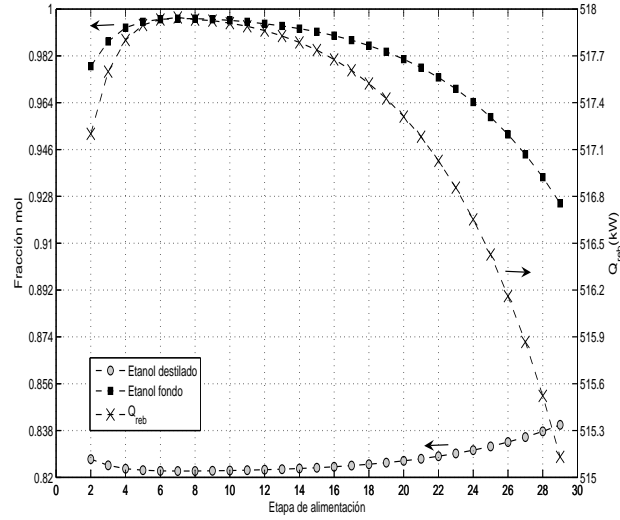


Figura 4.10: Sensibilidad de la columna HP de la DPV a la etapa de alimentación.

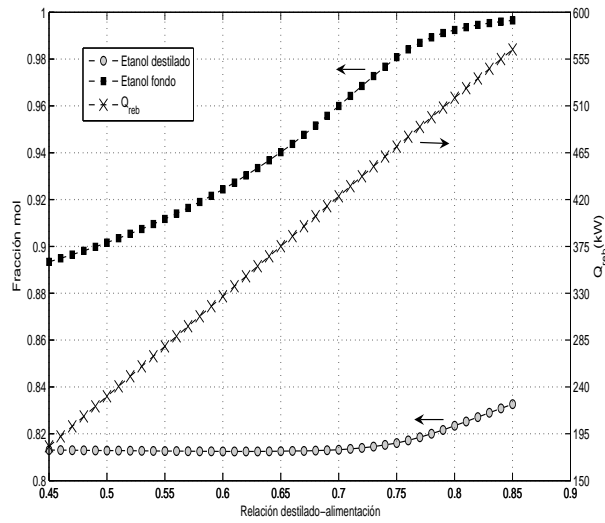


Figura 4.11: Sensibilidad de la columna HP de la DPV a la relación destilado-alimentación.

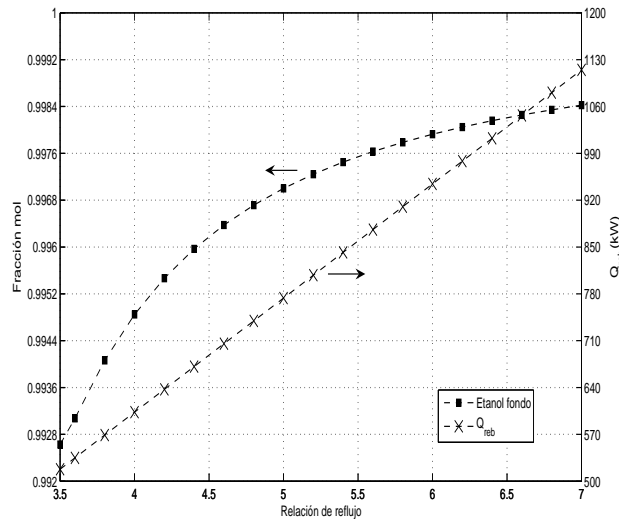


Figura 4.12: Sensibilidad de la columna HP de la DPV a la relación de reflujo.

Diseño final de la DPV

El siguiente paso para el diseño de la DPV consiste en alimentar el destilado de la columna HP a la columna LP después de pasar por un proceso isoentálpico de reducción de presión. Las características de esta corriente se muestran en la Tabla 4.3.

Para elegir la etapa en la que se debe alimentar esta corriente de alimentación proveniente de la columna HP, se decidió elegir aquella etapa de la columna LP que tuviera una composición similar a la de la corriente a alimentar. En la Figura 4.13 se observa que entre las etapas 12-13 de la columna LP existen composiciones similares a la del destilado de la columna HP. En este caso se eligió la etapa 13 como la etapa de alimentación.

El último paso para el diseño de la DPV consiste en elegir la RDA de la columna LP con el objetivo de conservar las composiciones en los productos de ambas columnas, y además que en el fondo de la columna HP se recupere al menos el 95 % del etanol alimentado al proceso. De la

Corriente	Destilado preliminar columna HP
Temperatura (°C)	138.9
Presión (atm)	1
Fracción vapor	1
Flujo(kmol/h)	18.4
Fracción mol etanol	0.822
Fracción mol agua	0.178

Tabla 4.3: Destilado del diseño preliminar de la columna LP después del proceso de reducción de presión.

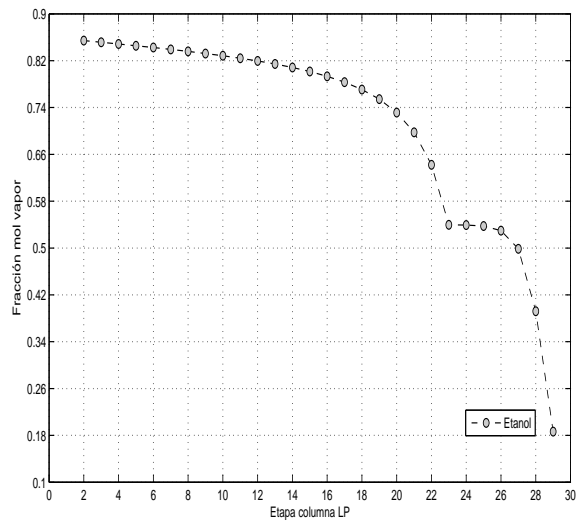


Figura 4.13: Perfil de composición de etanol en la fase vapor en la columna LP antes de introducir corriente de alimentación proveniente de la columna HP.

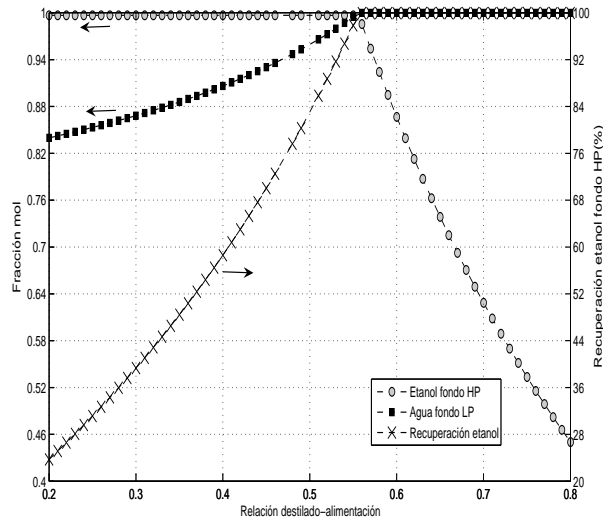


Figura 4.14: Sensibilidad de la DPV a la RDA de la columna LP.

	Columna LP	Columna HP
Etapas	30	30
Etapas de alimentación	23 (F), 13 (D2LP)	14
Relación de Reflujo	3.5	4.6
Relación alimentación-destilado	0.55	0.8

Tabla 4.4: Parámetros de operación de la DPV.

Figura 4.14 se puede concluir que la nueva RDA de la columna LP que hace que se alcancen los objetivos de diseño corresponde a un valor de 0.55.

En la Tabla 4.4 se muestran las condiciones de operación de la DPV, en la Tabla 4.5 los resultados de las corrientes más importantes, en la Tabla 4.6 los requerimientos de calor, y en la Figura 4.15 se muestra el diagrama de flujo del proceso de separación resultante.

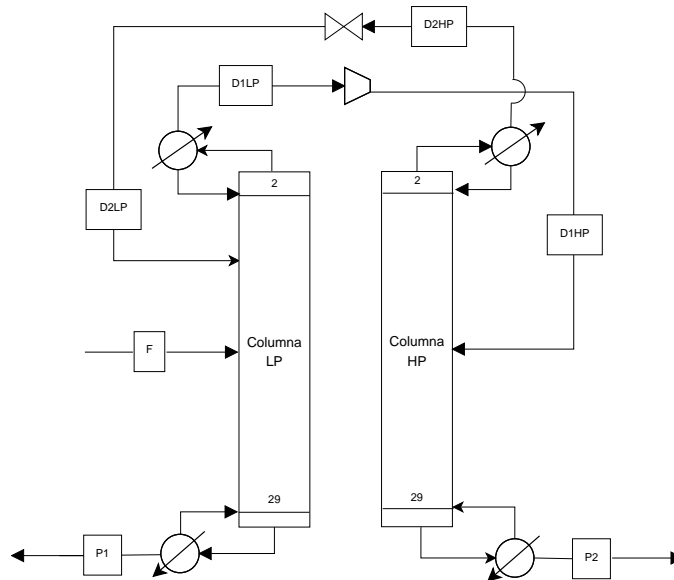


Figura 4.15: Destilación de presión variable.

Corriente	F	P1	D1LP	D1HP	D2HP	D2LP	P2
Temperatura (°C)	89.9	98.4	78	218.5	150	138.9	151.3
Presión (atm)	1	1	1	10	10	1	10
Fracción vapor	0.5	0	1	1	1	1	0
Flujo(kmol/h)	100	80.357	98.214	98.214	78.571	78.571	19.643
Fracción mol etanol	0.2	0.005	0.861	0.861	0.827	0.827	0.997
Fracción mol agua	0.8	0.995	0.139	0.139	0.173	0.173	0.003

Tabla 4.5: Propiedades de las corrientes de la DPV.

Columna	LP	HP
Q rehervidor (MW)	3.32	3.01
Q condensador (MW)	3.75	3.34

Tabla 4.6: Requerimientos de calor de la DPV.

4.3.5. Diseño de la CPDP

Para completar el diseño de la CDPD se deben especificar las características de transferencia de calor entre las secciones de alta y baja presión de la CDPD. Para este fin se supone que el calor transferido etapa a etapa es constante. Además se considera que el flujo de calor es igual para todos los pares de etapas integradas. En términos matemáticos estas suposiciones están representadas por:

$$Q_k^{LP} = Q_{k+1}^{LP} = \dots = Q_{\frac{N}{2}}^{LP} \quad (4.2)$$

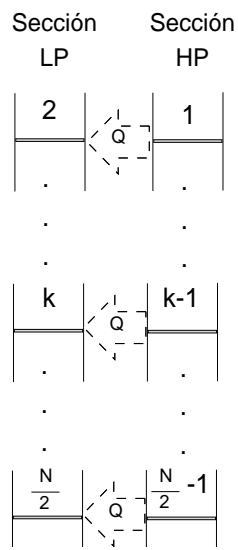
$$Q_k^{LP} = -Q_{k-1}^{HP} \quad (4.3)$$

donde $k = 2, \dots, \frac{N}{2}$.

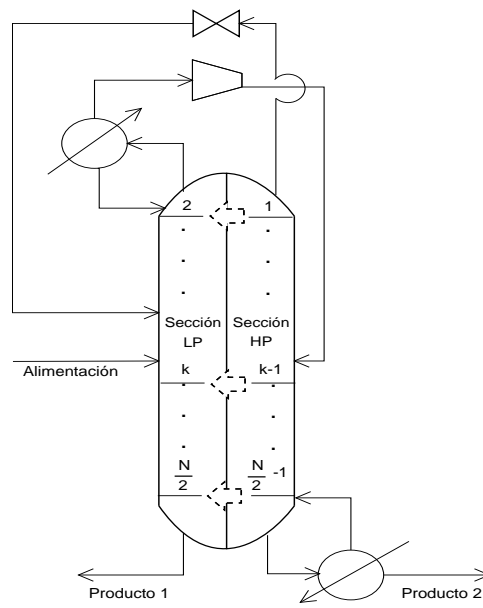
El diseño de la DPV de la sección anterior es la base para la CDPD, por lo cual se consideran 30 etapas para la sección LP y 30 para la HP. La etapa 2 LP está integrada térmicamente con la etapa 1 HP, la 3 LP con la 2 HP, y así sucesivamente hasta llegar a la integración entre la etapa 30 LP y la 29 HP (ver Figura 4.16). La etapa 1 de la sección LP es el condensador y la etapa 30 de la sección HP corresponde al rehervidor.

Como valor inicial del calor intercambiado entre cada etapa de la CDPD se toma el valor de la carga térmica del rehervidor de la columna LP de la DPV dividido entre el número de etapas que están integradas térmicamente. Una vez conocido el valor del calor transferido sólo queda un grado de libertad en cada sección de la CDPD. Se eligió la RDA en cada sección de la CDPD como la variable a especificar para completar el diseño. Como valores iniciales de la RDA en cada sección se consideran los valores de sus contrapartes en la DPV.

Primero se eligen una serie de valores de flujo de calor intercambiado cercanos al valor inicial. Después, manteniendo la RDA de la sección HP en su valor inicial, se hace un análisis de sensi-

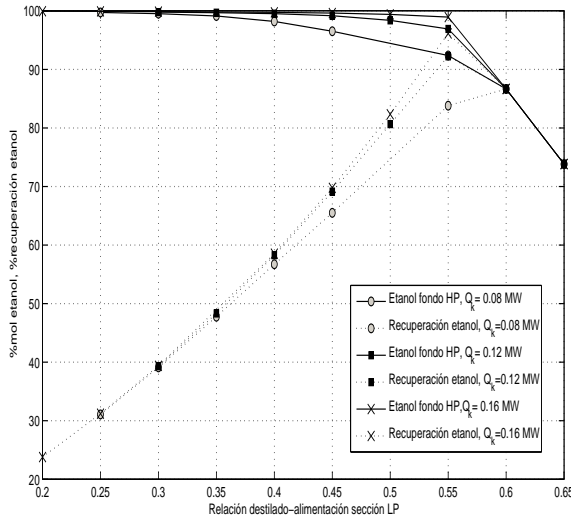


(a) Integración conceptual.

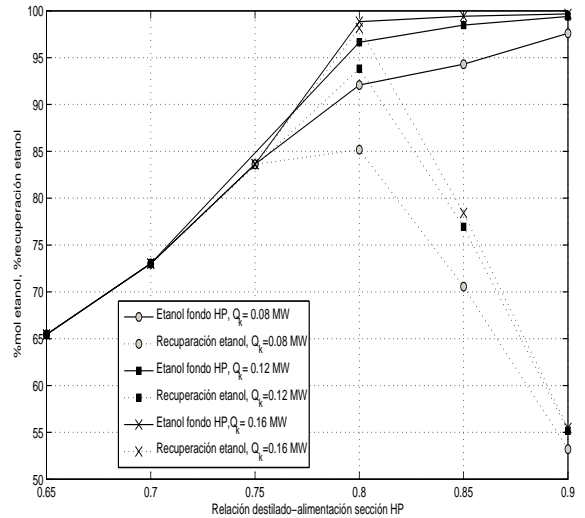


(b) Integración real.

Figura 4.16: Integración térmica interna de la CDPD.



(a) Relación destilado alimentación sección LP.



(b) Relación destilado alimentación sección HP.

Figura 4.17: Sensibilidad de la composición y recuperación de etanol en los fondos de la sección HP a la RDA en cada sección de la CDPD.

bilidad para el valor de la RDA en la sección LP para cada valor de flujo de calor seleccionado. Posteriormente se realiza un procedimiento similar pero esta vez se mantiene constante el valor inicial de la RDA en la sección LP y se varia el de la HP. Como se observa en la Figura 4.17 con los valores iniciales de RDA de ambas secciones (0.55 en LP y 0.8 en HP) para cualquier valor de calor intercambiado, la composición y la recuperación se mantienen en la zona de valores altos. Se encontró que con un valor de Q_k de 0.16 MW se alcanzan los objetivos de diseño de la CDPD.

En la Tabla 4.7 se muestran las condiciones de operación de la CDPD, en la Tabla 4.8 los resultados de las corrientes más importantes, en la Tabla 4.9 los requerimientos de calor y en la Figura 4.18 el diagrama de flujo final de la CDPD. En la Figura 4.19 se muestra el diagrama de flujo de la CDPD como es implementado en Aspen Plus.

	Sección LP	Sección HP
Etapas	30	30
Etapa de alimentación	23 (F), 13 (D2LP)	14
Relación alimentación-destilado	0.55	0.8
$Q(k)(MW)$	0.16	-0.16

Tabla 4.7: Parámetros de operación de la CDPD.

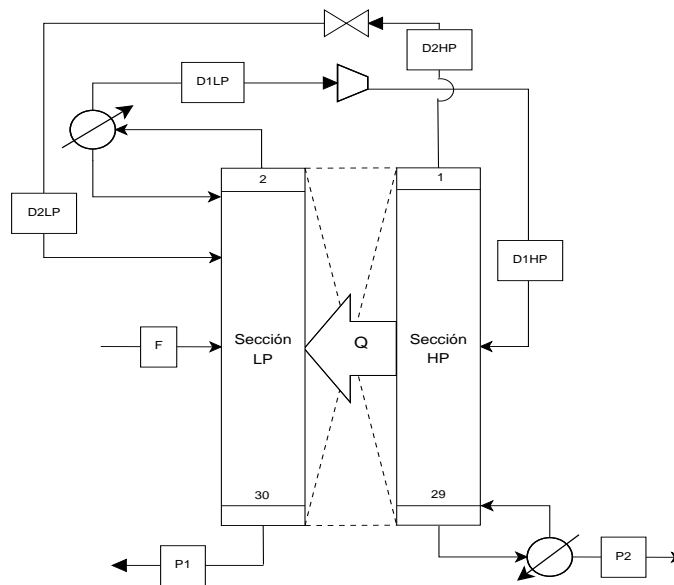


Figura 4.18: Columna de destilación de pared dividida.

Corriente	F	P1	D1LP	D1HP	D2HP	D2LP	P2
Temperatura (°C)	89.9	97.1	78	218.6	150	138.9	151.2
Presión (atm)	1	1	1	10	10	1	10
Fracción vapor	0.5	0	1	1	1	1	0
Flujo(kmol/h)	100	80.355	98.211	98.211	78.569	78.569	19.642
Fracción mol etanol	0.2	0.007	0.859	0.859	0.826	0.826	0.989
Fracción mol agua	0.8	0.993	0.141	0.141	0.174	0.174	0.011

Tabla 4.8: Propiedades de las corrientes de la CDPD.

Sección	LP	HP
Q rehervidor (MW)	-	4.30
Q condensador (MW)	5.07	-

Tabla 4.9: Requerimientos de calor de la CDPD.

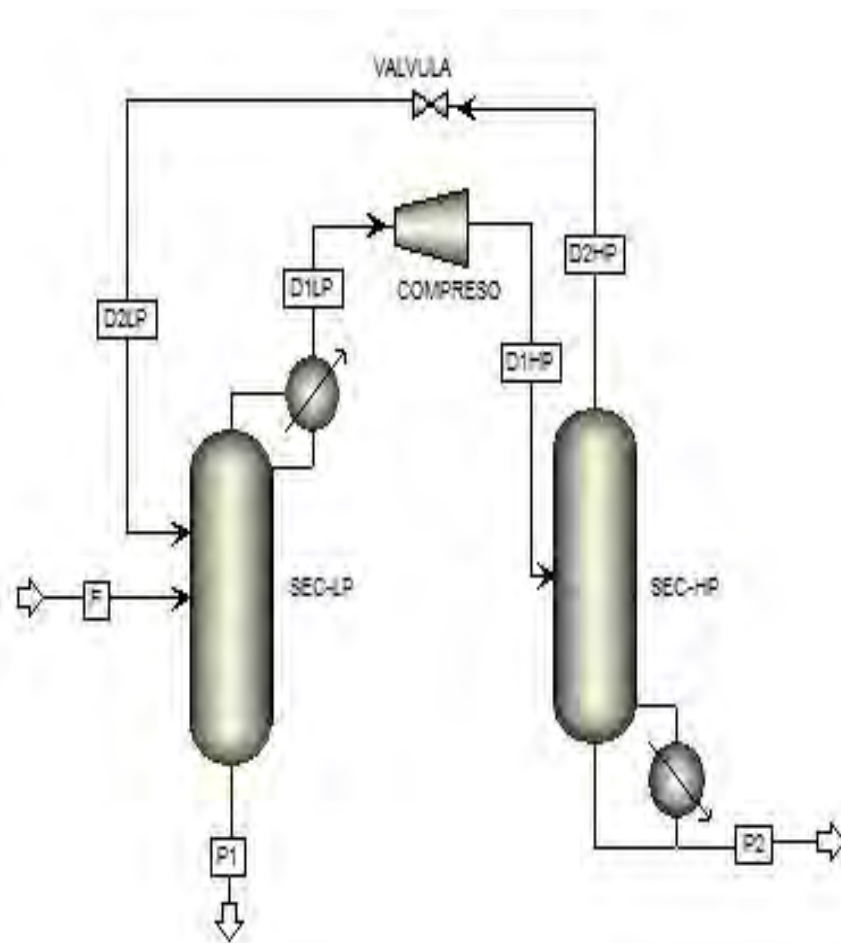


Figura 4.19: Diagrama de flujo de la CDPD como es implementado en Aspen Plus.

4.4. Análisis de resultados

De los resultados de la Tabla 4.8, se observa que en la CDPD se alcanza una composición de etanol lo suficientemente alta para que pueda ser considerado apto para usarse como combustible de acuerdo a las especificaciones reportadas en la Tabla 1.1. Además la recuperación de etanol alimentado en el fondo de la sección HP es aceptable.

Otro aspecto importante a resaltar es que con el uso de la CDPD para la separación de la mezcla etanol-agua se logra un ahorro de energía de alrededor del 32% comparado con el caso en que se usa la tradicional DPV. La integración térmica interna de la CDPD sin duda propicia que el gasto energético sea menor para la separación de la mezcla etanol-agua, situación que puede hacer competitivo a este proceso de separación frente a otros procesos que se usan actualmente para purificar esta mezcla u otras con características similares. Es importante aclarar en este punto que el diseño propuesto para la CDPD tiene como principales objetivos: mostrar que la separación de alta pureza de la mezcla etanol-agua es posible y que la integración térmica interna permite ahorro en los requerimientos energéticos. Los parámetros de diseño encontrados con el procedimiento heurístico propuesto cubren esos dos requisitos, sin embargo podrían ser mejorados usando métodos de optimización rigurosos con la finalidad de encontrar aquellos parámetros que permitan lograr la separación de la mezcla pero con el mínimo consumo de energía.

En la Figura 4.20 se puede notar que la diferencia de temperatura entre las etapas de la sección LP y la HP se mantiene casi constante en una gran zona de la CDPD, por lo que la suposición de que el calor intercambiado entre las etapas es constante se puede considerar como aceptable.

Una de las consecuencias que se espera como resultado de la integración térmica interna presente en la CDPD, es que el flujo de líquido y de vapor a través de las secciones no se mantengan constantes debido a que en la sección LP el líquido se evapora conforme desciende a través de la sección y a que el vapor en la sección HP se condensa mientras asciende en esa sección. En la

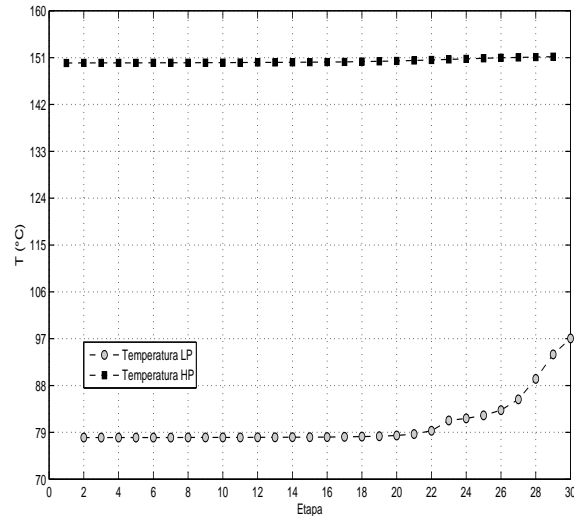
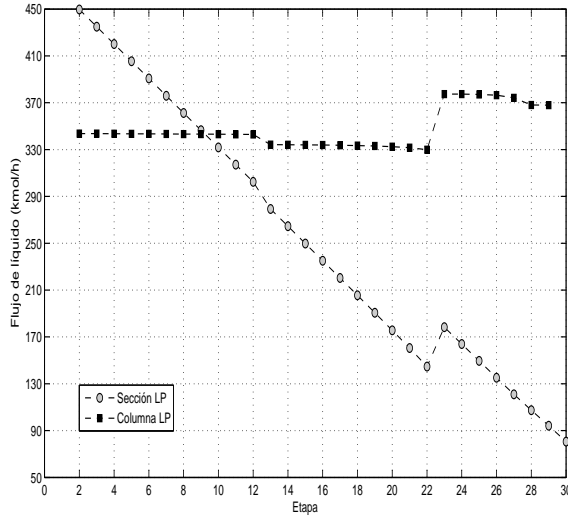


Figura 4.20: Perfil de temperatura en la CDPD.

