

SIMULACIÓN DINÁMICA Y CONTROL DIFUSO DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN CONTINUA

A. Arbildo López, J. Lombira Echevarría, I. Osorio López*

Unidad de Post Grado, Facultad de Química e Ingeniería Química
Universidad Nacional Mayor de San Marcos

Resumen: El objetivo de nuestra investigación está en el estudio de la simulación dinámica y control difuso de una columna de destilación continua multicomponente. En este trabajo, se describe el modelo matemático de la columna de destilación y el programa elaborado para la simulación. También, se describe la estructura e implementación del controlador difuso. Finalmente, los resultados obtenidos son comparados con los reportados en la literatura científica para diferentes mezclas.

Palabras clave: Simulación, Control, Difuso, Destilación, Columna.

Abstract: The objective of this work is the study of the dynamic simulation and fuzzy control of a multicomponent continuous distillation column. In this work, the mathematical model of the distillation column and the computing program for the simulation are described. Also, the structure and implementation of the fuzzy controller are presented. Finally, the results obtained using this program are compared with those reported in the scientific literature for different mixtures.

Key words: Simulation, Control, Fuzzy, Distillation, Column.

INTRODUCCIÓN

La destilación es un proceso que permite fraccionar los distintos componentes de una mezcla en función de las diferentes volatilidades relativas de los mismos. Las composiciones de los productos de cabeza, de fondo, así como los flujos de las extracciones que se realicen a lo largo de la columna, deben cumplir con ciertas especificaciones dadas por el propio proceso. Por lo tanto, resulta sumamente importante realizar un adecuado control automático de las columnas de destilación involucradas, para lograr alcanzar las especificaciones de los referidos productos dentro de los valores de composición aceptables.

En muchos procesos industriales, los métodos convencionales de control automático a ve-

ces no son los más adecuados, debido a que estos requieren un conocimiento estricto de las relaciones de entrada y salida del proceso. En otros casos, debido a la complejidad de la naturaleza de los procesos, se deben simplificar muchos de los cálculos que describen a los mismos, obteniéndose con ello resultados que no serán del todo satisfactorios, apareciendo automatizaciones de baja calidad, y funcionando de manera inadecuada.

Ante muchas de estas dificultades, los controladores difusos son una alternativa ya que proveen algoritmos que permiten convertir una estrategia de control lingüística basada en el conocimiento de la experiencia, en una estrategia de control automático. Es decir, se obtiene un control del proceso mucho más cercano a la

* Tesis de Maestría, UNMSM, Lima, Perú 2001

Las ecuaciones que describen el modelo matemático para el plato genérico n (Figura 1b) son:

Ecuación de continuidad total:

$$\frac{dM_n}{dt} = L_{n-1} + F_n^L + F_{n-1}^V + V_{n-1} - V_n - L_n - S_n^L - S_n^V \quad (2)$$

Ecuación de continuidad para cada componente:

$$\frac{dM_n X_{ni}}{dt} = L_{n-1} X_{n-1,i} + F_n^L X_{ni}^F + F_{n-1}^V Y_{n-1,i}^F + V_{n-1} Y_{n-1,i} - V_n Y_{ni} - L_n X_{ni} - S_n^L X_{ni} - S_n^V Y_{ni} \quad (3)$$

Ecuación del balance de energía:

$$\frac{dM_n h_n}{dt} = L_{n-1} h_{n-1} + F_n^L h_n^F + F_{n-1}^V H_{n-1}^F + V_{n-1} H_{n-1} - V_n H_n - L_n h_n - S_n^L h_n - S_n^V V_n + Q_n \quad (4)$$

Donde las entalpías para cada componente puro han sido evaluadas a partir de la base de datos reportada por Prausnitz *et. al.*³.

