



## Simulador estocástico de una torre de destilación multicomponente basado en Excel

Mario Luis Chew Hernández, Leopoldo Viveros Rosas, Raúl Gómez Gómez-Tagle\*

### RESUMEN

La simulación dinámica se usa en la enseñanza del diseño de controladores, pues permite evaluar el desempeño de distintas alternativas de control. La mayoría de los ejercicios de diseño de controladores basados en simulación a nivel universitario consideran perturbaciones determinísticas. En la vida real, sin embargo, los procesos enfrentan perturbaciones fluctuantes, por lo que usar la simulación estocástica en ejercicios de ajuste de controladores proporcionaría al estudiante una experiencia más cercana a su futura práctica profesional que la conseguida usando simulación determinística. Sin embargo, las instituciones públicas que busquen utilizar simuladores dinámicos y estocásticos en la docencia se enfrentan a la necesidad de comprar licencias de software especializado, pues no hay simuladores dinámicos y estocásticos disponibles como software gratuito descargable. Este documento muestra un simulador dinámico y estocástico, con una interfaz amigable, de una torre de destilación, desarrollado como una macro de Excel. Este simulador tiene la ventaja de que puede ser utilizado sin costo para las instituciones educativas, ya que Excel es ampliamente utilizado por el personal universitario.

### ABSTRACT

Dynamic process simulation is widely used in teaching controller design, as it allows foreseeing the performance of different control configurations and controller tunings. Currently, most college level controller design exercises that are based on simulation consider deterministic perturbations (i.e., steps or ramps). In real life, however, processes are more likely to face fluctuating, random disturbances, so the use of stochastic simulation in controller tuning exercises would provide students with an experience closer to their future professional practice than that provided by deterministic simulation. However, public institutions attempting to use dynamic, stochastic simulators in teaching, are hindered by the need of buying licenses of simulation packages or specialized programming languages (such as Matlab), as there aren't any dynamic, stochastic simulators available as downloadable freeware. This paper shows a dynamic, stochastic simulator with a friendly interface of a distillation tower, developed as an Excel Macro. This simulator has the advantage that it can be used at no cost to educational institutions, since Excel is almost universally known and used by college faculties.

**Palabras claves:** Simulación, destilación, control de procesos

\* TECN: Tecnológico de Estudios Superiores de Coacalco, Dr. Mario Chew (mario@tesco.edu.mx), M. en C. Leopoldo Viveros (leopoldo@tesco.edu.mx), Ing. Raúl Gómez (raul.iqu@tesco.edu.mx)

### INTRODUCCIÓN

Los simuladores dinámicos son muy útiles en la enseñanza del control de procesos, pues permiten comparar el desempeño de diferentes configuraciones de control y sintonizaciones de los controladores. Casi todas las experiencias de aprendizaje basadas en simulación aplican perturbaciones determinísticas en la evaluación dinámica de los controladores (Luyben y Luyben, 1996). En la práctica, las unidades de proceso están sujetas a perturbaciones mejor descritas como estocásticas, variando continuamente y de manera impredecible. Por lo tanto, el estudiante de ingeniería se beneficiaría de realizar prácticas de control de procesos que incluyan perturbaciones estocásticas. Para llevar a cabo estas actividades se requiere de simuladores dinámicos capaces de manejar elementos aleatorios (simuladores dinámicos estocásticos).

Por otro lado, las instituciones públicas de educación superior en países en desarrollo enfrentan una escasez de recursos económicos. Esto dificulta su capacidad para utilizar simuladores de procesos en sus actividades docentes, por la necesidad de comprar licencias. En el caso de los simuladores en estado estacionario, hay algunas alternativas de software gratuito que han sido validadas (por ejemplo, el simulador COCO (2022)). Sin embargo, este no es el caso de los simuladores dinámicos y menos aún del subconjunto de estos capaces de manejar perturbaciones aleatorias. Este manuscrito presenta el desarrollo del simulador dinámico de una torre de destilación de tres componentes con elementos estocásticos, con una interfaz amigable (que permite la interacción con el usuario mediante botones y cuadros de diálogo) creada utilizando funcionalidades macro de Microsoft Excel. Esto permite que el simulador se ejecute en dicho software, que ya está siendo utilizado por la mayoría de las facultades de ingeniería de las universidades en los países en desarrollo.