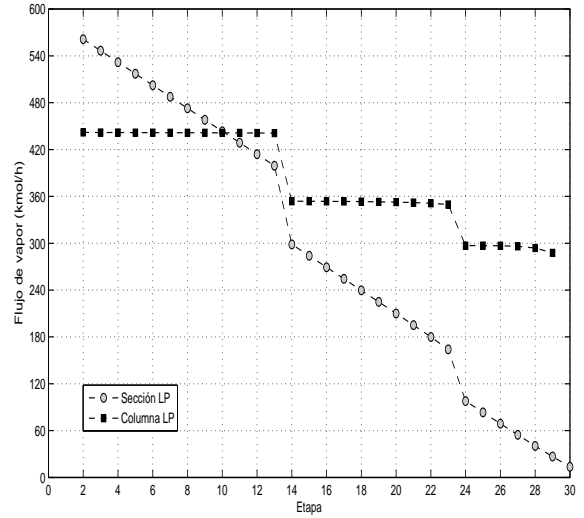
Figura 4.21(a) se puede notar que efectivamente el flujo de líquido disminuye conforme desciende por la sección LP de la CDPD a consecuencia de la evaporación, mientras que por el efecto de la acumulación de vapor etapa por etapa hay un mayor flujo de vapor en las etapas superiores de esa sección (Figura 4.21(b)). En la Figura 4.21(d) se observa que el comportamiento del flujo de vapor en la sección HP está de acuerdo a lo esperado, ya que este disminuye conforme asciende por esa sección a consecuencia de la condensación, mientras que por efecto de la acumulación el flujo de líquido es mayor en las etapas inferiores de esa sección de la CDPD (Figura 4.21(c)).

Por otra parte debido a que en la DPV no existe integración térmica interna, se espera que los perfiles de flujo presentes en las columnas de ese proceso no cambien como en el caso de la CDPD. Los resultados de la Figura 4.21 confirman que los perfiles de flujo de líquido y vapor de las columnas de la DPV se mantienen constantes en ciertas etapas de la columna LP y de la columna HP.

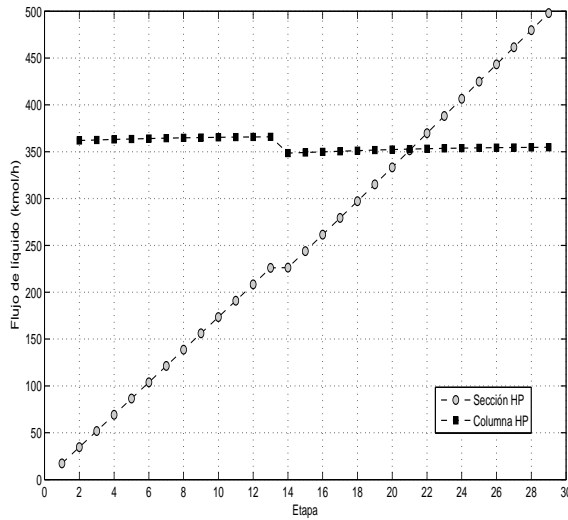
4. Diseño y simulación en estado estacionario de la CDPD



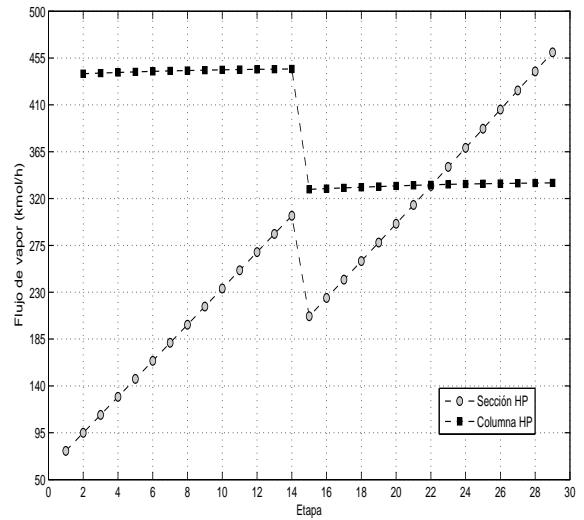
(a) Flujo de líquido en la sección LP (CDPD) y columna LP (DPV).



(b) Flujo de vapor en la sección LP (CDPD) y columna LP (DPV).

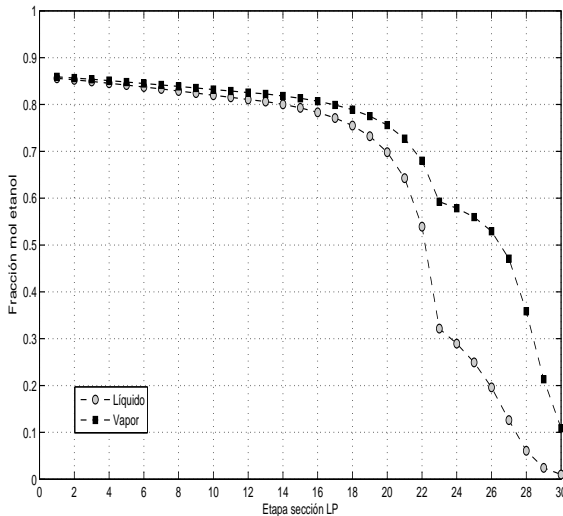


(c) Flujo de líquido en la sección HP (CDPD) y columna HP (DPV).

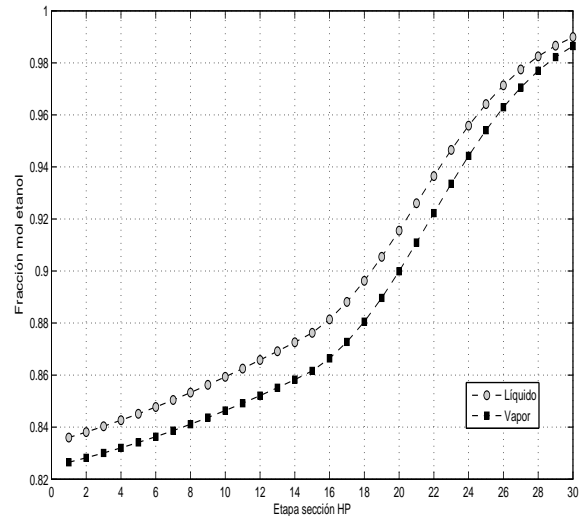


(d) Flujo de vapor en la sección HP (CDPD) y columna HP (DPV).

Figura 4.21: Comparación de los perfiles de flujo de la CDPD y la DPV.



(a) Sección LP.



(b) Sección HP.

Figura 4.22: Perfil de composiciones de etanol en la CDPD.

En la Figura 4.22 se presenta el perfil de composición de ambas secciones de la CDPD. Se nota que en las primeras 12 etapas de la sección LP las composiciones del líquido y del vapor son muy cercanas debido a la cercanía al punto azeotrópico. En relación al perfil de composición en la sección HP se observa que no hay una zona pinch como en el caso de la sección LP.

Cambio del número de etapas

En esta sección se analiza el efecto de disminuir el número de etapas sobre el costo de separación, medido en términos de la energía requerida para realizar la separación de la mezcla en estudio. En la Tabla 4.10 se presentan los esquemas estudiados en esta sección.

Como se observa en la Figura 4.20 y 4.22 existen zonas pinch en la CDPD propuesta para la separación de la mezcla etanol-agua para el esquema A, por lo que siguiendo el mismo procedi-

Esquema	Etapas sección LP	Etapas sección HP
A	30	30
B	23	23

Tabla 4.10: Número de etapas de los esquemas estudiados para el efecto de la disminución de las etapas de la CDPD.

	Sección LP	Sección HP
Etapas	23	23
Etapas de alimentación	21 (F), 11 (D2LP)	14
Relación alimentación-destilado	0.55	0.8
$Q(k)$ (MW)	0.39	-0.39

Tabla 4.11: Parámetros de operación de la CDPD para el esquema B.

miento que se usó para este esquema se determinaron los parámetros de diseño para la CDPD que cumplieran con los objetivos de diseño con la diferencia que el número de etapas en cada sección es de 23 (esquema B).

Para el esquema B, donde hay 7 etapas menos por sección comparado con el esquema A, la carga térmica del rehervidor en la sección HP aumenta poco más del doble de la carga térmica del caso A (ver Tabla 4.12). Además en el esquema B se necesita transferir mayor flujo de calor por etapa de la sección HP a la LP, situación que puede ser comprendida en términos de los flujos internos de líquido y vapor presentes en cada sección de la CDPD. De la Figura 4.23 se observa que el flujo de líquido y de vapor en la sección HP del esquema B es mayor que los flujos presentes en esa misma sección en el esquema A, por lo tanto en el esquema B se tiene que adicionar más flujo de calor

Sección	LP	HP
Q rehervidor (MW)	-	8.24
Q condensador (MW)	9.01	-

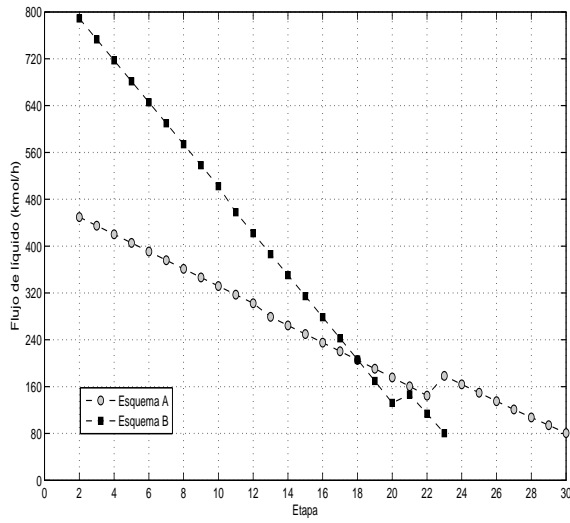
Tabla 4.12: Requerimientos de calor de la CDPD para el esquema B.

al rehervidor y mayor cantidad de calor tiene que ser transferida a la sección LP con la finalidad de alcanzar la RDA de la sección HP. Esa mayor transferencia de calor por etapa del esquema B produce un mayor flujo de vapor en la sección LP que el que se presenta en el esquema A, lo cual trae como consecuencia que la carga térmica del condensador aumente para poder mantener la RDA de la sección LP.

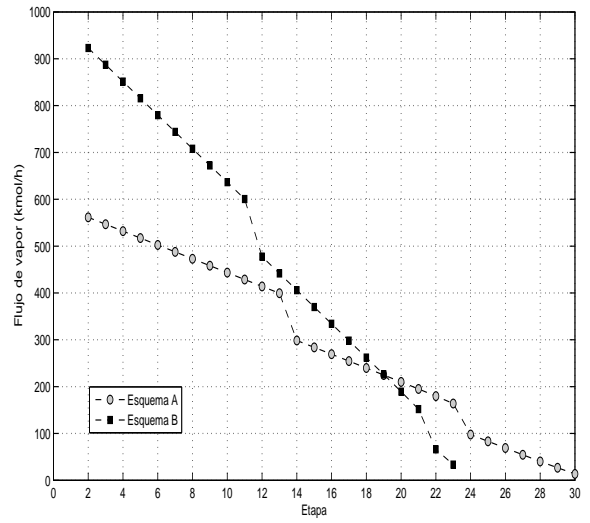
En la Figura 4.24 se presentan los perfiles de composición en ambas secciones de la CDPD para el esquema B. Se observa que en la sección LP existe una zona donde las composiciones tanto de líquido como de vapor son muy parecidas, mientras que en la sección HP no hay una zona pinch.

Para la parte de control del presente trabajo, la cual se presenta en el siguiente capítulo, se eligió trabajar con el esquema A por ser menor su consumo energético que el del esquema B.

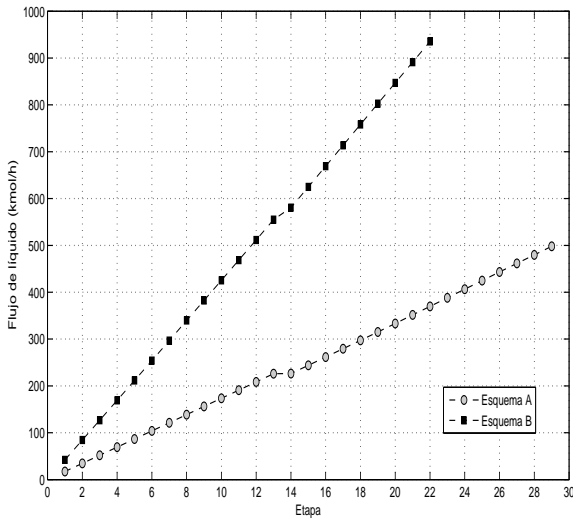
4. Diseño y simulación en estado estacionario de la CDPD



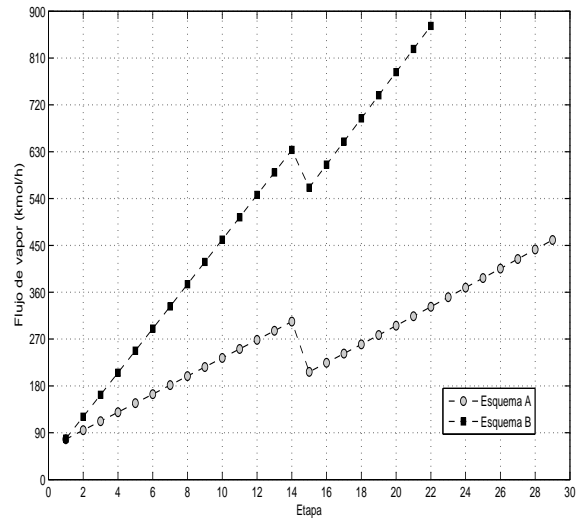
(a) Flujo de líquido en la sección LP.



(b) Flujo de vapor en la sección LP.

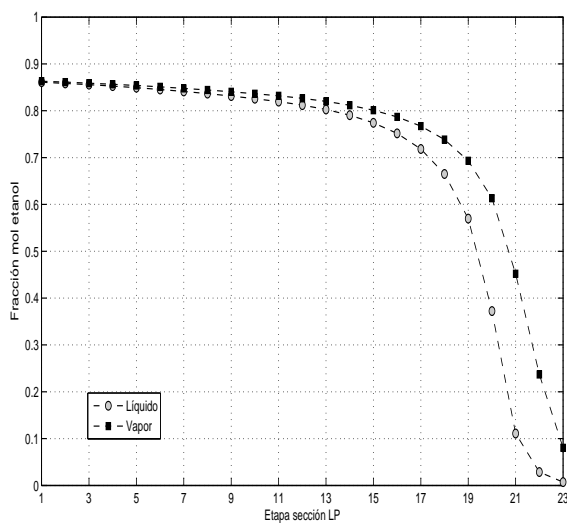


(c) Flujo de líquido en la sección HP.

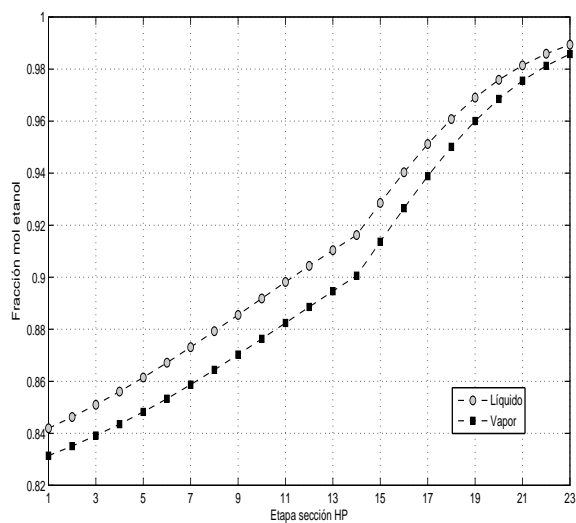


(d) Flujo de vapor en la sección HP.

Figura 4.23: comparación entre los perfiles de flujo de los esquemas A y B de la CDPD.



(a) Sección LP.



(b) Sección HP.

Figura 4.24: Perfil de composiciones de etanol en la CDPD para el esquema B.

Capítulo 5

Control de la CDPD

En el capítulo anterior se presentaron los resultados relativos al diseño y operación en estado estacionario de la CDPD. Sin embargo también es importante conocer el comportamiento dinámico del proceso ante posibles perturbaciones externas al mismo (e.g temperatura, flujo y composición de alimentación, presión del vapor para el rehervidor) con la finalidad de poder establecer una estructura de control adecuada para lograr que el proceso se mantenga lo más cercano posible a el punto de operación deseado o set-point. Un punto importante a considerar en este análisis es que debido al alto grado de integración térmica interna entre la sección LP y HP de la CDPD, se espera que las interacciones puedan dificultar el control del proceso, además de la naturaleza multivariable del problema de control de la CDPD.

5.1. Modelo dinámico

Para la simulación dinámica se optó por utilizar el simulador comercial Aspen Dynamics 2006.5. Para obtener el modelo dinámico se tomó como base el modelo en estado estacionario de la CDPD que se obtuvo en Aspen Plus, el cual se transformó a modelo dinámico por medio del procedimiento reportando en Luyben (2006b) y las guías de usuario del software. Para tener un modelo dinámico

más realista se establece una caída de presión a través de todo el modelo; por lo tanto la presión en cada etapa de cada sección de la CDPD es función del flujo del líquido y vapor.

Para el modelo dinámico se considera la dependencia con la temperatura del calor transferido etapa por etapa entre las secciones de la CDPD. Para que el modelo sea capaz de reproducir esta suposición se cambia la opción de transferencia de calor (*HeatOpt*), en cada etapa involucrada en la integración térmica, de *Constant duty* a *Constant temperature*. Esta opción permite que el calor que recibe cada etapa este dado por la siguiente expresión:

$$Q_k = UA_k(T_k - T_m) \quad (5.1)$$

donde Q_k es el flujo de calor transferido o recibido en la etapa, UA_k es el producto del coeficiente de transferencia de calor por el área de transferencia de la etapa, T_k es la temperatura de la etapa y T_m es la temperatura del medio con el cual se transfiere calor. Para establecer la integración entre las etapas de la sección LP y HP, se introdujo un pequeño código al modelo dinámico de forma que las temperaturas tuvieran el arreglo establecido en la ecuación (3.23). Se considera el valor de cada UA_k constante y se toman los valores numéricos necesarios para que se alcance un flujo de calor de 0.16 MW (valor establecido en estado estacionario) en cada par de etapas integradas. Estos valores se encuentran reportados en la Tabla 5.1.

5.2. Objetivos de control

Los objetivos de control son los siguientes:

- Mantener la composición de etanol en la corriente P_2 mayor a 97.5 % mol (99.0 % en peso).
- Recuperación rápida y suave de las variables de proceso ante posibles perturbaciones.

Etapas integradas (LP-HP)	UA (W/°C)	Etapas integradas (LP-HP)	UA (W/°C)
2-1	2231	16-15	2325
3-2	2238	17-16	2332
4-3	2245	18-17	2339
5-4	2252	19-18	2346
6-5	2258	20-19	2356
7-6	2265	21-20	2369
8-7	2272	22-21	2396
9-8	2278	23-22	2476
10-9	2285	24-23	2492
11-10	2292	25-24	2519
12-11	2298	26-25	2564
13-12	2305	27-26	2657
14-13	2311	28-27	2853
15-14	2318	29-28	3131
		30-29	3351

Tabla 5.1: UA en cada par de etapas integradas térmicamente.

5.3. Respuesta a lazo abierto de la CDPD

Se estudia la respuesta del proceso a tres perturbaciones, todas ellas de la corriente de alimentación: el flujo, temperatura y la composición de etanol. Las variables de la CDPD a analizar son la composición de etanol en la corriente P_2 , la composición de agua en la corriente P_1 , así como la temperatura, el calor transferido, y la presión de algunas etapas de la sección LP y HP. Para todos los casos la perturbación entra al proceso al tiempo 0.

En la Figura 5.1 se presenta la respuesta de las variables en estudio a un cambio de +5% y -5% en el flujo de alimentación. Se observa claramente que este cambio no modifica sustancialmente la calidad de la corriente P_1 ni la de la P_2 . Las temperaturas de ambas secciones tampoco sufren gran cambio y como consecuencia tampoco lo hace el calor transferido entre ambas secciones. Debido a la naturaleza de la CDPD, el calor transferido entre las secciones influye fuertemente en los flujos internos y a su vez estos lo hacen sobre la presión de cada sección, por lo que se espera que un cambio en el flujo de calor transferido afecte en la misma proporción a la presión en la sección correspondiente. Esta relación se observa en los resultados de la Figura 5.1 donde la presión tampoco sufre cambios importantes. Todas las variables alcanzan su nuevo valor en alrededor de 2 horas.

La respuesta de la CDPD a un cambio de +5% y -5% en la composición de etanol en la corriente de alimentación se muestra en la Figura 5.2. Al igual que en el caso de la perturbación de flujo, la composición de las corrientes principales se mantiene. La desviación que sufren las temperaturas, el calor transferido y las presiones es mayor comparado a el caso de la perturbación de flujo. Todas estas variables alcanzan su nuevo valor en alrededor de 2 horas.

De las tres perturbaciones, el cambio en la temperatura de la corriente de alimentación es la que tiene más impacto sobre la CDPD tal y como se muestra en los resultados de la Figura 5.3, donde la temperatura de alimentación cambió en +5% y -5% de su valor inicial. A pesar de que al

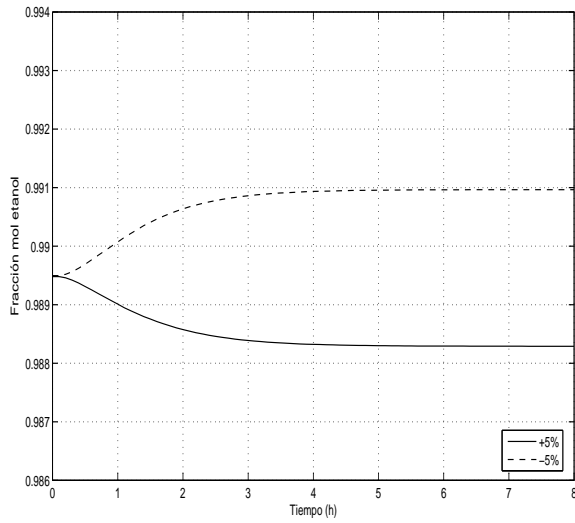
final la calidad de los productos se mantiene, el resto de las variables estudiadas presenta grandes desviaciones de sus valores iniciales lo cual en un una columna real podría representar dificultades de operación dadas las restricciones propias de los equipos, y los requerimientos de seguridad.

Además del efecto de las perturbaciones sobre las variables de proceso, también se estudia el efecto de la carga térmica del condensador sobre la temperatura de algunas etapas de la sección LP, y el efecto de la carga térmica del rehervidor sobre la temperatura de algunas etapas de la sección HP. En la Figura 5.4(a) se presenta la respuesta de la temperatura de algunas etapas de la sección HP cuando ocurre un cambio de +1 % en la carga térmica del rehervidor. Estos resultados muestran que la temperatura en la sección HP cambia en la misma dirección que lo hace el cambio de la carga térmica del rehervidor, lo cual es consistente con lo esperado ya que con el aumento de la carga térmica del rehervidor se espera que exista mayor flujo de vapor a través de la sección situación que provoca un incremento de la temperatura de ésta.

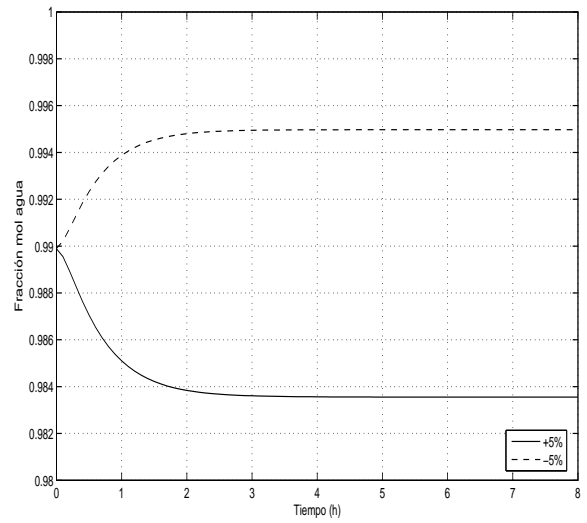
Por otra parte, en la Figura 5.4(b) se presenta la respuesta de la temperatura en la sección LP cuando el valor numérico de la carga térmica del condensador aumenta en 1 %. Debido a que el valor de la carga térmica del condensador es negativo, con el cambio estudiado lo que en realidad se considera es una disminución de la capacidad de enfriamiento del condensador lo cual provoca una disminución del reflujo y como consecuencia la temperatura de la sección LP aumenta. Estas afirmaciones se pueden constatar en la Figura 5.4(b).

