

Excel: una alternativa para evitar el uso de los simuladores como “cajas negras”. Aplicación a la simulación de columnas de destilación multicomponente

Amparo Gómez Siurana, Alicia Font Escamilla

(Amparo Gómez Siurana) (*amparo.gomez@ua.es)

Universidad de Alicante, Departamento de Ingeniería Química, Escuela Politécnica Superior, Carretera de San Vicente del Raspeig s/n, 03690 San Vicente del raspeog-Alicante, España

Palabras clave: (Hojas de cálculo; destilación multicomponente; métodos rigurosos; aplicación “a mano”).

Resumen

Los métodos rigurosos para el cálculo de columnas de rectificación multicomponente implican un elevado número de variables y ecuaciones que son difíciles de resolver “a mano” y que requieren el uso de software específico, como es el caso de simuladores de procesos químicos tales como ChemCAD, Aspen HYSYS o Aspen Plus, cuyo uso hace ya años que se incorporó a la docencia universitaria de Ingeniería Química. De hecho, hay libros de texto de operaciones de separación donde se incluyen problemas o ejemplos para ser resueltos con simuladores [1-3]. Incluso, el libro de Seader y col. [2] incluye un capítulo donde se hace referencia explícita a esta necesidad de programas de cálculo (*Computer-Aided Equilibrium Based Methods*). Estas herramientas, que sin duda son de una utilidad extraordinaria, tienen la desventaja, también ampliamente reconocida [4], de la pérdida de contacto con los algoritmos de cálculo y la metodología desarrollada para su aplicación, hasta el punto que pueden llegar a ser utilizados como “cajas negras”.

Obviamente, desde el punto de vista didáctico, la mejor forma de comprender cómo se aplica un método de cálculo es resolviendo problemas “a mano”. Sin embargo, la extensión de los programas docentes y el escaso tiempo disponible para desarrollarlos hace que, en el caso de la destilación multicomponente, esta opción sea inviable. Una alternativa que ha demostrado su utilidad en estos casos [5, 6] es la de proporcionar a los estudiantes hojas de cálculo con problemas complejos resueltos donde pueden seguir paso a paso los algoritmos de cálculo, comprobar la dificultad de su aplicación y obtener información directa de cómo evolucionan las variables a través de los cálculos iterativos. Estos ficheros pueden servir también para analizar la influencia de las especificaciones del problema y de las estimaciones de partida sobre los resultados obtenidos. En este sentido, en la universidad de Alicante se han desarrollado hojas de cálculo [5,6] que permiten resolver los problemas de aplicación de métodos de cálculo riguroso de destilación multicomponente, algunos ampliamente recogidos en los libros de texto (*boiling point*, BP; *sum rates*, SR; *isothermic sum rates*, ISR; *simultaneous correction*, SC; *inside-out*) y otros no tan difundidos, como es el caso de los métodos homotópicos. Estas hojas de cálculo se encuentran descritas en la bibliografía [6] y están disponibles en <https://bit.ly/2SLhsNJ>.

Dada la buena acogida que ha tenido esta estrategia docente, se ha desarrollado otro fichero dedicado a los métodos de relajación, que no suelen estar descritos en muchos libros de texto, pero que son muy interesantes ya que proporcionan una analogía con la puesta en marcha de la columna. Dado que para ello se han de resolver las ecuaciones MESH en estado no estacionario, se ha incluido también un ejemplo de simulación rigurosa de una columna discontinua, cuya resolución para el caso multicomponente suele describirse en los libros de texto basándose en el método de McCabe-Thiele y tratando las mezclas como pseudobinarias. La descripción de estos ejemplos se ha enviado para su publicación y se encuentra actualmente en fase de revisión.

Referencias

- [1] Kister, H.Z. Distillation Design. McGraw Hill. Boston, MA, 1992.
- [2] Seader, J.D.; Henley, E.J.; Roper, D.K. Separation Process Principles: Chemical and Biochemical Operations. John Wiley & Sons, Inc. Hoboken, NJ, 2011.
- [3] Wankat, P.C. Separation Process Engineering. Pearson Education, Inc. Westford, MA, 2012
- [4] Dahm, K.D.; Hesketh, R.P.; Savelski, M.J. Is process simulation used effectively in ChE courses? Chem. Eng. Ed. 2002, 36(3), 192-203 (2002).
- [5] Gómez-Siurana, A.; Font-Escamilla, A. Development of a learning strategy to assist in explaining homotopy methods in the field of separation processes. Education for Chemical Engineers. 2012, 7(4). e181–e186.
- [6] Gómez-Siurana, A.; Font-Escamilla, A. Novel spreadsheets to enhance learning of rigorous equilibrium-based methods for multicomponent separations. Chem. Eng. Ed. 2022, 56(2), 125-134.