

11 208.

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

**Escuela Nacional de Estudios Profesionales
"ZARAGOZA"**



"SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION"

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A :
PABLO EDUARDO VALERO TEJEDA



Universidad Nacional
Autónoma de México



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 está 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.

I N D I C E

I.	INTRODUCCION.....	1
II.	GENERALIDADES.....	5
II.1.	Formulación de Problemas de Síntesis.....	10
II.2.	El Principio de "Descomposición" y la Clasificación de Problemas.....	15
II.3.	Métodos de Síntesis de Procesos.....	31
III.	SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION.....	40
III.1.	Revisión de Trabajos Previos.....	46
IV.	TECNICAS DE SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION SIN INTEGRACION DE ENERGIA....	120
IV.1.	Heurística.....	120
IV.1.1.	Ejemplos Ilustrados.....	130
IV.2.	Evolutiva.....	151
IV.2.1.	Método de Seader y Westerberg (1977).....	151
IV.2.1.1.	Ejemplos Ilustrados.....	156

IV.2.2.	Método de Nath y Motard (1981).....	165
IV.2.2.1.	Ejemplos Ilustrados.....	177
IV.2.3.	Método de Lu y Motard (1982).....	189
IV.2.3.1.	Ejemplos Ilustrados.....	206
IV.3.	Algoritmica.....	213
IV.3.1.	Ejemplos Ilustrados.....	220
V.	CONCLUSIONES.....	244
VI.	BIBLIOGRAFIA.....	247

A P E N D I C E S

A.	Procesos de Separación.....	267
B.	Clasificación de los Mapas de Curvas de Residuo.....	292

I. INTRODUCCION

Los objetivos del presente trabajo son:

1. Analizar los diferentes enfoques para la Síntesis de Procesos.
2. Analizar las metodologías y técnicas para la Síntesis de Secuencias de Separación sin Integración de Energía.
3. Analizar los métodos Heurísticos y Evolutivos en la solución de Secuencias de Separación sin Integración de Energía.
4. Aplicación de la Síntesis de Secuencias Heurística y Evolutiva en problemas específicos, ejemplificando los métodos de solución.
5. Destacar la importancia de la Síntesis de Secuencias de Separación en la Ingeniería Química como una herramienta necesaria en el diseño de procesos químicos.

En todo Proceso Químico, una parte significativa e importante en la inversión total y costo anual de operación

son los Procesos de Separación. Lo anterior ha conducido al desarrollo de métodos sistemáticos y racionales que generen las mejores secuencias en lo que se refiere a pureza de productos, menor inversión total, menores costos de operación y servicios.

Los procesos de Separación incluyen generalmente mezclas multicomponentes, que deben ser separadas eficientemente a través de la secuencia más factible, la cual debe contar con tipos de separadores y condiciones de operación adecuadas para efectuar dicha separación al menor costo, aislando los productos deseados.

El determinar la mejor secuencia de separación es el objetivo de la Síntesis de Secuencias de Separación.

La Síntesis de Secuencias de Separación es una área de la síntesis de procesos, que ha recibido mucha atención en los últimos años, lo que la ha colocado en el tercer lugar de las áreas más estudiadas, Nishida(1981).

La Síntesis de Procesos es una estrategia que determina la mejor alternativa de un proceso (arreglo de equipo, secuencia de etapas, etc.) sin tener que evaluar todas las posibilidades de un proceso.

En lo que se refiere al alcance del presente trabajo se tiene lo siguiente:

En el capítulo II se describe de manera general la Síntesis de procesos, la clasificación de los métodos de solución, así como sus correspondientes problemas de acuerdo a la naturaleza de los mismos, como son Rutas de Reacción, Redes de Intercambiadores de calor, Redes de Reactores, Recuperación de Energía, Estructuras de Control, Sistemas de Seguridad, Sistemas de Proceso Total y Secuencias de Separación con y sin integración de Energía.

El capítulo III está relacionado con las Secuencias de Separación, donde se describen los enfoques para la misma, las técnicas de solución que son empleadas, además de contener una revisión de trabajos previos desde los puntos de vista: Heurístico, el cual se basa en el análisis de las

alternativas de un proceso desarrolladas en experiencias similares anteriores; Evolutivo, que tiene como objetivo la adquisición sistemática de experiencias que permitan proponer modificaciones al diseño base tendientes a mejorarlo, y Algorítmico, que se basa en algoritmos matemáticos que generan todas las posibles alternativas y evaluarlas para seleccionar la mejor.

El capítulo IV incluye las técnicas de solución Heurística, Evolutiva y Algorítmica para secuencias de separación sin integración de energía, en virtud de que éstas deben ser entendidas primeramente que las técnicas que si integran la energía, ya que éstas últimas surgen a partir de las primeras.

En el capítulo V se presentan las conclusiones.

Finalmente, en los apéndices A y B se presentan los tipos de procesos de separación existentes y sus características, además de un catálogo de mapas de curvas de residuo empleadas en uno de los enfoques para el diseño y síntesis de destilaciones homogéneas azeotrópicas de mezclas ternarias.

II. GENERALIDADES

La Ingeniería de Procesos es un instrumento del -- cual se vale el Ingeniero Químico para diseñar en forma parcial o total un proceso cuyas principales características -- son: mínimo costo, obtención de productos deseados y máximo rendimiento, basándose únicamente en materias primas y servi- cios disponibles.

En el Diseño de Procesos, una de las tres activida- des fundamentales es la Síntesis de Procesos. En este campo se han realizado en los últimos años un gran número de inve- stigaciones que han conducido a la consecución de técnicas y herramientas que pueden ser utilizadas para generar y evaluar las mejores alternativas de un proceso.

La Síntesis de Procesos "es el paso en el diseño - donde los Ingenieros de Proceso seleccionan los componentes y cómo interconectarlos para crear un diagrama de flujo", - (Nishida, 1981).

La interconexión de las unidades es la llamada es-

estructura del sistema de proceso. La Síntesis del sistema de Proceso puede ser llevada a cabo a través de los siguientes pasos:

1. Definir los objetivos del sistema.
2. Definir el criterio para evaluar el sistema.
3. Seleccionar la tecnología para conseguir los objetivos.
4. Descomponer el problema original en un conjunto de tareas o problemas interconectados.
5. Realizar las tareas o problemas dentro de la tecnología seleccionada.

El diseño involucra las actividades desde la concepción del proceso hasta la construcción y operación del mismo, por lo que el diseño ha sido dividido en varias etapas de desarrollo, (Umeda, 1983) :

- Desarrollo del Proceso
- Planeación del Proceso
- Diseño Básico del Proceso
- Diseño de Detalle del Proceso
- Mejoramiento del Proceso

- Desarrollo del Proceso

Para especificaciones dadas de productos y materias primas, el desarrollo del proceso, consiste en establecer los conceptos óptimos o mejores del proceso para determinar la secuencia o esquema básico del proceso, utilizando la mínima información disponible. Aquí debe tomarse en cuenta las rutas de reacción, seleccionar los tipos de separadores, distribución de las especies, costos de operación, seguridad, condiciones de presión y temperatura, así como el criterio económico.

- Planeación del Proceso

La planeación del proceso esta dirigida a establecer una configuración balanceada de las unidades constituyentes del proceso, la cual de como resultado una mejor producción. Para determinar la estructura del sistema, se construye un diagrama de bloques y se plantea éste como un problema matemático, que debe ser resuelto para determinar la capacidad de producción, cantidad de materia prima y especificaciones de los productos de todas las unidades del proceso, así como para maximizar la utilidad. Otros de los parámetros que se toman en cuenta para la planeación son el valor del producto, costo de capital, costo -

de operación, mantenimiento, demanda del producto, tratamiento de desechos, etc.

- Diseño Básico del Proceso

La Síntesis de Procesos esta íntimamente relacionada a esta etapa. Aquí se debe determinar la estructura íntegra del proceso. De acuerdo a la definición formal de Síntesis y Diseño de Procesos, ambas, la estructura del sistema y las variables de diseño de las unidades tienen que ser determinadas. El sistema de proceso tiene que ser diseñado para encontrar los siguientes requerimientos funcionales:

- a) Una condición capaz de mantener las especificaciones de los productos por un cierto tiempo de operación.
- b) Una condición adaptable a cambios en las condiciones internas o externas sin que exista modificaciones en la estructura del sistema.
- c) Minimizar los costos de operación e inversión.

En esta etapa se establecen los Diagramas de Flujo de Proceso (DFP), los cuales deben satisfacer los requerimientos -

funcionales. Por lo que el objetivo en esta parte es la determinación de un sistema de proceso total que sea seguro y económicamente factible.

- Diseño de Detalle del Proceso

En esta parte, el diseño resultante de las etapas previas permanece básicamente inalterado, solamente acentúa la realización de conceptos de diseño en la forma de un sistema factible en la práctica. En ella lo principal es la construcción de diagramas de tubería e instrumentación (DTI) que muestren el equipo mecánico, tuberías, accesorios, instrumentos, etc. El diagrama de flujo de proceso también es usado para el diseño final de la planta, así como en su operación y mantenimiento.

- Mejoramiento del Proceso

El incremento de la eficiencia de la planta es indispensable en la operación comercial. Por lo anterior es necesario mejorar el funcionamiento de la misma. Esto se puede hacer a través de cambios en las condiciones presentes en la etapa de diseño del proceso. Para ello se pueden hacer dos tipos de cambios, uno es en las condiciones de la energía que es usada, y el otro

es en la disponibilidad de la materia prima.

Resumiendo, el mejoramiento se debe efectuar por medio del análisis y optimización de las condiciones del proceso.

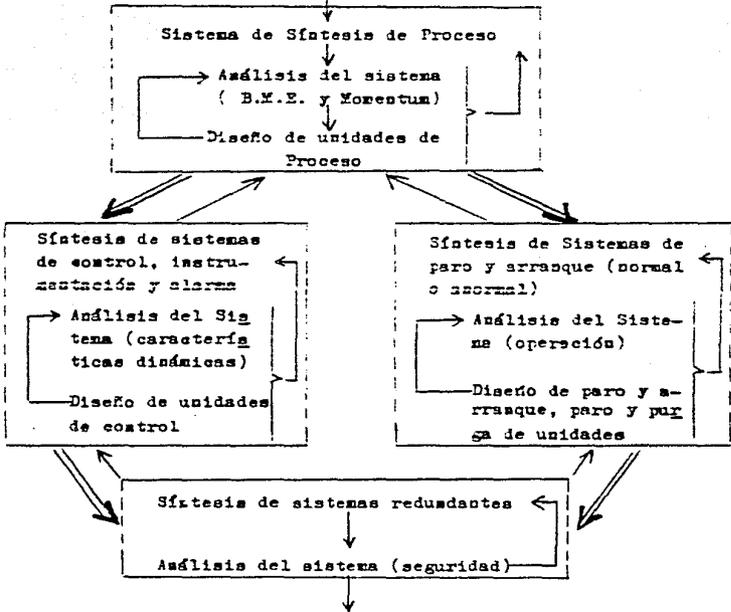
Como se mencionó anteriormente la Síntesis de Procesos involucra el análisis, optimización y/o evaluación, los cuales son frecuentemente iterativos (figura 1). Puesto que en la práctica la síntesis y el análisis son mutuamente independientes, es posible dividir el problema original en cuatro problemas con dos objetivos cada uno (figura 1). Incrementándose la estimación del criterio económico, inversión y costos de operación a través del paso secuencial de Síntesis, Análisis y Optimización.

II.1. Formulación de Problemas de Síntesis de Procesos

La Síntesis de un diagrama de flujo de proceso, es -- una de las partes más generales en el diseño de procesos. La figura 2 describe la interacción de los cuatro principales elementos que intervienen en el diseño de un proceso:

- Síntesis

Especificaciones de diseño con condiciones límite del sistema



Estructura del sistema y resultados de diseño

Figura 1. Interrelaciones entre Síntesis, Análisis y Optimización.

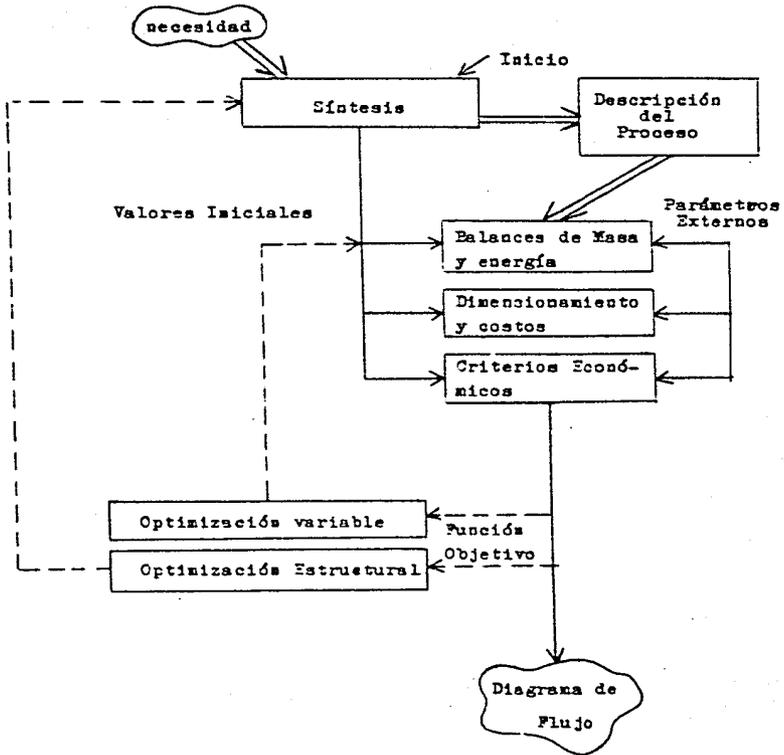


Figura 2. Estructura de las actividades del diseño de un esquema de proceso.

- Análisis
- Bvaluación
- Optimización

En el caso de la síntesis, es el paso inventivo en el diseño, en el cual, normalmente las salidas del sistema están - especificadas, al igual que las entradas, desconociéndose la estructura del mismo.

En contraste con la síntesis, el análisis involucra en tradas y características del sistema especificadas, mientras que las salidas son desconocidas y deben calcularse (figura 3).

Por lo tanto, la síntesis del mejor sistema de proceso requiere de decisiones en dos espacios de búsqueda, (Westerberg, 1980) :

- a) El de una estructura alternativa distinta de cómo está definida por la topología del proceso y naturaleza de las unidades que interactúan, y
- b) El de diseños alternativos para las unidades de proceso formadoras del sistema.

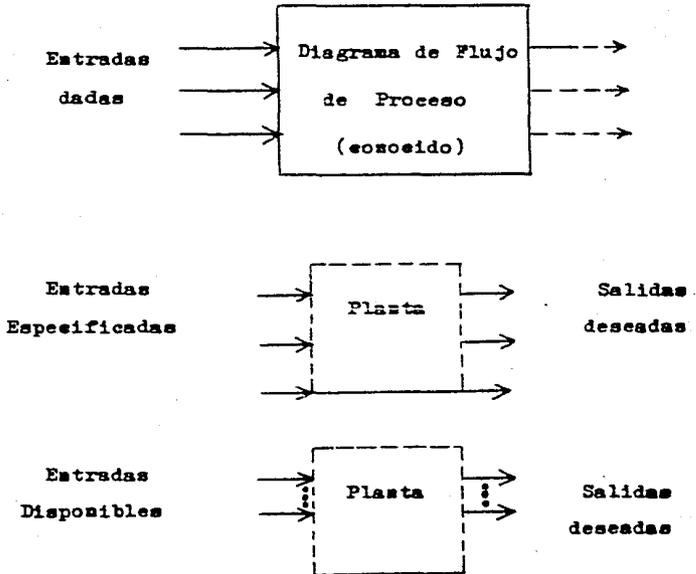


Figura 3. Esquema de Análisis y Síntesis

En el primer espacio, la optimización del sistema es un problema de programación entera (Grossman y Santibañez, 1980). En el segundo, el problema es de programación lineal.

La formulación apropiada del problema de síntesis es un paso crucial, ya que debe incluir todas las alternativas factibles y excluir todas las obsoletas, (Westerberg, 1980).

Por otro lado, para reducir el espacio de búsqueda de las estructuras alternativas, se pueden emplear diferentes métodos como los algorítmicos, heurísticos e híbridos o de consideraciones algorítmicas-heurísticas.

II.2. EL Principio de "Descomposición" y la Clasificación de Problemas

La Síntesis del mejor diagrama de flujo, es un problema de optimización multiobjetivo con una región de búsqueda definida como la unión de dos espacios, es decir, las estructuras alternativas y el diseño de unidades. El segundo espacio

es fácil de formular dentro de una estructura de conocimiento disponible acerca de las unidades de operación, mientras que el primero requiere un procedimiento sistemático y eficiente para desarrollar todas las estructuras alternativas.

El principio de descomposición intenta reconstruir un mapeo completo a varios niveles, usando operadores (unidades de proceso de un espacio homogéneo en cada nivel). Este principio establece:

"La construcción inductiva de un mapeo usando operadores de dos espacios separados, puede proceder a varios niveles independientemente del orden en que son considerados", (Stephanopoulos, 1981).