Relación para el Equilibrio de fases, para cada componente i en la mezcla:

A los efectos del modelo matemático desarrollado en el presente trabajo, y considerando que se simularán procesos sometidos a presiones bajas o moderadas, se ha asumido comportamiento ideal para la fase vapor, con lo cual la relación para el equilibrio de fases resulta:

$$y_{ni}^* P_n = \gamma_{ni} X_{ni} P_{ni}^S \quad (5)$$

Para el cálculo del coeficiente de actividad γ_i se implementó la ecuación UNIQUAC³:

$$\ln \gamma_i = 1 - (\phi_i/x_i) + \ln (\phi_i/x_i) + (Z/2) q_i [\ln (\theta_i/\phi_i) + (\phi_i/x_i) - 1] + q_i [1 - \ln (\sum_j \theta_j \tau_{ji}) - (\sum_j (\theta_j \tau_{ij} / (\sum_k \theta_k \tau_{kj})))] \quad (6)$$

donde:

$$\phi_i = r_i x_i / (\sum_i r_i x_i) \quad (6.1)$$

$$\theta_i = q_i x_i / (\sum_i q_i x_i) \quad (6.2)$$

Los parámetros de interacción a_{ij} , donde $a_{ij} \neq a_{ji}$ y $a_{ii} = a_{jj} = 0$, están relacionados en la forma:

$$\tau_{ij} = \exp (-a_{ij}/T) \quad (6.3)$$

La presión de vapor P_{ni}^S se calculó mediante la ecuación de Antoine, en su forma:

$$\log P_{ni}^S \text{ (mmHg)} = A_i - B_i / (t_n + C_i) \quad (7)$$

La implementación computacional está preparada para trabajar con cualquier otro modelo o correlación para el cálculo del coeficiente de actividad, u otra alternativa para la determinación de la presión de vapor³, los cuales deberfan ser adicionados al programa.

PROCEDIMIENTO PARA LA SIMULACIÓN DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN

En la simulación de la columna de destilación continua se ha considerado la siguiente configuración y condiciones:

- Para los efectos de control se ha considerado solamente un hervidor en el fondo de la columna.
- La presión es constante en el tiempo y en cada plato, pero varía linealmente hacia arriba de la columna desde una presión PB en la base de la columna hasta una presión PD en el tope de la columna.
- Productos líquidos y en fase vapor pueden ser obtenidos del cilindro de reflujo, los cuales están en equilibrio.
- La hidráulica del líquido se calcula mediante la fórmula del vertedero de Francis. Esta relaciona la retención líquida sobre el plato (Mn) con la velocidad de flujo líquido dejando el plato (Ln):

$$F_L = 1.839 L_w (h_{ow})^{1.5} \quad (8)$$

donde:

FL : flujo líquido sobre el vertedero (m³/s),

Lw : longitud del vertedero (m),

- how: altura del líquido sobre el vertedero (m).
- Las retenciones volumétricas en el cilindro de reflujo y en la base de la columna se mantienen constantes, cambiando los flujos de los productos de fondo B y destilado líquido DL.
 - La entrada de calor al hervidor QR será utilizada para mantener el perfil de temperaturas en la columna.

Los pasos que se siguen en la simulación son:

1. Se ingresan los datos sobre el dimensionado de la columna (diámetro, altura, etc.), número de platos y número de componentes, propiedades físicas de los mismos, así como los parámetros para calcular los coeficientes de actividad. Se deberá ingresar además, las temperaturas, composiciones y flujos de las alimentaciones, y las condiciones iniciales para las composiciones líquidas, velocidades de flujo líquido, y estimados iniciales de las temperaturas en cada uno de los platos.
2. Se calculan las retenciones iniciales sobre los platos y el perfil de presiones.
3. Se calculan las temperaturas y las composiciones de vapor a partir de los datos de equilibrio líquido-vapor (se considera la eficiencia de Murphree). Se calculan las entalpías del líquido y del vapor³ (incluida la entalpía de las alimentaciones).
4. Se calculan las velocidades de flujo del vapor sobre los platos, desde el fondo de la columna hasta el tope utilizando la forma algebraica de las ecuaciones de energía.
5. Se evalúan todas las derivadas de las ecuaciones de continuidad total y para todos los NC componentes en todos los NT platos más el cilindro de reflujo y el fondo de la columna.
6. Se integran las derivadas de las ecuaciones de continuidad para todos los NC componentes en todos los NT platos, más el cilindro de reflujo y el fondo de la columna usando el método numérico de Runge-Kutta Michelsen ("stiff")^{6,7} de paso variable, obteniéndose así, las nuevas fracciones molares líquidas. Luego se integran las

derivadas de las ecuaciones de continuidad total de los NT platos, mediante el método de Euler^{1,7}, usando el mismo paso de integración determinado con el método anterior, obteniéndose así, las nuevas retenciones totales para todos los NT platos.