### REVISIÓN DE LITERATURA

Revisiones literarias sobre las aplicaciones de simulación dinámica para optimizar sistemas energéticos y químicos se incluyen en Adams (2019) y Odedario y Nwabuokey (2018). Usos de la simulación para aplicaciones específicas son presentadas por Bauer y Filho (2004) para el diseño sostenible de plantas, Huang et al. (2016) para el modelado de presión de un gasificador e Idzham et al. (2018) para analizar una planta de aguas residuales de la industria petroquímica. Aplicaciones adicionales se encuentran en Yu y Jenne (2018), que abordan una planta de desalinización, Meshalkin et al. (2019) que optimizan el secado de fosfatos y Silviana et al. (2020) que analizan el tren de separación benceno-tolueno-xileno desde un punto de vista sostenible.





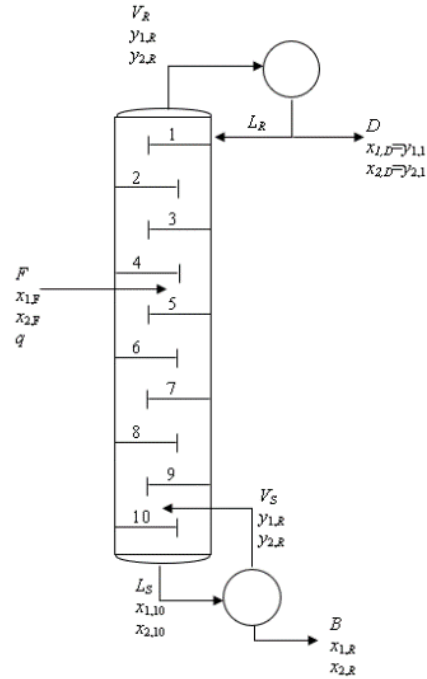
Respecto al software utilizado en las simulaciones dinámicas, Aspen Dynamics y Matlab se han utilizado para estudiar trenes de torres de separación (Khodadoost y Sadeghi 2011), ChemCAD para modelar reactores de polimerización (Kuzmić y Jukić, 2015) Aspen HYSIS para tratar reactores integrados energéticamente (Partono y Iqbal, 2018) y Matlab y COSMOL Multiphysics para estudiar catalizadores (Patan et al., 2018). Además, Wanotayaroj et al. (2020) presentan una propuesta para controlar ciclos de combustión utilizando Aspen Dynamics, Calise et al. (2020) simularon un sistema de aguas residuales utilizando INSEL (Integrated Simulation Environment Language) y Li et al. (2021) modelaron un conjunto de absorbedores de CO<sub>2</sub> para implementar un esquema de control predictivo, empleando ASPEN y Matlab.

Experiencias sobre el uso didáctico de simuladores de procesos químicos se incluyen en Joao y Silva (2017), que utilizan Aspen HYSIS para la formación de ingenieros en el manejo de trenes de destilación y Puskás et al. (2018) que utilizó Honeywell Unisim Design en la capacitación de operadores de una planta de isopropanol. En cuanto a informes sobre el desarrollo de simuladores de procesos propios en instituciones educativas con fines pedagógicos, Riachi et al. (2014) describen el simulador de estado estacionario Lazarus, ejecutado en UML y desarrollado como un freeware con la opción de incorporar módulos; Lona et al. (2000) y Cartaxo et al. (2014) desarrollan programas para estudiar la dinámica de las redes de intercambiadores de calor, Lee et al. (2017) desarrollan el simulador de un sistema de distribución de gas natural que corre en línea, Granjo y Rasteiro (2020) describen la plataforma de aprendizaje LABVIRTUAL que incluye simuladores de estado estacionario y Molina et al. (2021) muestran el simulador dinámico de un reactor, programado en Matlab.

Se puede observar que existe una creciente preferencia por usar software de simulación comercial (por ejemplo, ASPEN) y lenguajes de programación avanzados (por ejemplo, Matlab) en las aplicaciones de la simulación a la pedagogía y la investigación. Dado que este software requiere de licencias, las aplicaciones reportadas son de poca relevancia para la enseñanza en instituciones públicas. En contraste, el simulador aquí presentado está programado en Microsoft Excel, que es un programa que ya es ampliamente usado en las escuelas. Además, ninguno de los simuladores dinámicos reportados, construidos para aplicaciones de enseñanza, incorpora perturbaciones aleatorias. Como en la práctica, la operación de las plantas se ve afectada por perturbaciones aleatorias, el uso de simuladores dinámicos estocásticos para la enseñanza del diseño y ajuste de controladores puede preparar mejor al futuro ingeniero para operar plantas reales.