Los métodos de descomposición de problemas consisten básicamente en la división de un problema grande y complejo en un número dado de problemas simples que pueden resolverse fácilmente por la tecnología disponible, o a su vez dividirlos en otros más sencillos con solución conocida.

Existen varios métodos de descomposición como los siguientes: Sistema AIDES (Adaptive Initial Design Synthesize), propuesto por Sirola, Powers y Rudd , además Sirola y Rudd (1971) y Powers (1972). Sistema BALTAZAR (Procedimiento para la Síntesis de un proceso total) de Mahalec y Motard (1977, a y b), mostrado en la figura 4.

Lu y Motard(1985), también han diseñado un método para crear un diagrama de flujo aplicando una técnica de programación lineal.

Otro de los métodos eficientes de descomposición es el análisis Morfológico cuya idea central es la de identificar los objetivos fundamentales y establecer criterios que permitan determinar la validez de cualquier solución propuesta; una vez logrado esto, se deben identificar las funciones a desempeñar simultáneamente o secuencialmente para lograr los objetivos, y finalmente plantear todas las alternativas posibles, las cuales suelen ser los diferentes fenómenos físicos y químicos.

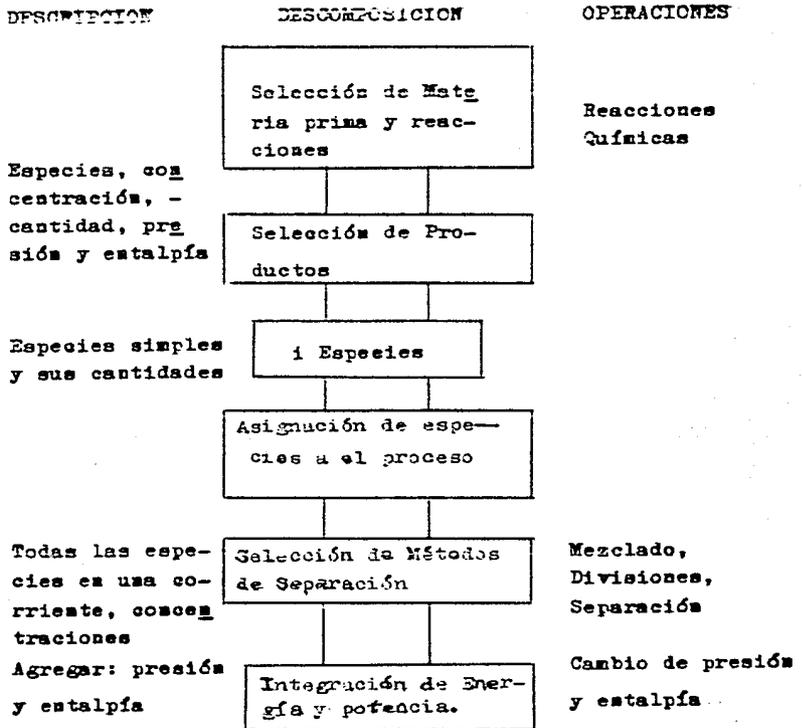


Figura 4. Descomposición de un problema de Síntesis Global.

así, para la Síntesis de Esquemas de Proceso, los siguientes niveles y sus correspondientes problemas pueden ser identificados como :

a) Rutas de Reacción

En este caso el problema es determinar la secuencia de reacciones, las cuales puedan ser utilizadas para obtener un producto dado, un intermedio o un subproducto, utilizando la materia prima disponible.

La Síntesis de Rutas de Reacción fue iniciada por químicos orgánicos para la determinación de moléculas grandes y complejas de manera más eficiente.

Este problema constituye una optimización multiobjetivo con tres objetivos principales: minimizar costos, número de pasos de reacción y maximizar la conversión y uso de -

materias primas.

Las estrategias de solución pueden dividirse en dos : Métodos basados en la lógica y los basados en la información.

Los primeros son recientes y emplean representaciones rigurosas para crear rutas de reacción alternativas desconocidas, pero generando a su vez un gran número de rutas obsoletas; trabajos sobre éstos métodos son los de Ugi y Hendrickson, (1972), (1976).

Los segundos utilizan la experiencia acumulada por los diseñadores y generan "n" secuencias que se atribuyen al ingenio e imaginación de éstos. Trabajos al respecto son los de Corey (1976), Wipke (1977), Gelernter (1971) y Govind Powers (1977).

En el espacio permitido para las secuencias de reacción, los principales factores a considerar son:

1. Las condiciones de operación en el espacio factible están expresadas por la temperatura y presión.

2. Energía Libre de Gibbs (ΔF)

3. Cambio de Entalpía de la reacción (ΔH)

Para condiciones de diseño el ΔG debe ser menor a 10 Kilocal/mol para una reacción o grupo de reacciones con pasos individuales menores o iguales a este valor.

Esta área ha recibido más atención en los últimos años, ya que ha resuelto varios problemas, cuyos resultados han producido considerables avances, principalmente en la -- Química Orgánica. La mayor contribución a esta área son los trabajos de Govind y Powers, Agnihotri y Motard (1981), May y Rudd (1976) y Rotstein y Stephanopoulos (1980).

b) Redes de Intercambiadores de Calor

Aquí lo principal es encontrar el costo mínimo de la red de intercambiadores de calor dadas las condiciones de temperatura para un conjunto de corrientes calientes a enfriar o viceversa, así como el requerimiento y disponibilidad de servicios.

Este problema surge en la búsqueda de condiciones de operación en reactores, separadores, etc. Esta área es de las más estudiadas y donde se han conseguido grandes avances en la práctica industrial. Esto se debe probablemente a que ha sido la mejor comprendida.

Tres resultados principales permiten la reducción efectiva del espacio completo de búsqueda en uno pequeño; - éstos proporcionan al diseñador: utilización mínima de servicios, número mínimo de intercambiadores de calor y localizar los obstáculos del proceso para una integración posterior de calor.

Los primeros dos resultados desarrollan los objetivos de la Síntesis, Hohmann (1971) y, el último identifica - fácilmente todas las descomposiciones factibles, Umeda (1979) y Linnhoff (1979).

Los métodos de solución iniciales de éste problema fueron algorítmicos, Hwa (1965) así como la asignación de éste a programación lineal, Kesler y Parker (1969), no obstante, presenta una "debilidad" que supone una función objetivo lineal.

Se han utilizado también búsquedas Heurísticas e Híbridas, Donaldson (1976) para localizar el óptimo, por medio de técnicas de ramificación y acotamiento. Los métodos Evolutivos juegan un importante papel aquí, Shah y Westerberg (1975). También los Algorítmicos rigurosos se han propuesto, McGalliard (1971).

Aunque el número de técnicas de búsqueda es impresionante, los principales avances en la solución del problema no se atribuyen a su eficacia, sino al número de cuestiones centrales contestadas.

Nishida, Stephanopoulos y Westerberg (1981) han identificado los siguientes pasos para la Síntesis de redes de intercambiadores de calor:

- (i) Estudio previo del establecimiento de objetivos y limitaciones,
- (ii) Invención de la red,
- (iii) Evolución.

Una búsqueda particular afecta al paso (ii) y al (iii), mientras que el paso (i) requiere una actitud diferen

te. El avance en este último ha producido Algoritmos simples, racionales y efectivos.

Trabajos futuros en esta área podrán realizarse en sistemas de enfriamiento, energía o potencia.

c) Redes de Reactores

Establecer la mejor configuración de reactores — usando dos modelos de mezclado (flujo tapón y perfecto) es — lo esencial en esta área, la cual ha sido estudiada como una optimización de los efectos de distribución de temperatura, — perfil de dilución del catalizador, tiempo de residencia, — etc.

Los objetivos de este problema son: obtener una — red que minimice costos y maximizar la producción.

Esta área ha permanecido relativamente inmóvil, — pero en el futuro incrementará su interés y número de investigaciones.

d) Recuperación de Energía

Aquí el objetivo es determinar una red de costo mínimo para la recuperación de energía, la cual debe emplear operaciones como intercambio de calor, expansión y/o refrigerantes para enfriamiento.

Esta Síntesis no está totalmente resuelta, sin embargo existen grandes esfuerzos que consideran la recuperación simultánea de calor y energía, Hlavacek (1978).

El área de recuperación de energía está poco estudiada y por lo mismo existen pocos trabajos, aunque se espera que en un futuro se contesten las cuestiones sobre la migración, Westerberg (1980).

e) Estructuras de Control

En esta parte la Síntesis establece una estructura por la selección de variables "manipulables y controlables" que satisface los objetivos de control.

Este problema determinará: qué variables deben ser medidas para monitorear completamente el proceso y cuáles -- deben usarse para integrar el circuito de control.

En este caso la economía no es tan importante, y -- el índice de rendimiento puede incluir errores en las condiciones de estudio como grado de integración entre circuitos, rango de operación, etc. Para obtener una estructura alternativa se usan procesos simples trasladados a una gráfica causa-efecto, además de conceptos de control, Govind y Powers -- (1977), (1978) .

Se han utilizado también métodos Heurísticos para -- limitar el espacio de búsqueda, Umeda (1978), analizando las estructuras de control a través de simulación dinámica hasta obtener la mejor.

La Síntesis de Estructuras de Control aún no ha sido probada en problemas reales, le falta información para establecer las variables críticas que afectan profundamente la -- estructura, desarrollar una configuración general e identificar las partes del proceso donde ésto es significativo, Nishida (1981).

f) Sistemas de Seguridad

Estos ofrecen una operación segura del proceso para un amplio rango de operación, por lo que el problema se establece como, Stephanopoulos (1981):

"Definir una topología de elementos medibles y variables manipulables tales como los valores de estado esperados en el proceso y que sean mínimos en un espacio limitado".

La economía para la implementación de estos sistemas es un objetivo adicional, pero no significativo. Para el desarrollo de las estructuras alternativas se usan proposiciones lógicas formalizadas a través del Algebra Booleana, -Rivas (1974). Aquéllas que satisfacen el objetivo de Síntesis se evalúan en base a rapidez de respuesta, alcance, simplicidad y reabilidad, Stephanopoulos (1981).

Esta área es también de las poco estudiadas.

g) Sistema de Proceso Total

En este caso el objetivo es desarrollar una configuración que convierta las materias primas en productos -
deseados de manera económica.

Dependiendo de la información dada, los siguientes problemas se pueden presentar: para una ruta de reacción un sistema inicial es sintetizado, para un sistema inicial se sintetizan aquéllos con mejor rendimiento y, para unidades de proceso se determina su interconexión. Umeda (1983).

Existen programas de cómputo desarrollados para -- resolver este problema cuyas técnicas de solución son de dos tipos:

- (i) aproximación sin una estructura inicial y
- (ii) parámetros estructurales; aproximación integrada.

Dentro de estas técnicas están los sistemas AIDES, Sirola, Powers y Rudd (1971), Sirola y Rudd (1971) y Powers (1972) y BALTAZAR, Mahalec y Motard (1977 a y b), los -
cuales utilizan procedimientos heurísticos. También se han em-
pleado evolutivos, Grossman y Santibañez (1979) y Lu y Motard (1985).

Por la dimensión y complejidad del problema de Sin tesis se han desarrollado algoritmos de solución que se vuelven utópicos y sólo resuelven pocos problemas, Stephanopoulos (1981).

h) Secuencias de Separación con Integración de Energía

Estas consisten en limitar el caso a las secuencias de destilación con integración de energía o acopladas térmicamente para conservar la energía. Esto es necesario para igualar el consumo de calor entre reboiler y condensador que acompañan la operación de separación, Umeda (1983).

El principio de descomposición aplica para generar todas las estructuras alternativas; por lo que para resolver el problema se usan técnicas algorítmicas de ramificación y acotamiento a través de una optimización de dos niveles, Sophos (1978). Se han comenzado a utilizar técnicas heurísticas, Sophos (1980), que conducen a reglas en términos de ΔT entre corrientes de domo y fondo en diferentes destilaciones y el contenido de calor de esas corrientes.

Lo anterior conduce a una virtual descomposición del problema. Además, usando consideraciones termodinámicas, Krishna (1978), se conduce a reglas útiles que han sido aplicadas en la resolución de problemas particulares.

1) Secuencias de Separación

Para las secuencias de separación el objetivo principal es sintetizar el proceso de costo mínimo el cual deberá aislar los productos específicos de una alimentación con condiciones conocidas como composición, flujo, presión y temperatura, Umeda (1983).

La generación sistemática de todas las secuencias (estructuras alternativas), es sencilla si todos los separadores están especificados. Hendry y Hughes (1972) introdujeron la noción de "listas ordenadas", demostrando fácilmente lo anterior, aunque la selección de la mejor estructura es difícil. Para ello se han sugerido varios métodos que se dividen en dos grandes categorías: aquéllos que intentan la síntesis empleando una sola técnica de separación (destilación) y las que utilizan varias.

Las secuencias de separación contribuyen significativamente al costo total de la planta. Por esta razón, la -- síntesis de la mejor ha tenido enorme interés industrial, -- por lo que existe una amplia literatura para técnicas de bús queda.

Debido a que éste es el objetivo del presente trabajo, el análisis de las técnicas para secuencias de separación será tratado con más detalle en el siguiente capítulo.

II. 3. Métodos de Síntesis de Procesos

Como la mayoría de los problemas de Síntesis son optimizaciones multiobjetivo, no lineales y enteras mixtas, -- Grossman y Santibañez (1980), una solución analítica o numérica está más allá de las simples habilidades del diseñador. Dependiendo de la formulación de los problemas, se debe seleccionar una estrategia favorable, la cual produzca la estructura mas adecuada.

En esta sección se intenta presentar de manera sig

temática las diferentes estrategias de solución o búsqueda - propuestas por varios autores para resolver el problema de - síntesis o sus correspondientes problemas.

Según Stephanopoulos (1981) una primera clasificación de los métodos de solución es :

- A. Los que toman en cuenta todas las estructuras alternativas, y
- B. Los que sólo consideran un conjunto limitado de - todas las alternativas.

Una segunda división produce las siguientes categorías dentro de las clases A o B:

- I. Métodos que consideran solamente configuraciones de estructuras (sistemas completamente sintetizados).
- II. Métodos que permiten desarrollos parciales de configuraciones con grados variables de terminación.

Relacionando ambas clasificaciones obtenemos las siguientes categorías :

1. Métodos Algorítmicos,
2. Métodos Heurísticos y
3. Métodos Heurísticos-Algorítmicos.

Dentro de estas categorías podemos distinguir - diferentes técnicas algorítmicas tales como:

- 1a. Programación dinámica
- 1b. Optimización multinivel
- 1c. Programación lineal
- 1d. Ramificación y acotamiento
- 1e. Varias técnicas de optimización

La figura 5 provee una representación gráfica de - las diferentes estrategias de búsqueda. Se puede apreciar que los métodos A.I.1 son complejos y poco prometedores, los B.II.2 son rápidos y simples, aunque pueden excluir alternativas "atractivas".

Un procedimiento de búsqueda no debe considerar to das las estructuras, ya que pueden obtenerse algunas obsole-
tas, para ello debe limitarse el espacio de búsqueda utili---

zando lo siguiente:

- Primeros; heurística, que contiene una representación - muy condensada de la experiencia pasada,
- Segundo; técnicas de ramificación y acotamiento, que permiten la exclusión de grandes familias obsoletas o búsqueda entre ellas de la mejor.
- Tercero; una estrategia evolutiva en conjunto con la - heurística o de una estrategia de ramificación y acota miento.

Independientemente del uso de cualquiera de las es trategias anteriores, el espacio es limitado después de usar técnicas de profundidad y amplitud.

A su vez, Umeda (1983) clasifica los métodos de - Síntesis en:

- a) Algorítmicos para optimización.
 - Técnicas de búsqueda directa, programación dinámica lineal o no lineal y/o mixta entera.

- b) Búsqueda
-Amplitud, profundidad y acotados.
- c) Heurísticos.
- d) Evolutivos.
- e) Heurísticos-Evolutivos.
- f) Heurísticos con ramificación y acotamiento.
- g) Búsqueda Evolutiva acotada.
- h) Heurísticos de profundidad.

Nishida, (1981) hace la clasificación de métodos-
más general :

A. Heurísticos

Es una técnica de diseño que se basa en experiencias anteriores de situaciones similares para desarrollar estructuras alternativas, a través de una serie de reglas Heurísticas o empíricas que conducen a la mejor, en la mayoría -

de los casos.

Aunque existen pocas reglas generales y confiables, éstas ofrecen buenas soluciones y ahorro considerable de dinero y esfuerzo, por lo que se recomiendan en las etapas iniciales del proceso.

B. Evolutivos

Tienen como objetivo la adquisición sistemática de experiencia que permita proponer modificaciones al diseño, las cuales tienden a mejorar la economía y confiabilidad del mismo, sin pasar por la etapa de implementación a escala comercial.

La idea de cualquier diseño evolutivo se centra en los modos de operación de los procesos para mejorar los sistemas de los mismos.

C. Algorítmicos

Están basados en algoritmos matemáticos que permiten generar todas las alternativas posibles, evaluarlas en -

forma explícita o implícita, con el objeto de determinar cuál es la más económica de acuerdo a una función objetivo previamente establecida. Estos métodos están limitados a la resolución de problemas cuyas características estén definidas, pero tiene la ventaja de garantizar la selección de la mejor configuración del proceso.