En la Tabla 5.2 se presenta un análisis cualitativo del efecto de las perturbaciones estudiadas, así como de los cambios en la carga térmica del rehervidor y condensador sobre la temperatura de la CDPD.

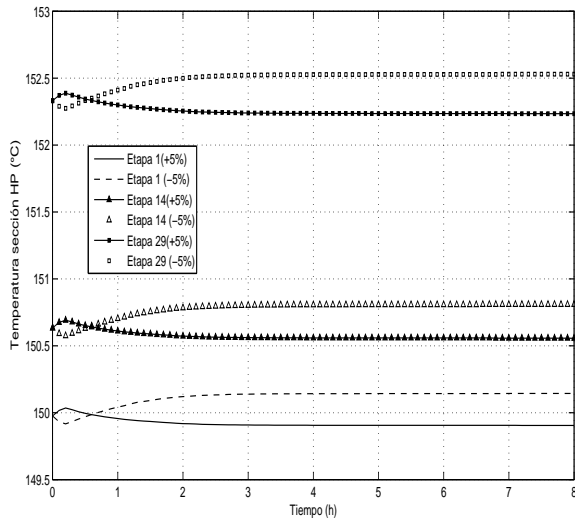
De forma global aunque el proceso es estable en el punto de operación deseado, es necesario establecer un esquema de control para mejorar los tiempos de rechazo de perturbaciones y sobre todo mantener el proceso lo más cerca posible del punto de operación deseado.



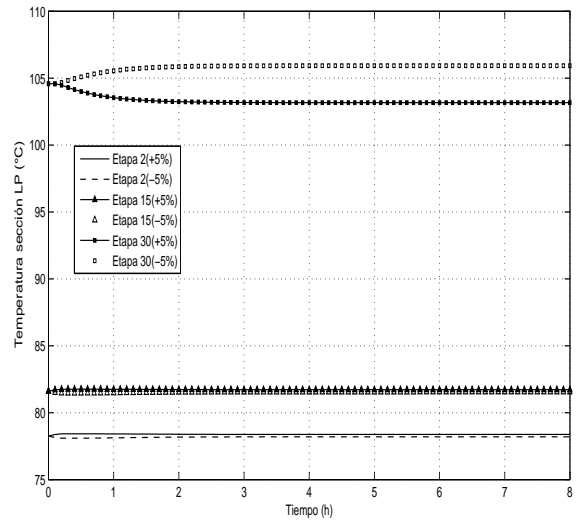
(a) Composición de etanol en la corriente P_2 .



(b) Composición de agua en la corriente P_1 .

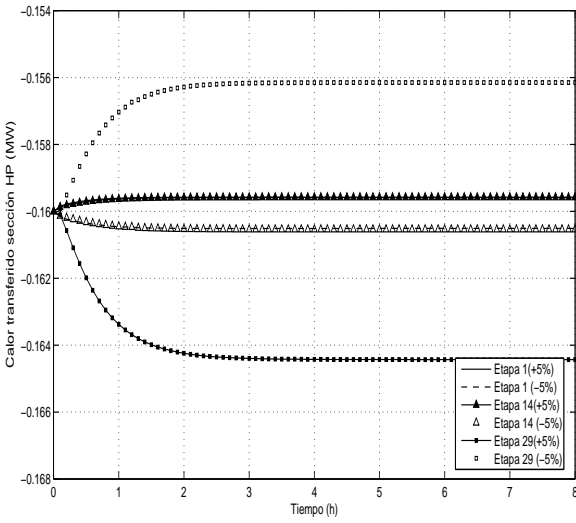


(c) Temperatura sección HP.

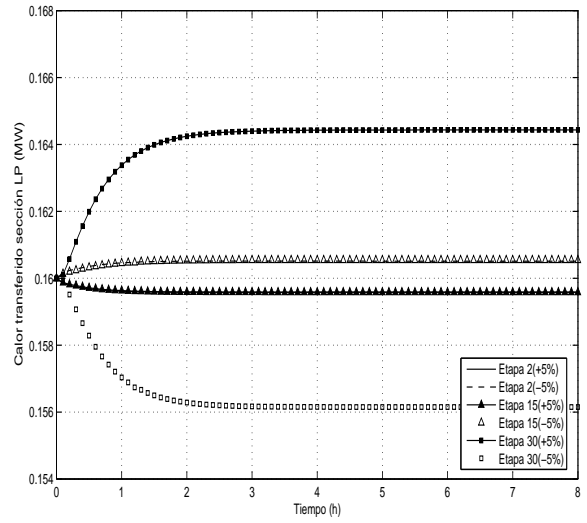


(d) Temperatura sección LP.

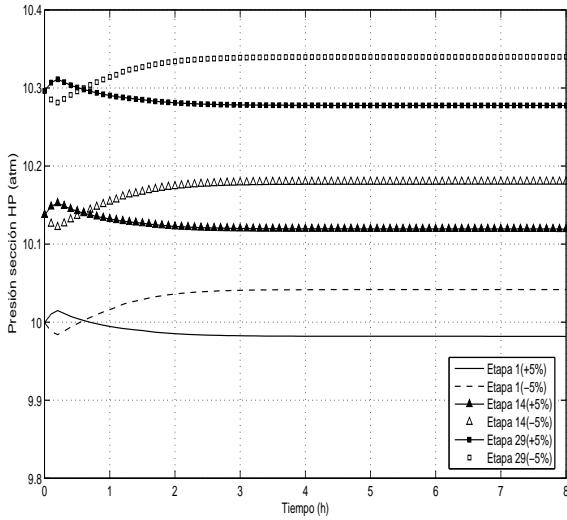
Figura 5.1: Respuesta a lazo abierto de la CDPD al cambio del flujo de alimentación.



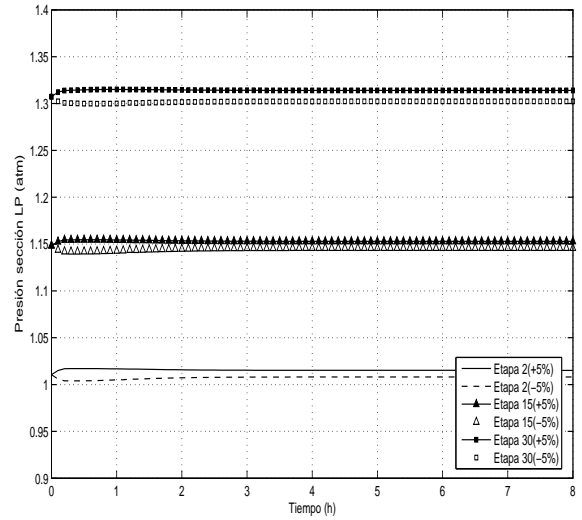
(e) Calor transferido sección HP.



(f) Calor transferido sección LP.

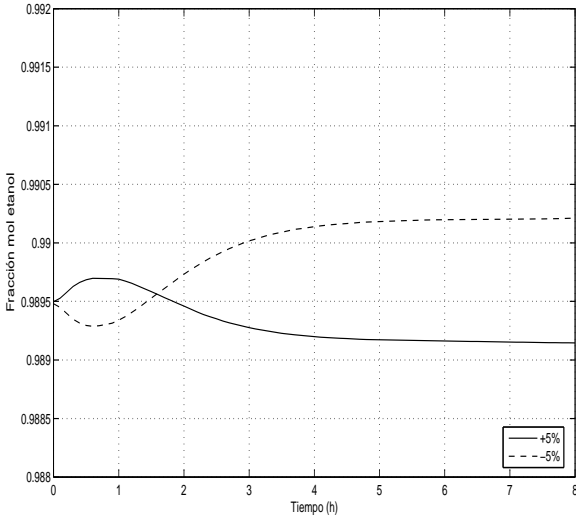


(g) Presión sección HP.

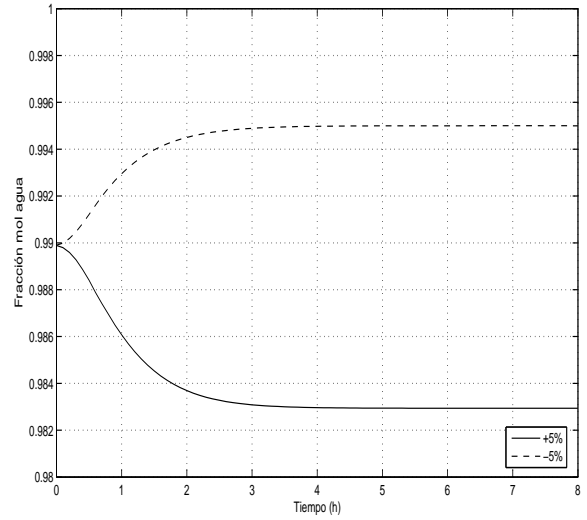


(h) Presión sección LP.

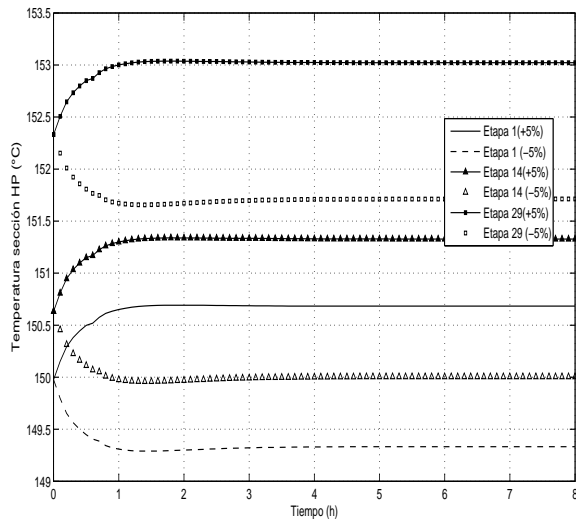
Figura 5.1: (cont.) Respuesta a lazo abierto de la CDPD al cambio del flujo de alimentación.



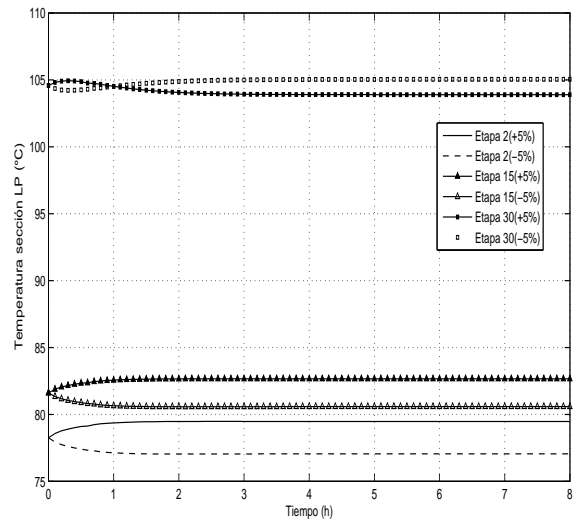
(a) Composición de etanol en la corriente P_2 .



(b) Composición de agua en la corriente P_1 .

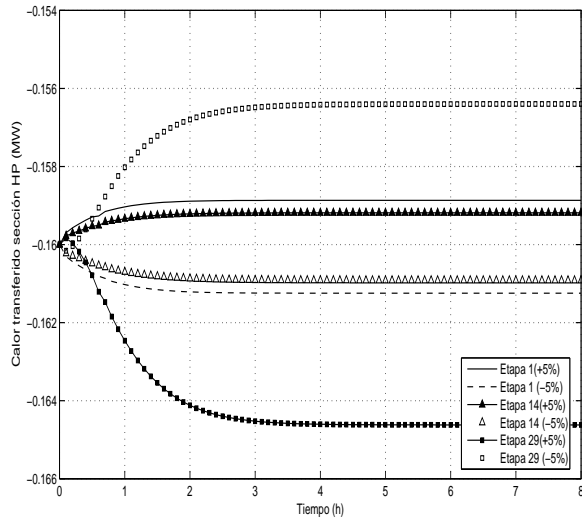


(c) Temperatura sección HP.

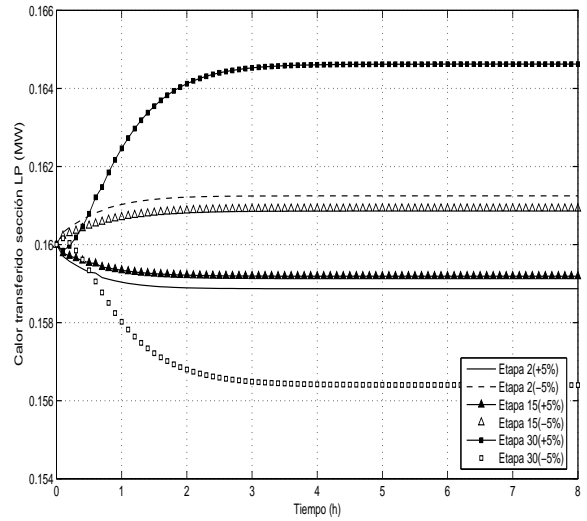


(d) Temperatura sección LP.

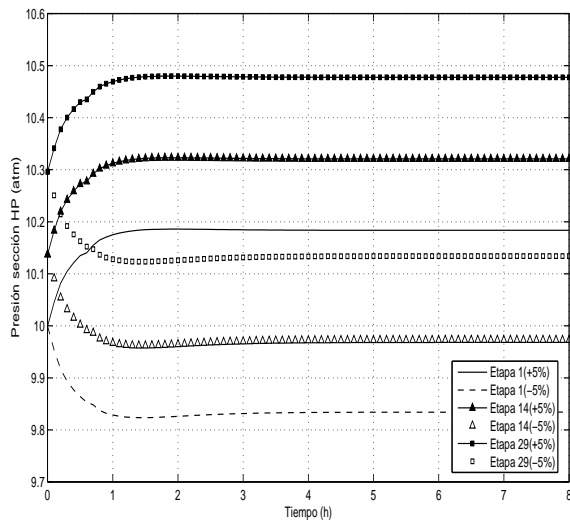
Figura 5.2: Respuesta a lazo abierto de la CDPD al cambio de la composición de alimentación de etanol.



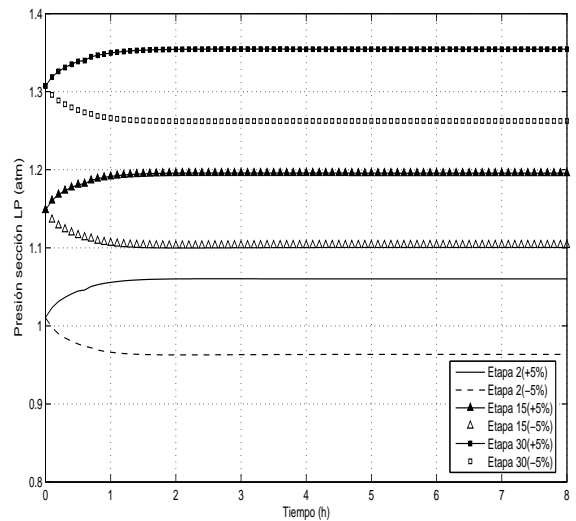
(e) Calor transferido sección HP.



(f) Calor transferido sección LP.

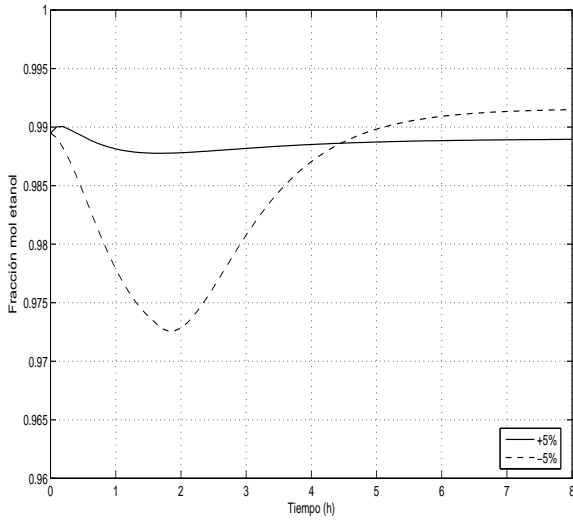


(g) Presión sección HP.

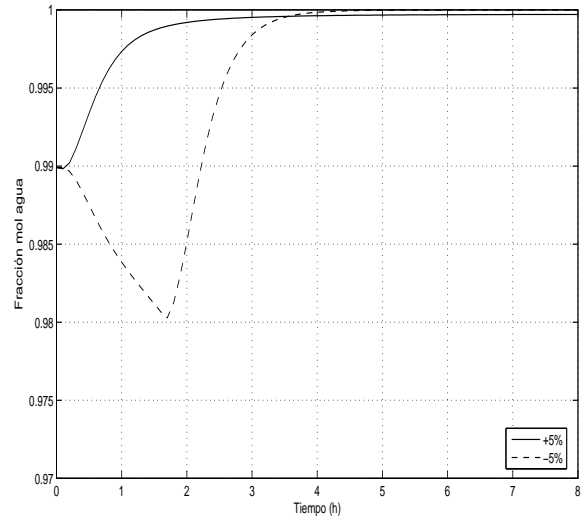


(h) Presión sección LP.

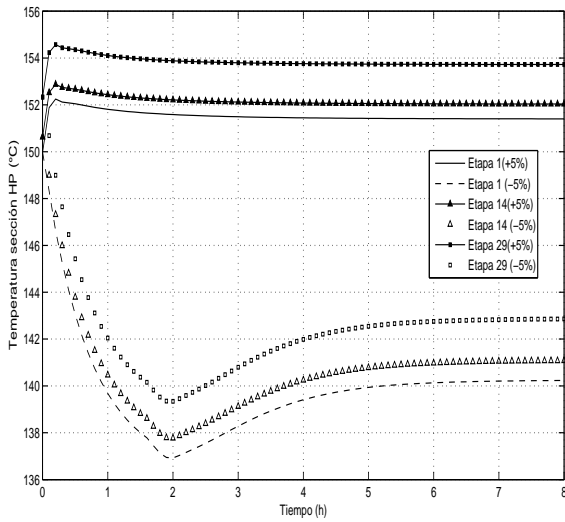
Figura 5.2: (cont.) Respuesta a lazo abierto de la CDPD al cambio de la composición de alimentación de etanol.



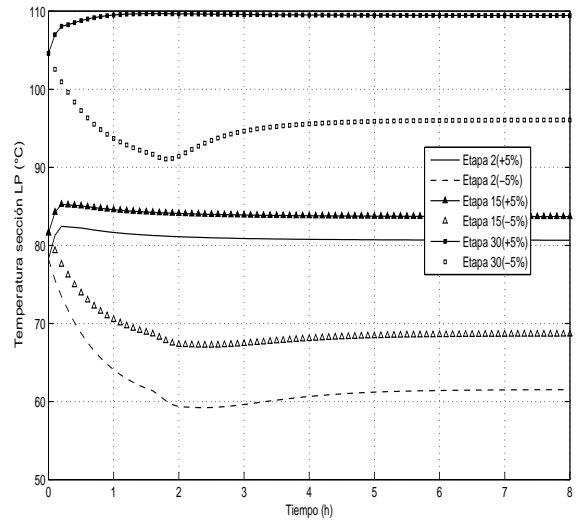
(a) Composición etanol corriente P_2 .



(b) Composición de agua en la corriente P_1 .

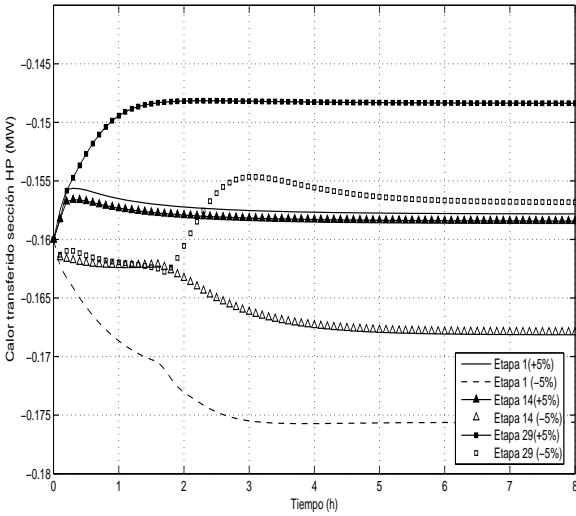


(c) Temperatura sección HP.

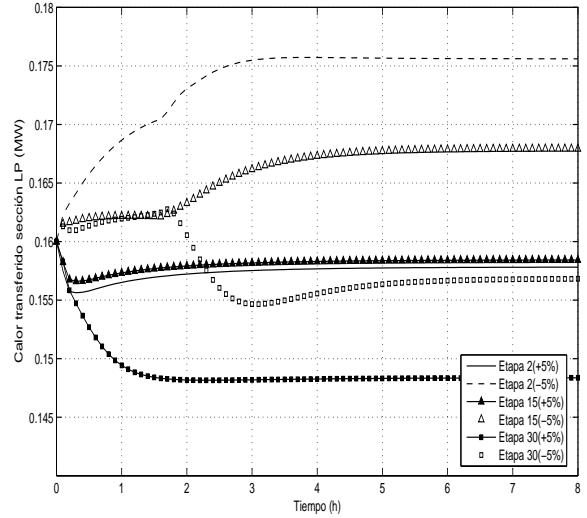


(d) Temperatura sección LP.

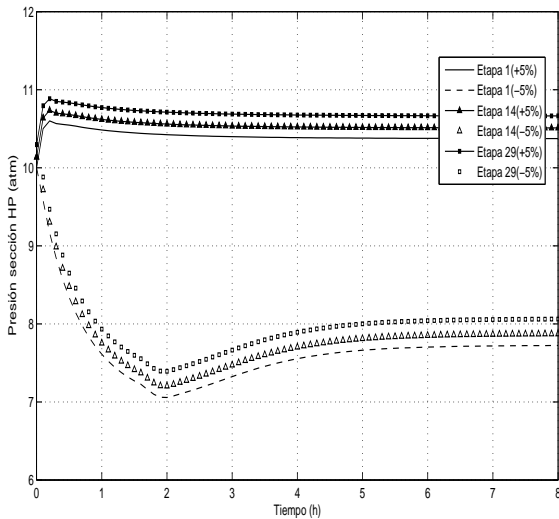
Figura 5.3: Respuesta a lazo abierto de la CDPD al cambio de la temperatura de alimentación.



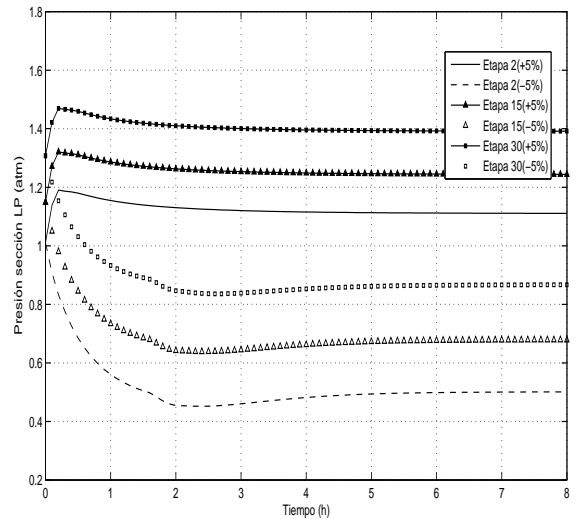
(e) Calor transferido sección HP.



(f) Calor transferido sección LP.

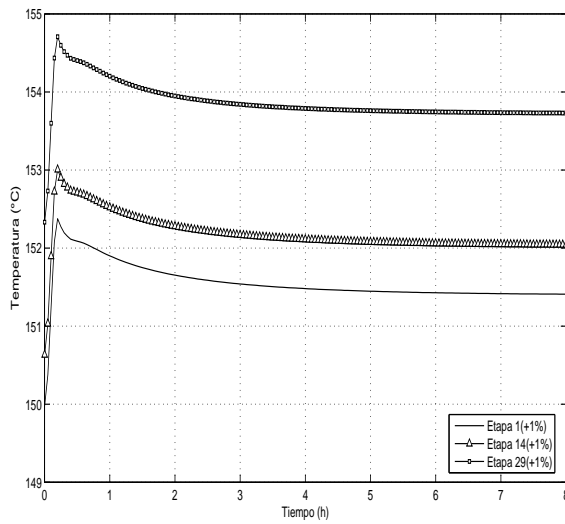


(g) Presión sección HP.