### CASO DE ESTUDIO

Se considera una torre de destilación de diez platos alimentada con una mezcla de benceno, tolueno y p-xileno (Figura 1).



**Figura 1. Torre de destilación. Fuente: elaboración propia**

$V_R$  y  $V_S$  son, respectivamente, el flujo molar de vapor en las secciones de rectificación y agotamiento, siendo  $L_R$  y  $L_S$  los flujos molares de líquido correspondientes;  $F$ ,  $D$  y  $B$  son, respectivamente, el flujo de alimentación, destilado y el producto de fondo, y  $q$  la fracción de vapor de alimentación. La fracción molar de alimentación del componente  $i$  es  $x_{i,F}$  ( $i=1, \dots, 3$ ). En la Figura 1,  $x_{i,j}$  e  $y_{i,j}$  denotan, respectivamente, la fracción molar del componente  $i$  en el líquido y el vapor que sale de los platos y reboiler ( $j=1, \dots, 10, R$ ). Se hicieron los siguientes supuestos:

- Los flujos molares en las secciones de la torre son constantes, así como el contenido molar en los platos ( $m$ ) y reboiler ( $m_R$ ).
- El equilibrio líquido-vapor sigue la ley de Raoult (1)

$$P y_{i,j} = P_i^0(T_j) x_{i,j} \quad i=1, \dots, 3; \quad j=1, \dots, 10, R \quad (1)$$

Donde  $P$  es la presión y  $P_i^0(T_j)$  la presión de vapor del componente  $i$  a la temperatura  $T_j$  de la etapa  $j$  ( $j=1, \dots, 10, R$ ). Las presiones de vapor siguen la relación de Antoine (2) con constantes  $A_i$ ,  $B_i$  y  $C_i$

$$P_i^0 = \exp(A_i - B_i / (T_j + C_i)) \quad (2)$$

- La hidráulica de la torre es muy rápida, los flujos se ajustan instantáneamente a los cambios en  $F$ ,  $q$ ,  $V_S$  y  $r$ , que es la razón de reflujo ( $L_R / D$ ), según (3-7)