Resumiendo se puede decir que:

-La Síntesis de Procesos puede descomponerse en una serie de problemas.

- Cada problema puede ser formulado como una optimización multiobjetivo con variables de decisión enteras y continuas.

-El espacio completo de decisiones factibles puede en muchos casos ser definido por procedimientos formales y rigurosos de transformación que son simples de implementar en computadora.

-Este espacio factible para las decisiones continuas

puede ser fácilmente definido antes, por las especificaciones de diseño.

Por lo anterior es claro que los estudios matemáticos formales del problema de Síntesis de Procesos, encuentra dificultades en cuanto a algunos objetivos que son difíciles de cuantificar, pero en general estos problemas pueden ser resueltos con las técnicas existentes.

III. SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

Este problema de Síntesis es definido por Nath y Motard (1978) como:

"Dada una alimentación de condiciones conocidas -- (flujo, composición, presión y temperatura) una síntesis -- sistemática puede aislar los productos deseados a un costo mínimo", así:

$$\text{Minimizar } \phi = \sum_{i \in I} C_i(X_i) \dots \dots \dots (3.1)$$

donde:

- $i \in I$ = Unidad factible de separación,
- C_i = Costo anual del separador i ,
- I = Subconjunto de S ; S = Conjunto de todas las posibles configuraciones de separación que pueden -- producir los productos deseados,
- X_i = Variables de diseño del separador i ,
- $X = \cup (X_i)$.

El problema anterior es de programación no lineal , mixto entero, Grossman y Santibañez (1980), donde la solución es obtenida a través de todos los subconjuntos I que pueden ser generados de S y de un rango de valores de la variable X_i . Así, el diseñador se enfrenta a dos cuestiones:

1. Encontrar la mejor secuencia y la naturaleza de cada separador, y
2. Encontrar los mejores valores para las variables de diseño de cada separador (dimensiones y condiciones de operación).

Thompson y King (1972), también han definido el problema como sigue:

"Para una mezcla de N componentes que van a ser separados en N componentes puros se usan M métodos de separación". El número posible de secuencias de separación está dado por:

$$R = \frac{[2 (N - 1)]!}{N! (N - 1)!} M^{N - 1} \dots \dots \dots (3.2)$$

Cada separador debe dividir en dos corrientes la alimentación, cada componente de ésta debe existir en una de estas corrientes únicamente. La ecuación (3.2) está restringida a secuencias donde cualquier agente de separación masa (como en destilación extractiva) es recuperado por recirculación en el siguiente separador del que fue usado.

Cualquier enfoque basado en la enumeración y evaluación completa de todas las alternativas es una tarea muy abrumadora de cálculo, al igual que para valores de n y N (Tabla 1).

Esta área ha tenido gran auge debido a que los sistemas de separación surgen en los procesos químicos porque son necesarios para:

- Preparación de la alimentación,
- Separación de productos,
- Terminación de productos y
- Tratamiento de desechos.

Los principales métodos de solución que se emplean

NUMERO DE COMPONENTES N	NUMERO DE METODOS M	NUMERO DE SECUENCIAS
1	1	1
2	1	1
3	1	2
3	2	8
4	1	5
4	2	40
4	3	135
5	1	14
5	3	1134
9	5	558,593,750

Tabla 1. Número de Secuencias Simples de Separación
para diferentes valores de N y M.

aquí son de naturaleza Heurística, y los primeros intentos de trabajos al respecto son los de Lockhart (1947) y Rod y Marek (1959). Los que se han enfocado al uso de la heurística únicamente, han propuesto dos grandes grupos a partir de ella: los primeros incluyen reglas que determinan la estructura y los segundos involucran Heurística, la cual determina las condiciones de operación de los separadores y su diseño característico.

También se han utilizado técnicas Algorítmicas e Híbridas (algorítmicos-heurísticos), como el trabajo de Hendry y Hughes (1972) usando programación dinámica y el de Wegterberg (1975) con técnicas de ramificación y acotamiento.

Los métodos evolutivos como el de Nath y Motard (1978) también han sido empleados.

Analizando las diferentes estrategias de búsqueda empleadas aquí, se pueden observar los siguientes puntos:

a) Para Síntesis de Secuencias de Destilación:

- Existen reglas heurísticas eficientes con amplio rango de aplicación,

- Separaciones complejas no se han considerado, por lo que deben ser estudiadas.
- Un análisis termodinámico y numérico verifica las reglas heurísticas comúnmente usadas.
- Búsquedas algorítmicas extensivas producen mejores soluciones.

b) Para Síntesis de Secuencias de Separación generales:

- La estrategia de búsqueda debe basarse en secuencias parcialmente desarrolladas,
- La estrategia debe limitar el espacio de búsqueda usando la heurística,
- Síntesis Heurística-Evolutiva ofrece mejores resultados,
- El trabajo analítico debe ser bien entendido para la formulación de nuevas reglas heurísticas, y además el ordenamiento y evaluación de las an-

teriores.

III.1. Revisión de Trabajos Previos

En el campo de la Síntesis de Secuencias de Separación se han publicado un gran número de trabajos. El primero fue publicado hace más de cincuenta años y corresponde al de Thormann (1928). Desde entonces han aparecido artículos, los cuales se han clasificado en tres grandes grupos:

a) Síntesis Heurística

En esta primera clasificación existen los trabajos iniciales de las secuencias de separación. En 1947 Lockhart examinó secuencias directas e indirectas para tres casos: separación de gasolinas en isobutano, pentano y productos pesados por medio de una depropanizadora; separación de gasolinas en propano, isobutano, n-butano y productos pesados por medio de una destanizadora; y finalmente separación de gasolina en etano, propano, butano, productos pesados y ligeros. El modelo de diseño empleado fue el método --

teriores.

III.1. Revisión de Trabajos Previos

En el campo de la Síntesis de Secuencias de Separación se han publicado un gran número de trabajos. El primero fue publicado hace más de cincuenta años y corresponde al de Thormann (1928). Desde entonces han aparecido artículos, los cuales se han clasificado en tres grandes grupos:

a) Síntesis Neurística

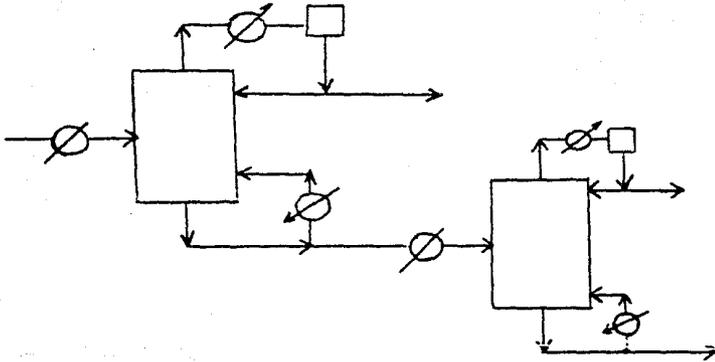
En esta primera clasificación existen los trabajos iniciales de las secuencias de separación. En 1947 Lockhart examinó secuencias directas e indirectas para tres casos: separación de gasolinas en isobutano, pentano y productos pesados por medio de una depropanizadora; separación de gasolinas en propano, isobutano, n-butano y productos pesados por medio de una deetanizadora; y finalmente separación de gasolina en etano, propano, butano, productos pesados y ligeros. El modelo de diseño empleado fue el método --

corto de Fenske-Underwood a reflujo constante de 1.2 veces el mínimo, la presión de operación varió de 50 a 450 psia. La altura y diámetro de la torre fueron estimados, también fueron determinados la inversión de capital inicial y el costo anual de operación.

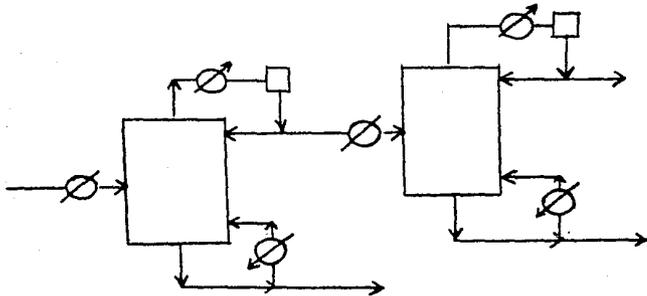
De este estudio, fueron desarrolladas las siguientes reglas heurísticas:

- 1.- La secuencia directa es preferida cuando están presentes grandes cantidades de productos ligeros.
- 2.- Cuando existen grandes cantidades de productos pesados se elige la secuencia invertida, (figura 6).

Harbert (1957), postuló que los requerimientos totales de calor dominan la evaluación económica, aquí el autor prefirió una secuencia, la cual minimizó la carga de calor.

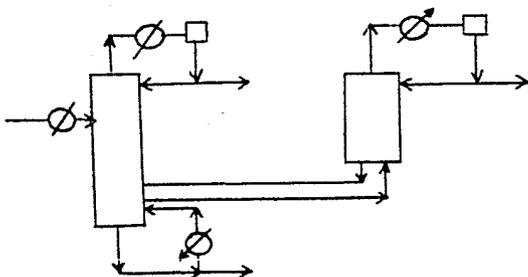


Diseño I Secuencia Directa

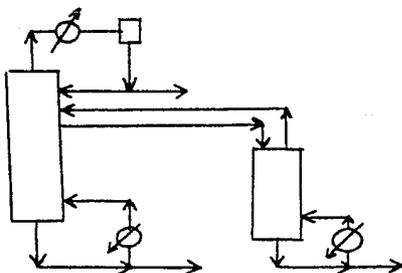


Diseño II Secuencia Invertida

Figura 6. Configuraciones Simples



Diseño III



Diseño IV

Figura 6. Configuraciones Simples (Continuación)

El modelo económico usado, no fue muy detallado ya que los costos de operación anual y de inversión de capital fueron solamente inferidos.

Aquí el autor identificó las siguientes reglas:

- 1.- Realizar las operaciones difíciles al último.
- 2.- Favorecer divisiones equimolares entre productos del domo y fondo.

Rod y Marek (1959) presentan años más tarde un -- nuevo enfoque. Se basaron en que el costo de la secuencia fue proporcional a la cantidad total de vapor y que esta proporcionalidad constante era idéntica para ambas secuencias, directa e indirecta. Ellos desarrollaron funciones objetivo analíticas para estimar la cantidad mínima de vapor en la composición de la alimentación y la de los componentes de volatilidad relativa.

Para este caso se estudió una mezcla de benceno-tolueno-etilbenceno a una presión de una atmósfera y un reflu-

jo de 1.25 veces el mínimo.

Aunque no se desarrollaron nuevas reglas, si confirmaron las propuestas por Lockhart (1947).

Así, la secuencia elegida fue la de menor cantidad de vapor.

Los trabajos con fraccionadores complejos comenzaron con Grunberg (1960), quien sugirió una configuración acoplada térmicamente.

Petlyuk (1965), emprendió un caso de estudio para comparar los diseños V (figura 7) y VIII (figura 8) con el I y II (figura 6).

Diez diferentes composiciones ternarias de alimentación, conteniendo domos y fondos equimolares, además de productos intermedios fueron considerados. Los resultados presentados indican que el diseño V requiere menos cantidad de vapor que el I o II; y también el VIII, cuando grandes cantidades de algunos productos intermedios aquí estuvieran presentes. Stupis (1970), confirmó estos resultados, además ---

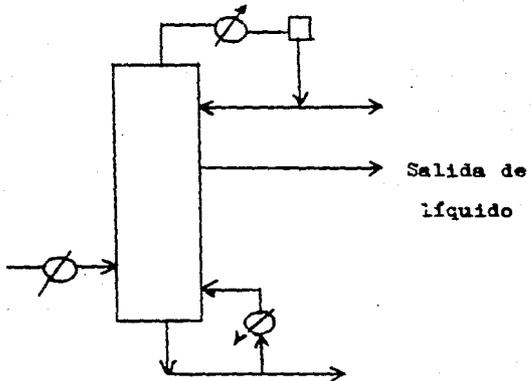
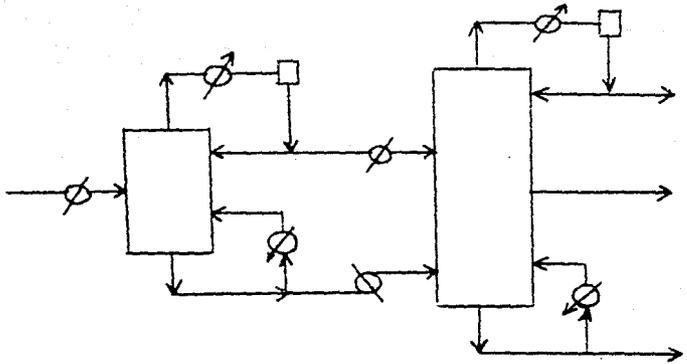


Figura 7. Diseños V, VI y VII

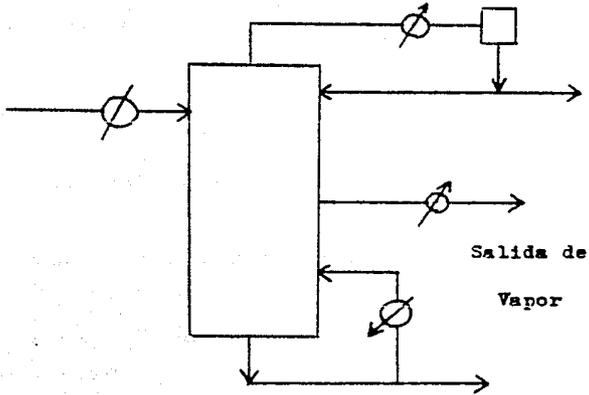


Figura 7. Diseños V, VI y VII (Continuación)

afirmó que el diseño V podría ser más estable a disturbios en la alimentación y que los requerimientos de vapor fueran a -proximadamente 20% menores que para los diseños I o II.

Heaven (1969), estudio un sistema de hidrocarburos ligeros e incorporó modelos económicos más detallados. El optimizó variables y comparó los diseños con los óptimos. Métodos cortos fueron usados para obtener las siguientes heurísticas:

- 1.- Remover los productos del domo uno por uno excepto los más pesados.
- 2.- Favorecer las divisiones equimolares entre productos del domo y fondo.
- 3.- Realizar separaciones de componentes adyacentes cuya volatilidad relativa es cercana a la unidad, en ausencia de otros componentes.
- 4.- Conservar las separaciones de alta recuperación hasta el último.

Nishimura y Hiraizumi (1971), examinaron las secuencias directas e indirectas usando métodos cortos en términos del volumen de la torre y requerimientos del reboiler. La re

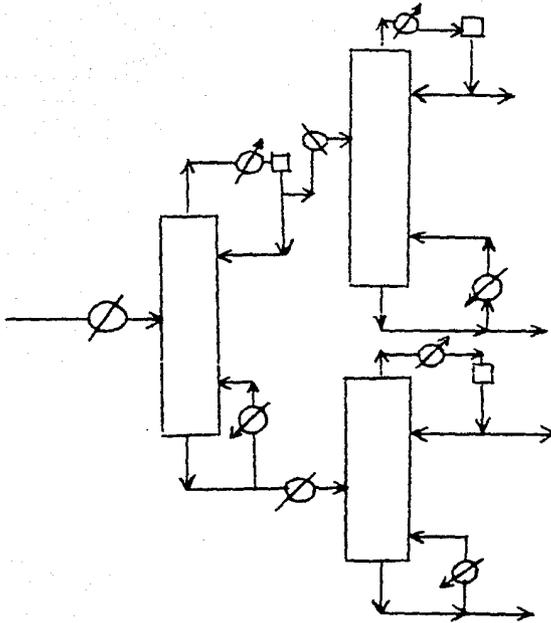


Figura 8. Diseño VIII

lación de reflujo fue optimizada y se estimó el costo de la torre usando un modelo sofisticado de costos. Mezclas de alimentación conteniendo benceno, tolueno y o-xileno se emplearon y condujeron a las siguientes heurísticas:

1.- Para alimentaciones de composición equimolar y aproximadamente igual a la volatilidad relativa adyacente favorecen la secuencia directa.

2.- Remover primero los componentes más abundantes.

Estos resultados han sido confirmados por Freshwater (1973).

Rudd (1973), presentó varias heurísticas para la Síntesis de un Proceso Total :

1.- Diferencia en la composición de las corrientes, domina económicamente el proceso; por lo que se debe seleccionar primero la secuencia de separación.

2.- Reducir la carga de separación cuanto sea posible dividiendo las corrientes.

3.- Favorecer diseños en los cuales la mayoría de los componentes deseados sean productos del domo.

4.- Evitar temperaturas y presiones extremas, principalmente en el domo y en el fondo.

Morozova y Platonov (1974), examinaron la configuración secuencial no ideal azeotrópica. Las técnicas involucran diagramas de fase multicomponente.

Maikov (1974), propuso la maximización de la entropía como un criterio para la elección de la secuencia mejor. Este presentó un problema de separación de cuatro componentes (etilbenceno, p-xileno, m-xileno, y o-xileno). Esta técnica ha sido discutida también por Liapis y Walter (1977) y Flower y Linnhoff (1977), aunque ellos lo relacionaron con las redes de intercambiadores de calor más que con las secuencias de separación.