7. Se calculan las nuevas velocidades de flujo líquido a partir de las nuevas retenciones totales para todos los NT platos (fórmula de Francis).

Se regresa al paso 3 y se repite hacia delante para el próximo paso en el tiempo hasta alcanzar el tiempo de simulación deseado.

En la figura 2 se observa el diagrama de flujo del programa de simulación.

ESTRUCTURA DEL CONTROLADOR DIFUSO²

Un controlador difuso ("FUZZY") está compuesto de tres pasos de cálculo.

En el primer paso todas las señales del sensor deben ser traducidas en variables lingüísticas. Este paso es denominado "FUZZIFICACION" porque este usa conjuntos "FUZZY" para traducir variables reales en variables lingüísticas. Una vez que todos los valores de las variables de entrada son traducidos en sus correspondientes valores de las variables lingüísticas, el paso de "INFERENCIA FUZZY" es ejecutado para derivar una conclusión a partir de la base de reglas que representa la estrategia de control. El resultado de este paso es un valor lingüístico para la variable de salida. El paso de "DEFUZZIFICACION" traduce el resultado lingüístico en un valor real que representa el valor corriente de la variable de control. Existen varios métodos de "DEFUZZIFICACION"², y uno de los más empleados es el del Centro del Máximo (CoM). En el primer paso de este método, se determina el valor máximo de la función de pertenencia respectiva de cada término en la variable lingüística de salida. En el segundo paso, se calcula el mejor compromiso con un promedio ponderado de los valores máximo de los términos (ver figura 4).