$$V_R = V_S + qF \quad (3)$$

$$D = V_R / (1 + r) \quad (4)$$

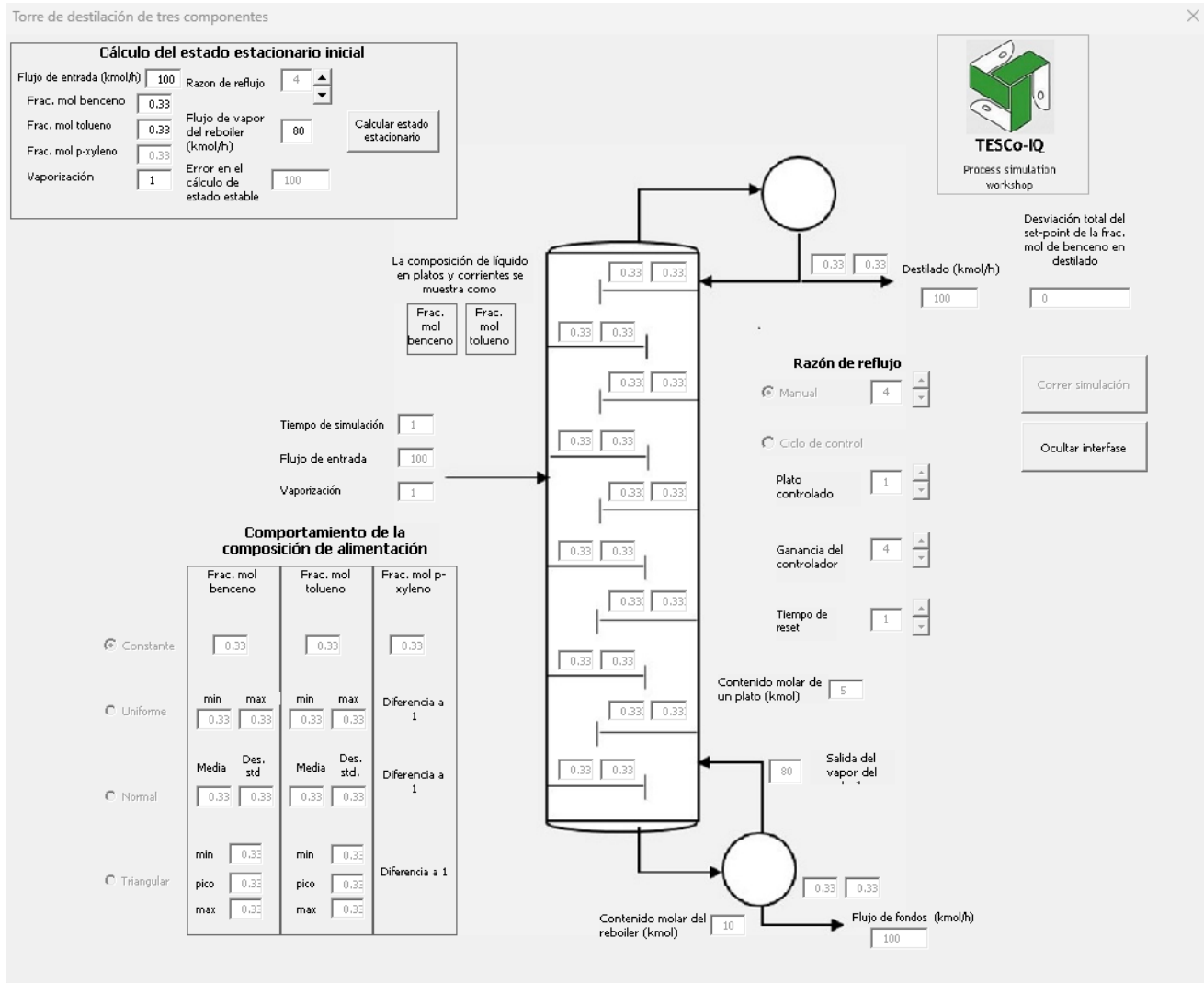


Figura 2. Interfase principal (elaboración propia)

$$B=F-D \quad (5)$$

$$L_S=V_S+B \quad (6)$$

$$L_R=Dr \quad (7)$$

- La composición de alimentación,  $x_{i,F}$  ( $i=1,\dots,3$ ), pueden fluctuar aleatoriamente.

El modelo dinámico consiste en dos balances molares por etapa, que resulta en veintidós ecuaciones diferenciales (8-13, para  $i = 1,2$ )

Plato 1

$$dx_{i,1}/dt = \{L_R(y_{i,1}-x_{i,1})+V_R(y_{i,2}-y_{i,1})\}/m \quad (8)$$

Plato en la sección de rectificación  $j=2,3,4$

$$dx_{i,j}/dt = \{L_R(x_{i,j-1}-x_{i,j})+V_R(y_{i,j+1}-y_{i,j})\}/m \quad (9)$$

Plato de alimentación

$$dx_{i,5}/dt = \{F x_{i,F} + V_S y_{i,6} + L_R x_{i,4} - V_R y_{i,5} - L_S x_{i,5}\}/m \quad (10)$$

Plato en la zona de agotamiento  $j=6,\dots,9$

$$dx_{i,j}/dt = \{L_S(x_{i,j-1}-x_{i,j})+V_S(y_{i,j+1}-y_{i,j})\}/m \quad (11)$$

Plato 10

$$dx_{i,10}/dt = \{L_S(x_{i,9}-x_{i,10})+V_S(y_{i,R}-y_{i,10})\}/m \quad (12)$$

Reboiler

$$dx_{i,R}/dt = \{L_S x_{i,10} - B x_{i,R} - V_S y_{i,R}\}/m_R \quad (13)$$

Las ecuaciones 8-13 se integran usando el método de Euler implícito: dado un vector de estado  $\mathbf{X}=[x_{1,1}, x_{2,1}, \dots, x_{1,R}, x_{2,R}]^T$ , un vector de perturbaciones  $\mathbf{D}=[F, q, x_{1,F}, x_{2,F}]^T$  y un vector de



variables manipuladas  $U=[r, V_s]^T$ , el valor de  $X$  en el tiempo  $t+h$ , se obtiene de su valor en el tiempo  $t$  resolviendo el sistema de ecuaciones no lineales (14), siendo  $h$  el tamaño del paso.