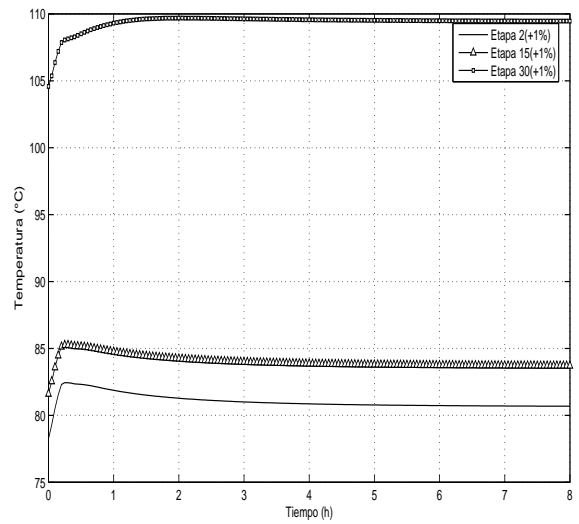


(h) Presión sección LP.

Figura 5.3: (cont.) Respuesta a lazo abierto de la CDPD al cambio de la temperatura de alimentación.



(a) Respuesta al cambio de la carga térmica rehvador. Temperatura sección HP.



(b) Respuesta al cambio de la carga térmica condensador. Temperatura sección LP.

Figura 5.4: Respuesta de la CDPD al cambio de la carga térmica del rehvador y condensador.

Variable	Efecto sobre la temperatura sección HP	Efecto sobre la temperatura sección LP
Flujo alimentación	Muy bajo.	Muy bajo en etapas superiores e intermedias mientras que en etapas inferiores es relativamente más significativo.
Composición alimentación	Moderado pero mayor que para el caso de la perturbación de flujo.	Moderado pero mayor que para el caso de la perturbación de flujo.
Temperatura alimentación	Muy importante.	Muy importante.
Carga térmica rehervidor	Un cambio relativamente pequeño en esta variable, afecta de forma importante a la temperatura de esta sección.	-
Carga térmica condensador	-	Un cambio relativamente pequeño en esta variable, afecta de forma importante a la temperatura de esta sección.

Tabla 5.2: Análisis cualitativo del efecto de las perturbaciones estudiadas, así como de los cambios en la carga térmica del rehervidor y condensador sobre la temperatura de la CDPD.

5.4. Esquema de control

Se optó por usar un enfoque multi-lazo para el control de la CDPD, donde cada controlador tiene una variable de entrada para controlar una variable de salida asignada. La principal ventaja de este tipo de esquema de control es que cada lazo se diseña de forma independiente mientras que

su principal desventaja es que no toma en cuenta las posibles interacciones entre los lazos.

Se trató de analizar por medio de la matriz de ganancias relativas la interacción entre los lazos y el apareamiento de las variables manipuladas y controladas, por lo cual se linealizó el modelo dinámico no lineal por medio de las herramientas de Aspen Dynamics, sin embargo el modelo resultante no representaba de forma satisfactoria los resultados del modelo no lineal. Por esta razón el apareamiento de las variables manipuladas y controladas se realizó utilizando sólo el conocimiento heurístico del proceso.

5.4.1. Variables manipuladas y controladas

En la Tabla 5.3 se muestra el apareamiento sugerido para las variables manipuladas y controladas. En la Figura 5.5 se muestra el diagrama de la CDPD con el esquema de control propuesto.

A nivel industrial el control de los niveles es importante debido a las restricciones de capacidad de los equipos. El nivel en el fondo de la sección LP es controlado por medio del flujo que sale de esta sección, el cual es regulado por la posición de la válvula 1, debido a la relación directa que existe entre el nivel y el flujo de salida de esa sección (a mayor flujo de salida menor es el nivel y viceversa). El apareamiento para el nivel en el condensador y en el fondo de la sección HP tienen la misma justificación que la del nivel en el fondo de la sección LP.

El control de la presión es importante por cuestiones de seguridad, además de que es una variable que afecta fuertemente a otras variables de proceso (e.g. composiciones). La presión en la sección HP se controla por medio del flujo de vapor que sale de esta sección debido a la relación que existe entre el flujo de vapor a través de la columna con la presión (a menor flujo de vapor la presión aumenta y viceversa). Se eligió sólo controlar la presión en la sección HP debido a la interacción que existe entre ambas secciones de la CDPD.

Como se mencionó anteriormente uno de los objetivos de control es asegurar la pureza de etanol

Variable manipulada	Variable controlada
Posición válvula 1	Nivel fondo sección LP
Reflujo sección LP	Nivel condensador
Posición válvula 2	Nivel fondo sección HP
Posición válvula 3	Presión sección HP
Carga térmica rehervidor	Temperatura etapa k sección HP
Carga térmica condensador	Temperatura etapa k sección LP

Tabla 5.3: Variables manipuladas y controladas.

en la corriente P_2 , sin embargo en este esquema se optó por un control de composición indirecto a través de la temperatura debido a las posibles dificultades que podría acarrear establecer en forma real una medición en línea de la composición. Más adelante se describe la forma en la que se eligió la etapa en cada sección para controlar la temperatura correspondiente.

5.5. Control retroalimentado

La primera estrategia a considerar para todos los lazos de control es la del control retroalimentado. En la Figura 5.6 se muestra el diagrama de bloques de esta estrategia de control. El control retroalimentado tiene como principal ventaja que puede corregir el efecto de perturbaciones no medidas sobre la respuesta del proceso a lazo cerrado y de errores de modelamiento.

Para establecer el control retroalimentado se tiene que determinar el tipo de controlador. Se eligió un controlador tipo proporcional-integral (PI) para todos los lazos, el cual tiene como función de transferencia la siguiente expresión.

$$G_{cb} = K_{cb} \left(1 + \frac{1}{\tau_b s} \right) \quad (5.2)$$

donde G_{cb} es la función de transferencia, K_{cb} es la ganancia, y τ_b es el tiempo integral asociados

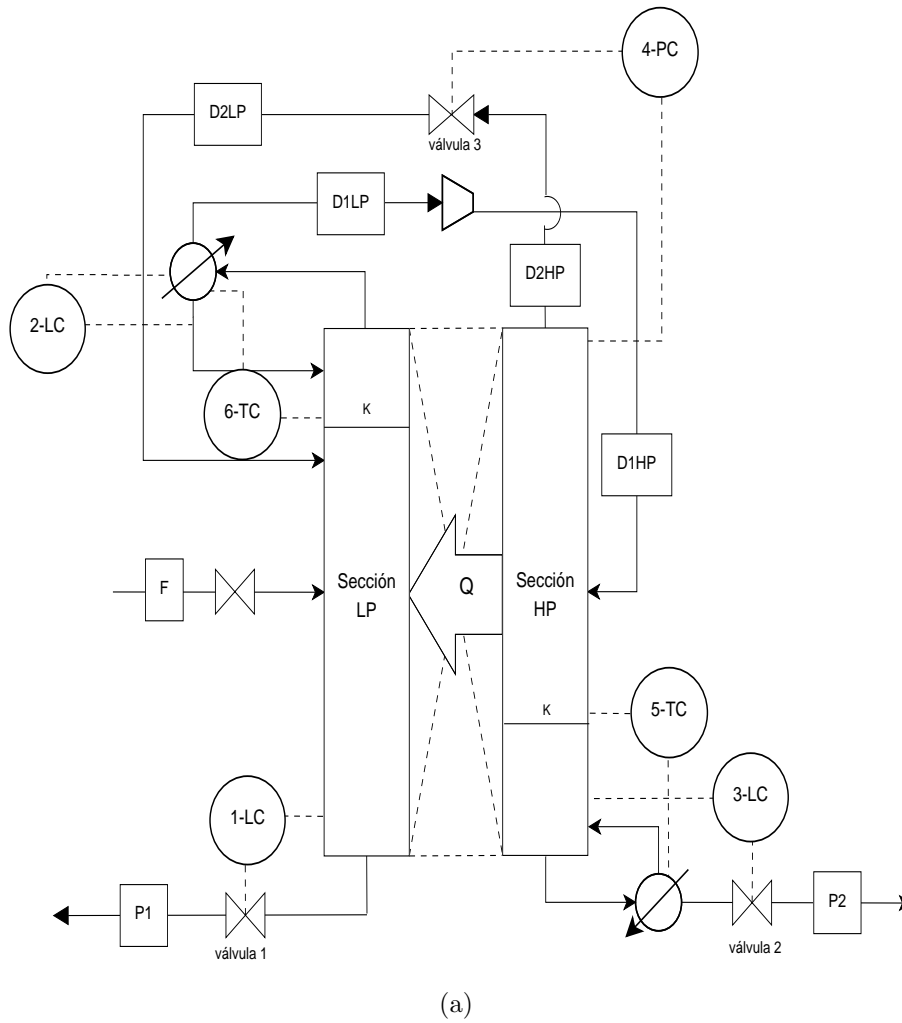


Figura 5.5: Esquema de control para la CDPD

Posición/Número de lazo	Lazo
1	Posición válvula 1 - Nivel fondo sección LP
2	Reflujo sección LP - Nivel condensador
3	Posición válvula 2 - Nivel fondo sección HP
4	Posición válvula 3 - Presión sección HP
5	Carga térmica rehervidor - Temperatura etapa k sección HP
6	Carga térmica condensador - Temperatura etapa k sección LP

Tabla 5.4: Secuencia de sintonización.

al controlador PI. s es la variable de transformación de Laplace.

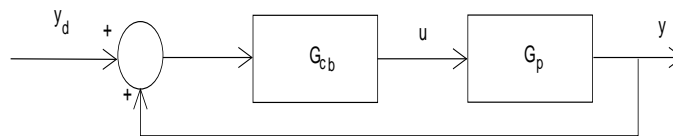
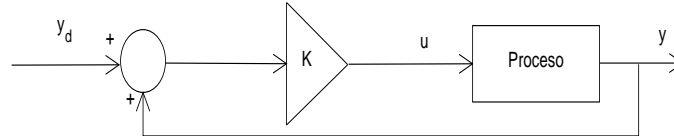


Figura 5.6: Diagrama de bloques para el esquema de control retroalimentado. y_d = set point, G_{cb} = función de transferencia del controlador, u = variable de entrada al proceso, G_p = función de transferencia del proceso, y = variable de salida.

5.5.1. Sintonización de los controladores

Se eligió una estrategia secuencial para sintonizar los controladores propuestos para el control de la CDPD, es decir se sintoniza el primer lazo seleccionado, después ese lazo se cierra y se sintoniza un segundo lazo y así sucesivamente hasta sintonizar el último lazo. De esta forma se espera tomar en cuenta, de manera un tanto empírica, el efecto de interacción entre los lazos de control. En la Tabla 5.4 se presenta la secuencia de sintonización utilizada. Los primeros cuatro lazos de control se denominan básicos o simples ya que sus variables controladas son relativamente fáciles de controlar. Los dos últimos representan mayores problemas de control.

Para sintonizar los controladores de la CDPD se utilizó el método de variación de autosintonización



(a) Sintonización ATV.

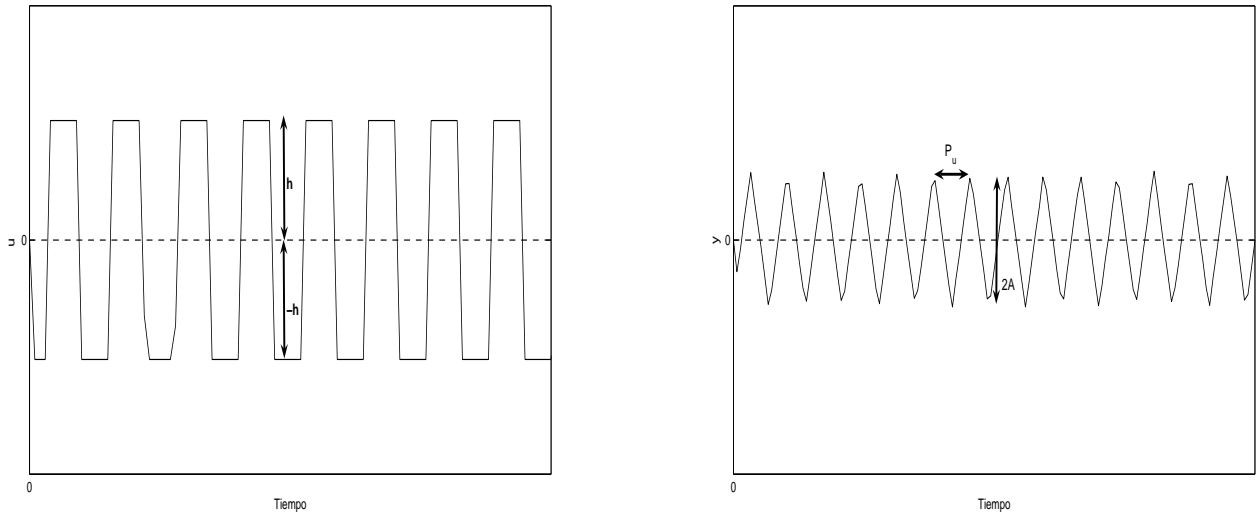
Figura 5.7: Respuesta del proceso a una prueba ATV.

(ATV por sus siglas en inglés). Este método de sintonización es de uso común en el control de procesos químicos (Lin *et al.*, 2006). Una de las ventajas de este método es que en algunas ocasiones no es necesario obtener un modelo lineal explícito para sintonizar un controlador debido a que se puede implementar también en forma experimental o empleando un modelo no-lineal del proceso.

El método ATV está basado en la idea de usar un controlador encendido/apagado (ver Figura 5.7) cuya dinámica sea como la que se presenta en la Figura 5.8(a). Iniciando en su valor nominal, la acción de control se incrementa en un valor h y después se disminuye hasta un valor $-h$. La ideal es forzar al proceso a mostrar una respuesta similar a la que se presenta en la Figura 5.8(b). Inicialmente la respuesta oscila alrededor de su valor nominal hasta que alcanza un patrón de oscilación con periodo P_u y amplitud A . Estos parámetros característicos de la respuesta a lazo-cerrado del método ATV se relacionan con los parámetros del punto crítico del proceso, la ganancia y el periodo límites, por medio de la siguiente expresión.

$$K_{cu} = \frac{4h}{\pi A} \quad (5.3)$$

Una vez con el punto crítico establecido, las reglas de sintonización de Ziegler-Nichols (Tabla 5.5) fueron utilizadas para sintonizar el controlador correspondiente.



(a) Dinámica del controlador.

(b) Respuesta de la variable de salida.

Figura 5.8: Respuesta del proceso a una prueba ATV.

K_{cb}	τ_b
$0.45K_{cu}$	$P_u/1.2$

Tabla 5.5: Reglas de sintonización de Ziegler-Nichols.

Los resultados de sintonización de los lazos de nivel y presión se presentan en la Tabla 5.6.

Lazo	Acción	h	K_{cu}	$P_u(min)$	K_{cb}	$\tau_b(min)$
1	Directa	5 %	113.30	4.2	51.50	3.5
2	Directa	5 %	169.75	1.2	77.16	1.0
3	Directa	5 %	39.84	4.8	18.11	4.0
4	Directa	5 %	299.20	6.0	136.31	5.0

Tabla 5.6: Parámetros de sintonización de controladores básicos.

5.5.2. Localización de los sensores de temperatura

Una vez establecidos y cerrados los lazos básicos, resta sintonizar los lazos de temperatura para el control indirecto de las composiciones, sin embargo se debe decidir en cual etapa se debe medir la temperatura. Para ese propósito se han propuesto diversos criterios. Uno de ellos consiste en elegir la etapa en la cual hay un mayor cambio de temperatura de etapa a etapa, en otro se trata de encontrar la etapa en la cual hay un mayor cambio de temperatura cuando hay una variación en la variable manipulada y también se ha propuesto usar la descomposición en valores singulares para decidir la etapa donde se debe medir la temperatura (Skogestad, 2007).

En el presente trabajo para decidir en cual etapa se va a medir la temperatura para propósitos de control, se realizan pruebas a lazo cerrado frente a las perturbaciones antes mencionadas de diferentes esquemas de control de temperatura, los cuales difieren en la posición en la que se mide y controla esta. Se establecen dos tipos de esquemas: el primero para estudiar el control de temperatura en la sección HP y el segundo para el estudio del control de temperatura en la sección LP. Estos esquemas se establecen como a continuación se describe. Para decidir la etapa en la que se va a controlar la temperatura en la sección HP, se estudian esquemas en los cuales se selecciona una etapa de esa sección para controlar la temperatura (diferente etapa para cada esquema), mientras que en la sección LP se realiza el control de temperatura en una etapa

Esquema	Etapa en la que se controla la temperatura en sección HP (Lazo 5)	Etapa en la que se controla la temperatura en sección LP (Lazo 6)
AHP	1	2
BHP	14	2
CHP	29	2

Tabla 5.7: Etapas en las que se controla la temperatura en los esquemas estudiados para elegir la etapa en la que se va a controlar la temperatura en la sección HP.

determinada. Para estos esquemas se controla la temperatura en la misma etapa de la sección LP. Posteriormente para elegir la etapa en la que se va a controlar la temperatura en la sección LP, se analizan esquemas en los cuales se elige una etapa de esa sección para controlar la temperatura (diferente etapa para cada esquema), mientras que en la sección HP se controla la temperatura en una etapa determinada. Para estos últimos esquemas se controla la temperatura en la misma etapa de la sección HP.

Las etapas en las que se controla la temperatura en los esquemas estudiados para decidir la etapa en la que se va a controlar la temperatura en la sección HP se muestran en la Tabla 5.7. En la Tabla 5.8 se muestran los parámetros de sintonización de cada caso. En la Tabla 5.9 se presentan las etapas en las que se controla la temperatura en los esquemas analizados para decidir la etapa en la que se va a controlar la temperatura en la sección LP, mientras que en la Tabla 5.10 se muestran los parámetros de sintonización de cada esquema. Para todos los lazos de temperatura implementados se considera un retardo de 2 minutos.

Las respuestas a lazo cerrado de los esquemas AHP, BHP y CHP se muestran en las las Figuras 5.9, 5.10 y 5.11. Se observa que el desempeño de los tres esquemas es satisfactorio ante las tres perturbaciones ya que en todos los casos se mantiene la temperatura correspondiente en su punto nominal, además las acciones de control son similares y suaves. Otro aspecto importante, es que ante las perturbaciones de flujo y composición de alimentación prácticamente en todo momento se mantiene el valor nominal de la temperatura correspondiente, mientras que frente a la perturbación

Esquema	Control de temperatura sección HP (Lazo 5)					Control de temperatura sección LP (Lazo 6)				
	Acción	K_{cu}	P_u (<i>min</i>)	K_{cb}	τ_b (<i>min</i>)	Acción	K_{cu}	P_u (<i>min</i>)	K_{cb}	τ_b (<i>min</i>)
AHP	Indirecta	106.42	4.2	48.37	3.5	Indirecta	2.34	7.2	1.06	6.0
BHP	Indirecta	46.35	4.2	21.06	3.5	Indirecta	2.08	7.2	0.94	6.0
CHP	Indirecta	37.79	4.2	17.17	3.5	Indirecta	2.39	7.2	1.08	6.0

Tabla 5.8: Parámetros de sintonización de los lazos de temperatura de los esquemas estudiados para elegir la etapa en la que se va a controlar la temperatura en la sección HP.

Esquema	Etapa en la que se controla la temperatura en sección HP (Lazo 5)	Etapa en la que se controla la temperatura en sección LP (Lazo 6)
ALP	29	2
BLP	29	15
CLP	29	30

Tabla 5.9: Etapas en las que se controla la temperatura en los esquemas estudiados para elegir la etapa en la que se va a controlar la temperatura en la sección LP.

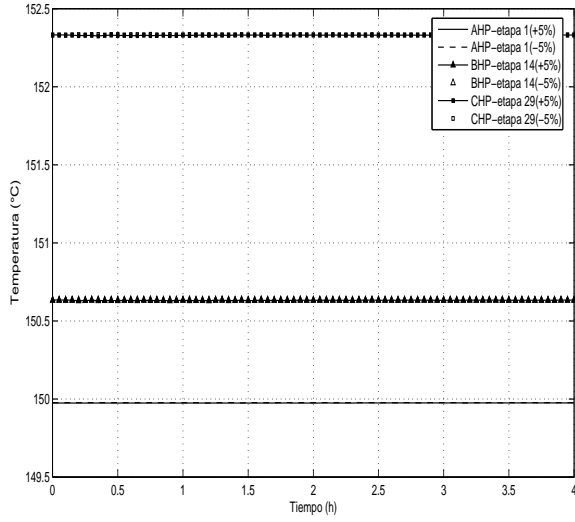
Esquema	Control de temperatura sección HP (Lazo 5)					Control de temperatura sección LP (Lazo 6)				
	Acción	K_{cu}	P_u (<i>min</i>)	K_{cb}	τ_b (<i>min</i>)	Acción	K_{cu}	P_u (<i>min</i>)	K_{cb}	τ_b (<i>min</i>)
ALP	Indirecta	37.79	4.2	17.17	3.5	Indirecta	2.39	7.2	1.08	6.0
BLP	Indirecta	37.79	4.2	17.17	3.5	Indirecta	2.81	7.2	1.28	6.0
CLP	Indirecta	37.79	4.2	17.17	3.5	Indirecta	4.42	8.4	2.01	7.0

Tabla 5.10: Parámetros de sintonización de los lazos de temperatura de los esquemas estudiados para elegir la etapa en la que se va a controlar la temperatura en la sección LP.

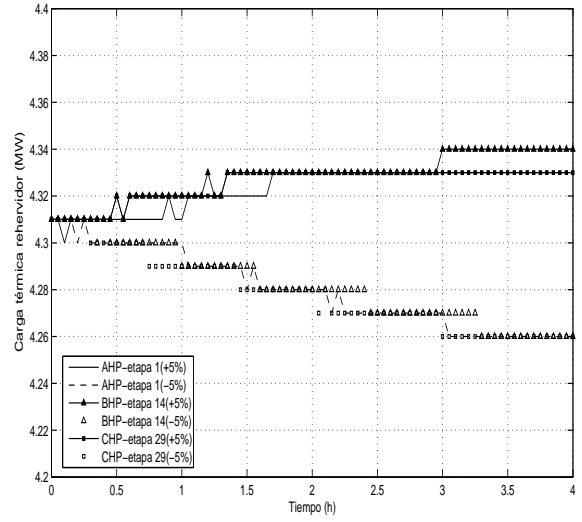
de temperatura el tiempo en que se estabiliza el valor de la temperatura correspondiente es menor a 0.25 horas. También se observa que la composición de etanol en la corriente P_2 en las tres situaciones se mantiene en su punto nominal, por lo que controlar la temperatura en cualquiera de las tres posiciones de la sección HP estudiadas cumple satisfactoriamente con el control indirecto de la composición de la corriente P_2 .

Las respuestas a lazo cerrado de los esquemas ALP, BLP y CLP se presentan en las las Figuras 5.12, 5.13 y 5.14. Se observa que el desempeño de los tres casos es satisfactorio ante las perturbaciones, además las respuestas de control de los esquemas ALP y BLP (control en etapa 2 y 15 respectivamente) son muy similares. Para la perturbación de temperatura, que es el caso donde se observa una desviación de los valores nominales de la variable controlada, el tiempo de respuesta es menor a 0.25 horas. Con relación al control indirecto de la composición, en los esquemas ALP y BLP la composición de agua en la corriente P_1 no se mantiene en su valor nominal, sin embargo la desviación no es muy grande por lo que se le puede considerar que en esas posiciones el control de temperatura cumple de forma aceptable con el control indirecto de la composición de la corriente P_1 . También en esos resultados se observa que la introducción del controlador de temperatura en la etapa 30 (esquema CLP), modifica ligeramente los valores iniciales del proceso por lo que controlar la temperatura en esa posición de la sección LP queda descartado.

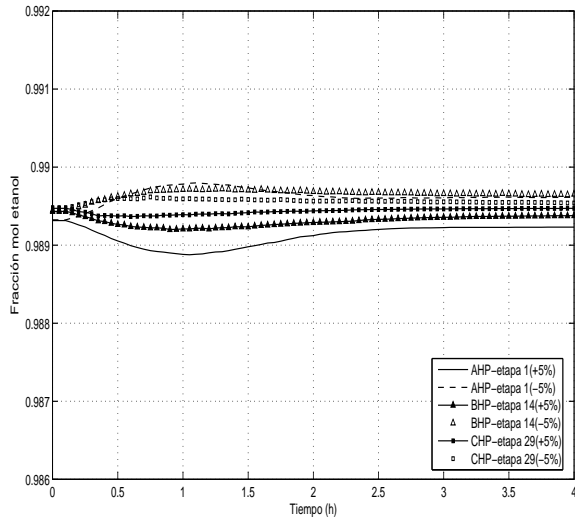
De los resultados descritos anteriormente, se concluye que el control de la temperatura en cualquier etapa en la sección HP tiene un buen desempeño ante las perturbaciones y que cumple en forma satisfactoria con el control indirecto de la composición de etanol en la corriente P_2 . Para la sección LP se descarta controlar la temperatura en la etapa 30, mientras que para el control de temperatura entre las etapas 2 y 15 se espera que el desempeño del controlador sea satisfactorio y que el control indirecto de la composición de agua en la corriente P_1 sea aceptable. Para el esquema de control de la CDPD se selecciona controlar la temperatura en la etapa 2 de la sección LP y en la etapa 29 de la sección HP.