Freshwater y Hendry (1975), examinaron las heurísticas anteriores, estudiando alimentaciones de 3, 4 y 5 componentes de hidrocarburos ligeros ideales a N-2 diferentes composiciones de la alimentación y a 3 niveles de recuperación (90, 95 y 99%). Diseños directos e invertidos se usaron y se obtuvieron a través de balances de masa y energía plato a plato, usando una presión en el domo de 100 psia y un reflujo de

1.25 veces el mínimo. También calcularon los costos totales anuales. De estos estudios se concluyó que en los casos de - muy alta recuperación (99%) y donde los componentes menos vo látiles dominan la alimentación, el orden de magnitud del cos to total anual no es muy significativo. Sin embargo, a bajas recuperaciones o con alimentaciones sin separaciones difíciles, las consideraciones secuenciales son muy importantes y con ello se confirmaron las heurísticas " remover los componentes uno por uno " y " remover los componentes más abundantes primero ".

Un estudio similar fue el de Kafarov (1975), quién examinó las heurísticas " remover los componentes uno por uno " y " favorecer divisiones equimolares del domo y fondo " , comparando los diagramas de flujo generados con programación dinámica con los generados con estas heurísticas (Bellman, 1957). Usando el método corto de Fenske-Underwood-Gilliland, - estudió un problema de separación de 10 componentes de alco hol usando una torre simple. Aunque el modelo de programación dinámica generó el diagrama de flujo de menor costo, el heurístico estuvo dentro del 5% del reportado como el mejor.

Tedder (1975), estudió los fraccionadores simples

y complejos. Este consideró el diseño VIII, sin embargo, esta configuración nunca fue establecida para ser la mejor. Su estudio involucró 6 alimentaciones ternarias de hidrocarburos ligeros, cada una a 7 diferentes composiciones. El método corto de Fenske-Underwood-Gilliland fue usado para dimensionar la altura y diámetro de la torre. El equipo adicional como bombas y alimentación a precalentadores fueron dimensionados y evaluados económicamente. Dos conjuntos de datos fueron usados, siendo el segundo 10 veces mayor que el primero. Los resultados de este trabajo fueron dos. Primero, la optimización de las variables es muy importante en ciertas configuraciones

Fijar arbitrariamente estas variables puede conducir a inclinarse hacia ciertas configuraciones. Segundo, el orden para establecer la heurística es un parámetro conocido como Índice de Fácil Separación (ESI) :

$$ESI = \frac{K_a K_c}{K_b^2} \dots\dots\dots(3.3)$$

donde:

K_a = Coeficiente de distribución de productos del domo.

K_b = Coeficiente de distribución de productos intermedios.

K_c = Coeficiente de distribución de productos del fondo.

Con ESI menor que 1.0 indica que la división A/B - es la más difícil.

Con este parámetro, dos gráficas ternarias fueron presentadas mostrando las regiones de optimalidad como una - función de la composición de la alimentación. Estas gráficas pueden ser resumidas como sigue (composición en por ciento en mol) :

Para ESI menor que 1.6 :

1.- Si de 40 a 80% de la alimentación son productos intermedios y la cantidad de productos del domo y fondo son casi iguales, entonces se favorece el diseño V.

2.- Si más del 50% de la alimentación es producto intermedio y menos del 5% son productos de fondo, se favorece el diseño VI.

3.- Si más del 50% son productos intermedios en la alimentación y menos del 5% son productos del domo, entonces se favorece el diseño VII.

4.- Si menos del 15% de la alimentación son productos intermedios y la cantidad de productos de fondo y domo - son casi iguales, se favorece el diseño III.

5.- En otro caso, favorecer los diseños I o II removiendo de primera los componentes más abundantes.

Para ESI mayor o igual a 1.6 :

1.- Si más del 50% de la alimentación son productos del fondo, entonces se favorece el diseño II.

2.- Si más del 50% de la alimentación son productos intermedios y del 5 al 20% son productos de fondo, entonces se favorece el diseño V.

3.- Si más del 50% de la alimentación son productos intermedios y menos del 5% son productos del fondo, se favorece el diseño VI.

4.- Si más del 50% de la alimentación son productos intermedios y menos del 5% son productos del domo, se favorece el diseño VII.

5.- Otro caso, se favorece el diseño III.

Bakshi y Gaddy (1977), examinaron 9 problemas de - separación por medio de una búsqueda exhaustiva en el espacio de solución. Todas las relaciones de reflujo se optimizaron y también la presión de la primera torre, usando una técnica de búsqueda al azar. Tres heurísticas se probaron, pero los

resultados no fueron presentados.

Hendry (1977), continuó los trabajos de Freshwater y Hendry (1975) para encontrar ejemplos que contradijeran la heurística " conservar las separaciones difíciles hasta el último ". Esta regla no fue válida cuando se tenían dos componentes en gran cantidad en la alimentación.

Doukas y Luybea (1978), completaron un estudio similar al de Tedder (1975). Ellos consideraron los diseños I, II, V, VI, y VII para la alimentación de benceno, tolueno y o-xileno a dos diferentes volatilidades. En todos los casos, la presión del domo fue de una atmósfera; el reflujo, la localización de la alimentación y las corrientes laterales de los platos se optimizaron. Esto fue hecho utilizando el método de Fenske-Underwood-Gilliland; para torres con corrientes laterales la optimización fue realizada empíricamente examinando diferentes valores de las variables. El costo total anual fue calculado usando los datos suministrados por Dryden y Furlow (1966). Los casos de estudio involucraron cualquier composición del domo o fondo fija y entonces conjuntos de otras dos composiciones comenzaron a ser iguales aproximadamente. Los resultados son similares a los de Tedder (1975).

En el conjunto de volatilidades relativas (6.7, 2.4, 1),

ESI= 1.2:

- 1.- Para una alimentación con 10% o menos del domo favorece el diseño VII.
- 2.- Para una alimentación de más del 10% del domo pero menos del 30% favorece el diseño V.
Como la volatilidad relativa decrece, el límite entre el diseño V y VII también decrece en su óptimo.
- 3.- Para una alimentación de menos o igual al 10% de fondos, se favorece el diseño VI.
- 4.- Para una alimentación mayor del 10% de fondos se favorece el diseño V.

A volatilidades relativas menores (3, 2, 1), ESI= 0.75, el diseño directo fue base para ser la mejor a concentraciones del fondo del 10 y 20%.

Freshwater (1981), continuó los trabajos y generó gráficas con lo cual el diseñador puede elegir una mejor configuración conociendo únicamente la composición de la alimentación, volatilidades relativas y especificaciones de pro

ductos. Este autor propuso los "pseudocomponentes" con volatilidades relativas convenientes. Las propiedades de estos -- pseudocomponentes fueron interpoladas con las de los componentes reales, dando como resultado 30 volatilidades relativas diferentes entre 1.1 y 5. Entonces, cada alimentación ternaria fue evaluada a 32 diferentes composiciones que dieron un total de más de 3 400 corrientes de alimentación. Lo anterior se hizo utilizando un modelo de plato a plato a 100 psia y 1.25 veces el reflujo mínimo. En este caso, la carga del reboiler fue tomada como función objetivo conduciendo a resultados que fueron presentados en gráficas ternarias en función de la volatilidad relativa y composición de la alimentación, mostrando las mejores regiones y el porcentaje de beneficio de tales selecciones. Lo más importante de lo anterior es lo siguiente:

- 1.- Para alimentación equimolar, la secuencia directa fue siempre mejor. Sin embargo, a volatilidades relativas menores de 1.1, la diferencia fue insignificante.
- 2.- Para alimentaciones con más del 80% de componentes ligeros, la secuencia directa fue siempre mejor.

- 3.- Para alimentaciones con componentes pesados -- predominantes, la secuencia invertida fue la mejor solamente cuando la volatilidad relativa entre A y B es menor que algunos valores dependientes del sistema de interés.

El autor examinó los índices de Heaven y fácil separación; los resultados indicaron que ningún índice fue válido para todos los casos estudiados. Para un ESI mayor que 1.6 no coinciden, aunque para ESI menor que la unidad, los resultados son convenientes con los datos por Tedder y Rudd (1978). En este caso Tedder atribuye esta diferencia al hecho de que Freshwater no optimizó sus toves con respecto a la presión de operación.

Nakkash (1980), extendió el trabajo de Freshwater (1981) y Hendry (1977), para mezclas de cuatro componentes. El procedimiento de modelado fue idéntico a los trabajos previos y los resultados fueron presentados en forma gráfica.

Nadgir y Liu (1984) presentaron un método con el cual obtuvieron menores costos que los reportados con técnicas heurísticas-evolutivas para varios problemas existentes

en la literatura. El método es muy directo y no requiere -- gran habilidad computacional o matemática profunda. Este se empleó para generar secuencias de separación multicomponentes iniciales, con lo cual demostraron su simplicidad y eficacia.

Su estudio consistió en aplicar las siguientes reglas:

- 1.- Favorecer las destilaciones ordinarias y remover primero el agente de separación masa (MSA).
- 2.- Evitar vacío y refrigeración.
- 3.- Favorecer pequeños conjuntos de productos.
- 4.- Remover primero los componentes corrosivos y peligrosos.
- 5.- Realizar las separaciones difíciles al último.
- 6.- Remover los componentes más abundantes primero.

7.- Favorecer divisiones equimolares (50/50).

Las primeras dos reglas deciden el método de separación a usar, las siguientes tres dan una guía acerca de -- las divisiones prohibidas por la especificación de productos así como la primera y última separación. Las dos restantes -- sintetizan la secuencia inicial, con la ayuda de un parámetro llamado Coeficiente de Fácil Separación (CES), el cual -- se define como :

$$CES = f \times \Delta \dots\dots\dots (3.4)$$

donde:

f = Flujo molar de productos de destilado y fondo, -
E/Do.D/B , dependiendo de su valor, sea menor o
igual a la unidad.

$\Delta = \Delta T$ que es la diferencia entre los puntos de ebullición de los componentes o $\alpha = (\alpha - 1) \times 100$, con
 $\alpha = a$ la volatilidad relativa o índice de separación entre los componentes a separar.

Este coeficiente junto con la regla 6 son esencial

mente los que sintetizan la secuencia inicial.

Los ejemplos que se resolvieron para probar la efi ciencia del método fueron la separación de parafinas ligeras por destilación ordinaria, la de olefinas y parafinas ligeras con destilación ordinaria, purificación de n-butileno con destilación extractiva y separación de productos de un cracking térmico de hidrocarburos.

Cada problema es comparado con los métodos exis-- tentes: el de Seader y Westerberg (1977) Heurístico-Evolutivo y el de Nath y Motard (1981) similar al anterior, obtenien dose siempre menores costos que los reportados por éstos.

b) Síntesis Evolutiva

La segunda técnica empleada es la Evolutiva, la cuál genera un diagrama de flujo inicial por medio de la heurís tica, y es continuamente mejorada por medio de un conjunto de reglas evolutivas hasta conseguir el mejor.

Uno de los primeros autores de esta área fue Powers

(1971) quién sugirió el uso de factores de peso aplicados a la heurística para determinar una buena configuración. Para ello aplicó las siguientes reglas:

- 1.- Favorecer la secuencia directa excepto si se encuentra lo escrito a continuación.
- 2.- Remover los componentes más abundantes primero.
- 3.- Dejar las separaciones más difíciles hasta el final.
- 4.- Remover los componentes corrosivos tan pronto como sea posible.

Thompeon y King (1972), estudiaron las destilaciones directa y extractiva sin integración de energía. Como Powers, ellos usaron factores de peso para favorecer ciertas reglas heurísticas. Inicialmente éstos fueron un conjunto de valores bajos para estimular las consideraciones, y entonces eliminar algunas alternativas. Los factores fueron adaptados hasta que el sistema convergió a las propiedades deseadas.

Los componentes estudiados fueron ideales y las condiciones de operación de las columnas no se optimizaron.

Las heurísticas usadas fueron las siguientes:

- 1.- Favorecer la generación de procesos con el menor número de productos.
- 2.- Favorecer el siguiente separador en la secuencia si es más barato.

Seader y Westerberg (1977) también consideraron las destilaciones directa y extractiva pero tampoco incluyeron la integración de energía.

Su procedimiento es destinado a generar un diagrama de flujo inicial a través de la heurística y entonces obtener todos los aproximados. Los diagramas resultantes fueron clasificados pero no optimizados, por lo que se eligió el mejor diagrama.

Las reglas heurísticas usadas fueron:

- 1.- Remover aquéllos componentes de volatilidad relativa adyacente cercana a la unidad hasta el final.
- 2.- Remover primero los componentes más abundantes cuando la diferencia en la proporción molar varía, pero no la volatilidad relativa.

3.- Cuando ninguna volatilidad relativa ni proporción molar cambia, entonces remover los componentes uno por uno desde el domo.

4.- Cuando los productos multicomponentes están especificados, favorecer secuencias que produzcan éstos directamente.

Dos ejemplos fueron considerados: el de n-butileno de Hendry y Hughes (1972) y el de hidrocarburos ligeros de Thompson y King (1972). En el primero, el procedimiento anterior encontró el mismo diagrama de flujo que con el de Hendry y Hughes, pero sólo se evaluaron ocho separadores contra 227 del trabajo original. Para el segundo caso, el mejor diagrama no fue encontrado; sin embargo el resultante fue muy cercano en costos. Además, el procedimiento anterior requirió la evaluación de sólo 11 separadores contra 35 del trabajo original.

Como muchos autores han apuntado, las reglas heurísticas presentan en muchos casos conflictos y es muy difícil determinar el orden de éstas. Por lo que Nath y Motard (1978) intentaron resolver tales conflictos definiendo una función

conocida como Coeficiente de Difícil Separación (CDS), el --
cual toma en cuenta estas reglas heurísticas:

- 1.- Favorecer las volatilidades relativas grandes.
- 2.- Favorecer divisiones equimolares.
- 3.- Favorecer divisiones difíciles claves
- 4.- Favorecer pocos productos de destilado.

El CDS es entonces definido como:

$$\text{CDS} = \frac{\log \left(\frac{s_{\text{PLK}}}{1-s_{\text{PLK}}} \right) \left(\frac{s_{\text{PHK}}}{1-s_{\text{PHK}}} \right)}{\log (\alpha_{\text{LK-HK}})} \left(\frac{D}{F} \right) \left(1 + \frac{(D-B)}{F} \right) \dots\dots\dots(3.5)$$

dende:

- B = Flujo de fondos
- D = Flujo del destilado,
- F = Flujo de la alimentación,
- HK = Referido a los componentes claves pesados,
- LK = Referido a los componentes claves ligeros,
- $s_{\text{p}1}$ = Fracción de división del componente 1 ,
- $\alpha_{\text{LK,HK}}$ = Volatilidad relativa entre los componentes claves

ligeros y pesados.

El primer término de la ecuación toma en cuenta la primera y tercera reglas; el segundo toma en cuenta la cuarta y el último a la segunda.

Finalmente la secuencia de separación es entonces generada eligiendo al separador de máximo coeficiente de difícil separación (CDS).

Lu y Motard (1982), propusieron una técnica heurística-evolutiva, aplicando primero siete reglas heurísticas de manera sistemática para crear una estructura inicial; la cual es entonces modificada sucesivamente aplicando cinco reglas evolutivas, obteniéndose la estructura final cuando a ésta ya no puede modificarse.

Esta estrategia puede mejorar destilaciones y separaciones que usen agentes de separación masa (MSA), tales como las extractivas, extracción líquida y de gases.

Las reglas heurísticas empleadas son:

- 1.- Generar pocos productos.
- 2.- Favorecer la destilación.
- 3.- Elegir la separación potencialmente más barata.
- 4.- No usar un MSA para aislar otro MSA.
- 5.- No se acepta una separación con $\alpha < \min$.
- 6.- Usar heurística como guía para el diseño de la unidad de separación.
- 7.- Si la destilación no es factible, probar otro tipo de separación.

Los autores modificaron las reglas 3, 6 y 7 de la siguiente forma:

Regla 3 : La evaluación de una función heurística.

Esta regla a su vez con las siguientes reglas :

- a) Reducir la carga total de separación en la secuencia.
- b) Favorecer grandes α_{LK-HK} .
- c) Favorecer una columna balanceada.
- d) Dejar las fracciones de alta recuperación hasta el final.
- e) Favorecer menos productos de destilado.

La función heurística H toma en consideración las reglas anteriores y se representa como:

$$H = H_L + H_D \dots\dots\dots(3.6)$$

donde:

H_L = Estimación del costo de la corriente de separación.

H_D = Estimación del costo de todas las separaciones resultantes corriente abajo.

Esta función también toma en cuenta la estimación del costo total de la secuencia.

La expresión matemática de H para destilación es:

$$H_L = \frac{\left[\log \frac{sp_{LK}}{1-sp_{LK}} \times \frac{sp_{HK}}{1-sp_{HK}} \right]}{\log(\alpha_{LK-HK})} \left(1 + \frac{2D}{D+B} \right) \left(1 + \frac{D-B}{D+B} \right) \dots(3.7)$$

$$H_D = EML \times AVG \times W \dots\dots\dots(3.8)$$

donde:

sp_{LK} ; sp_{HK} = Fracción de la división de componentes -
clavas pesados y ligeros.