$$X(t+h)=X(t) + h dX/dt |_{X(t+h), D(t), U(t)} \quad (14)$$

Para simular una torre con fracciones molares de alimentación estocásticas,  $x_{1,F}(t)$  y  $x_{2,F}(t)$  se muestrean de sus distribuciones de probabilidad, con los métodos descritos en Ross (2012), y se sustituyen en (14) antes de resolver estas ecuaciones para  $X(t+h)$ . Cuando se simula una torre controlada, una lógica proporcional integral (15) cambia la razón de reflujo  $r$  para controlar la temperatura de un plato en la sección de rectificación

$$r=r_0+K_C(e+(1/\tau)\int e dt) \quad (15)$$

Donde  $e$  es la desviación de la temperatura respecto a su set-point,  $K_C$  es la ganancia del controlador,  $\tau$  es el tiempo de reset y  $r_0$  el valor inicial de la relación de reflujo.

### DESCRIPCIÓN DEL SIMULADOR

El simulador se entrega al usuario como un archivo de Microsoft Excel habilitado para macros. Al hacer clic en el botón "Comenzar simulación/mostrar interfase de la torre" (Figura 3) aparece la interfaz principal del simulador (Figura 2).

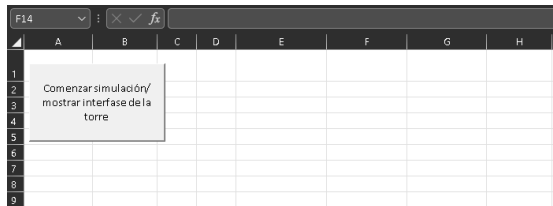


Figura 3. Pantalla inicial (fuente: elaboración propia)

Al inicio solo están activos los controles de la zona "Cálculo del estado estacionario inicial" (Figura 4) con los que el usuario especifica la condición inicial de la torre. Una vez introducidas las cualidades de la alimentación, la razón de reflujo y el flujo de vapor del reboiler ( $V_s$ ), el botón "Calcular estado estacionario" determina el estado inicial del sistema. El error total al resolver el problema en estado estacionario (que se consiste en las derivadas (8-13) igualadas a cero) aparece en un cuadro de diálogo. La composición en estado estacionario del líquido en los platos y los flujos y composiciones de las corrientes de salida aparecen en las cajas de texto colocadas en los platos y cerca de las corrientes de salida en el dibujo de la torre (Figura 2). Una vez que se ha resuelto el estado estacionario, los botones de la simulación dinámica se activan.

El flujo de alimentación, su vaporización y el tiempo de simulación se introducen en los cuadros de diálogo situados a la izquierda de la torre en la figura 2. Las distribuciones de probabilidad de las fracciones molares de alimentación, que deben variar aleatoriamente, se definen a través de los controles en la sección "Comportamiento de la composición de alimentación" (Figura 5).

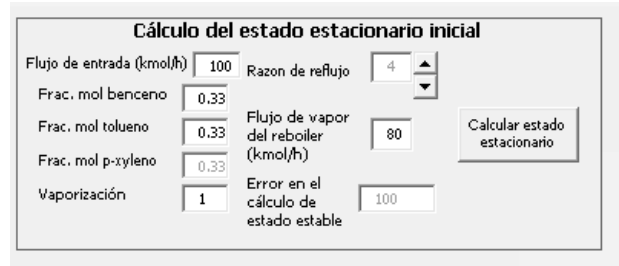


Figura 4. Controles en la zona de estado estacionario (elaboración propia)

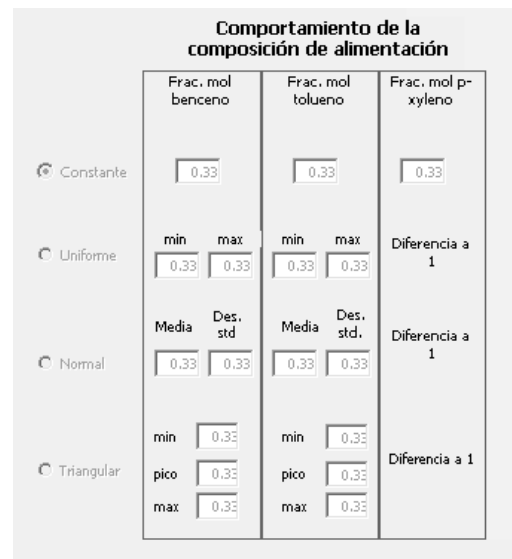


Figura 5. Controles para la composición de entrada (fuente: elaboración propia)