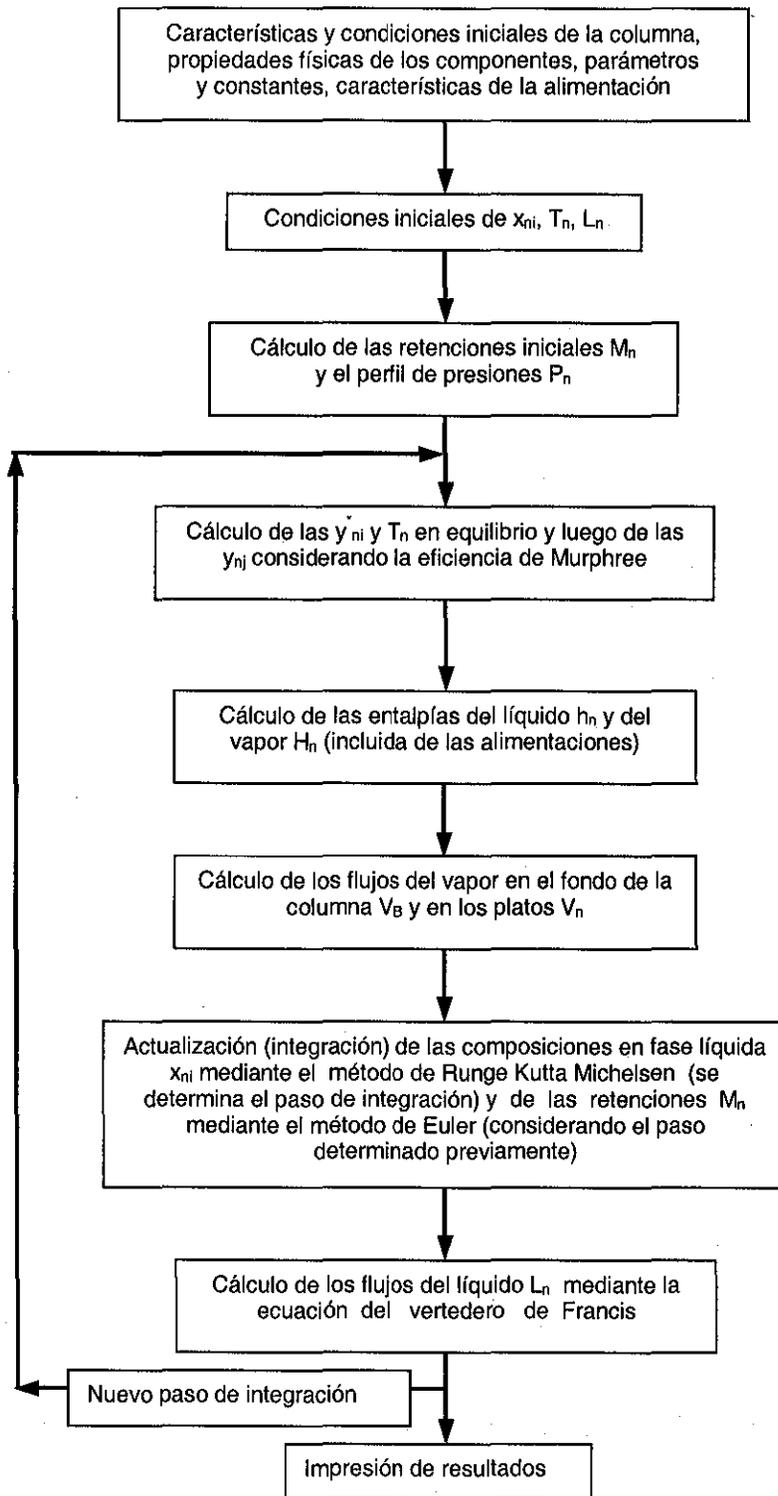


Figura N.º 2
Diagrama de flujo del programa de simulación

METODOLOGÍA DE IMPLEMENTACIÓN DEL CONTROLADOR DIFUSO

Definición de las variables lingüísticas

El controlador difuso fue implementado usando la herramienta que posee el lenguaje de programación LabVIEW: Fuzzy Logic Toolkit. En la simulación del control difuso se utiliza un controlador para mantener la temperatura en el fondo de la columna, o en alguna etapa cercana, la que a su vez mantendrá constante el gradiente de temperatura. La subrutina de este controlador fue enlazada al simulador de la columna de destilación para poder analizar su funcionamiento y realizar las comparaciones entre los resultados obtenidos en la simulación de control difuso, y los resultados experimentales reportados en la literatura.

El procedimiento que se sigue en la simulación del control difuso puede observarse en la figura 3. El controlador recibe del simulador los valores del flujo de calor de la alimentación líquida o vapor (Q_F en kJ/h), y la temperatura en el fondo de la columna (T_B en K). En este trabajo, se propone considerar sólo a estas dos variables lingüísticas de entrada porque el flujo de calor de la alimentación Q_F , es función de la temperatura T_F , composiciones x_F o y_F , y flujos F_L o F_V , y por consiguiente si se produjera alguna perturbación o disturbio en estas variables, ya estarían siendo consideradas. Estas son las variables lingüísticas de entrada al controlador. Del controlador sale como variable manipulada la entrada de calor al hervidor (Q_R en kJ/h). Esta es la variable lingüística de salida del controlador.

NÚMERO DE TÉRMINOS LINGÜÍSTICOS

Los posibles valores de la variable lingüística son los términos o interpretaciones lingüísticas de las cantidades técnicas.

La variable lingüística de entrada: flujo de calor de la alimentación líquida o vapor, tiene cinco términos: muy bajo, bajo, normal, alto y muy alto.

La variable lingüística de entrada: temperatura de fondo, tiene cinco términos: muy baja, baja, normal, alta y muy alta.

La variable lingüística de salida: entrada de calor al hervidor, tiene siete términos: muy bajo, bajo, medio bajo, normal, medio alto, alto y muy alto.

Los límites inferior y superior de todas las variables lingüísticas, así como los valores establecidos de todos los términos lingüísticos, dependen de cada sistema que se quiera controlar.

Los criterios de "FUZZIFICACION" utilizados son los siguientes:

- Mediante pruebas de simulación a lazo abierto (sin control) y para las condiciones óptimas de funcionamiento (estado estacionario óptimo), se generan perturbaciones positivas y negativas que se pudieran dar en una situación real considerando casos extremos, para obtener los valores de Q_F mínimo y Q_F máximo. Asimismo se obtienen T_B mínimo y T_B máximo. De esta forma se obtienen los límites inferior y superior de cada una de las variables de entrada, dentro de los cuales tienen que ser distribuidos los cinco términos de cada variable. Los valores óptimos se ubican en el centro de los términos normal de Q_F y T_B respectivamente. Los límites inferior y superior de todos los términos lingüísticos inicialmente se asumen (valores razonables).
- En la variable lingüística de salida Q_R , se asumen los límites inferior y superior, dentro de los cuales se distribuyen los siete términos lingüísticos y el valor óptimo de Q_R se ubica en el centro mismo del término normal.
- Todos los límites asumidos para ubicar los términos lingüísticos en todas las variables, se van sintonizando conjuntamente con la base de reglas mediante pruebas de simulación a lazo cerrado (con control).