D = Flujo de destilado.

B = Flujo del fondo.

α_{LK-HK} = Factor de separación.

EML = Estimación de la carga másica de separación corriente abajo.

AVG = Número promedio de etapas por unidad de carga másica de separación corriente a -
bajo.

W = Factor de peso para las separaciones corriente abajo.

H_L estima el costo de las separaciones por unidad de masa y H_D el de las separaciones corriente abajo.

Reglas 6 y 7 : También se dividen en reglas y se utilizan para seleccionar las condiciones de operación de cada unidad e identificar que otro tipo de separación puede utilizarse si la destilación no es factible.

Las reglas evolutivas empleadas son:

- 1.- Dudar de la regla heurística 1.
- 2.- a) Si se usa refrigeración, probar absorción.
b) Si se usa una columna de vacío, probar extracción.
- 3.- Examinar las estructuras aproximadas, si la función H está dentro de un 5%.
- 4.- Probar un separador usando un MSA si :
$$\text{Máx}(\alpha_{\text{MSA}}) < \text{Máx}(\alpha)^{1.95}$$

todas todas
divisiones divisiones
- 5.- Examinar las aproximaciones para decidir si la separación del MSA debe retrasarse.
- 6.- Probar otras separaciones si :
 - a) Rmín del inmediato sucesor >>> Rmín de la unidad en consideración y
 - b) El costo del inmediato sucesor >>> costo de la unidad en consideración.

En este caso se han modificado las reglas 2 y 3 .

Este método es comparado contra el de Nath y Motard (1981) y el de Thompson y King (1972) que utilizan otros enfoques.

Lu y Motard (1985) nuevamente diseñaron otro método sistemático basado en computación para sintetizar un diagrama de flujo total. La estrategia utilizada es la de una agrupación de objetivos y un algoritmo sucesivo de programación lineal.

El procedimiento inicia con la creación de dos matrices representando los objetivos y las fuentes que, al aplicarle programación lineal crea un diagrama preliminar cuyas tareas de separación son sintetizadas y su costo estimado usando siete reglas heurísticas y seis evolutivas.

Lo significativo de este trabajo es la presentación de varias nuevas técnicas para el diseño de procesos y:

- La aplicación de la inteligencia artificial es provista útilmente en los procedimientos de Síntesis.

- El enfoque propuesto aproxima a la solución, imitando al procedimiento empleado por los ingenieros.

- Se hace énfasis sobre la teoría de Síntesis de separación, la cual genera las estructuras del proceso como unidades flash, mezcladores, divisores de corriente, etc. Para transferir varias mezclas disponibles como fuentes en un conjunto deseado de productos.

El proceso evolutivo descrito aquí es el primer intento para describir la transición de una estructura de proceso en otra y el uso de estas relaciones para encontrar el mejor esquema.

La solución de problemas indica que este procedimiento genera diagramas similares a los establecidos en procesos industriales, los cuales pueden ser mejorados.

Para la creación de la estructura inicial se usan los siguientes pasos:

1.- Para cada corriente de producto, examine las materias primas, si éstas contienen todas las especies requeridas en la corriente y cantidad de materia prima, ir a 3.

2.- Examinar las reacciones disponibles y seleccionar una secuencia para las materias primas disponibles.

3.- Crear una corriente conteniendo subproductos globales.

4.- Construir la matriz objetivo con las corrientes de producto, de entrada al reactor y subproductos.

5.- Construir la matriz fuente con las materias primas, corrientes de salida del reactor y subproductos.

6.- Con la corriente objetivo y la matriz fuente encen -

trar el nivel inferior de la agrupación de objetivos válida así como la fuente potencial.

7.- Aplicar la técnica de programación lineal.

8.- Usar el resultado de 7 para generar la estructura.

9.- Realizar un balance de masa en el divisor y generar una corriente conteniendo el residuo de la fuente original, siendo ésta una nueva fuente.

10.- Realizar un balance de masa en cada mezclador asociado a un objetivo.

11.- Si la matriz objetivo se hace nula, parar.

12.- Cualquier otro caso ir a 6.

Una vez formada la estructura inicial por medio de los pasos anteriores se aplican las siguientes reglas:

1.- Eliminar redundancias del proceso como:

- a) Una salida de un divisor no puede ser entrada de otro.
- b) Un orificio de salida de un mezclador no puede ser entrada de otro.
- c) Todas las salidas de un divisor no pueden ser entradas de un mezclador.

2.- Realizar estas separaciones en la misma tasa.

- 3.- Suprimir los separadores costosos usando otro más barato.
- 4.- Reducir la cantidad de derivaciones y hacer la separación más directa.
- 5.- Evitar el uso de separadores pequeños probando otro tipo de separadores.
- 6.- Aceptar la intuición del diseñador.
- 7.- Utilizar circuitos de recirculación para reducir el consumo de materias primas.

Este algoritmo fue probado en tres problemas simples, el primero con una mezcla de butano, pentano, hexano y heptano, el segundo con la manufactura de estireno y el último con la producción de benceno.

c) Síntesis Algorítmica

Esta última técnica fue considerada por vez primera por Hendry y Hughes (1972), los cuales consideraron destilación extractiva sin integración de energía.

El procedimiento empleado fue la programación diná-

rica de Bellman (1957), con una lista de procesamiento con la cual los componentes en la alimentación original son clasificados de acuerdo a sus propiedades físicas. Para destilación directa la propiedad es la volatilidad relativa.

Si la clasificación cambia con algunas variables - de estado, entonces se pueden multiplicar las listas ordenadas contrarrestando así el problema original.

Una vez que las listas ordenadas están establecidas, el procedimiento de programación dinámica es implementado.

Cada problema fue optimizado empezando con las torres corriendo abajo y siguiendo corriente arriba. El inconveniente de este procedimiento es que no maneja recirculaciones, diferencias de presión en torres individuales y divisiones difíciles, además deben examinarse muchos separadores; convirtiéndose los requerimientos computacionales en -- excesivos al incrementar el número de componentes o proyectos de separación.

Un sistema de seis componentes para purificar n-butano fue considerado y el mejor resultado fue encontrado al evaluar 227 diferentes separadores.

Rathore (1974 a y b), extendió el trabajo de Hendry y Hughes para incluir la integración de energía. En su primer trabajo (1974 a), la presión de la torre fue fijada a 100 psia, la fracción de vaporización es cero y el reflujo fue optimizado. El método corto de Fenske-Underwood-Gilliland fue usado para estimar las torres y el costo total anual.

En el segundo (1974 b), la presión de la torre fue optimizada para cada diseño y solo se consideraron destilaciones directas.

Para ambos trabajos se empleó la separación de cinco componentes de parafinas ligeras, la cual mostró que las secuencias sin integración de energía forman un límite superior a las de integración.

Westerberg y Stephanopoulos (1975) desarrollaron un procedimiento algo diferente a los anteriores.

El método empleado usó el procesamiento de listas con dos niveles de descomposición en conjunto con las técnicas de ramificación y acotamiento para encontrar el óptimo o uno muy cercano buscando en toda la zona de solución como se requiere en programación dinámica.

El procedimiento es válido para destilaciones extractiva y directa, sin embargo, éste no considera la integración de energía.

El procedimiento es más eficiente que el de Hendry y Hughes, sin embargo, el aspecto computacional en grandes problemas puede ser enorme.

Rodrigo y Seader (1975), desarrollaron un procedimiento similar para considerar las destilaciones directa y extractiva sin integración de energía.

El método establece las listas ordenadas de todos los posibles problemas siguiendo una búsqueda de acotamiento en orden heurístico directamente sobre una gráfica. Las variables de estado de los separadores individuales no fueron optimizadas pero algunas de ellas son elegidas en

lugar de las heurísticas.

Al igual que con Westerberg y Stephanopoulos, el espacio total de solución no necesita ser examinado.

Este procedimiento fue reportado como muy eficiente en términos de memoria y tiempo de computación, al igual que muchos otros, sin embargo, es menos eficiente que el de Thompson y King (1972).

La heurística empleada en este caso fue: "Realizar las separaciones más baratas primero" y fue aplicada a un problema de separación de tres componentes.

Gomez y Seader (1976), mejoraron en algo el procedimiento anterior, considerando destilación extractiva y directa sin integración de energía, además de no optimizar las variables de estado para las unidades individuales.

La estrategia utiliza una búsqueda ordenada, la cual predice los límites inferiores por medio de algunas heurísticas. Este procedimiento es más eficiente que los de Hendry y Hughes (1972) y Rodrigo y Seader (1975) y además fue aplica-

do a la separación de parafinas ligeras propuesta por Rathore (1974 a y b), obteniéndose la mejor secuencia evaluando sólo 30 separadores.

Sophos (1978), empleó un enfoque diferente puesto que su objetivo fue sintetizar una buena secuencia con integración de energía. Ellos desarrollaron un esquema de integración de calor primero y posteriormente determinaron el esquema de separación a igualar. Para generar la red de intercambiadores de calor usaron el método de matriz de corrientes introducido por Pho y Lapidus (1973). La meta principal fue recuperar la mayor cantidad de energía utilizando para ello técnicas de ramificación y acotamiento basadas en el método de optimización a dos niveles de Stephanopoulos y Westerberg (1976).

Este procedimiento también fue aplicado al ejemplo de la separación de parafinas de Rathore (1974 a y b), sin embargo ninguna de las variables de operación fue optimizada, aunque algunas de las presiones de operación fueron fijadas para satisfacer la temperatura de los intercambiadores integrados.

En un reciente trabajo de Morari y Faith (1980), - también consideraron la destilación directa con integración de energía por medio de una técnica de listas ordenadas y - una estrategia acotada, que generan los límites inferiores (basados en la teoría de Lagrange para programación lineal) sobre el costo óptimo sin considerar todas las posibles i-gualdades entre los intercambiadores de calor. Una ventaja de este procedimiento es que los requerimientos computacionales no se incrementan rápido al aumentar el número de compo-nentes.

También el diagrama de flujo inicial fue generado con la heurística, empleando a su vez el ejemplo de separación de parafinas ligeras de Rathore (1974 a y b).

Glinos y Malone (1985), presentan un nuevo enfoque a través de un criterio analítico simple, el cual aplica a la selección de secuencias para mezclas ideales. Se usa un - modelo simple de costos junto con un método de solución de - las ecuaciones de Underwood para determinar la cantidad total de vapor, la cual es una variable clave en el diseño.

En este estudio se considera que la Síntesis de se

cuencias de Separación es el paso importante en la invención de un diagrama de flujo de proceso, para el cual se usan normalmente reglas heurísticas, las cuales en algunas ocasiones pueden ser contradictorias, como es el caso de:

- 1.- Remover los componentes ligeros primero.
- 2.- Remover los componentes más abundantes primero.
- 3.- Conservar las separaciones difíciles hasta el final.
- 4.- Favorecer divisiones equimolares (50/50).

Generalmente la selección de la mejor secuencia depende de la volatilidad relativa y composición de la alimentación, siendo necesario un criterio que incluya a ambas. -- Existen algunos de este tipo pero son intuitivos por lo que aquí se propone una forma funcional apropiada de la que se derivan soluciones aproximadas de las ecuaciones de diseño y un análisis del orden de magnitud de las ecuaciones de costo.

Los resultados obtenidos indican que el enfoque analítico da mejores predicciones que las reglas heurísticas, ya que eliminan los conflictos e inexactitudes entre ellas.

El trabajo consiste en usar en lugar de intuición,

soluciones aproximadas de las ecuaciones de diseño que son comúnmente aceptadas junto con argumentos de orden de magnitud. El modelo de costos usado inicia por considerar el costo de separación, el cual estima el total anual de una columna en términos del número de platos N y el flujo de vapor V de la siguiente forma, Marquez (1982):

$$TAC = C_0 N^{0.82} V^{0.53} + C_1 V^{0.55} + C_2 V \dots (3.9)$$

donde:

TAC = Costo total anualizado de una torre

C_0, C_1, C_2 = Coeficientes de costo para el modelo

El primer término representa el costo de capital anualizado de la correlación de Guthrie, y asume que la altura de la columna es proporcional al número de platos, y el diámetro al flujo de vapor al cuadrado. El segundo corresponde al costo anualizado combinado del reboiler y el condensador, también de la correlación de Guthrie, y asumiendo que el área de los intercambiadores de calor es proporcional al flujo de vapor. El último término es la combinación del costo de vapor y el agua de enfriamiento que son proporcionales al flujo de vapor.

Los coeficientes de costo dependen de puntos de ebullición, calores de vaporización, etc. , y pueden ser evaluados para cualquier sistema.

La ecuación anterior puede ser linealizada en base al modelo de costo incremental de Happel y Jordan (1975), quedando de la siguiente forma:

$$TAC = TAC_0 + K_1 N + K_2 V \dots\dots\dots(3.10)$$

donde:

K_1 y K_2 = Coeficientes del modelo de costos lineal.

La linealización de la ecuación 3.9 puede hacerse tan cercana como se desee por medio de iteraciones.

Para escribir el modelo anterior en terminos de la composición y de λ , primero se usa la aproximación de Gilliland, $N/N_m = 2$, entonces, utilizando la ecuación de Fenske (para el número mínimo de platos con 50% de eficiencia) para eliminar N se obtiene lo siguiente:

$$N = 4 \frac{\ln \left[\frac{sp_{LK}}{1-sp_{LK}} \cdot \frac{sp_{HK}}{1-sp_{HK}} \right]}{\ln \alpha_{LK, HK}} = 4 \frac{\ln S}{\ln \alpha} \dots\dots\dots(3.11)$$

donde:

sp_i = Fracción de recuperación de los componentes claves ligeros o pesados

α_{ij} = Volatilidad relativa del componente i con respecto al j

Para estimar el flujo de vapor se usa un balance de materia y la regla común $R = 1.2 R_m$, obteniéndose:

$$V = (1.2 R_m + 1) D \dots\dots\dots(3.12)$$

Usando ahora la ecuación aproximada de refluje mínimo para alimentación de líquido saturado de Glinos y Malone (1983) para una mezcla ternaria se tiene:

Para A/BC :

$$R_m = \frac{\alpha_B(X_A + X_B)}{fX_A(\alpha_A - \alpha_B)} + \frac{X_C}{fX_A(\alpha_A - 1)} \dots\dots\dots(3.13)$$

donde: X_i = fracción mol del componente i en la alimentación,
 f = factor de corrección dado por;

$$f = 1 + 1/(100X_B) \dots\dots\dots(3.14)$$

α_i = volatilidad relativa del componente i .

y para AB/C :

$$R_m = \frac{(X_B + X_C)/(\alpha_B - 1) + X_A/(\alpha_A - 1)}{(X_A + X_B)(1 + X_A X_C)} \dots\dots\dots(3.15)$$

Para una solución binaria las ecuaciones de Underwood son:

$$\text{Para B/C : } R_m = \frac{1 - X_A}{(\alpha_B - 1)X_B} \dots\dots\dots(3.16)$$

$$\text{y A/B : } R_m = \frac{\alpha_B(1 - X_C)}{(\alpha_A - \alpha_B)X_A} \dots\dots\dots(3.17)$$

Así combinando las ecuaciones 3. 10 a la 3. 17 se desarrolla el modelo de costos para sistemas de separación.

Los autores consideran el caso más simple y común donde $n - 1$ columnas son usadas para separar n componentes en un tren de destilación, restringiendo el análisis a mezclas ternarias con dos alternativas, una directa I y una indirecta II, siendo la diferencia entre éstas:

$$\Delta = TAC_I - TAC_{II} \dots\dots\dots(3.18)$$

Cuando Δ es negativo, se favorece la secuencia directa y si es positivo, la indirecta.

Usando la ecuación 3.10 para describir el costo de la columna y asumiendo que los coeficientes de costo de cada una son aproximadamente los mismos, entonces tenemos:

$$\Delta = K_1 (N_{AB}^I - N_{AB}^{II} + N_{BC}^I - N_{BC}^{II}) + K_2 (v_{AB}^I - v_{AB}^{II} + v_{BC}^I - v_{BC}^{II}) \dots\dots\dots(3.19)$$

Como el balance de vapor en la columna es normalmente el factor dominante en la diferencia de costos, éste se puede describir como:

$$\frac{\Delta}{K_2 P} = V_{AB}^I - V_{AB}^{II} + V_{BC}^I - V_{BC}^{II} \dots\dots(3.20)$$

Si se sustituye la ecuación 3.12 a través de la 3.15 en la 3.19 se obtiene:

$$\frac{\Delta V}{P} = 1.2 \frac{X_B + X_C}{\alpha_B - 1} \cdot \frac{X_A X_C}{1 + X_A X_C} + \frac{1}{\alpha_A - 1} \cdot \frac{X_C - f X_A + X_A X_C^2}{f(1 + X_A X_C)} - \frac{\alpha_B(X_A + X_B)}{\alpha_A - B} \cdot \frac{f - 1}{f} - X_A \dots\dots(3.21)$$

Esta es la ecuación que da el criterio analítico para la selección de la secuencia. El factor f es significativo sólo cuando X_B es menor que 0.2, de otro modo el último término es eliminado. Este factor no es significativo para la ecuación 3.13 (porcentaje de error = 3.5 cuando f = 1), pero puede tener efecto sobre ΔV .