El selector a la izquierda en la Figura 5 permite seleccionar el tipo de comportamiento de las fracciones molares de benceno y tolueno, las que pueden permanecer constantes o seguir una distribución de probabilidad: uniforme (especificando valores mínimos y máximos), normal (especificando media y desviación estándar) o triangular (especificando valores mínimos, más probables y máximos). Las fracciones mol de alimentación muestreadas se estandarizan en caso de que su suma exceda uno y, como puede suceder con la distribución normal, si el valor simulado es negativo o mayor que uno, se producen nuevos valores hasta que estos se encuentran en el rango requerido.

La Figura 6 muestra la sección en la que se define el manejo de la razón de reflujo. Este puede estar fijo (seleccionando "manual" y definiendo su valor) o usarse para mantener la temperatura de un plato cerca de su temperatura en el estado estacionario inicial. Las especificaciones del controlador también se introducen aquí. La desviación absoluta total (es decir, el valor absoluto de la desviación integrada a lo largo del tiempo simulado) de la fracción





mol de benceno en el destilado, con respecto a su valor en estado estacionario, se muestra en un cuadro.

Una vez terminada la simulación, un cuadro de diálogo pregunta al usuario si se van a producir gráficos de los resultados. Si se responde "sí", se muestran gráficos de la temperatura del plato bajo control de temperatura y la fracción molar de benceno en destilado contra el tiempo. Estos gráficos se generan usando las funcionalidades de la hoja de cálculo de Excel (Figura 7).

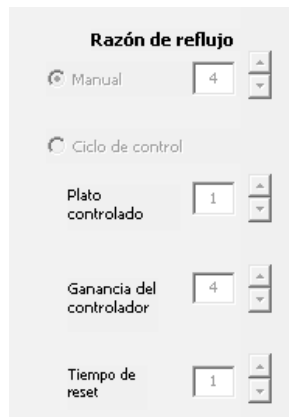


Figura 6. Controles para el manejo del la razón de reflujo (elaboración propia)

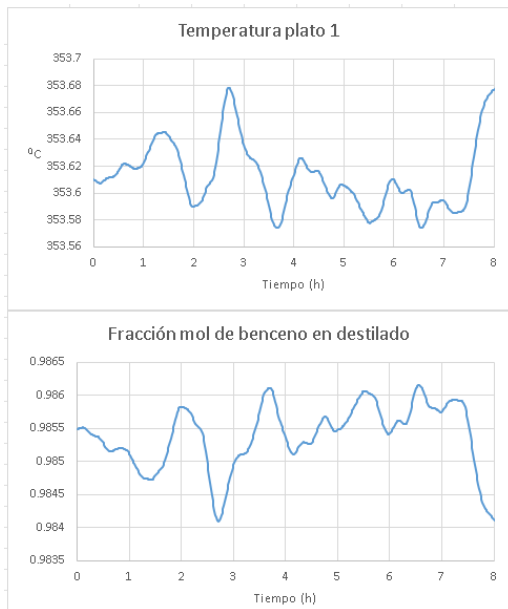


Figura 7. Gráficas producidas por el simulador (elaboración propia)

Para ilustrar los resultados del simulador, el gráfico superior de la Figura 8 muestra el comportamiento de la temperatura del plato uno

cuando las fracciones molares de alimentación de benceno y tolueno se distribuyen uniformemente entre 0.1667 y 0.5.

La Figura 8 compara los resultados cuando la razón de reflujo se fija en su valor inicial y cuando esta se manipula para controlar la temperatura del plato uno, con ganancia del controlador de 20 y tiempo de reset de 0.1 h. El gráfico inferior de la Figura 8 muestra la fracción molar de benceno en el destilado. La desviación absoluta total de la fracción molar de benceno en el destilado cuando se controla la temperatura es 0.0672, mientras que cuando la razón de reflujo está fija es de 0.21.