DEFINICIÓN DE LA BASE DE REGLAS⁹

La base de reglas es la parte principal de un sistema difuso porque suministra todas las ac-

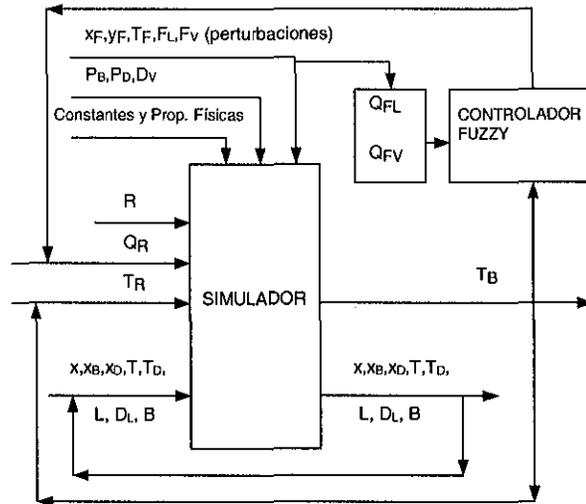


Figura N.º 3. Esquema de la simulación del control de la columna de destilación utilizando el controlador difuso

ciones a ser realizadas por el controlador difuso en cada situación presente. En ese sentido, la base de reglas representa la inteligencia del controlador.

Como tenemos dos variables de entrada, ambas con cinco términos, entonces el número total de reglas posibles es 25.

Este número de reglas es suficiente para formar una consistente base de reglas.

La base de reglas se define de la recopilación de información experimental y se van sintonizando mediante pruebas experimentales o como en este caso mediante pruebas de simulación.

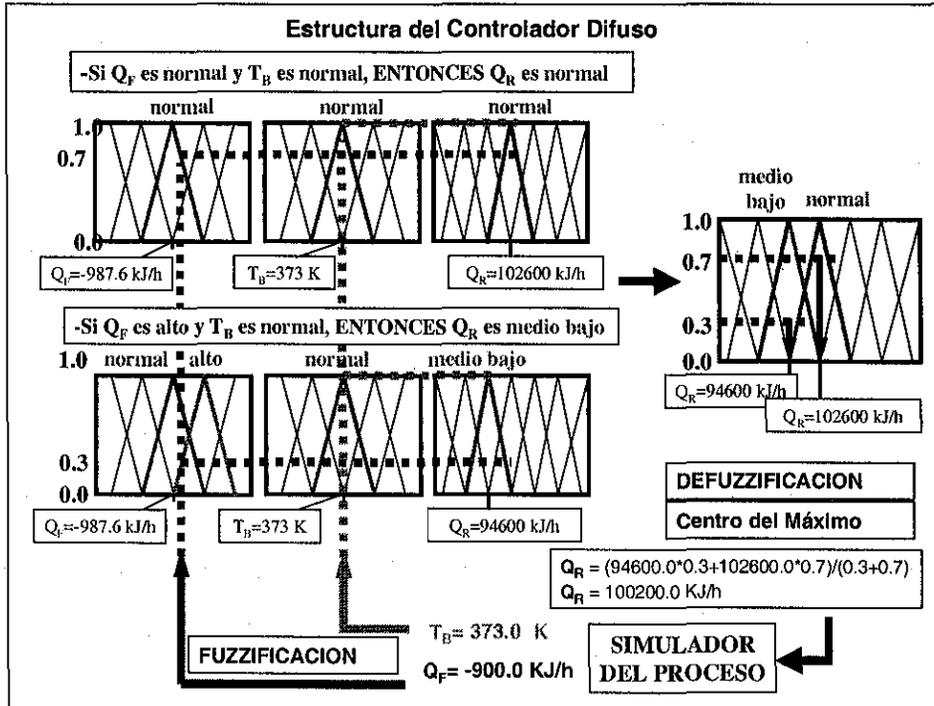


Figura N.º 4. Estructura del Controlador Difuso a lazo cerrado

El criterio empleado para establecer la base de reglas es el siguiente:

- Se analiza como varía la temperatura y por consiguiente las composiciones en el fondo de la columna y en el destilado cuando se manipula la entrada de calor al hervidor ante diversas perturbaciones generadas en la alimentación. Si para una perturbación dada, la temperatura en el fondo se incrementa, entonces será necesario que la entrada de calor al hervidor disminuya. Si se produce el efecto inverso, es decir si la temperatura en el fondo disminuye, será necesario incrementar la entrada de calor al hervidor.