El método es válido para una corriente simple de alimentación con valores constantes de volatilidad relativa.

Se puede hacer extensión a sistemas multicomponen-

tes, ya que existen expresiones aproximadas para la relación de mínimo reflujo en el trabajo de Glina y Malone (1983).- pero debe incluirse el efecto de recirculación de corrientes impuras y de múltiple alimentación. En el caso de sistemas - no ideales (volatilidad no constante) es más difícil, ya que las ecuaciones de Fenske y Underwood no son válidas.

Existe un estudio sobre el diseño y síntesis de -- destilaciones homogéneas azeotrópicas propuesto por varios - autores que consta de tres partes:

Primera: Formulación del problema para una columna simple, Van Dongen y Doherty (1985). Ellos afirman que el -- conjunto de diferencias finitas de un balance de masa que go biernan el perfil de composiciones de una columna es aproxima- damente un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales, las cuales son usadas para demostrar la existen- cia de una región de destilación azeotrópica similar a las - observadas en un proceso de destilación simple. La solución de las ecuaciones produce perfiles de composición similares a los predichos por las diferencias finitas, demostrando así la similitud entre los perfiles para las curvas de residuo de

destilación simple. Esta similitud sugiere que el mapa de - las curvas de residuo de una destilación simple, contenga la información esencial para el diseño.

El propósito de este trabajo es desarrollar un nuevo enfoque para la destilación extractiva y azeotrópica, la cual fue realizada por primera vez en 1902 por Young y se convirtió en un proceso continuo en 1915 por Kubierschly.

La estrategia básica seguida en esta parte y las - subsecuentes será para descartar las diferencias finitas convencionales del balance de masa y energía plato a plato, y - en su lugar utilizar un conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales aproximadas.

La formulación del problema para una columna simple muestra las relaciones entre un mapa de curva de residuo de una destilación simple con los diagramas de una continua.

Cuando se intenta separar una mezcla binaria azeotrópica se necesita agregar un "arrastrador" que sea capaz de modificar las propiedades de la mezcla de tal forma que pueda

separarla. Para destilación simple, la influencia de este tercer componente se resume en una curva de residuo la cual es dividida en regiones separadas por los límites de destilación simple las cuales actúan como barreras para las curvas de residuo en cada región, (figura 9).

El modelo empleado aquí es el de aproximación diferencial para columnas azotrópicas, el cual resuelve el conjunto finito de ecuaciones diferenciales en forma de una serie de puntos discretos, los cuales pueden conectarse por una línea recta. Por la aproximación de ecuaciones diferenciales se puede reducir enormemente el tamaño del problema. El proceso de transformación de destilación simple con aproximación finita a aproximación diferencial es el siguiente:

- Primero: Realizar un balance de masa alrededor de un plato "n" arbitrario en la sección de agotamiento (figura 10):

$$X_{1,n+1} = \frac{S}{S+1} \cdot Y_{1,n} + \frac{1}{S+1} \cdot X_{1,B} \dots\dots\dots (3.22)$$

donde:

X_1 y Y_1 = Composiciones del líquido y vapor

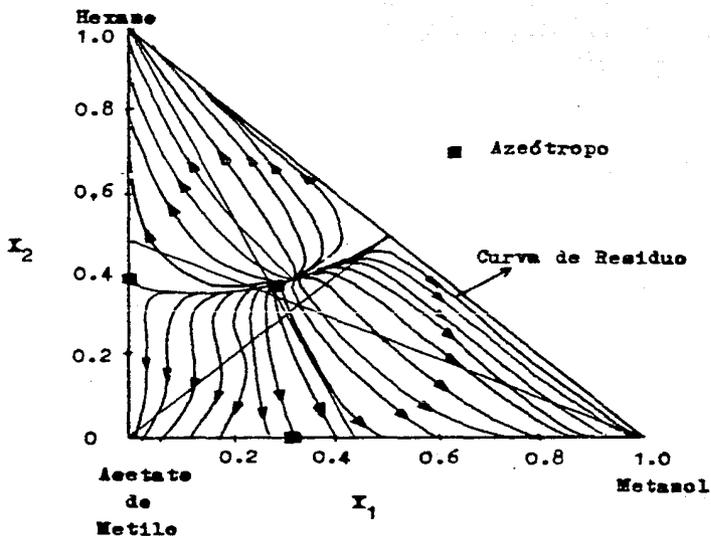


Figura 9 Mapa de una Curva de Residuo para el Sistema Metanol/Hexano/Acetato de Metilo a 1 Atm de presión.

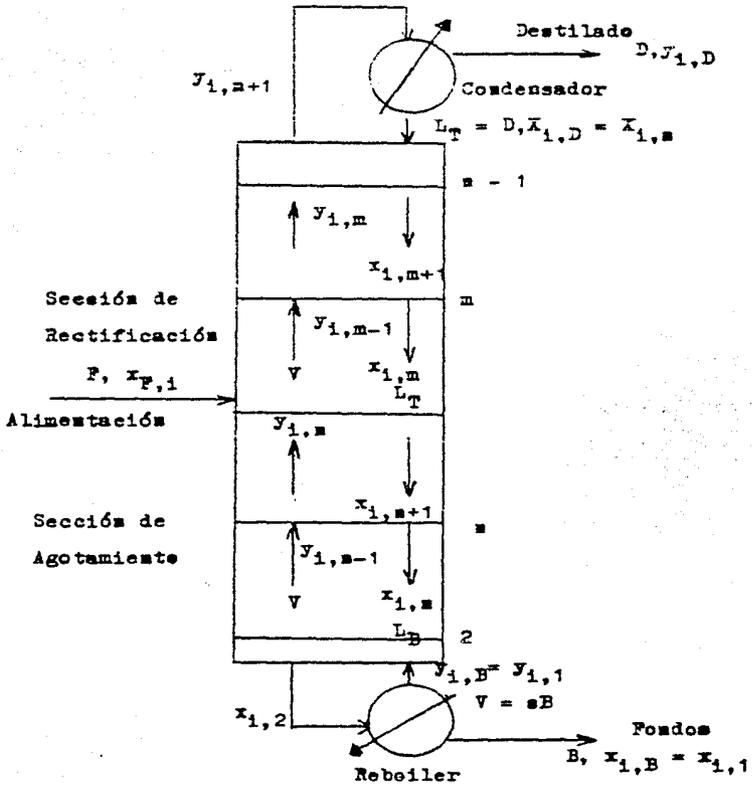


Figura 10 Diagrama Esquemático de una Columna de Destilación.

S = La proporción en el rebalder y se define como :

$$S = V/B ; V = \text{flujo de vapor y B del fondo;} \dots (3.23)$$

Para un plato arbitrario "m" en la sección de rec-tificación un balance de masa produce:

$$X_{i,m+1} = \frac{r+1}{r} Y_{i,m} - \frac{1}{r} Y_{i,D} \dots \dots \dots (3.24)$$

donde: la relación de reflujo r se define como:

$$r = L_{\bar{n}}/D \dots \dots \dots (3.25)$$

$L_{\bar{n}}$ = gasto del reflujo; D = flujo del destilado.

- Segundo: Expresar la nueva composición del líquido --

$X_{i,n+1}$ de la ecuación 3.22, por expansión en series de Tay--
lor se tiene:

$$X_{i,n+1} = X_{i,n} + \left. \frac{dX_i}{dh} \right|_{h=n} (\Delta h) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2X_i}{dh^2} \right|_{h=n} (\Delta h)^2 + \dots (3.26)$$

donde:

$$\Delta h = (n+1) - n = 1$$

Sustituyendo lo anterior en la ecuación 3.22 se ob-
tiene:

$$\frac{dX_1}{dh} + \frac{1}{2} \frac{d^2 X_1}{dh^2} + \dots = \frac{S}{S+1} Y_1 - X_1 + \frac{1}{S+1} X_{1,B} \dots\dots(3.27)$$

Conservando la primera derivada se tiene:

$$\frac{dX_1}{dh} = \frac{S}{S+1} Y_1 - X_1 + \frac{1}{S+1} X_{1,B} \dots\dots(3.28)$$

Esta ecuación describe el perfil de composiciones en la sección de agotamiento, usando la condición de frontera: $X_1(h = 1) = X_{1,B} \dots\dots(3.29)$

La integración de Euler con un tamaño de paso de 1, transforma la ecuación aproximada 3.28 en la exacta 3.22.

Por otro lado puede ser apropiado incluir la segunda derivada:

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 X_1}{dh^2} + \frac{dX_1}{dh} = \frac{S}{S+1} Y_1 - X_1 + \frac{1}{S+1} X_{1,B} \dots\dots(3.30)$$

Usando la condición de frontera 3.29 y una más:

$$\frac{d^2 X_1}{dh^2}(h = 1) = 0 \dots\dots(3.31)$$

Esta es una condición arbitraria, la cual cuestiona la validez del uso de términos de orden mayor en la ecuación 3.27.

Estos modelos diferenciales pueden ser integrados numéricamente por el método de Runge-Kutta con un tamaño de paso de 0.1 para dar el perfil de composiciones en la sección de agotamiento.

- Tercero: En la sección de rectificación la misma transformación puede ser aplicada dando:

$$\frac{dX_1}{dh} = \frac{r+1}{r} Y_1 - X_1 + \left(\frac{r+1}{r_s} X_{1,B} \right) - \left(\frac{s+r+1}{r_s} X_{F,1} \right) \quad (3.32)$$

Con la condición inicial:

$$X_1 (h=h_F) = X_{1,F} \dots \dots \dots (3.33)$$

donde:

$X_{1,F}$ es la composición del líquido en el plato de alimentación.

La única desventaja de este enfoque es que no garantiza que la integración sobre la columna será válida para la composición del líquido en el condensador, la cual - - -

puede conocerse de la ecuación siguiente especificando r , s , X_P y X_B :

$$Y_{1,D} = \frac{s + r + 1}{s} X_{P,1} - \frac{r + 1}{s} X_{i,B} \dots\dots\dots(3.26)'$$

Para satisfacer el balance de masa se debe integrar la ecuación 3.32 en dirección opuesta y utilizando la relación de balance global, obteniéndose:

$$\frac{dX_i}{dh'} = X_i - \frac{r + 1}{r} Y_i + \frac{1}{r} Y_{i,D} \dots\dots\dots(3.34)$$

Con la condición inicial:

$$X_i(h' = 1) = X_{i,D} \dots\dots\dots(3.35)$$

Si en lugar de modelar la composición de la fase líquida en cada plato se modela la fase vapor se obtiene:

$$Y_{i,m+1} = \frac{r}{r + 1} X_{i,m} + \frac{1}{r + 1} Y_{i,D} \dots\dots\dots(3.36)$$

O como una ecuación diferencial:

$$\frac{dY_i}{dh'} = \frac{r}{r + 1} X_i - Y_i + \frac{1}{r + 1} Y_{i,D} \dots\dots\dots(3.37)$$

Junto con la propia condición inicial:

$$Y_1(h' = 1) = Y_{1,D} \dots\dots\dots(3.38)$$

Con una integración de Euler a tamaño de paso de 1 se transforma la ecuación aproximada 3.37 en la exacta 3.36.

Se debe elegir un modelo de columna para estudiar las restricciones sobre el perfil de composiciones en las - columnas azeotrópicas, ya que el propósito es el de proveer un entendimiento cualitativo de las destilaciones azeotrópicas, esto es conveniente para usar modelos explícitos de primer orden en la composición de la fase líquida.

Por lo tanto el modelo de columna utilizado es:

$$\frac{dX_1'}{dh'} = X_1' - \frac{r+1}{r} Y_1 + \frac{1}{r} Y_{1,D} \dots\dots\dots(3.39)$$

$$X_1'(h' = 1) = X_{1,D} \dots\dots\dots(3.40)$$

$$\frac{dX_1}{dh} = \frac{s}{s+1} Y_1 - X_1 + \frac{1}{s+1} X_{1,B} \dots\dots\dots(3.41)$$

$$X_1(h = 1) = X_{1,B} \dots\dots\dots(3.42)$$

$$Y_{1,D} = \frac{s+r+1}{s} (X_{F,1} - X_{1,B}) + X_{1,B} \dots\dots\dots(3.43)$$

$$X_1(h = h_F) = X_1'(h' = h_F') \dots\dots\dots(3.44)$$

$$0 \quad r \quad \dots\dots(3.46) \quad 1 \quad h_p, h'_p \quad \dots\dots\dots (3.45)$$

$$0 \quad s \quad \dots\dots(3.47) \quad i = 1, 2, \dots, C - 1 \quad \dots (3.48).$$

La ecuación 3.44 requiere que los perfiles del domo y fonde se intersecten en alguna parte de la composición. El modelo supone que cada plato teórico ha sido dividido en un número finite de platos diferenciales distribuidos sobre el intervalo n a $n + 1$ con una transferencia de masa diferencial. Para resolver la ecuación 3.39 numéricamente se necesita especificar primero el modelo termodinámico para poder determinar las composiciones de la fase vapor. Esto produce entonces $3C$ parámetros con X_B , Y_D , X_F , r , s y p y $C - 1$ relaciones entre ellos (ecuación 3.43). Por lo tanto se debe especificar $2C + 1$ parámetros independientes. En el caso de mezclas ternarias se deben especificar 7 parámetros eligiendo entre p , X_R , X_B , r y s , entonces se calcula la composición del destilado con la ecuación 3.43, empezando así la integración numérica, obteniéndose h y h' al término de ésta.

Finalmente, los resultados obtenidos sugieren que la topología de los mapas de curvas de residue es la influencia predominante para el diseño de columnas azeotrópicas y usando el diseño diferencial se reduce la cantidad de trabajo

necesario para encontrar un diseño preliminar.

Segunda: Cálculos del reflujo mínimo para columnas no ideales y azeotrópicas, Levy, Van Dongen y Doherty (1985), - en esta parte se genera un método para determinar la cantidad de reflujo mínimo aplicado a destilaciones azeotrópicas ideales y no ideales, haciéndolo idéntico al de Underwood para - mezclas ideales, el método es algebraico exacto y eficiente, ya que no utiliza grandes esquemas de iteración involucrados en la simulación de columnas.

Cuando se intenta separar una mezcla binaria azeotrópica se debe saber si el azeótropo está a presión sensitiva, es decir, si éste varía con cambios de presión; por lo - que si es no sensitivo se debe adicionar un tercer componente (un "arrastrador") para hacer posible la separación. Los arrastradores se clasifican de acuerdo a la forma que realizan la separación en:

- a) Líquidos, los cuales no inducen la separación de la fase líquida en una mezcla ternaria.
- b) Líquidos, los cuales sí inducen la separación de la fase líquida.

- c) Los que reaccionan preferencial y reversiblemente - con uno de los componentes de la mezcla.
- d) Los que se disocian iónicamente en la mezcla original moviendo la posición del azeótropo.

Las destilaciones de la categoría a) son llamadas azeotrópicas homogéneas y las de b) heterogéneas.

El método empleado en este trabajo está basado en el modelo de columna diferencial propuesto en la primera parte, y se emplea para determinar el número teórico de platos antes y después de la alimentación una vez conocido el refluxo mínimo de operación. En el modelo diferencial aparece el parámetro Y_1 , el cual puede ser especificado libremente por el ingeniero de diseño, el parámetro puede usar el modelo de Equilibrio Líquido-Vapor, por lo que se debe especificar varios parámetros antes de obtener los perfiles de composición. Para un sistema de C componentes hay un total de 3C parámetros: F, r, s, $X_{B,1}$, $Y_{D,1}$ y $X_{F,1}$, ($i = 1, 2, \dots, C - 1$).

Debido al balance de masa global se tiene:

$$F = D + B \dots\dots\dots (3.49)$$

$$FX_{F,i} = DY_{D,i} + BX_{B,i} \quad ; \quad i = 1, 2, \dots, C - 1 \quad \dots(3.50)$$

O equivalentemente:

$$B = F \frac{X_{F,i} - Y_{D,i}}{X_{B,i} - Y_{D,i}} \quad D = F - B \quad \dots\dots\dots(3.51)$$

$$\frac{s}{r + 1} = \frac{X_{B,i} - X_{F,i}}{X_{F,i} - Y_{D,i}} \quad i = 1, 2, \dots, C - 1 \quad \dots\dots\dots(3.52)$$

donde:

B = Flujo de productos del fondo.

D = Flujo de productos del destilado.

F = Flujo de la alimentación.

$X_{F,i}$ = Composición de la alimentación.

$Y_{D,i}$ = Composición del vapor en el destilado.

$X_{B,i}$ = Composición del líquido en el fondo.

s = proporción del reboiler.

r = proporción de reflujo.