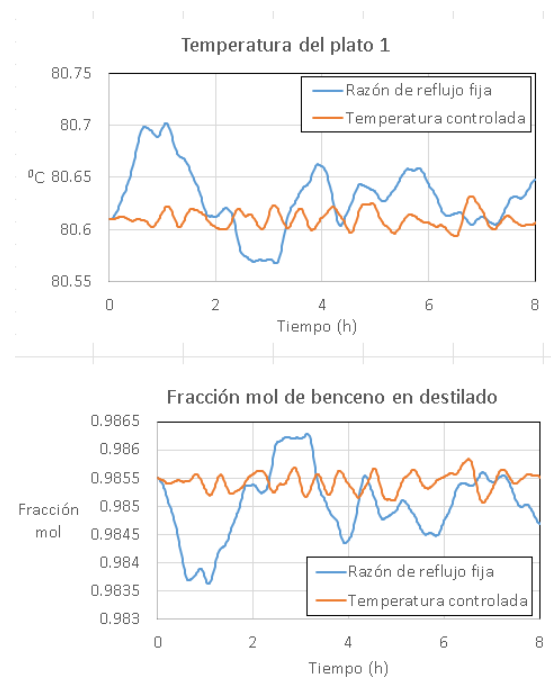


Figura 8. Comparación de operación con temperatura controlada y no controlada (elaboración propia)

Es fácil visualizar el uso de este simulador para capacitar a los estudiantes en el diseño de controladores en condiciones estocásticas, a través de ejercicios en los que necesiten ajustar el controlador y seleccionar el plato a controlar para minimizar la desviación de la fracción mol de benceno en el destilado, y pidiéndoles que discutan el efecto del comportamiento de la composición en la alimentación sobre los resultados.

## CONCLUSIONES

Ante la inexistencia de simuladores gratuitos, las instituciones educativas que busquen usarlos en la enseñanza deben comprar licencias. Esta situación se agrava para los simuladores dinámicos capaces de incluir perturbaciones estocásticas, ya que estos son más especializados y tienen licencias más caras que los simuladores determinísticos. Como en la práctica los ingenieros necesitan controlar plantas que enfrentan perturbaciones impredecibles y continuamente variables, la implementación de ejercicios de control de procesos para estudiantes de ingeniería que utilizan



perturbaciones estocásticas simuladas puede ser una preparación valiosa para su futuro desempeño.

En este trabajo, se presenta un simulador estocástico destinado a este propósito. Como el simulador se ejecuta en Microsoft Excel, que ya se utiliza en la mayoría de las escuelas de ingeniería, no se necesita ningún software de licencia para su uso pedagógico. Se espera que el trabajo presentado aquí anime a las facultades de ingeniería a desarrollar sus propios simuladores.