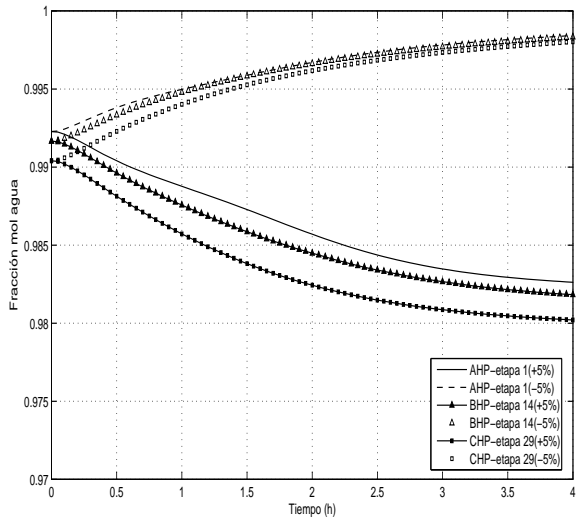
(a) Temperatura.



(b) Carga térmica rehervidor.

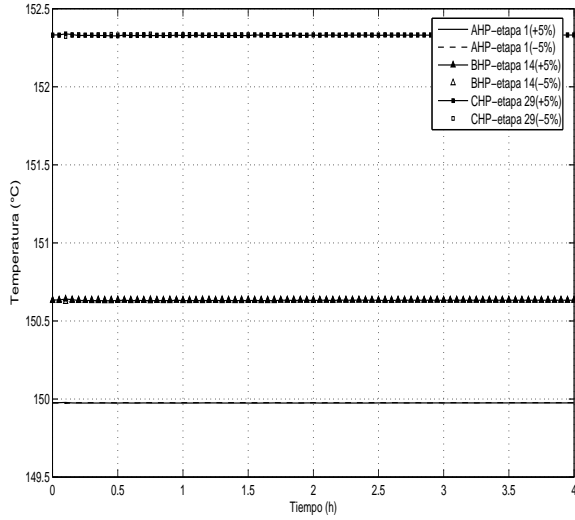


(c) Composición etanol P_2 .

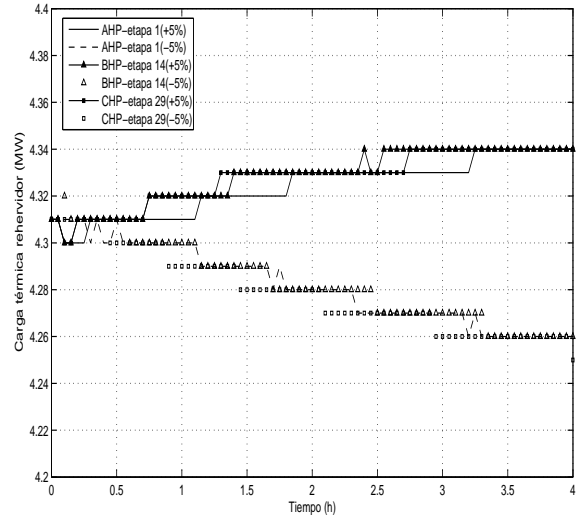


(d) Composición agua P_1 .

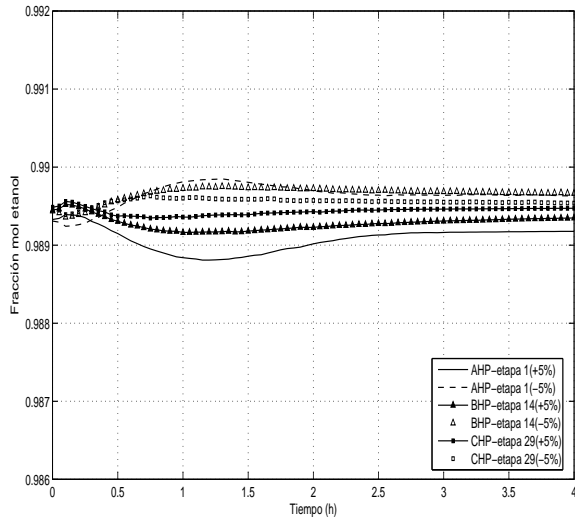
Figura 5.9: Respuesta al cambio de flujo de alimentación de los esquemas estudiados para elegir la etapa de control de temperatura en la sección HP.



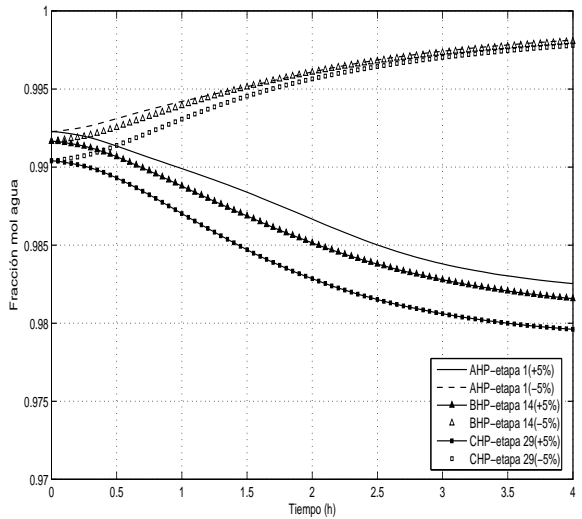
(a) Temperatura.



(b) Carga térmica rehervidor.

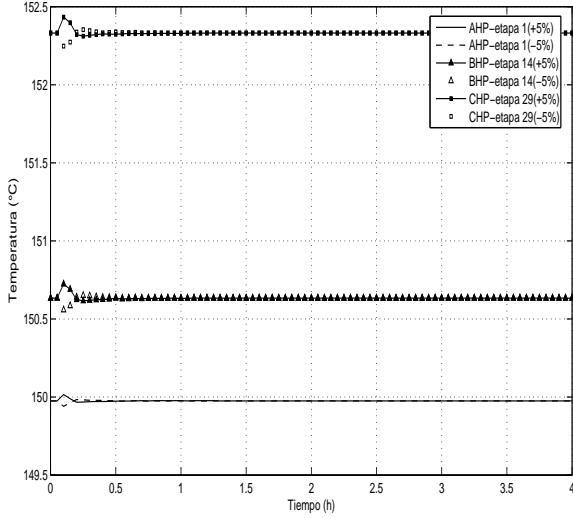


(c) Composición etanol P_2 .

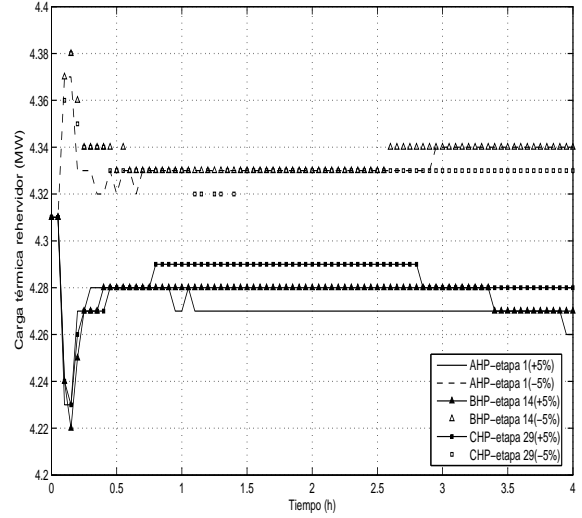


(d) Composición agua P_1 .

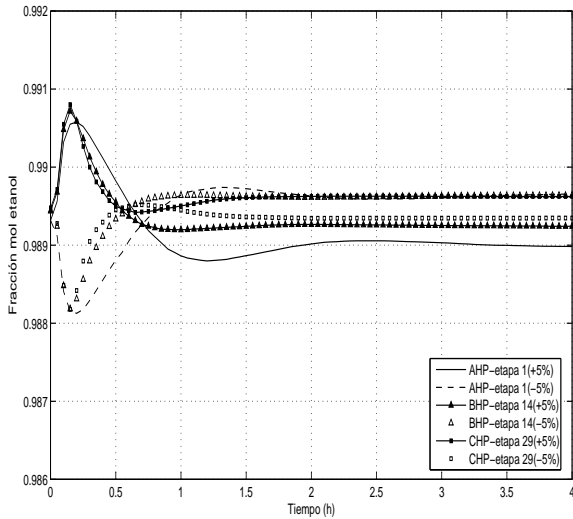
Figura 5.10: Respuesta al cambio de composición de alimentación de los esquemas estudiados para elegir la etapa de control de temperatura en la sección HP.



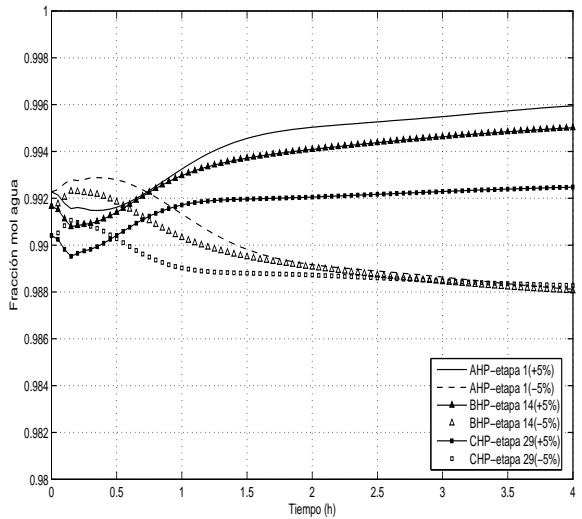
(a) Temperatura.



(b) Carga térmica rehervidor.

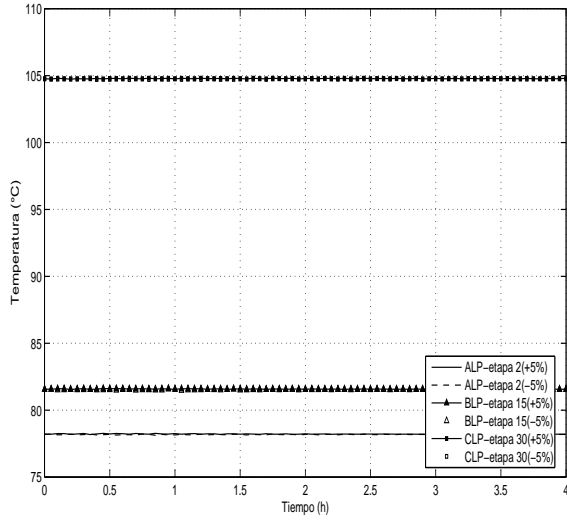


(c) Composición etanol P_2 .

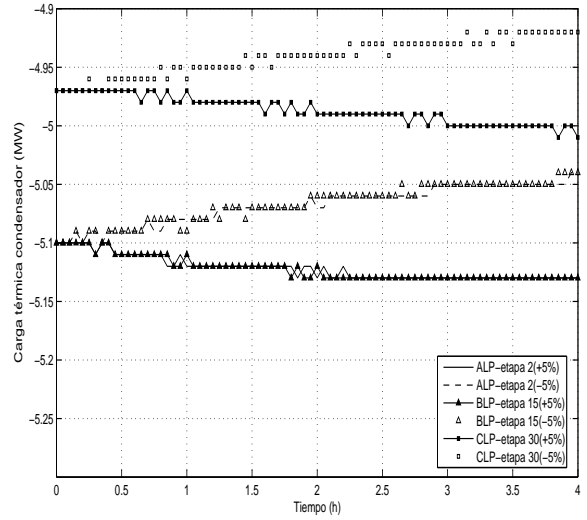


(d) Composición agua P_1 .

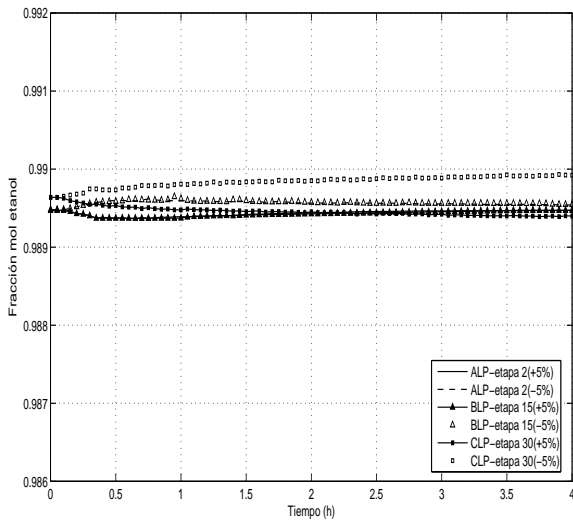
Figura 5.11: Respuesta al cambio de temperatura de alimentación de los esquemas estudiados para elegir la etapa de control de temperatura en la sección HP.



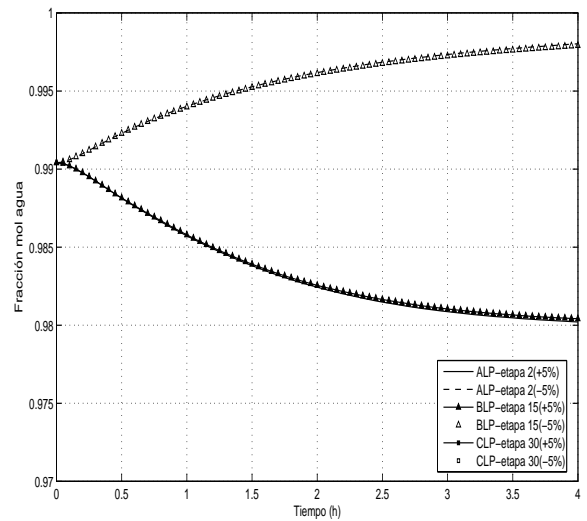
(a) Temperatura.



(b) Carga térmica condensador.

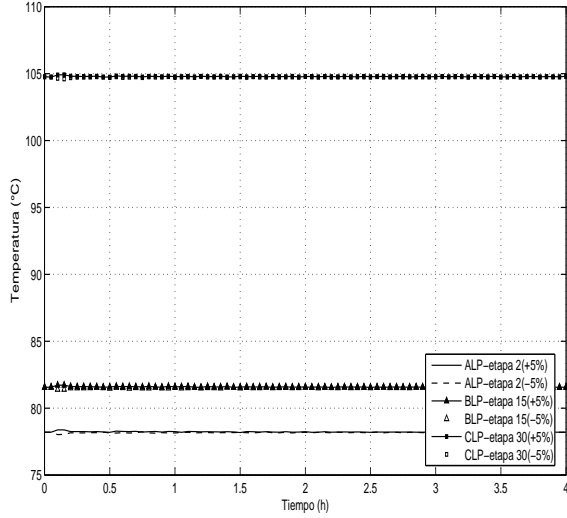


(c) Composición etanol P_2 .

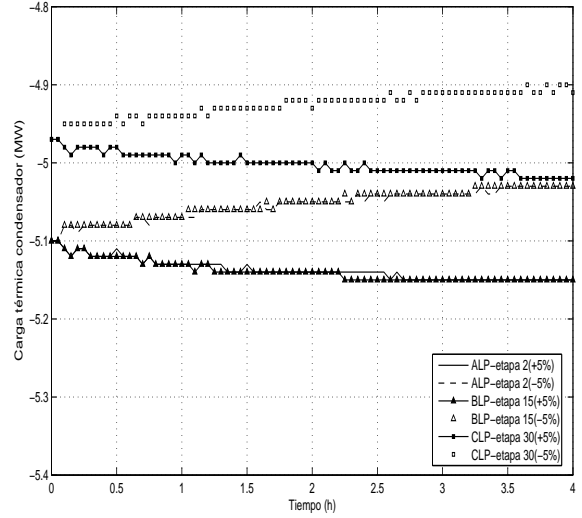


(d) Composición agua P_1 .

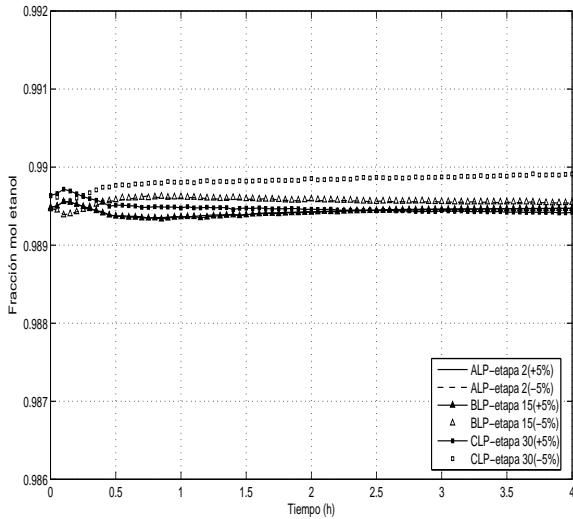
Figura 5.12: Respuesta al cambio de flujo de alimentación de los esquemas estudiados para elegir la etapa de control de temperatura en la sección LP.



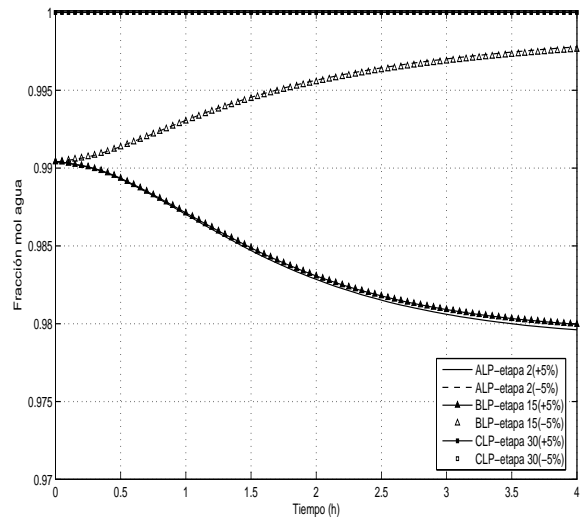
(a) Temperatura.



(b) Carga térmica condensador.

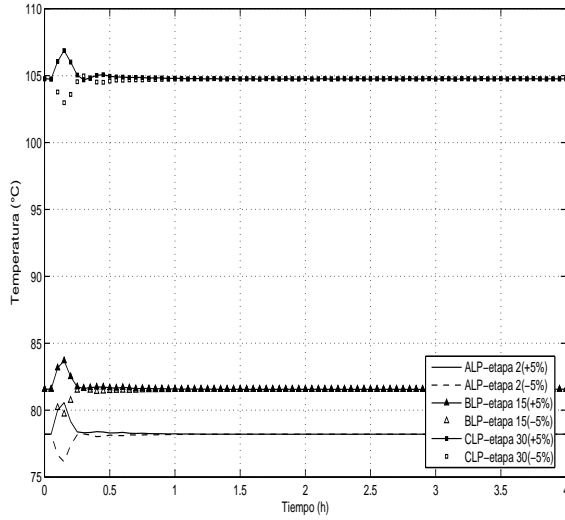


(c) Composición etanol P_2 .

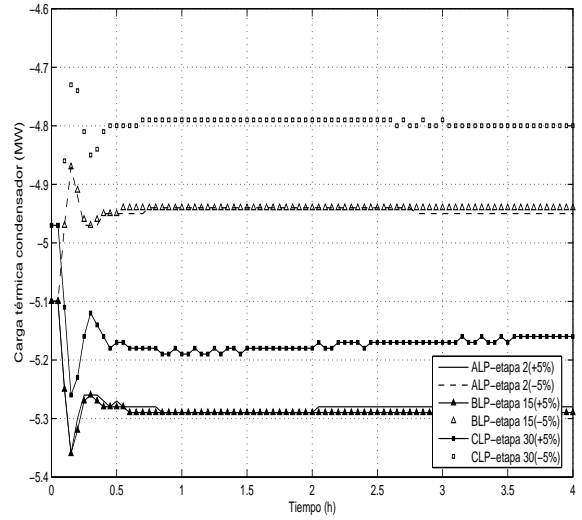


(d) Composición agua P_1 .

Figura 5.13: Respuesta al cambio de composición de alimentación de los esquemas estudiados para elegir la etapa de control de temperatura en la sección LP.



(a) Temperatura.



(b) Carga térmica condensador.

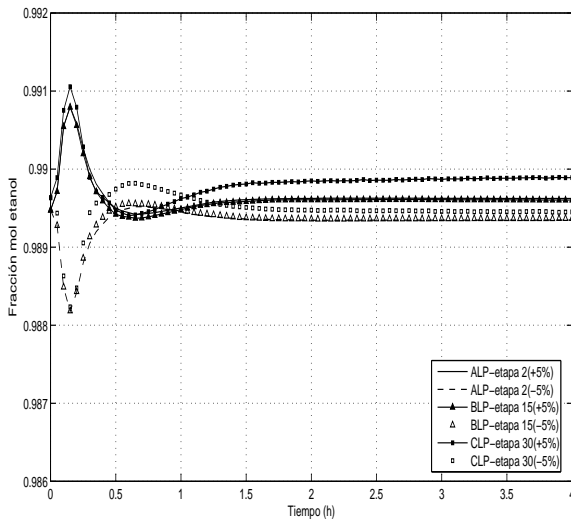
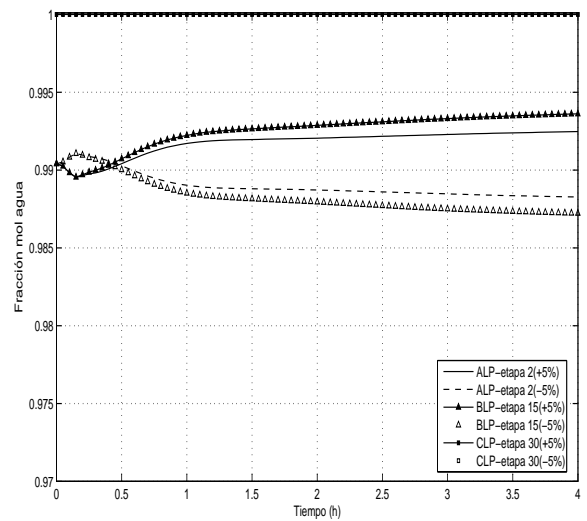
(c) Composición etanol P_2 .(d) Composición agua P_1 .

Figura 5.14: Respuesta al cambio de temperatura de alimentación de los esquemas estudiados para elegir la etapa de control de temperatura en la sección LP.

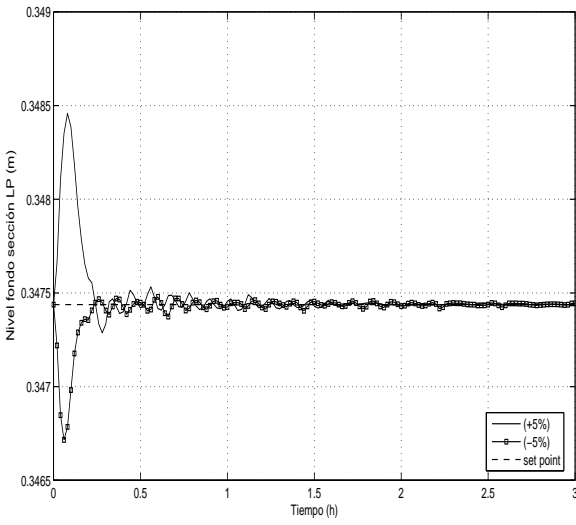
5.5.3. Desempeño de controladores básicos

A continuación se analiza la respuesta de los controladores básicos ante las perturbaciones, cuyos resultados se encuentran en las Figuras 5.15, 5.17 y 5.19. Para el caso del controlador del nivel del fondo de la sección LP se observa que el desempeño ante las tres perturbaciones es muy bueno, ya que los tiempos de respuesta son bajos, la variable manipulada siempre se mantiene o se logra estabilizar en su valor nominal y las respuestas de control son suaves. Estas mismas conclusiones se pueden observar para el caso del control del nivel del condensador y la presión en la sección HP. Para el caso del control del nivel del fondo de la sección HP el desempeño también es bueno, pero cuando entra al sistema la perturbación de +5% de la temperatura de alimentación la respuesta de control no es muy suave aunque sí físicamente realizable.