En la figura 4 se observa la estructura del controlador difuso a lazo cerrado para el primer ejemplo de aplicación y en un determinado instante cuando del simulador se tiene que Q_F es igual a -900.00 kJ/h y T_B es 373.00 K. En este ejemplo, se ha establecido un valor normal para Q_F de -987.6 kJ/h, 373 K como valor normal para T_B , y 102600 kJ/h para Q_R .

EJEMPLOS DE APLICACIÓN

En esta publicación se muestran y analizan las respuestas del control difuso para tres sistemas de destilación estudiados. En la referencia⁹ se encuentran más ejemplos y resultados donde se comparan las respuestas del control difuso con las respuestas experimentales del control convencional. Se puede observar y analizar todas las ventajas que ofrecen los controladores difusos y reforzar las conclusiones a las que se ha llegado en este trabajo.

1. SISTEMA METANOL (1) - AGUA (2)

Se analizó una columna de destilación que separa una mezcla de dos componentes: metanol (1) - agua (2). La tabla 1 reportada en la referencia⁵, muestra los datos y condiciones de operación de la columna. Esta columna es analizada desde la condición inicial de reflujo total (arranque) hasta la condición de reflujo en estado estacionario.

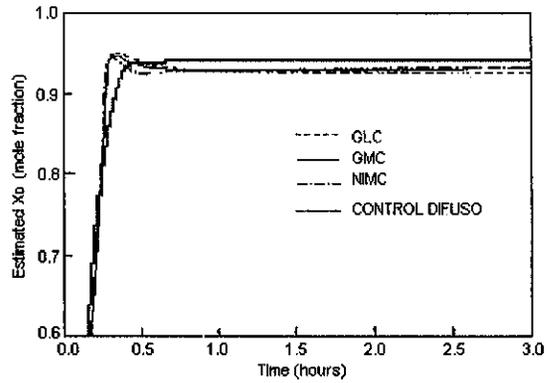


Figura N.º 5. Perfil de composiciones del metanol en el destilado

Resultados y discusión

Las respuestas de la composición del metanol en el destilado para tres modelos de control convencional GLC, GMC y NIMC reportados en la referencia⁵ se muestran en la figura 4. En esta figura se observa que las respuestas para los controladores convencionales PI exhiben un pequeño pico durante el período de transición desde la condición inicial de reflujo total a reflujo en estado estacionario. En cambio cuando se utiliza el controlador difuso, se observa que este pico desaparece obteniéndose por lo tanto una mejor respuesta en el control de la columna de destilación.

2. SISTEMA ETANOL(1) - AGUA (2)

Se analizó una columna de destilación que separa una mezcla de dos componentes: etanol(1) - agua(2). En la referencia⁴, se encuentran los datos y condiciones de operación de la columna.

Resultados y discusión

En la figura 5, se observa la variable controlada: temperatura en el plato 14 (T_{14} , contado desde el tope) y el flujo del producto de fondo (B). Estos resultados reportados en la referencia⁴ muestran las respuestas del control convencional PI (proporcional-integral) de dos puntos (un

Tabla 1	
Datos y condiciones de operación de la Columna de Destilación (composiciones en fracción molar)	
Número de platos	8
Posición del plato de alimentación	4
Presión de la columna (kPa)	101
Propiedades de la alimentación	
Composición del metanol	0.3300
Velocidad de flujo (kmol/h)	2.941
Temperatura (K)	349.99
Propiedades del destilado	
Composición del metanol	0.9334
Velocidad de flujo (kmol/h)	1.031
Temperatura (K)	338.80
Propiedades del producto de fondo	
Composición del metanol	0.0042
Velocidad de flujo (kmol/h)	1.910
Temperatura (K)	372.23
Condiciones de operación	
Entrada de calor al hervidor	1.026×10^5 (kJ/h)
Reflujo (kmol/h)	1.710
Retención en el hervidor (kmol)	0.780
Retención en el cilindro de reflujo (kmol)	0.181

controlador PI en el tope de la columna y otro controlador PI en el fondo de la columna), para un cambio en forma de escalón en la composición de la alimentación de 27% a 33% (% en peso del etanol), producido cuando $t = 32$ minutos.