La ecuación 3.51 es necesaria solamente para un conjunto absoluto de valores de r para todo el proceso, una vez que F está especificada. Por lo tanto de la ecuación 3.52 hay

C - 1 relaciones independientes entre los parámetros r , s , $X_{B,1}$, $X_{D,1}$ y $X_{F,1}$; de aquí que antes de resolver el modelo de la ecuación 3.28 o la 3.34 (de la primera parte) se necesita especificar $2C + 1$ parámetros independientes. El primer parámetro a especificar es P (presión) y la composición de la alimentación $X_{F,1}$, $X_{F,2}$. Así reorganizando la ecuación 3.52 con $i = 1$ y 2 se obtiene:

$$\frac{X_{F,2} - X_{B,2}}{X_{F,1} - X_{B,1}} = \frac{X_{F,2} - Y_{D,2}}{X_{F,1} - Y_{D,1}} \dots\dots\dots(3.53)$$

$$s = (r + 1) \cdot \frac{X_{B,1} - X_{F,1}}{X_{F,1} - Y_{D,1}} \dots\dots\dots(3.54)$$

La ecuación 3.54 calcula por un balance de masa a la proporción del reboiler s y la 3.53 analiza cómo la composición de la alimentación, destilado y fondo son colineales - cuando se trazan sobre un diagrama triangular.

Si se escribe la ecuación 3.28 en la proporción de flujo absoluto con $dX_1/dh = 0$ (un punto singular o de pliegue) se obtiene:

Secciones de rectificación (T) y agotamiento (B):

$$0 = L_T X_i - VY_i + DY_{D,i} \quad i = 1,2 \dots\dots\dots(3.55)$$

$$0 = VY_i - L_B X_i + BY_{B,i} \quad i = 1,2 \dots\dots\dots(3.56)$$

Estas ecuaciones son los componentes exactos del balance de masa en una sección de la columna, que pasa por una zona de pliegue, además de que cualquier punto del modelo es exacto y corresponde a la localización de un pliegue.

En la construcción del método algebraico se encuentra que el procedimiento para evaluar r crea un punto en el cual se localiza el punto de pliegue, el tipo silla y la composición de la alimentación como colineales. Este último y el tipo silla pueden localizarse igualando la ecuación 3.28 a 0. Para divisiones directas se tiene:

$$\text{Punto silla: } rX_{s,i} - (r + 1)Y_{s,i} + Y_{D,i} = 0 \dots\dots\dots(3.57)$$

Pliegue de alimentación :

$$sY_{e,i} - (s + 1)X_{e,i} + X_{B,i} = 0 \dots\dots\dots(3.58)$$

con $1,2 = i$ para ambas,

donde: los subfijos e y s son los puntos silla y pliegue de alimentación respectivamente.

Por lo tanto el algoritmo para calcular r mínimo en divisiones directas es:

- 1.- Dada X_P , especificar Y_D y X_B de tal modo que X_P y X_B estén sobre una línea recta (dictada por ec. 3.53)
- 2.- Seleccionar r .
- 3.- Calcule s de la ecuación 3.54.
- 4.- Resuelva las ecuaciones 3.57 y 3.58 para el punto silla X_s y pliegue de la alimentación X_e .
- 5.- Cheque si X_e , X_s y X_P son colineales, esto si:

$$\frac{X_{e,2} - X_{P,2}}{X_{e,1} - X_{P,1}} = \frac{X_{s,2} - X_{P,2}}{X_{s,1} - X_{P,1}}$$

o de otro modo:

$$0 = (X_{e,1} - X_{P,1})(X_{s,2} - X_{P,2}) - (X_{e,2} - X_{P,2})(X_{s,1} - X_{P,1}) \quad (3.59)$$

- 6.- Si la ecuación 3.59 se satisface, el valor de r mínimo es igual al elegido. De otra forma regresar a 2 y repetir el procedimiento.

Para divisiones indirectas el algoritmo se modifica li

geramente. Invirtiendo e y s en las ecuaciones 3.57 y 3.58.

Resumiendo, se puede decir que el método desarrollado aquí es idéntico al de Underwood (1946) para calcular r mínimo en mezclas ideales. Para el caso de no ideales y azeotrópicas es muy exacto para gran variedad de ejemplos, aunque algunos resultados difieren con los de Underwood (1946).

Tercera: Secuencia de columnas para destilación azeotrópica y extractiva, Doherty y Caldarola (1985). En este caso se hace un análisis de los mapas de curvas de residuo para la secuencia de columnas de destilación azeotrópica ternaria. Este provee un método simple para distinguir entre secuencias factibles y no factibles. En base a éste se puede dar una definición generalizada de destilación extractiva para la separación de mezclas azeotrópicas homogéneas.

El método está basado sobre curvas de residuo, las cuales son discutidas y clasificadas; este concepto fue introducido por Schreinemaker (1903) y consiste en un diagrama triangular con los componentes puros en cada vértice, el cual muestra el lugar de la composición de la fase líquida así co-

no la variación de ésta con el tiempo durante un proceso de destilación simple (figura 11).

Para diseñar curvas de residuo se requiere un conocimiento de experimentos azeotrópicos binarios o ternarios, los cuales están disponibles en el trabajo de Horsley (1973). Existe un procedimiento de curvas de residuo descrito por Doherty y Perkins (1979) en la siguiente forma:

- 1.- Sobre un diagrama triangular arrastrar en la composición del azeótropo las de cada mezcla binaria y marcar el azeótropo ternario en el interior de la curva de residuo.
- 2.- Sobre cada borde binario, coloque las flechas en dirección del incremento de temperatura.
- 3.- Si no existe azeótropo ternario, localice los límites entre los binarios y/o entre éstos y los vértices de componentes puros.
- 4.- Dirija los límites apuntando las flechas en dirección del incremento de temperatura y entonces diseñe las curvas de residuo para ser consistentes con los bordes de cada región.
- 5.- Si existe un azeótropo ternario que no es de ebullición alta ni baja, entonces es de punto de silla.

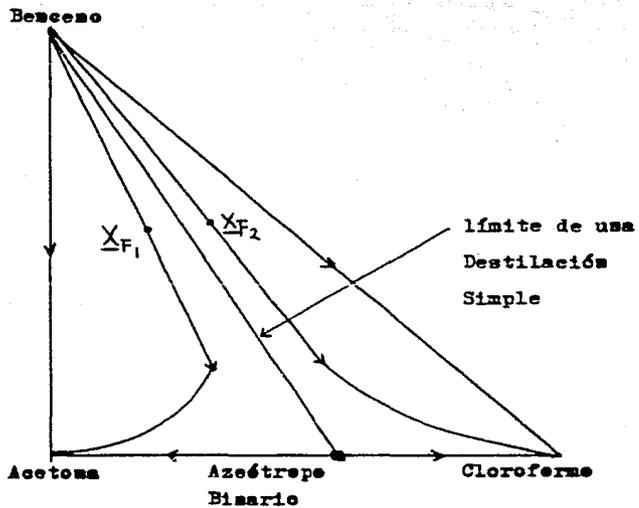


Figura 11 Mapa de una Curva de Residue mostrando un límite de destilación.

6.- Si el azeótropo es de ebullición alta o baja como - los componentes puros y azeótropos binarios, entonces es un nodo estable.

Estos pasos son muy generales y pueden generar un número plausible de curvas, sin embargo sólo una puede existir para cualquier sistema ternario especificado.

Las curvas de residuo también son importantes ya - que definen las regiones de destilación para un sistema ternario, además de que caracterizan y distinguen los sistemas ternarios que contienen azeótropos.

Aquí se define un método llamado de Recirculación, del cual se puede deducir los requerimientos básicos para una secuencia de columnas que sea factible, si es que los límites de destilación no se dividan en componentes puros para ser separados en diferentes regiones de destilación; además la alimentación debe tender a la misma región que los componentes puros. Lo anterior conduce a enunciar las siguientes reglas:

1.- Definición de destilación homogénea azeotópica: para separar componentes puros de cualquier mezcla ternaria por recirculación, éstos y la composición de la alimentación deben tender a la misma región de destilación.

2.- Selección del arrastrador: éste debe ser tal, que los componentes puros al separar tiendan a la misma región de destilación o mapa de curva de residuo. Los arrastradores potenciales pueden ser detectados por los siguientes pasos:

- (i) De los puntos de ebullición de los tres componentes puros (en el tercero existe el arrastrador) y de los azeótotos, hacer un dibujo de la curva de residuo.
- (ii) Si el mapa resultante se encuentra reportado en un catálogo de curvas de residuo factibles de Matsuyama y Nishimura (1977), entonces es un arrastrador probable a utilizar (Apéndice B).

Gomez y Seader (1985), presentaron un estudio basado en principios termodinámicos que involucran principalmente: el mínimo trabajo reversible de separación y un análisis de la segunda ley de la termodinámica que toma en cuenta la irreversibilidad; los que son usados para sintetizar trenes

de separación. Estos principios conducen al desarrollo y --- clasificación de las reglas heurísticas dentro de dos grandes grupos.

Los autores afirman que un algoritmo basado en la reversibilidad termodinámica conduce a una mejor estructura en caso de trenes de separación acíclicos, además de poder --- sintetizar estructuras complejas. El procedimiento que presentaron es un algoritmo de profundidad y las estructuras desarrolladas muestran que son fuertemente influenciadas por las composiciones de la alimentación y productos.

El estudio es dirigido por funciones objetivo termo--- dinámicas, una vez que la pureza de productos y condiciones óptimas de operación para cada unidad de separación han sido especificadas. La selección de la mejor estructura se basa en tres factores : (1) Composición de la alimentación, (2) factores inherentes a la separación y (3) Modelo de flujo. Una vez establecido lo anterior se deben considerar indivi--- dualmente las separaciones reversibles e irreversibles.

Para poder aplicar el algoritmo Termodinámico de --- Búsqueda (TS), que incluye a los dos tipos de sistemas, los

acíclicos y complejos, se usa la información termodinámica obtenida de la dimensionalidad del trabajo mínimo de separación, del equivalente de Carnot y del perdido en la separación.

Los principios termodinámicos pueden ser aplicados a mezclas ternarias para estudiar los efectos de la composición de la alimentación y volatilidades relativas sobre las estructuras de secuencias de separación. Esto se hace con el fin de determinar las heurísticas termodinámicas efectivas para la síntesis de trenes de separación multicomponentes.

Las principales reglas heurísticas empleadas en este trabajo son:

- H1 : Flujo molar del producto 1 / Flujo molar de la alimentación es aproximadamente igual a 0.5.
- H2 : Favorecer la secuencia directa cuando cantidades equimolares de componentes estén presentes en la alimentación.

El algoritmo TS fue aplicado a diversos problemas existentes en la literatura y comparado con otros procedimientos

tes como los de Hendry y Hughes (1972), Heaven (1969), Nath y Metard (1981), y otros. Encontramos que éste fue más eficiente. Basado en estos resultados los autores concluyeron que el algoritmo TS es mejor y más poderoso que los procedimientos disponibles. Este generalmente produce mejores diseños, sin embargo, si no ocurriera ello, estos diseños serían una excelente estructura inicial para la aplicación de un procedimiento evolutivo. Otra característica de este procedimiento es que no necesita emplear cálculos tediosos.

IV. TÉCNICAS DE SÍNTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACIÓN SIN INTEGRACIÓN DE ENERGÍA

En este capítulo, se tratan las técnicas de síntesis para secuencias de separación sin integración de energía, debido a que éstas tienen que entenderse bien primeramente, para posteriormente trabajar y comprender las técnicas que sí integran la energía, en virtud de que éstas surgen de las primeras.

Para obtener la mejor secuencia se emplean tres técnicas principalmente, que son las siguientes :

IV.1. Heurística

Dentro de éstas se describe el trabajo reciente de Nadgir y Liu (1984), el cual sugiere un método simple y eficaz.

El método inicia con la clasificación de las reglas heurísticas en cuatro categorías:

1.- Métodos Heurísticos (M), los cuales favorecen el uso de ciertos métodos de separación bajo especificaciones dadas.

2.- Diseños Heurísticos (D), los cuales favorecen secuencias de separación específicas con ciertas propiedades deseables.

3.- Especies Heurísticas (S), las cuales están basadas en las diferencias de propiedades entre las especies a separar, y

4.- Composición Heurística (C), la cual es relativa a los efectos de la composición de la alimentación y productos sobre los costos de separación.

La técnica aplica una serie de reglas de manera sistemática, de modo que si una no aplica, se usa la siguiente. Estas reglas son :

- Regla M_1 (Favorecer las destilaciones ordinarias y remover primero el agente de separación masa, MSA).
 - a) Favorecer métodos de separación como destilación ordinaria y evitar aquellos que requieran el uso de especies no presentes como los agentes de separación masa en destilación extractiva, Rudd (1973), sin embargo si el factor de separación o volatilidad relativa de los componentes claves es igual a : $\alpha_{LK,HK} > 1.05$, Seader y Westerberg (1977) o 1.10, Nath y Motard (1981), entonces la destilación or-

dinaria no es recomendable.

- b) Un agente de separación masa (MSA) puede ser usado, si mejora la volatilidad relativa entre los componentes claves, pero debe removerse inmediatamente en el siguiente separador al que fue usado, Headry y Hughes (1972).
- Regla M2 (Evitar vacío y refrigeración). Evitar desviaciones en presión y temperatura. Si la destilación ordinaria requiere usar vacío, la extracción líquido-líquido puede emplearse; si se requiere refrigeración (por ejemplo para separar materiales de bajo punto de ebullición con volatilidades relativas altas como productos de destilado), una alternativa puede ser el uso de la absorción.
- Regla D4 (Favorecer conjuntos pequeños de productos). Favorecer secuencias, las cuales produzcan el mínimo número de productos y evitar aquellas que separen componentes que deban permanecer unidos hasta el final, Thompson y King (1972)
- En otras palabras, cuando productos multicomponentes están especificados, favorecer las secuencias que los produzcan directamente o con un mínimo de combinaciones, a menos que las volatilidades relativas sean apreciablemente menores que para una secuencia que requiera separadores adicionales, Seader y Westerberg (1977).

- Regla S1 (Remover primero componentes corrosivos y peligrosos), Rudd (1973).
- Regla S2 (Realizar las separaciones difíciles al último), Harbert (1957). Las separaciones donde la volatilidad relativa de un componente clave es cercana a la unidad, se deben efectuar en ausencia de componentes no claves. Es decir, probar secuencias en las cuales no estén presentes componentes no claves, Heaven (1969).
- Regla C1 (Remover los componentes más abundantes primero) Una fracción grande de producto debe ser separada primero que el factor de separación o volatilidad relativa es razonable para la separación, Nishimura (1971).
- Regla C2 (Favorecer divisiones equimolares). Si la composición de un componente no varía ampliamente, se favorece la secuencia que dé una división equimolar o alguna muy cercana entre el destilado y fondo, Harbert (1957).

Si es muy difícil evaluar la división equimolar, entonces efectuar la división con el valor más alto del coeficiente de fácil separación (CES), definido como :

$$CES = f \times \Delta \dots\dots\dots (1.1)$$

donde :

f = Relación del flujo molar del destilado y fondo, B/D o D/B dependiendo de cuál de las dos relaciones es cercana o menor a la unidad.

$\Delta = \Delta T$ = Diferencia de puntos de ebullición entre los componentes a separar o $\Delta = (\alpha - 1) \times 100$ con α siendo la volatilidad relativa o factor de separación entre los componentes a separar.

En este caso, las reglas M1 y M2 deciden el método de separación a usar, la D1, S1 y S2 dan una guía acerca de las divisiones prohibidas por especificaciones en los productos así como la primera y última separación. La C1 y C2 junto con el CES sintetizan la secuencia inicial.

La técnica empleada es comparada con las heurísticas evolutivas recientes como son las de Seader y Westerberg (1977) y Nath y Motard (1981).

Las siguientes reglas adicionales son incluidas en los métodos anteriores que se encuentran resumidos en la Tabla 2 debido a que las usan para generar la secuencia inicial.

TABLA 2. Comparación de tres métodos de Síntesis de Secuencias de Separación

MÉTODO HEURÍSTICO (Madgir y Liu 1984)	MÉTODO HEURÍSTICO EVOLUTIVO (Seader y Westerberg 1977)	MÉTODO HEURÍSTICO EVOLUTIVO (Math y Motard 1981)	1 2 3
<p>1. Paso 1 : Decidir los métodos de separación a usar :</p> <p>a) Heurísticas M1a y M1b (favorecer destilación ordinaria y remover primero al agente de separación maso)</p> <p>b) Heurística M2 (evitar vacío y refrigeración)</p> <p>2. Paso 2 : Genera las divisiones prohibidas por la especificación de productos:</p> <p>a) Heurística D1 (favorecer conjuntos pequeños de productos)</p>	<p>1. Paso 1 : Decidir los métodos de separación a usar:</p> <p>a) Heurística M1a (favorecer la destilación ordinaria)</p> <p>b) Heurísticas M2 (evitar vacío y refrigeración).</p> <p>2. Paso 2 : Sintetiza la secuencia de separación inicial:</p> <p>a) Heurística S3a (efectuar las separaciones fáciles primero)</p> <p>b) Heurísticas C1 (remover los componentes más abundantes primero)</p> <p>c) Heurística D1 (Regla de separación directa)</p> <p>d) Parámetros auxiliares de la secuencia: volatilidad relativa e factor de separación α y composición de la alimentación . .</p>	<p>1. Paso 1 : Da un panorama de las divisiones prohibidas por la especificación de productos.</p> <p>a) Heurística D1 (favorecer conjuntos pequeños de productos)</p> <p>2. Paso 2 : Decidir los métodos de separación a emplear :</p> <p>a) Heurística M1a (favorecer la destilación ordinaria)</p> <p>b) Heurística M1b (remover el agente maso de separación a decudadamente)</p> <p>c) Heurística M2a (evitar vacío)</p> <p>d) Diseños heurísticos auxiliares : valores preespecificados para las fracciones de los componentes claves y la relación de reflujo de operación al 3 veces el reflujo mínimo para cada columna de destilación.</p>	

TABLE 2. Comparación de tres métodos de Síntesis de Secuencias de Separación (Cont.)