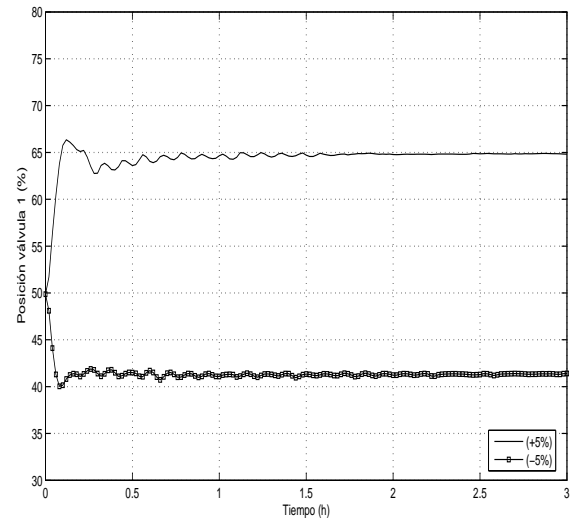
En las Figuras 5.16, 5.18 y 5.20 se presenta el comportamiento de los flujos de salida de la CDPD ante las perturbaciones estudiadas. Se observa que los controladores correspondientes tienen un buen desempeño, ya que los flujos se mantienen cerca de sus valores nominales cuando ingresan al proceso las perturbaciones de composición y temperatura de alimentación, mientras que para la perturbación de flujo de alimentación el tiempo en que dichos flujos alcanzan su nuevo valor es bajo y la respuesta de control es suave.

De forma general, la estrategia de control retroalimentado que se propone para cada uno de los lazos básicos tiene un buen desempeño ante las perturbaciones y cumple con los objetivos de control establecidos.

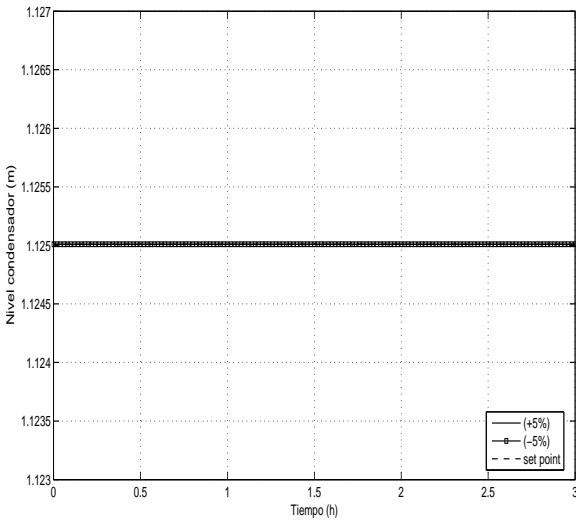
En la Figura 5.21 se muestra como el control retroalimentado para la CDPD es implementado en Aspen Dynamics.



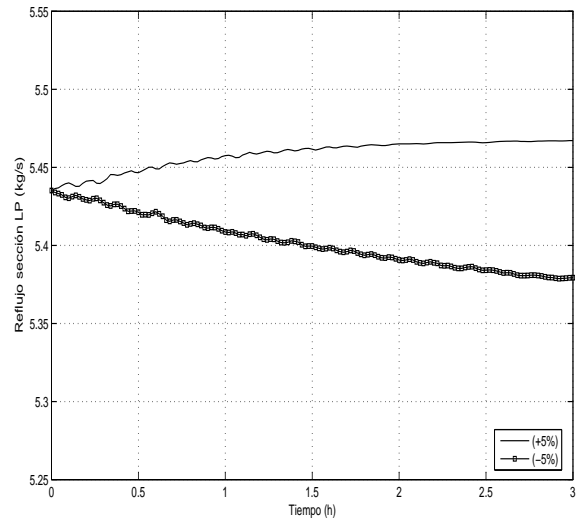
(a) Nivel fondo sección LP.



(b) Posición válvula 1.

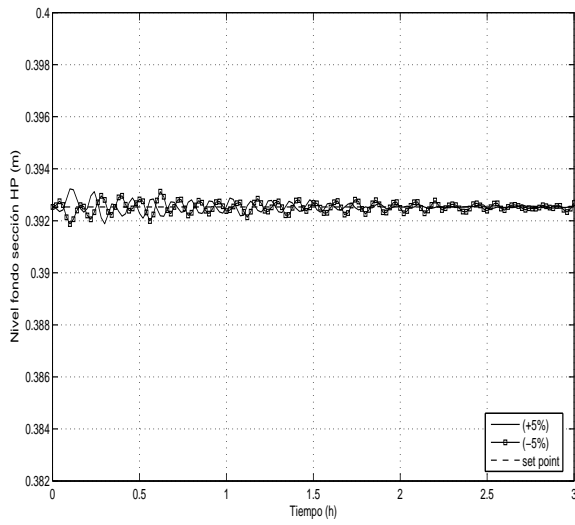


(c) Nivel condensador.

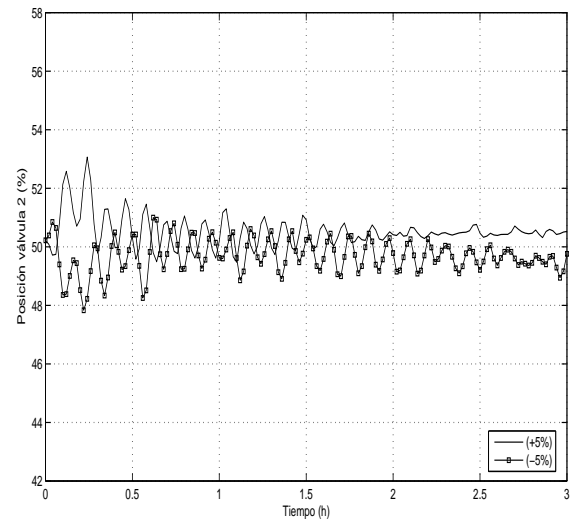


(d) Reflujo sección LP.

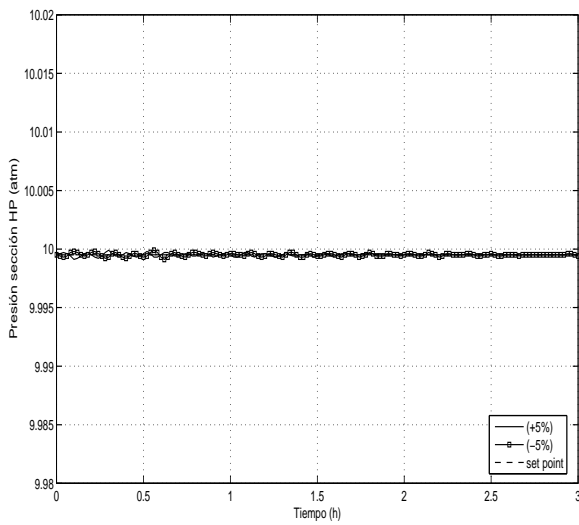
Figura 5.15: Respuesta de controladores básicos al cambio de flujo de alimentación.



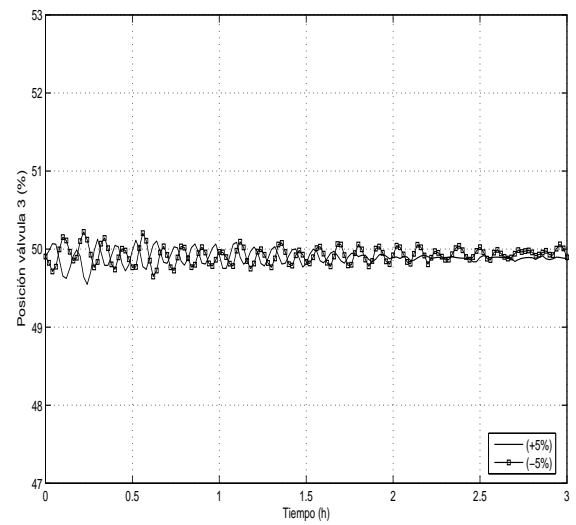
(e) Nivel fondo sección HP.



(f) Posición válvula 2.



(g) Presión sección HP.



(h) Posición válvula 3.

Figura 5.15: (cont.) Respuesta de controladores básicos al cambio de flujo de alimentación.

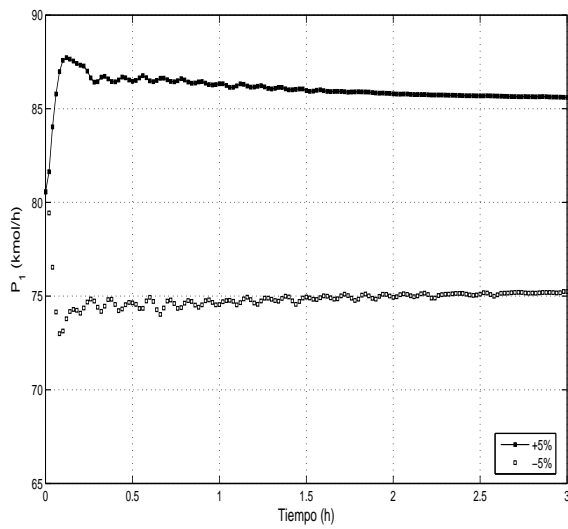
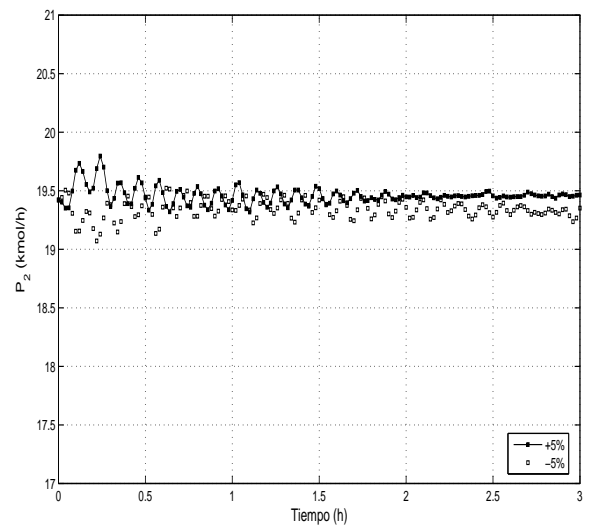
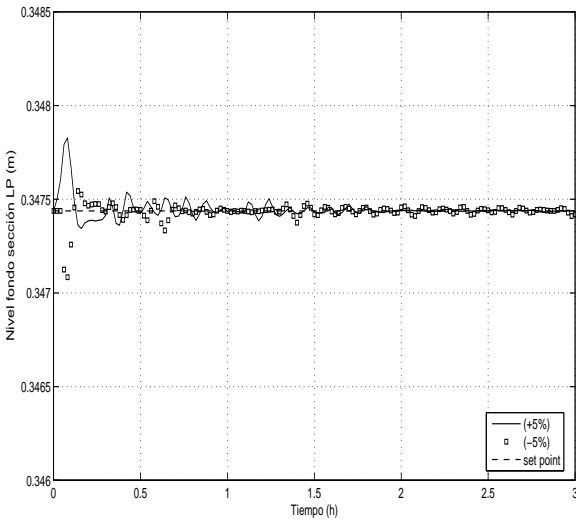
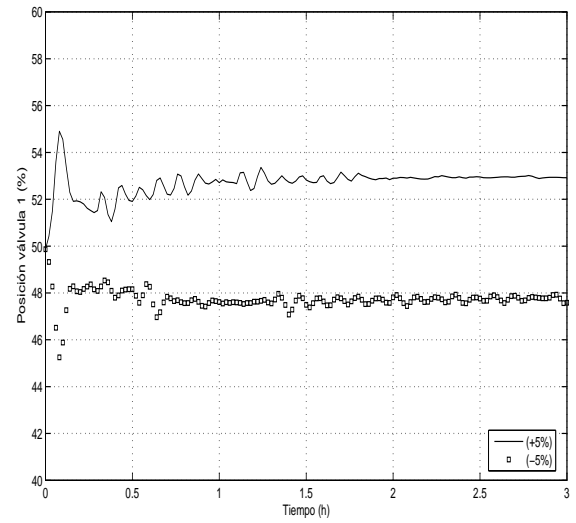
(a) P_1 .(b) P_2 .

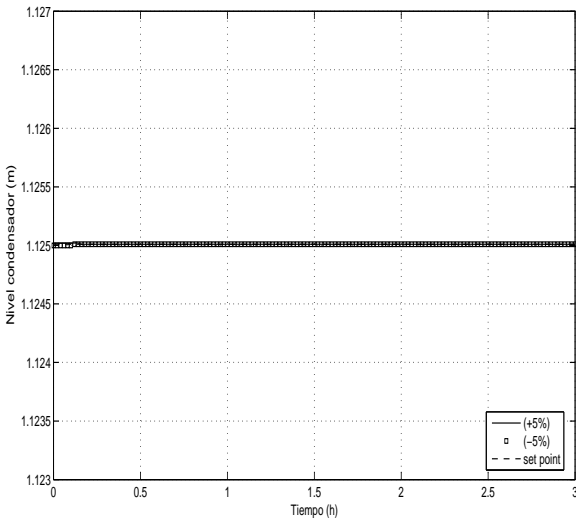
Figura 5.16: Respuesta de los flujos de salida al cambio de flujo de alimentación.



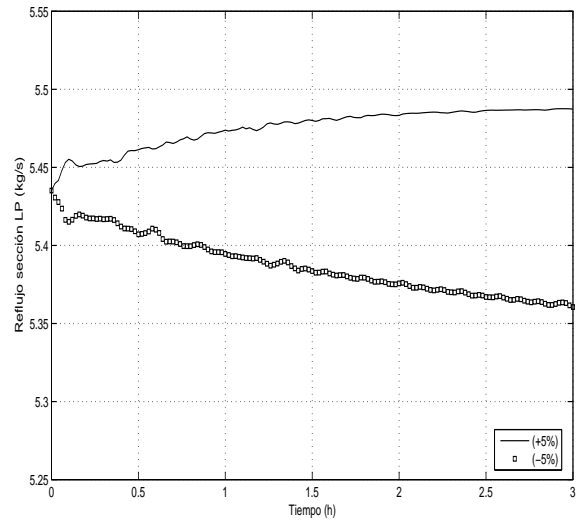
(a) Nivel fondo sección LP.



(b) Posición válvula 1.

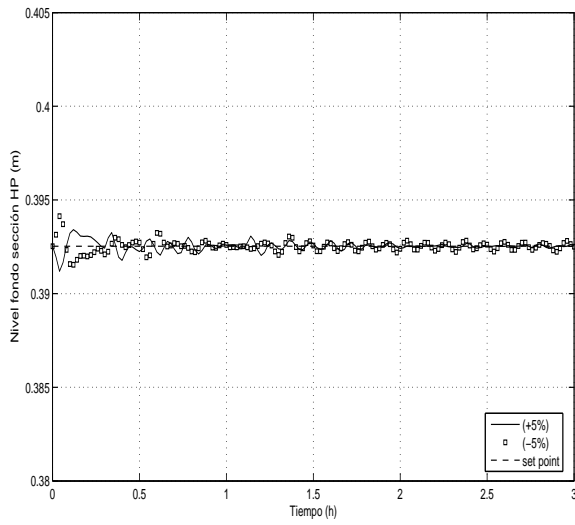


(c) Nivel condensador.

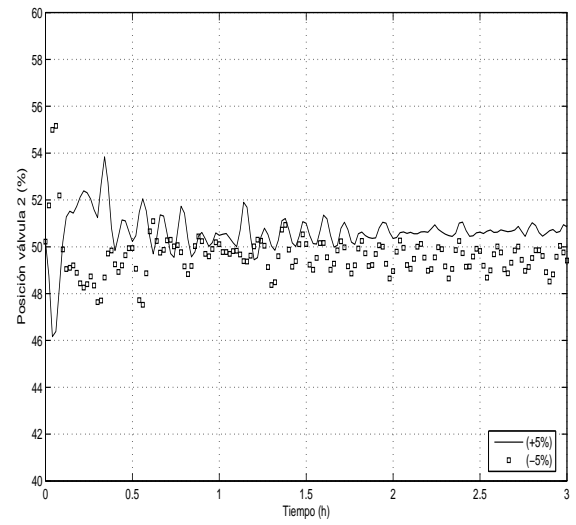


(d) Reflujo sección LP.

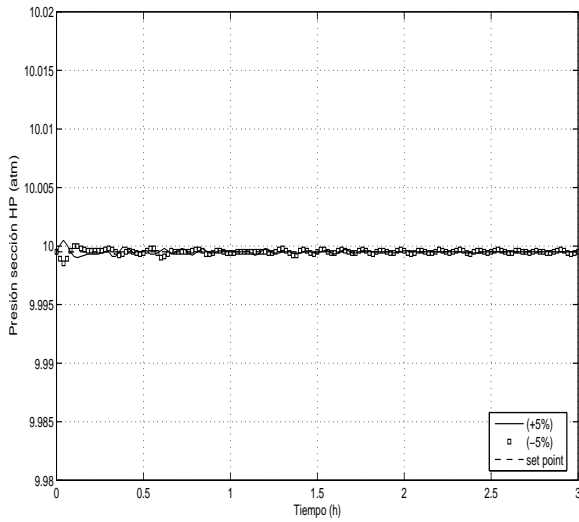
Figura 5.17: Respuesta de controladores básicos al cambio de composición de alimentación.



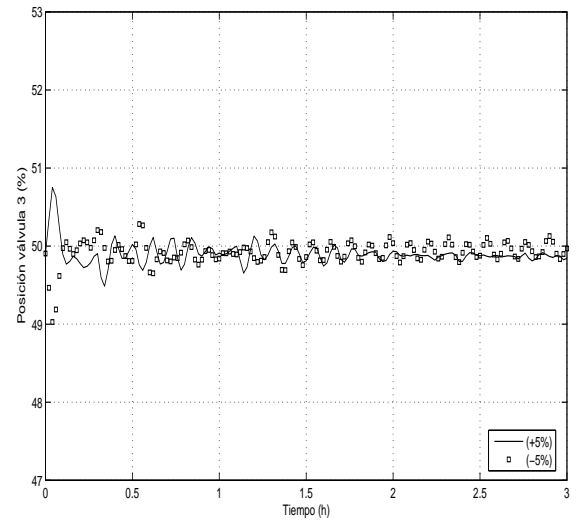
(e) Nivel fondo sección HP.



(f) Posición válvula 2.



(g) Presión sección HP.



(h) Posición válvula 3.

Figura 5.17: (cont.) Respuesta de controladores básicos al cambio de composición de alimentación.

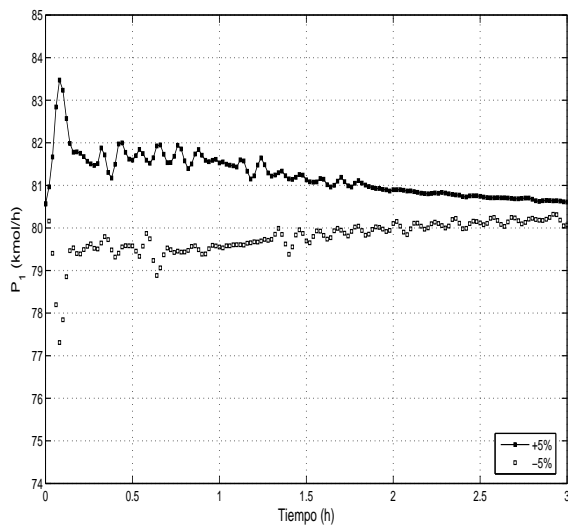
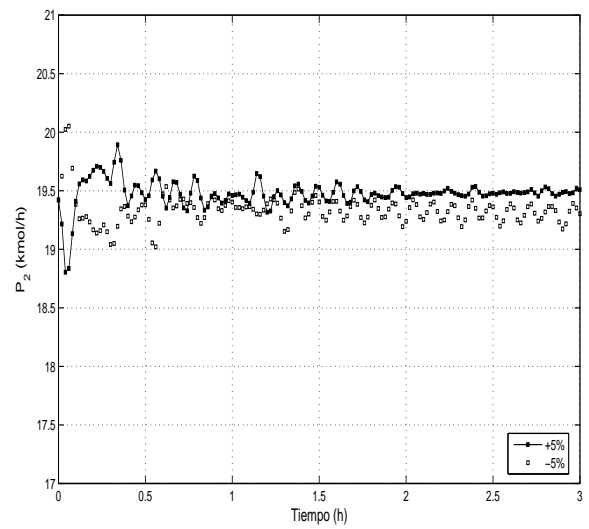
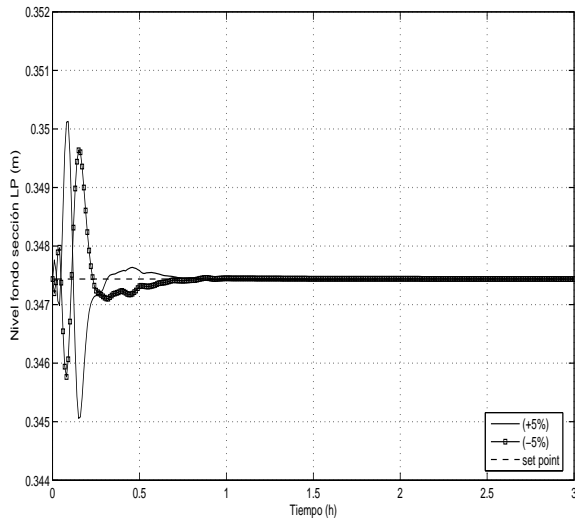
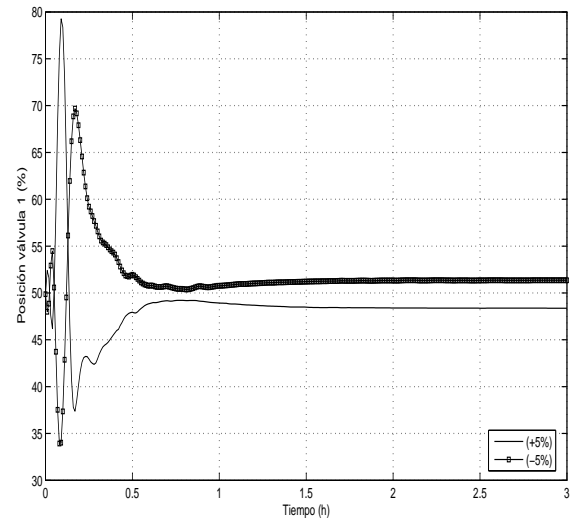
(a) P_1 .(b) P_2 .

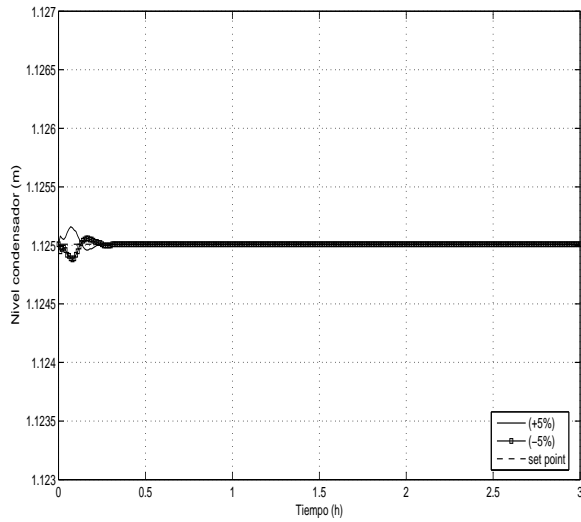
Figura 5.18: Respuesta de los flujos de salida al cambio de composición de alimentación.



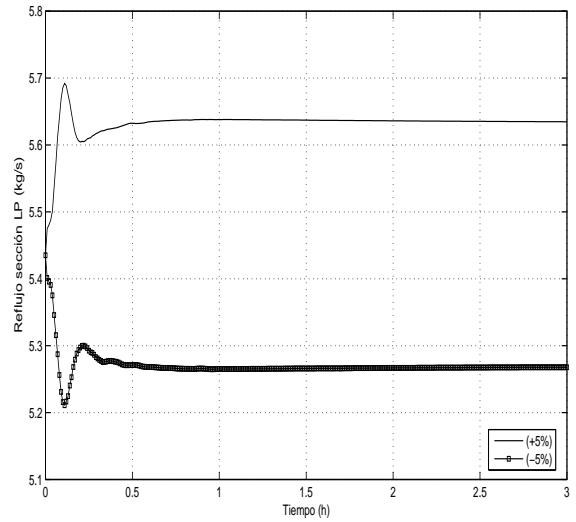
(a) Nivel fondo sección LP.



(b) Posición válvula 1.