En el control difuso propuesto en este trabajo, se usa solamente un controlador en el fondo para mantener o controlar la temperatura en el plato 14, manipulando la entrada de calor al hervidor.

Resultados aceptables y similares a los reportados, se obtuvieron en la simulación del control difuso mediante el presente trabajo.

3. SISTEMA ETANOL (1) - TER-BUTANOL(2) - AGUA (3)

Se analizó una columna de destilación que separa una mezcla de tres componentes: etanol(1) - ter-butanol (2) - agua (3). En la referencia⁸, se encuentran los datos y condiciones de operación de la columna.

Resultados y Discusión

En la figura 6, se observan los resultados reportados en la referencia⁸. En esta figura se muestra la evolución de las composiciones en fracción molar del etanol y del ter-butanol

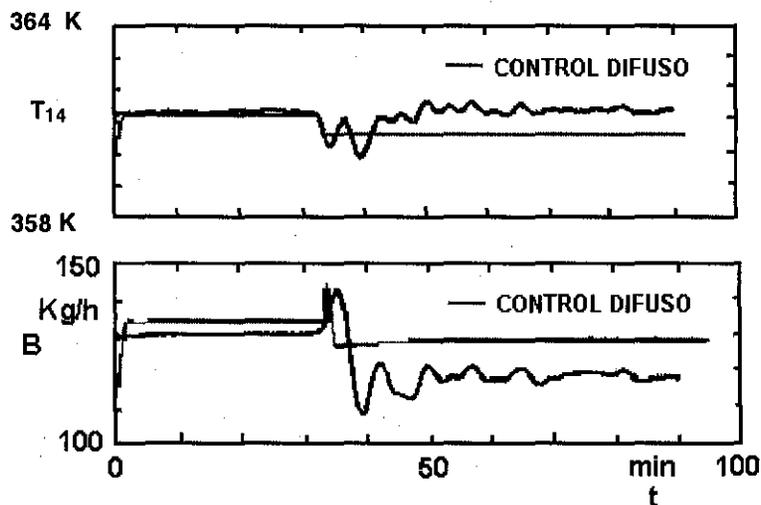


Figura N.º 6. Temperatura en la etapa 14, y flujo del producto de fondo, para un cambio en forma de escalón en la composición de la alimentación de 27% a 33% (% en peso de etanol), cuando $t=32$ min.

en el destilado y en el fondo de la columna de destilación.

Este sistema de tres componentes describe un comportamiento líquido-vapor altamente no ideal y se recomienda utilizar el coeficiente de fugacidad ϕ_{ni} ³, para corregir la no idealidad en la fase vapor. En este trabajo solamente se ha considerado la no idealidad en la fase líquida mediante el coeficiente de actividad g_{ni} .

En la simulación del control difuso se obtuvieron resultados similares a los que han sido reportados en la referencia.

CONCLUSIONES

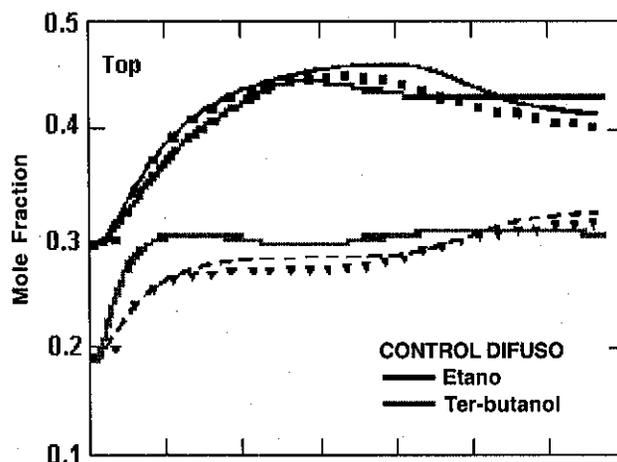
1. Se ha demostrado para los ejemplos estudiados en el presente trabajo, que el control difuso es una alternativa en el control de columnas de destilación continua ya que nos ofrece buenos resultados.