## REFERENCIAS

- [1] Adams T.A. (2019) , “Special Issue: Modeling and Simulation of Energy Systems”, *Processes*, vol. 7, no. 8, Art. no. 523.
- [2] Bauer P.E. y R. Filho (2004) “Incorporation of environmental impact criteria in the design and operation of chemical processes”, *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, vol. 21, no. 3, pp. 405-414.
- [3] Calise F., U. Eicker, J. Schumacher y M. Vicidomini (2020) “Wastewater Treatment Plant: Modelling and Validation of an Activated Sludge Process”, *Energies*, vol. 13, art. no. 3925.
- [4] Cartaxo S.J.M., P.F.G. Silvino y F.A.N. Fernandes (2014), “Transient analysis of shell-and-tube heat exchangers using an educational software”, *Education for Chemical Engineers*, vol. 9, no. 3, pp. e77-e84.
- [5] Cocosimulation (2022), “COCO: The Cape-Open to Cape-Open Simulator”, [www.cocosimulator.org](http://www.cocosimulator.org)
- [6] Granjo J.F.O. y M.G. Rasteiro (2020) “Enhancing the autonomy of students in chemical engineering education with LABVIRTUAL platform”, *Education for Chemical Engineers*, vol. 31, pp. 21-28.
- [7] Huang D., H. Zhang, S. Weng, y M. Su (2016) “Modeling and Simulation of IGCC Considering Pressure and Flow Distribution of Gasifier”, *Applied Sciences*, vol. 6, no. 10, art. no. 292.
- [8] Idzham A., F. Mohd, y B. Mardhiyah (2018), “Dynamic Simulation of Petrochemical Wastewater Treatment Using Wastewater Plant Simulation Software”, *Matec Web of Conferences*, vol. 203, art. no. 03005.
- [9] Joao I.M. y J.M. Silva (2017) “Designing Solutions by a Student Centred Approach: Integration of Chemical Process Simulation with Statistical Tools to Improve Distillation Systems”, *International Journal of Engineering Pedagogy*, vol. 7, no. 3, pp. 4-18.
- [10] Khodadoost M. y J. Sadeghi (2011) “Dynamic Simulation of Distillation Sequences in Dew Pointing Unit of South Pars Gas Refinery”, *Journal of Chemical and Petroleum Engineering*, vol. 45, no. 2, pp. 109-116.
- [11] Kuzmić S. y A. Jukić (2015) “Dynamic Simulation of Batch Polymerization Reactor and Sensitivity Analysis of Styrene Homopolymerization”, *Kemija u industriji*, vol. 64, no. 3-4, pp. 151-167.
- [12] Lee Y., C. Ko, H. Lee, K. Jeon, S. Shin y C. Han (2017) “Interactive plant simulation modeling for developing an operator training system in a natural gas pressure-regulating station”, *Petroleum Science*, vol. 14, no. 3, pp. 529-538.
- [13] Li Q., W. Zhang, Y. Qin y A. An (2021) “Model Predictive Control for the Process of MEA Absorption of CO<sub>2</sub> Based on the Data Identification Model”, *Processes*, vol. 9, art. no. 183.
- [14] Lona M.F., F.A.N. Fernandes, M.C. Roque y S. Rodrigues (2000) “Developing an educational software for heat exchangers and heat exchanger networks projects”, *Computers and Chemical Engineering*, vol. 24, no. 2-7, pp. 1247-1251.
- [15] Luyben M. L. y W.L. Luyben (1996) *Essentials of process control*, Estados Unidos de América, Mc Graw Hill College
- [16] Meshalkin V., V. Bobkov, M. Dli, y V. Dovì (2019) “Optimization of Energy and Resource Efficiency in a Multistage Drying Process of Phosphate Pellets”, *Energies*, vol. 12, no. 17, art. no. 3376.
- [17] Molina R., G. Orcajo, Y. Segura, J. Moreno y F. Martínez (2021) “KMS platform: A complete tool for modeling chemical and biochemical reactors”, *Education for Chemical Engineers*, vol. 34, pp. 127-137, 2021.
- [18] Odedairo B. O. y N. Nwabuoeki (2018), "Framework for Operational Performance Measurements in Small and Medium Scale Industries Using Discrete Event Simulation Approach," *Engineering, Technology & Applied Science Research*, vol. 8, no. 4, pp. 3103-3107, <https://doi.org/10.48084/etasr.2106>.
- [19] Partono A.T. y P.M. Iqbal (2018) “Process Stability Identification Through Dynamic Study of Single-bed Ammonia Reactor with Feed-Effluent Heat Exchanger (FEHE)”, *Matec web of conferences*, vol. 156, art. no. 03003.
- [20] Patan A.K., M. Mekala, y S.K. Thamida (2018) “Dynamic Simulation of Heterogeneous Catalysis at Particle Scale to Estimate the Kinetic Parameters for the Pore Diffusion Model”, *Bulletin of chemical reaction engineering and catalysis*, vol. 13, no. 3, pp. 420-428.
- [21] Puskás J., A. Egedy y S. Németh (2018) “Development of operator training simulator for isopropyl alcohol producing plant”, *Education for Chemical Engineers*, vol. 22, pp. 35-43.
- [22] Riachi M.S., M. Duarte y J.A. Scortechini (2014) “Diseño de un simulador de procesos químicos para uso colaborativo y didáctico”, *Revista Electrónica formación y calidad educativa*, vol. 2, no. 1, pp. 71-82.
- [23] Ross S.M. (2012), *Simulation*, tercera edición, Estados Unidos de América:Academic Press.
- [24] Silviana S., F. Dalanta, A.D. Qurrota, L. Khoiriyah, N.P. Rousan, y A.M. Fahrizal (2020), “Design simulation and economic optimization of a benzene-toluene-xylene system distillation process upon the energy cost”, *E3s web of conferences*, vol. 202, art. no. 10003.
- [25] Wanotayaroj T., B. Chalermisinsuwan y P. Piumsomboon (2020), “Dynamic simulation and control system for chemical looping combustion”, *Energy Reports*, vol. 6, pp. 32-39.
- [26] Yu Y.H y D. Jenne (2018) “Numerical Modeling and Dynamic Analysis of a Wave-Powered Reverse-Osmosis System”, *Journal of marine science and engineering*, vol. 6, no. 4, art. no. 132.