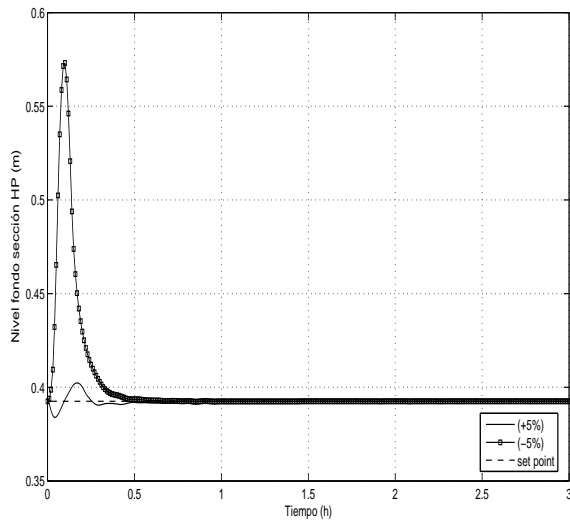


(c) Nivel condensador.

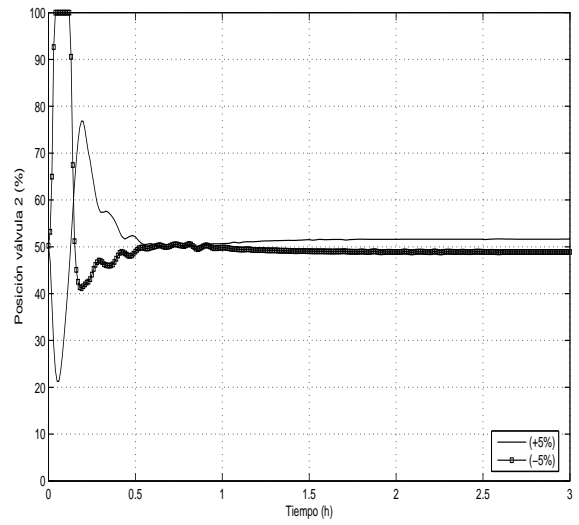


(d) Reflujo sección LP.

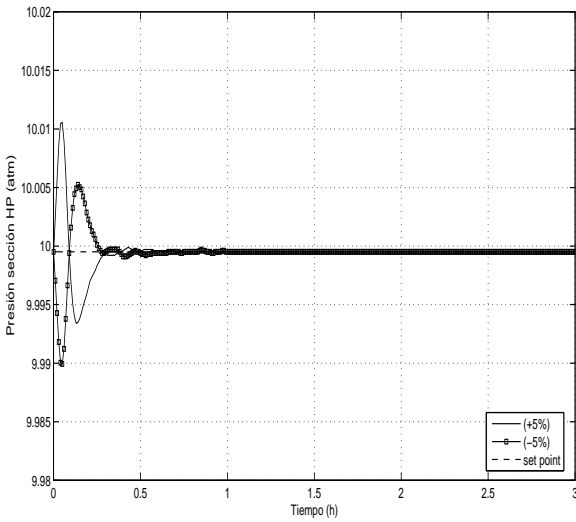
Figura 5.19: Respuesta de controladores básicos al cambio de temperatura de alimentación.



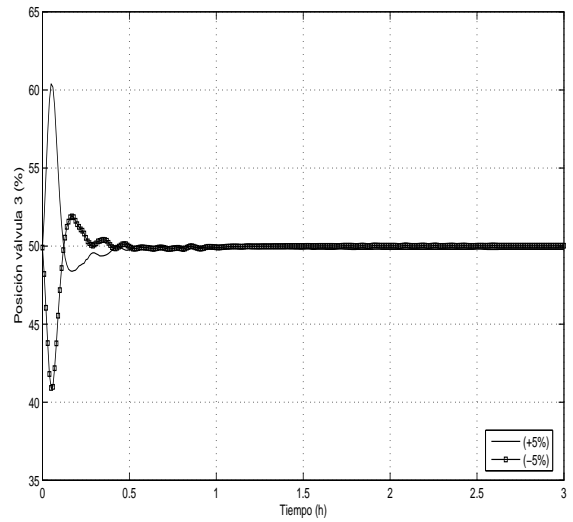
(e) Nivel fondo sección HP.



(f) Posición válvula 2.



(g) Presión sección HP.



(h) Posición válvula 3.

Figura 5.19: (cont.) Respuesta de controladores básicos al cambio de temperatura de alimentación.

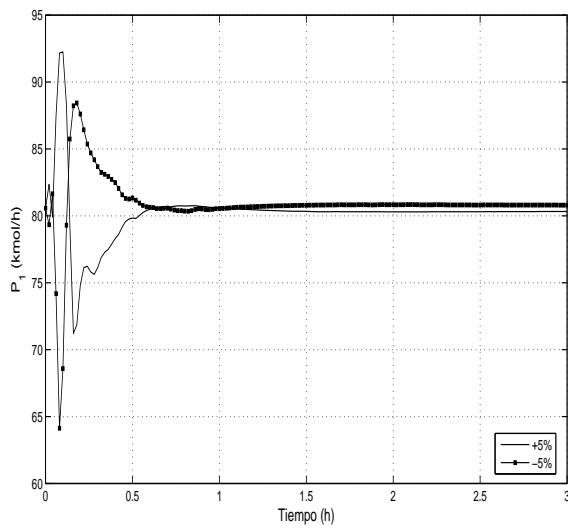
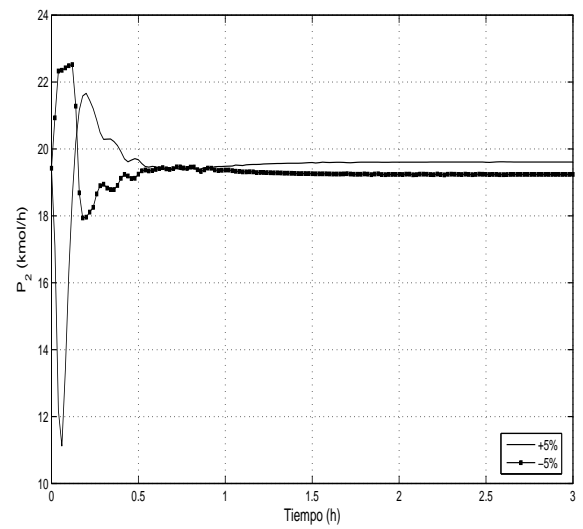
(a) P_1 .(b) P_2 .

Figura 5.20: Respuesta de los flujos de salida al cambio de temperatura de alimentación.

5.6. Control prealimentado puro y control retroalimentado-prealimentado simultáneos

Para mejorar el control en ambas secciones de la CDPD, se estudia la introducción de un controlador de tipo prealimentado puro y otro donde este actúe en forma simultánea con el control retroalimentado diseñando con anterioridad. En la Tabla 5.11 se presentan los esquemas de control estudiados en esta sección.

Esquema	Estrategia empleada para el control de temperatura en sección HP (Lazo 5)	Estrategia empleada para el control de temperatura en sección LP (Lazo 6)
AT	Prealimentado	Retroalimentado
BT	Retroalimentado-prealimentado simultáneos	Retroalimentado
CT	Retroalimentado	Prealimentado
DT	Retroalimentado	Retroalimentado-prealimentado simultáneos

Tabla 5.11: Esquemas estudiados donde se introduce la estrategia de control prealimentado y retroalimentado-prealimentado simultáneos en los lazos de temperatura.

En la Figura 5.22 se muestra el diagrama de bloques de la estrategia de control prealimentado. Esta estrategia de control tiene como principal ventaja que puede coadyuvar a remover el efecto de perturbaciones medidas sobre la respuesta del proceso a lazo cerrado.

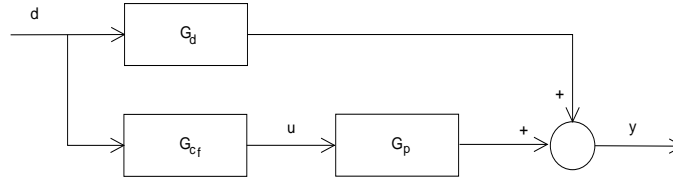


Figura 5.22: Diagrama de bloques para el esquema de control prealimentado. d = perturbación, G_d = función de transferencia de la perturbación, G_{cf} = función de transferencia del controlador prealimentado, u = variable de entrada al proceso, G_p = función de transferencia del proceso, y = variable de salida.

Para emplear el control prealimentado se tiene que determinar la función de transferencia del controlador de prealimentación G_{cf} , la cual tiene la siguiente expresión.

$$G_{cf} = - \left(\frac{G_d}{G_p} \right) \quad (5.4)$$

donde G_p es la función de transferencia del proceso a controlar y G_d es la función de transferencia de la perturbación. Por lo tanto se necesitan estas funciones de transferencia para establecer el control prealimentado. Esto puede significar una desventaja en procesos donde no se cuente con un modelo o sea complicado obtener de alguna manera una aproximación del mismo. Otra desventaja es el posible efecto que pueden tener los errores de modelamiento sobre el desempeño del controlador.

La G_p y la G_d se pueden aproximar por una función de transferencia de primer orden con retardo las cuales están dadas por:

$$G_p = \frac{k_p}{\tau_p s} e^{-\theta_p s} \quad (5.5)$$

$$G_d = \frac{k_d}{\tau_d s} e^{-\theta_d s} \quad (5.6)$$

entonces el controlador prealimentado estaría dado por:

$$G_{cf} = -\frac{k_d}{k_p} \left(\frac{\tau_p s + 1}{\tau_d s + 1} \right) e^{(\theta_p - \theta_d)s} \quad (5.7)$$

Este modelo del controlador prealimentado, implica que la diferencia entre el retardo asociado con la función de transferencia de la perturbación y la del proceso tiene que ser mayor a cero para que la implementación del controlador sea posible físicamente.

En la Figura 5.23 se presenta el diagrama de bloques de la estrategia de control retroalimentado-prealimentado de forma simultáneos. Esta esquema de control emplea las ventajas que ambas estrategias de control tienen en sus formas puras.

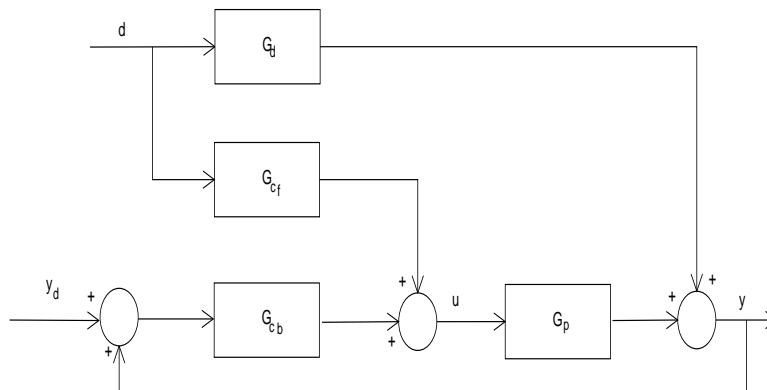


Figura 5.23: Diagrama de bloques para el esquema de control retroalimentado-prealimentado simultáneos.

5.6.1. Diseño del controlador prealimentado puro

Se eligió la temperatura de alimentación como la perturbación a medir para el diseño del controlador prealimentado de temperatura en la sección LP y HP. Para determinar las funciones de

transferencia correspondientes se realizaron las pruebas que a continuación se describen. Para la función de transferencia entre la carga térmica del rehervidor y la temperatura en la etapa 29 de la sección HP se hizo una perturbación de +1 % en la variable manipulada. Los datos para la función de transferencia entre la carga térmica del condensador y la temperatura de la etapa 2 de la sección LP, se obtuvieron de la respuesta de la temperatura a una perturbación de +1 % en la variable manipulada. Para las funciones entre la temperatura de alimentación y las temperaturas en ambas secciones, se hizo una prueba donde se cambio la temperatura de alimentación en +5 %. Los datos que se obtienen de esas pruebas de simulación, son ajustados a un modelo de primer orden con retardo por medio del siguiente procedimiento. En variables de desviación , la respuesta de un sistema de primer orden con retardo a una función escalón está dada por la siguiente ecuación:

$$y(s) = \frac{K e^{-\theta s} A}{\tau s + 1} \quad (5.8)$$

donde A es el tamaño de la función escalón, K es la ganancia del proceso, τ es la constante de tiempo y θ es el retardo. Si la ecuación 5.8 se transforma a dominio del tiempo resulta la siguiente expresión:

$$y(t) = y_{\infty} \left(1 - e^{-\left(\frac{t-\theta}{\tau}\right)} \right) \quad (5.9)$$

donde $y_{\infty} = AK$. Esta ecuación puede ser linealizada como:

$$\ln \left(1 - \frac{y}{y_{\infty}} \right) = -\frac{t}{\tau} + \frac{\theta}{\tau} \quad (5.10)$$

por lo que para encontrar los valores característicos de cada función de transferencia (K, τ, θ) , se seleccionaron dos puntos de la respuesta correspondiente a la perturbación. En la Tabla 7 se muestran los parámetros que se determinaron para cada una de las funciones de transferencia.

Función	K	$\tau(h)$	$\theta(h)$
G_{p5}	17.924	0.469	0.00639
G_{d5}	0.254	0.0250	0.108
G_{p6}	37.587	1.166	0.0111
G_{d6}	0.438	0.0224	0.106

Tabla 5.12: Parámetros de las funciones de transferencia para el control prealimentado. G_{p5} = función de transferencia del proceso correspondiente al lazo 5, G_{d5} = función de transferencia de la perturbación correspondiente al lazo 5, G_{p6} = función de transferencia del proceso correspondiente al lazo 6, G_{d6} = función de transferencia de la perturbación correspondiente al lazo 6.

Entonces las funciones de transferencia para los controladores 5 (temperatura sección HP) y 6 (temperatura sección LP) están dadas por:

$$G_{cf5} = -\frac{G_{d5}}{G_{p5}} = -0.0142 \left(\frac{0.469s + 1}{0.0250s + 1} \right) e^{-0.102} \quad (5.11)$$

$$G_{cf6} = -\frac{G_{d6}}{G_{p6}} = -0.0117 \left(\frac{1.166s + 1}{0.0224s + 1} \right) e^{-0.0942} \quad (5.12)$$

Los parámetros de estos modelos para el control prealimentado determinan que es posible implementarlos físicamente.

En las Figuras 5.24, 5.25, 5.26 y 5.27 se presenta la forma en la que se implementaron los esquemas AT, BT, CT y DT en Aspen Dynamics. Se considera un retardo de 2 minutos en el control prealimentado de temperatura cuando se implementa puro o combinado con el control retroalimentado.

5.7. Análisis de resultados

En la Figura 5.28 se presentan los resultados de la respuesta de la CDPD cuando ingresa al proceso una perturbación simultánea de flujo y temperatura de alimentación (+5 % y -5 %), cuando en el lazo 5 se implementa el control prealimentado puro (esquema AT), retroalimentado-prealimentado simultáneos (esquema BT) y retroalimentado puro. Se observa que los tres esquemas tienen una buena respuesta ante la perturbación y que todos permiten que el valor de la temperatura en la etapa 29 de la sección HP se mantenga en su valor nominal. Además en los tres casos el control indirecto de la composición de etanol en la corriente P_2 es satisfactorio.

En la Figura 5.29 se presentan los resultados de la respuesta de la CDPD cuando ingresa al proceso una perturbación simultánea de flujo y temperatura de alimentación (+5 % y -5 %), cuando en el lazo 6 se implementan los esquemas de control en estudio. Se observa que las estrategias de control retroalimentado puro y retroalimentado-prealimentado simultáneos tienen una buena respuesta ante la perturbación y además también tienen un control indirecto aceptable de la composición de agua en la corriente P_1 . Por el contrario, cuando se usa la estrategia de control prealimentado puro no hay un buen desempeño ante la perturbación y tampoco cumple en buena forma con el control indirecto de la composición de agua. Esto se debe a que las interacciones entre ambas secciones provocan que el calor intercambiado se modifique, y con él cambie también el flujo de vapor a través de la sección LP (ver Figura 5.30), lo que provoca un cambio de temperatura adicional que el controlador prealimentado no es capaz de corregir. A las causas de este bajo desempeño, se le puede adicionar el hecho de que el controlador prealimentado puro no es capaz de reaccionar ante perturbaciones no medibles.

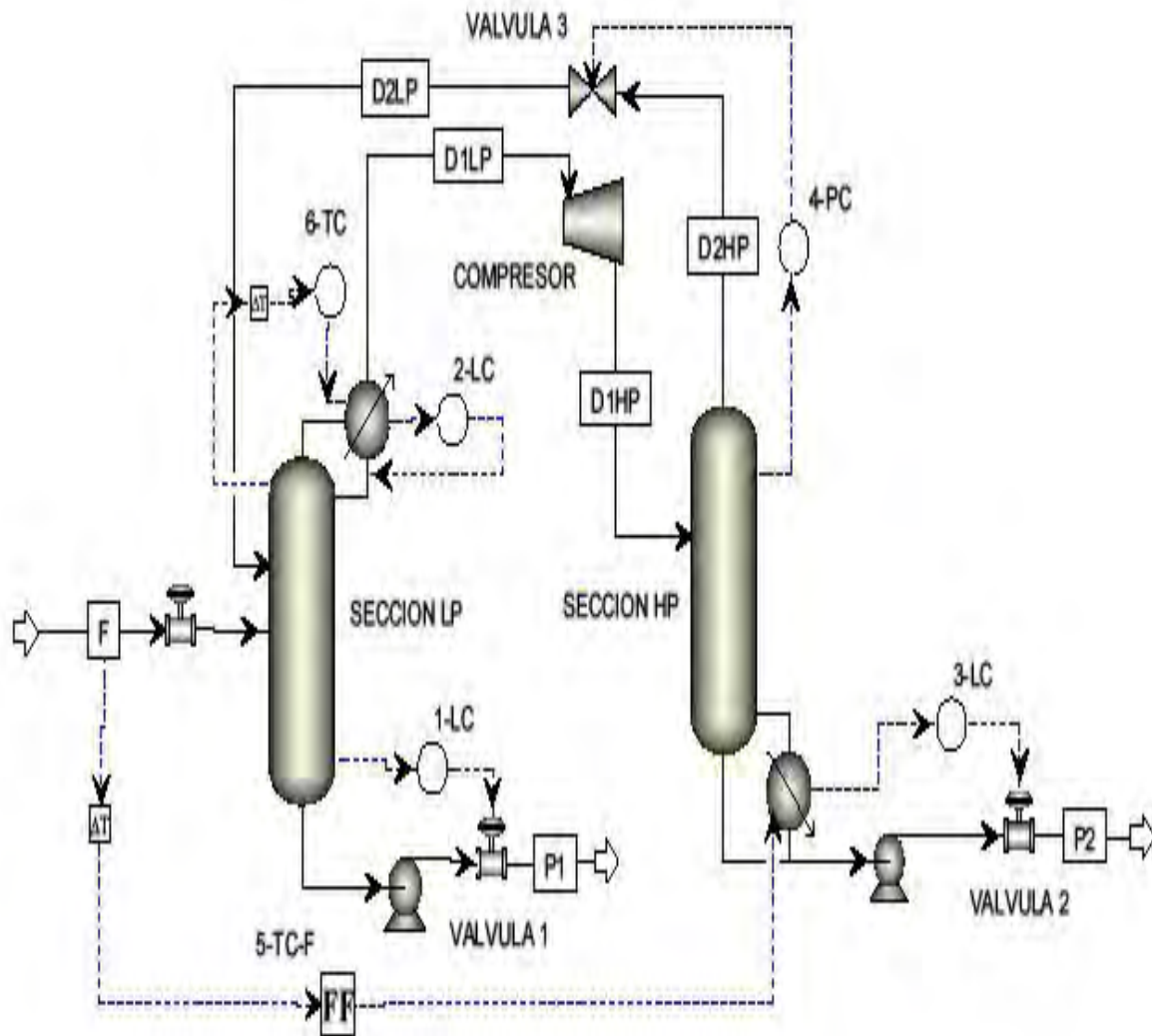


Figura 5.24: Esquema de control AT para la CDPD como se implementa en Aspen Dynamics.

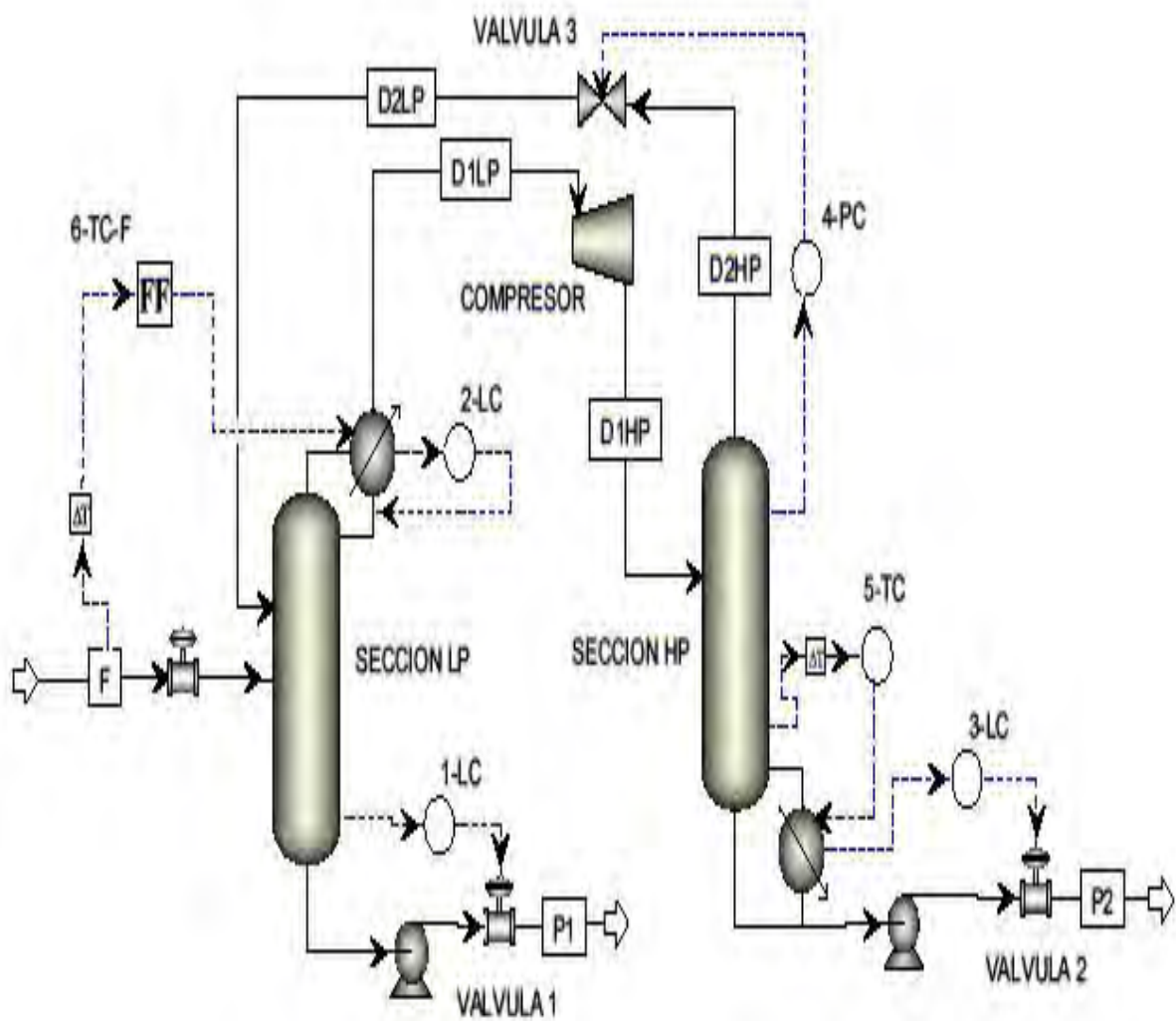


Figura 5.26: Esquema de control CT para la CDPD como se implementa en Aspen Dynamics.