2. La sintonización de un algoritmo de control convencional (que equivale a determinar los parámetros de control como son las ganancias proporcional, integral y derivativa) requiere o bien la determinación de un modelo matemático del comportamiento del proceso para controlar la columna de destilación, o bien de la ejecución de una serie de pruebas. Mientras que el diseño y la sintonización de un algoritmo de control difuso (que equivale a determinar la base de datos y

la base de reglas del sistema de control difuso), requiere de un conocimiento cualitativo del comportamiento del proceso de destilación, al que es más factible de acceder mediante pruebas experimentales o sobre la base de la experiencia y conocimiento acerca del proceso.

3. Una ventaja muy importante del sistema de control difuso implementado para controlar las columnas de destilación continua, es que utilizando expresiones lingüísticas y no modelos matemáticos complejos difíciles de obtener y que solamente relacionando las entradas y salidas del proceso se puede lograr un control más efectivo y robusto comparado con los métodos tradicionales de control.

4. En los casos estudiados se ha evidenciado que el control difuso es más efectivo y robusto, que el convencional, porque puede recibir o atender a muchas variables de entrada a la vez (temperatura de fondo de la columna y flujo de calor de la alimentación), de forma satisfactoria. Además, presenta una alta tolerancia, flexibilidad y mayor rapidez en el control frente a las perturbaciones, ya que al considerar al flujo de calor de la alimentación como la variable de entrada, ya está tomando en cuenta a la temperatura, flujo y composiciones de la alimentación. Como estas variables se miden a la entrada de la columna, el controlador difuso detecta casi instantáneamente los cambios que se puedan producir por alguna perturbación a la columna.



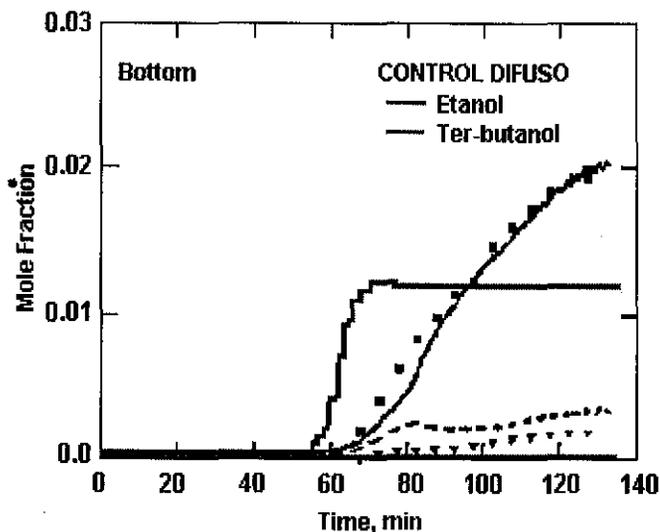


Figura N.º 7. Comportamiento de la Composición en el tope y en el fondo de la columna.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Luyben W. L. *Process Modelling, Simulation, and Control for Chemical Engineers*, Mc Graw-Hill, (1990).
- [2] National Instruments Corporation. *Fuzzy Logic for G Toolkit Reference Manual*, (1997).
- [3] Prausnitz J.M., O'Connell J.P. *Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, (1980).
- [4] Luyben, W. L. *Practical Distillation Control*, Van Nostrand Reinhold, N. Y., (1992).
- [5] Venkateswarlu Ch., Gangiah K. "Comparison of Nonlinear Controllers for Distillation Startup and Operation", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 36, 5531, (1997).
- [6] Michelsen, M. L. "An Efficient General Purpose Method for the Integration of Stiff Ordinary Differential Equations", *AIChE J.*, 22, 594, (1976).
- [7] Davis Mark E., *Numerical Methods and Modeling for Chemical Engineers*, Wiley, N.Y., (1984).
- [8] Baratti R., Bertucco A., Da Rold A., Morbidelli M., "A composition estimator for multicomponent distillation columns- development and experimental test on ternary mixtures", *Chem. Eng. Sci.*, 53, 3601, (1998).
- [9] Osorio, I., *Control de Columnas de Destilación*, Tesis de Maestría, UNMSM, Lima - Perú, (2001).