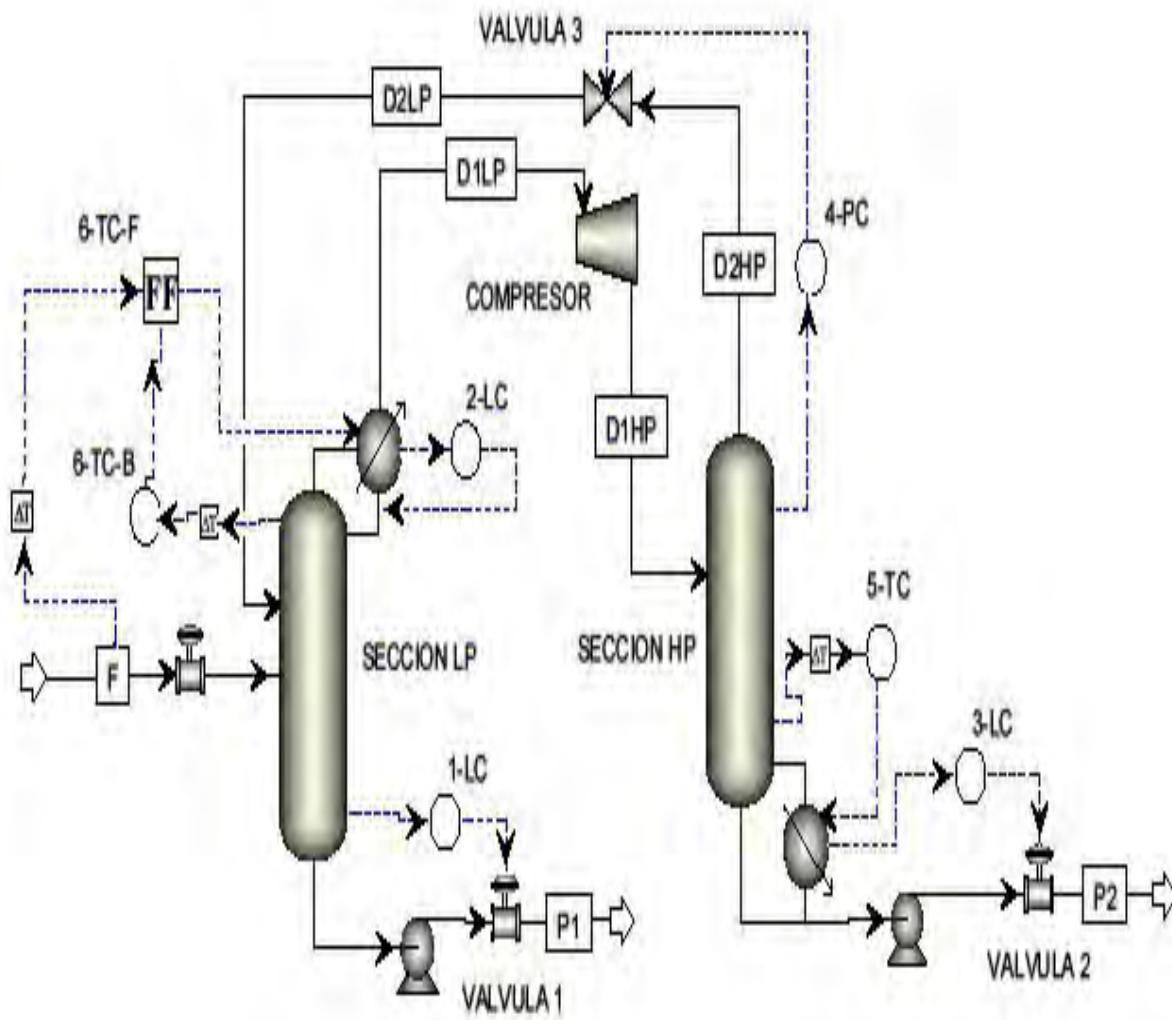
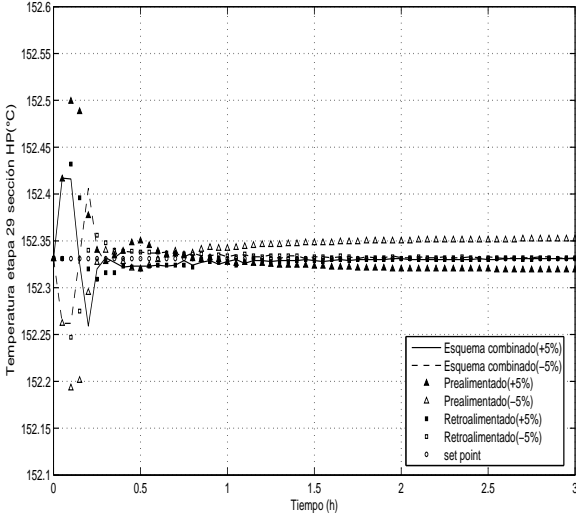
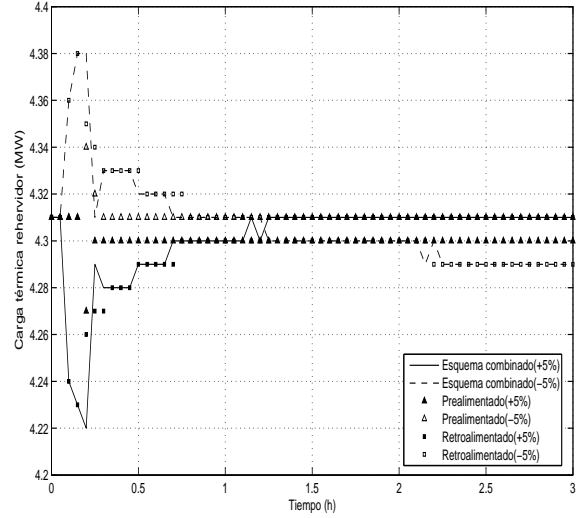


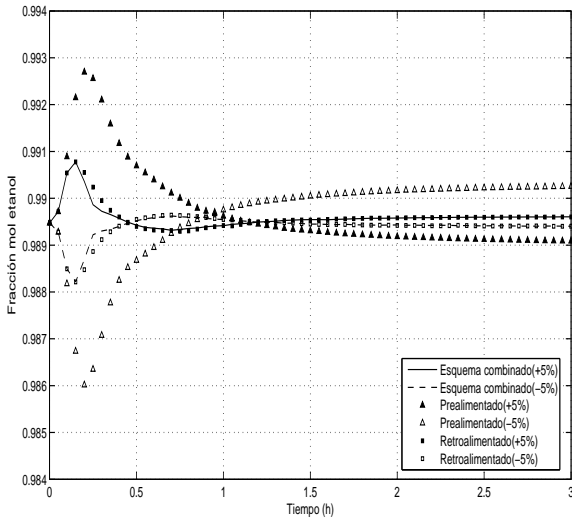
Figura 5.27: Esquema de control DT para la CDPD como se implementa en Aspen Dynamics.



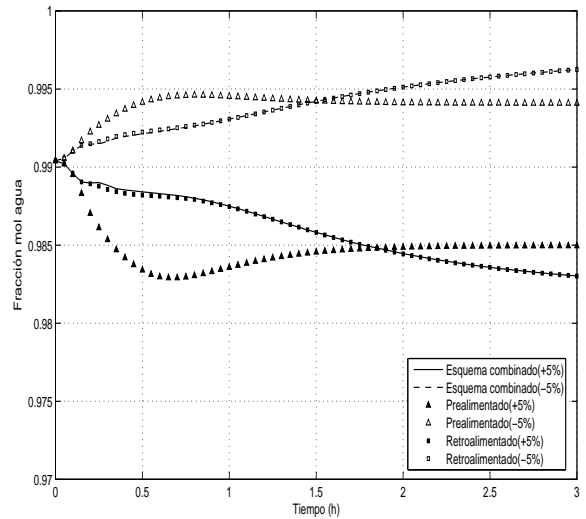
(a) Temperatura sección HP.



(b) Carga térmica rehervidor.

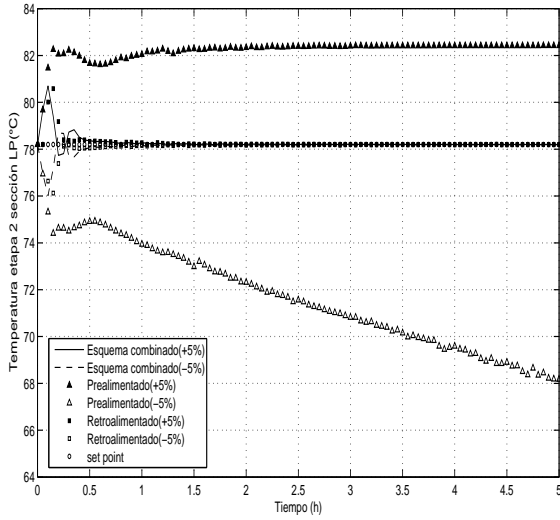


(c) Composición etanol P_2 .

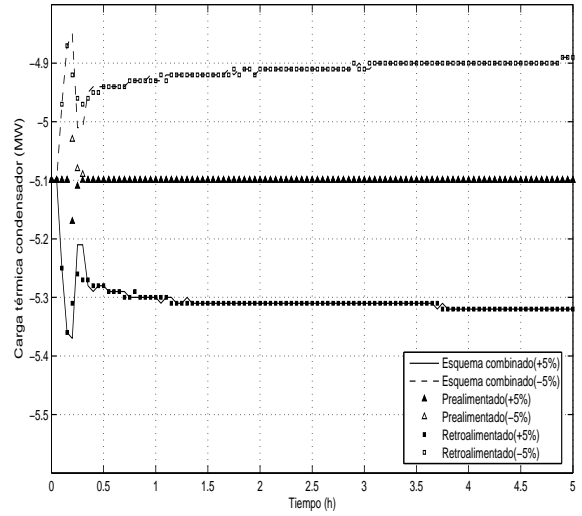


(d) Composición agua P_1 .

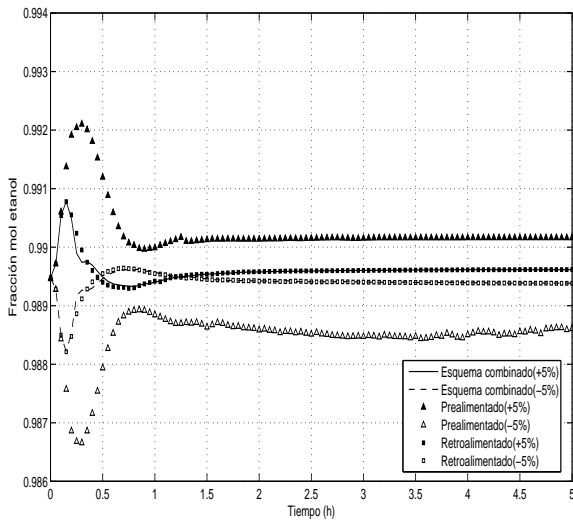
Figura 5.28: Diferentes esquemas para el control de la temperatura en la sección HP. Respuesta al cambio de composición y flujo simultáneos.



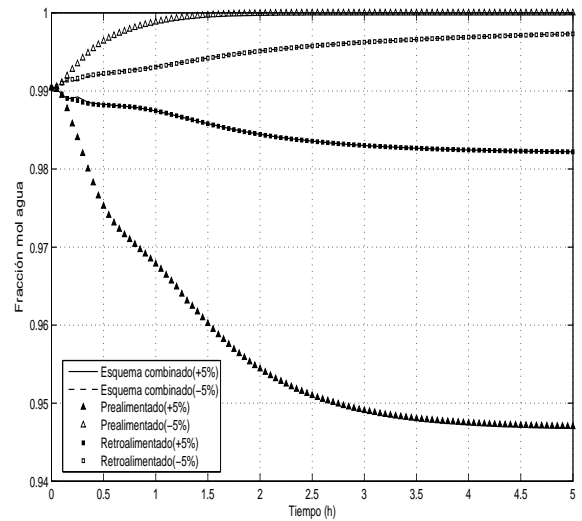
(a) Temperatura sección LP.



(b) Carga térmica condensador.

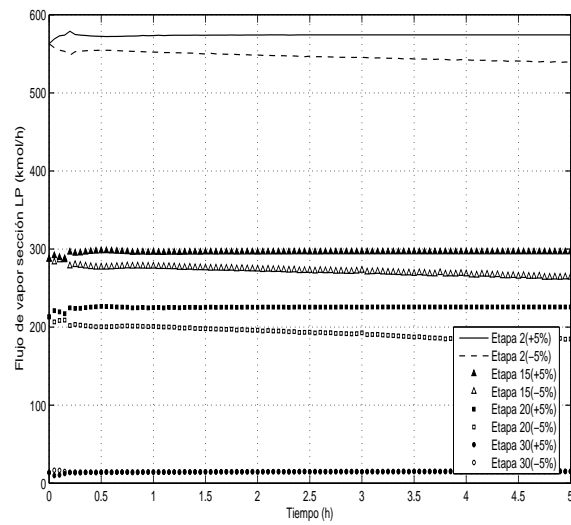


(c) Composición etanol P_2 .



(d) Composición agua P_1 .

Figura 5.29: Diferentes esquemas para el control de la temperatura en la sección LP. Respuesta al cambio de composición y flujo simultáneos.



(a)

Figura 5.30: Perfil flujo de vapor sección LP cuando se usa control prealimentado puro en lazo 6. Respuesta al cambio de composición y flujo simultáneos.

Conclusiones

- La purificación de la mezcla etanol-agua es posible utilizando una columna de destilación de pared dividida, proceso que es amigable con el ambiente al no requerir la adición de una sustancia orgánica volátil como agente de separación. Dichos agentes de separación tienden a ser un problema de salud pública debido a su toxicidad y a la facilidad con la que ingresan a la atmósfera.
- El etanol que se obtiene está dentro de las especificaciones de alta pureza para que pueda ser empleado como biocombustible.
- La integración térmica interna entre las secciones de la CDPD hace posible una reducción de los gastos energéticos para lograr la separación de la mezcla en estudio.
- A pesar de las grandes interacciones presentes en la CDPD, se logró establecer un esquema de control con un buen desempeño por medio de la estrategia de control retroalimentado, con controladores tipo proporcional-integral.
- La introducción de una estrategia de control prealimentado en los lazos de temperatura no mejora de manera importante el desempeño del esquema de control, por lo que la estrategia de control retroalimentado es suficiente para un buen control del proceso.

Trabajo futuro

- Un análisis entre la inversión y costos de operación, además del uso de métodos de optimización son herramientas que podrían proveer un diseño totalmente sustentable de la CDPD para la purificación de bioetanol.

Nomenclatura

$CDPD$	Columna de destilación de pared dividida
DPV	Destilación de presión variable
f	Flujo de alimentación fase líquida (kmol/s)
F	Flujo de alimentación fase vapor (kmol/s)
h	Entalpía de líquido (J/kmol)
H	Entalpía de vapor (J/kmol)
K	Constante de equilibrio líquido-vapor
L	Flujo de líquido (kmol/s)
M	Número de mol (kmol)
N	Número de etapas
N_c	Número de componentes
P	Presión (kPa)
P^{sat}	Presión de saturación (kPa)
Q	Flujo de calor (kW)
RDA	Relación destilado-alimentación

T	Temperatura (K)
UA	Velocidad de transferencia de calor (W/°C)
V	Flujo de vapor (kmol/s)
x	Fracción mol de componente en fase líquida
y	Fracción mol de componente en fase vapor

Subíndices/superíndices

f	Alimentación fase líquida
F	Alimentación fase vapor
HP	Sección de alta presión
i	Componente
k	Etapas
LP	Sección de baja presión
s	Sección de la columna

Letras griegas

γ	Coefficiente de actividad
ϕ	Coefficiente de fugacidad

Bibliografía

Dortmund Data Bank. <http://www.ddbst.de>.

Balat, M., Balat, H., & Oz, C. 2008. Progress in bioethanol processing. *Progress in Energy and Combustion Science*, **34**, 551–573.

Barr-David, F., & Dodge, B.F. 1959. Vapor liquid equilibrium at high pressures. The systems ethanol-water and 2-propanol-water. *J. Chem. Eng. Data*, **4**, 107–121.

Black, C. 1980. Distillation modeling of ethanol recovery and dehydration processes for ethanol and gasohol. *Chem. Eng. Prog.*, **76**, 78–85.

BP. 2009. *Statistical Review of World Energy*. <http://www.bp.com>.

Campbell, J.C., Wigal, K.R. Van Brunt, V., & Kline, R.S. 2008. Comparasion of energy usage for the vacuum separation of acid acetic/acid anhydride using an internal heat integrated distillation column (HIDiC). *Sep. Sci. Technol.*, **43**, 2269–2297.

Cardona, C.A., & Sánchez, O.J. 2007. Fuel ethanol production: Process design trends and integration oportunities. *Bioresource Technology*, **98**, 2415–2457.

Collura, M.A. 1985. *Energy-saving distillation in fuel ethanol production: Steady state and dynamic analysis*. Ph.D. thesis, Lehigh University.

- Demirbas, A. 2009. Biofuels securing the planet's future energy needs. *Energy Conversion and Management*, **50**, 2239–2249.
- Demirbas, A., & Demirbas, I. 2007. Importance of rural bioenergy for developing countries. *Energy Conversion and Management*, **48**, 2386–2398.
- Dias, M.O.S., Ensinas, A.V., Nebra, S.A., Maciel, R., Rossell, C.E.V., & Wolf, M.R. 2009. Production of bioethanol and other bio-based materials from sugarcane bagasse: Integration to conventional bioethanol production process. *Chem. Eng. Res. Des.*, **87**, 1206–1216.
- DOE, U.S.A. 2008. *Handbook for Handling, Storing, and Dispensing E85*. <http://www.afdc.energy.gov/afdc/pdfs/41853.pdf>.
- DOE, U.S.A. 2009. *World Fuel Ethanol Production, 2008*. <http://www.afdc.energy.gov/afdc/ethanol/production.html>.
- Escobar, J.C., Lora, E.S., Venturini, O.J., Yáñez, E.E., Castillo, E.F., & Almazan, O. 2009. Biofuels: Environment, technology and food security. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **13**, 1275–1287.
- Forster, P., Ramaswamy, V., Artaxo, P., Berntsen, T., Betts, R., Fahey, D.W., Haywood, J., Lean, J., Lowe, D.C., Myhre, G., Nganga, J., Prinn, R., Raga, G., Schulz, M., & Van Dorland, R. 2007. *Changes in Atmospheric Constituents and in Radiative Forcing*. In *Climate Change 2007: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA. <http://www.ipcc.ch>.
- Frank, T.C. 1997. Break azeotropes with pressure-sensitive distillation. *Chem. Eng. Prog.*, **93**, 52–63.

- Gadalla, M., Olujic, Z., Jiménez, L., & Guillén-Gosálbes, G. 2007. A design method for internal heat integrated distillation columns (iHIDiCs). *17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*.
- Gani, R., Ruiz, C.A., & Cameron, I.T. 1986. A generalized model for distillation columns-I. *Comput. Chem. Eng.*, **10**, 181–198.
- Ge, Y., Zhang, L., Yuan, X., Geng, W., & Ji, J. 2008. Selection of ionic liquids as entrainers for separation of (water+ethanol). *J. Chem. Thermodynamics*, **40**, 1248–1252.
- Gmehling, J., & Bolts, R. 1996. Azeotropic data for binary and ternary systems at moderate pressures. *J. Chem. Eng. Data*, **41**, 202–209.
- Gmehling, J., Onken, U., Arlt, W., Grenzheuser, P., Weidlich, U., Kolbe, B., & Rarey, J. 1988. *Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection*. DECHEMA.
- Griswold, J., Haney, J.D., & Klein, A. 1943. Ethanol-water system. Vapor-liquid properties at high pressures. *Ind. Eng. Chem.*, **35**, 701–704.
- Hang, C.C., Astrom, K.J., & Wang, Q.G. 2002. Relay feedback auto-tuning of process controllers—a tutorial review. *J. Process Control*, **12**, 143–162.
- Huang, K., Nakaiwa, M., Akita, T., Owa, M., Aso, K., & Takamatsu, T. 1996a. Dynamics of ideal heat integrated distillation columns. *J. Chem. Eng. Japan*, **29**, 656–661.
- Huang, K., Nakaiwa, M., Akita, T., Aso, K., & Takamatsu, T. 1996b. Numerical consideration on dynamic modeling and control of ideal heat integrated distillation columns. *J. Chem. Eng. Japan*, **29**, 344–351.
- Huang, K., Zhan, D., Nakaiwa, M., Nakane, T., & Takamatsu, T. 1999. Modeling and analysis of internal heat integrated distillation column. *Chinese J. of Chem. Eng.*, **7**, 67–76.

- Huang, K., Shan, L., Zhu, Q., & Qian, J. 2008. Adding rectifying/stripping section type heat integration to a pressure-swing distillation (PSD) process. *Applied Thermal Engineering*, **28**, 923–932.
- IEA. 2009. *Energy Balances of Non-OECD Countries*. <http://www.iea.org>.
- Jork, C., Kavarnou, A., & Arlt, W. 2004. Separation of azeotropic mixtures using hyperbranched polymers or ionic liquids. *AIChE J.*, **50**, 2439–2454.
- Keller, G.E. 1995. Adsorption: building upon a solid foundation. *Chem. Eng. Prog.*, **91**, 56–67.
- Kister, H.Z. 2002. Can we believe the simulation results? *Chem. Eng. Prog.*, **98**, 52–58.
- Knapp, J.P., & Doherty, M.F. 1992. A new pressure-swing distillation process for separating homogeneous azeotropic mixtures. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **31**, 346–357.
- Lin, Y.D., Huang, H.P., & Yu, C.C. 2006. Relay feedback tests for highly nonlinear processes: reactive distillation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **45**, 4081–4092.
- Liu, X., & Qian, J. 2000. Modeling, control and optimization of ideal internal thermally coupled distillation columns. *Chem. Eng. Technol.*, **23**, 235–241.
- Luyben, M.L., & Luyben, W.L. 1997. *Essentials of Process Control*. McGraw-Hill.
- Luyben, W.L. 2006a. Control of a multi-unit heterogeneous azeotropic distillation process. *AIChE J.*, **52**, 623–637.
- Luyben, W.L. 2006b. *Distillation Design and Control Using Aspen Simulation*. Wiley-Interscience.
- Luyben, W.L. 2008. Design and control of a fully heat-integrated pressure-swing azeotropic distillation system. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **47**, 2681–2695.

- Luyben, W.L. 2009. Control of a column/pervaporation process for separating ethanol/water azeotrope. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **48**, 3484–3495.
- Mah, R.S.H., Nicholas, J.J., & Wodnik, R.B. 1977. Distillation with secondary reflux and vaporization: A comparative evaluation. *AIChE J.*, **23**, 651–658.
- Montoya, M.I., Quintero, J.A., Sánchez, O.J., & Cardona, C.A. 2005. Evaluación económica del proceso de obtención de alcohol carburante a partir de caña de azúcar y maíz. *Universidad EAFIT*, **41**, 76–87.
- Mosier, N., Wyman, C., Dale, B., Elander, R., Lee, Y.Y., Holtzapple, M., & Ladisch, M. 2005. Features of promising technologies for pretreatment of lignocellulosic biomass. *Biosource Technology*, **96**, 673–686.
- Naito, K., Nakaiwa, M., Huang, K., Endo, K., Nakanishi, T., Nakamura, T. Noda, H., & Takamatsu, T. 2000. Operation of a bench-scale ideal heat integrated distillation column (HIDiC): an experimental study. *Comput. Chem. Eng.*, **24**, 495–499.
- Nakaiwa, M., Huang, K., Endo, A., Ohmori, T., Akiya, T., & Takamatsu, T. 2003. Internally heat-integrated distillation columns: A review. *Trans IChemE*, **81**, 162–177.
- Ogunnaike, A.B., & Ray, W.H. 1994. *Process, Dynamics, Modeling and Control*. Oxford University Press.
- OPEC. 2009. *World oil outlook 2009*. <http://www.opec.org>.
- Orbey, H., & Sandler, S.I. 1998. *Modeling Vapor-Liquid Equilibria. Cubic Equations of State and Their Mixing Rules*. Cambridge University Press.
- Pachauri, R.K., & Reisinger, A. 2007. *Cambio climático 2007: Informe de síntesis. Contribución de los Grupos de trabajo I, II y III al Cuarto Informe de evaluación del Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático*. IPCC. <http://www.ipcc.ch>.

- RFA. 2008. *Changing the Climate. Ethanol Industry Outlook 2008*. <http://www.ethanolrfa.org>.
- Simo, M., Brown, C., & Hlavacek, V. 2008. Simulation of pressure swing adsorption in fuel ethanol production process. *Comput. Chem. Eng.*, **32**, 1635–1649.
- Skogestad, S. 2007. The dos and don'ts of distillation column control. *Trans IChemE*, **81(A1)**, 13–23.
- Treybal, R.E. 1988. *Operaciones de Transferencia de Masa*. McGraw-Hill.
- Tsuyumoto, M., Teramoto, A., & Meares, P. 1997. Dehydration of ethanol on a pilot-plant scale, using a new type of fiber hollow-fiber membrane. *J. Membr. Sci.*, **133**, 83–94.
- Uyazán, A.M., Gil, I.D., Aguilar, J., & Rodríguez, A. Caicedo, L.M. 2006. Producción de alcohol carburante por destilación extractiva: simulación del proceso con glicerol. *Ingeniería e Investigación*, **26**, 45–50.