MÉTODO HEURÍSTICO (Madgir y Liu 1984)	MÉTODO HEURÍSTICO- EVOLUTIVO (Sawder y Westerberg 1977)	MÉTODO HEURÍSTICO- EVOLUTIVO (Math y Motard 1981)
<p>3. Paso 3 : Determina las primeras separaciones :</p> <p>a) Heurística S1 (remover primero componentes cerrados y peligrosos)</p>	<p>3. Pases 1a y 2a : Se aplican-- junto con los pasos 1 y 2 cuando son consideradas separaciones con agentes de separación masa.</p> <p>a) Heurística M1b (remover el agente de separación masa primero)</p> <p>b) Heurística D1 (favorecer con justos pequeños de productos)</p>	<p>3. Paso 3 : Sintetiza la secuencia inicial :</p> <p>a) Heurística S3b (efectuar las separaciones fáciles primero)</p> <p>b) Parámetros auxiliares: coeficiente de difícil separación ODS.</p>
<p>4. Paso 4 : Define las separaciones finales</p> <p>a) Heurística S2 (efectuar las separaciones difíciles al final)</p>	<p>4. Paso 3 : Mejorar la secuencia inicial con un procedimiento evolutivo.</p>	<p>4. Paso 4 : Mejorar la secuencia inicial con un procedimiento evolutivo.</p>
<p>5. Paso 5 : Sintetiza la secuencia de separación inicial :</p> <p>a) Heurística C1 (remover los componentes más abundantes primero)</p> <p>b) Heurística C2 (favorecer divisiones equisolares)</p> <p>c) Parámetro auxiliar: Coeficiente de fácil separación ODS.</p>		

- Regla D2 (Regla de secuencia directa). Durante la destilación, cuando ninguna volatilidad relativa ni porcentaje molar cambia, remover los componentes uno por uno como productos del destilado. La secuencia resultante es conocida como secuencia directa, en la cual la presión de operación tiende a ser alta en el primer separador y disminuye en los siguientes, Lockhart (1947) y Sender y Westerberg (1977).
- Regla S3a (Efectuar las separaciones fáciles primero). Arreglar específicamente los componentes de acuerdo a sus volatilidades relativas. Cuando alguna de éstas cambia ampliamente en la alimentación, las divisiones se realizan en el orden decreciente de volatilidades adyacentes.
- Regla S3b (Favorecer las separaciones fáciles primero). Arreglar las separaciones para dividir la alimentación en productos del destilado y fondos en orden del incremento del coeficiente de difícil separación (CDS) definido por :

$$CDS = \frac{\log \left(\frac{s_{LK}}{1 - s_{HK}} \cdot \frac{s_{HK}}{1 - s_{LK}} \right)}{\log \alpha_{LK, HK}} \cdot \left(\frac{D}{D + B} \right) \cdot \left(1 + \frac{D - B}{D + B} \right) \dots (4.2)$$

Donde : s_{LK} y s_{HK} = fracciones divididas de los componentes claves del destilado y fondo.

B y D = flujos molares del destilado y fondo.

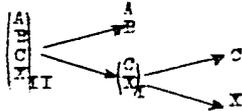
$\alpha_{LK, HK}$ = volatilidad relativa de los componentes claves
, Nath y Motard (1981).

El número de diferencias entre los métodos listados en la tabla 2 pueden ser descritas como sigue:

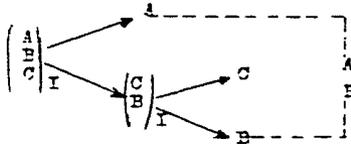
1.- En el paso 1 y 2 del método de Nath y Motard (1981) la regla D1 (favorecer pequeños conjuntos de productos) invalida la regla M1a (favorecer destilación ordinaria). Una consecuencia de retener pequeños conjuntos de productos es que algunas veces el método de separación usando un MSA es preferido en lugar de destilación ordinaria. Por ejemplo : - considerar la separación de una mezcla ternaria A, B, C en dos productos (AB) y C por destilación ordinaria (método I) y extractiva con un solvente X (método II) como describe Nath (1977). Las listas ordenadas (RL) del decremento de las volatilidades relativas adyacentes correspondiente a estos métodos esta dada por:

RL(I) : ACB ; RL(II) ABCX

La secuencia inicial resultante de aplicar el paso 1 y 2 del método de Nath y Motard es:



En contraste la secuencia obtenida al aplicar los - pasos 1 y 2 del método de Nadgir y Liu y el de Seader y Wegterberg (1977) es:



Esta secuencia favorece el uso de destilación ordinaria (regla M1a), en lugar de un conjunto pequeño de productos (regla D1). También se puede apreciar que el paso 2 del método de Nath y Motard no fue incluido.

2.- La incorporación de los pasos 3 y 4 del método de - Nadgir y Liu identifican las separaciones inicial y final -- usando la regla S1 y S2.

3.- Otra importante diferencia entre estos métodos -

es relativa a los parámetros heurísticos específicos y auxiliares usados por cada método para sintetizar la secuencia inicial.

4.- La última diferencia es relativa al paso evolutivo. El método de Nadgir y Liu no lo incluye por ser puramente heurístico. Por el contrario los métodos de Nath y Motard y - Seader y Westerberg sí, pero con una estrategia diferente en cada uno.

IV.1.1. Ejemplos Ilustrados

I.- Separación de Parafinas Ligeras con Destilación Ordinaria:

Consideremos la separación de una mezcla de 5 hidrocarburos ligeros en componentes puros con destilación ordinaria, estudiado por Heaven (1969):

Especies	Fracción Mol	Volatilidad Relativa	CES
A : Propano	0.05	2.0	5.26
B ; 1-Butano	0.15	1.33	8.25
C : n-Butano	0.25		

D : i-Pentano	0.20	2.40	114.50
E : n-Pentano	0.35	1.25	13.46

La secuencia de separación es la siguiente:

Paso 1 Reglas M1 y M2 : usar destilación ordinaria con refrigeración a alta presión.

Paso 2 Reglas D1 y S1 : no aplican.

Paso 3 Regla S2 : La división D/E tiene la volatilidad relativa menor (1.25) comparada con las otras. Por lo tanto debe hacerse hasta el final en ausencia de A, B y C.

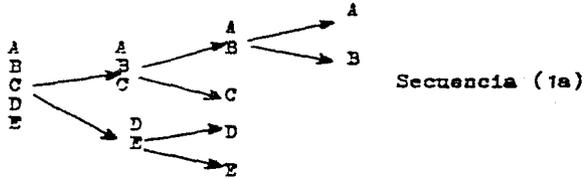
Paso 4 Regla C1 : Aunque el componente E está en gran parte en la alimentación, no debe separarse primero por que el método es ordenado y la regla S2 invalida la C1.

Paso 5 Regla C2 : Para separar ABCDE, la división ABC/DE es hecha primero pues tiene un gran valor de CES (114.50). Para separar ABC, las divisiones posibles son A/BC y AB/C, comparando sus CES tenemos:

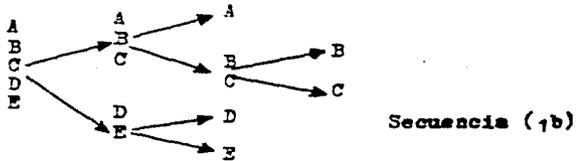
	$\frac{A/BC}{0.05/0.40}$	$\frac{AB/C}{0.20/0.25}$
f	100	33
$(\alpha - 1) \times 100$	12.5	26.5
CES		

Se puede apreciar que AB/C es preferible. Por lo --

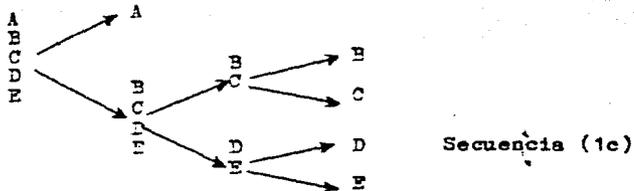
La secuencia resultante, la cual realiza al final la división D/E es :



Si en lugar de la división AB/C se hace la A/BC se obtiene una segunda secuencia:



La secuencia 1b es la que obtiene Seader y Westerbeg (1977). Para el de Nath y Motard (1981) la secuencia inicial es:



La Tabla 3 compara las diferentes secuencias obtenidas por los tres métodos comparados en la tabla 2 basados en el diseño detallado y de costos de Heaven (1969) y cotizado por Henley y Seader (1981).

La secuencia 1a reportada por este método corresponde a la mejor secuencia reportada por Heaven (1969).

IIA.- Separación de Olefinas Ligeras y Parafinas por Destilación Ordinaria:

Considere la separación de una mezcla de olefinas ligeras y parafinas por destilación ordinaria. La mezcla de alimentación fue originalmente presentada por Thompson y King (1972) y es:

TABLA 3. Una comparación de las secuencias reportadas para el ejemplo I.

SECUENCIA	COSTO \$/año	METODO HEURISTICO (Nadgir y Liu 1984)	METODOS HEURISTICOS-EVOLUTIVOS Seader y Westenberg (1977) Nath y Motard (1981)
1a	858,780 (mejor)	Secuencia Inicial (mejor)	Secuencia Final (mejor)
1b	863,580 (0.56%)	Segunda Secuencia mejor	Secuencia Inicial
1c	871,460 (1.49%)		Secuencias Inicial y final (mejores)

Especies	Fracción Mol	Volatilidad Relativa	CES
A : Etano	0.20	3.50	62.5
B : Propileno	0.15	1.20	10.7
C : Propano	0.20	2.70	139.1
D : 1-Butano	0.15	1.21	9.0
E : n-Butano	0.15	3.00	35.3
F : n-Pentano	0.15		

Se desea encontrar la secuencia para separar la alimentación en A, B, C, D, E, y F. Por lo que la secuencia se genera a través de los siguientes pasos:

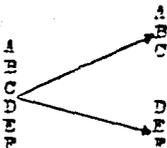
Paso 1 Reglas M1 y M2 : Usar destilación ordinaria con refrigeración a alta presión.

Paso 2 Reglas D1 y S1 : No aplican.

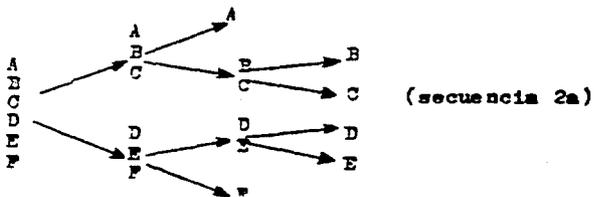
Paso 3 Regla S2 : La división B/C y D/E son relativamente difíciles por sus valores pequeños de volatilidad (1.20 y 1.21), entonces éstas deben hacerse hasta el final.

Paso 4 Regla C1: No aplica.

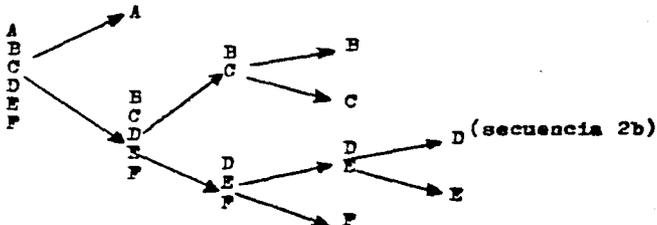
Paso 5 Regla C2: ABC/DEF representa una división 55/45 entre el destilado y fondo y tiene una volatilidad relativa de 2.70 y un CES de 139.1, por lo tanto esta división se hace primero:



La secuencia resultante, la cual divide B/C y D/E hasta el último de acuerdo a la regla S2 es:



Esta secuencia puede ser obtenida haciendo la división A/ BCDEF (la cual tiene el segundo valor alto del CES= 62.5 y realizando las divisiones difíciles B/C y D/E hasta el último:



La Tabla 4 compara las secuencias sintetizadas por los tres métodos resumidos en la Tabla 2. Las secuencias adicionales (2c a 2e) listadas en la Tabla son las siguientes; - Seader y Westerberg ; Nath (1977):

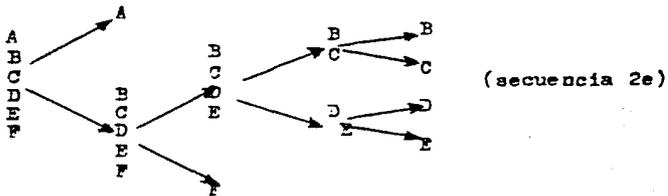
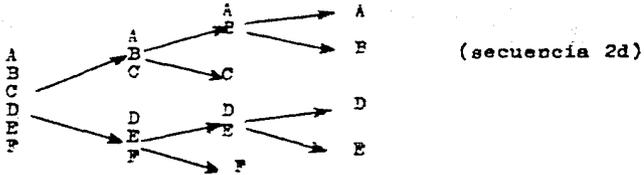
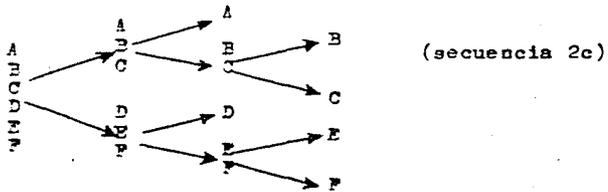


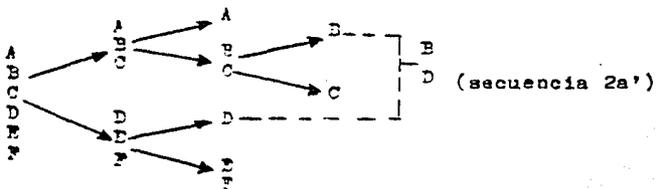
TABLA 4. Una comparación de las secuencias reportadas para el ejemplo IIA.

SECUENCIA	METODO HEURISTICO (Nadgir y Liu 1984)	METODOS HEURISTICOS-EVOLUTIVOS Seader y Weaterberg(1977) Nath y Motard(1981)	
2a	Secuencia Inicial (mejor)	Secuencia Final \$ 1,153,000 /año (mejor)	segunda Secuencia \$ 685,189/ año (8.7%)
2b	Segunda mejor Secuencia	Segunda Secuencia \$ 1,213,000/ año (5.2%)	Secuencia Inicial \$ 748,178/ año (18.6%)
2c			Secuencia Final \$ 630,454/ año (mejor)
2d			Tercer Secuencia \$ 805,105/ año (27.7%)
2e		Secuencia Inicial \$ 1,234,000/ año (7.0%)	

IIB. Separación de Olefinas Ligeras y Parafinas por Destilación Ordinaria:

Este ejemplo es el mismo que el IIA, sólo que ahora se desea encontrar los siguientes productos: A, BD, C y EF, Thompson y King(1972). La secuencia puede ser obtenida usando la regla D1 y haciendo menores cambios en el paso 4 del ejemplo IIA.

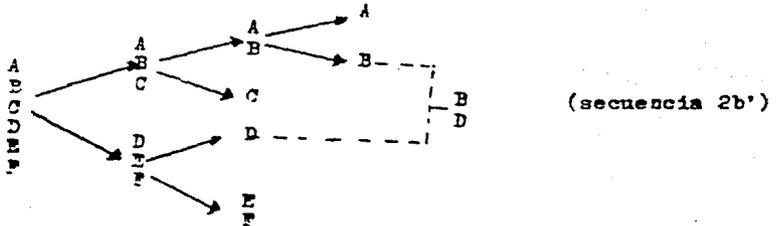
Paso 4' Regla C2: Como en la secuencia del ejemplo IIA, la división ABC/DEF es realizada primero. La separación de ABC se hace dejando al último la división B/C por ser más difícil. Para separar DEF, la única división recomendable de acuerdo a la regla D1 es D/EF, puesto que EF es un producto sencillo. El otro producto deseado BD puede ser obtenido mezclando B y D de separaciones anteriores:



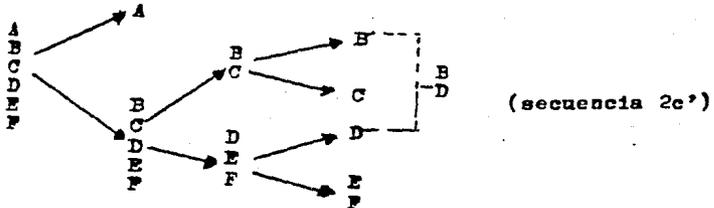
La segunda mejor secuencia de acuerdo al GES para separar ABC se realiza separando AB/C , en lugar de A/BC:

	A/BC	AB/C
f:	20/35	20/35
($\alpha - 1$)x 100:	250	20
CES:	142.8	11.4

La secuencia resultante es:



Alternativamente, si la segunda mejor división de acuerdo al GES para separar ABCDEF es eligiendo A/BCDEF en lugar de ABC/DEF:



La Tabla 5 compara las secuencias sintetizadas por varios métodos.

III.- Purificación de N-Butileno por Destilación Ordinaria y extractiva.

Considera las separaciones multicomponentes en la purificación industrial del n-butileno, Hendry y Hughes (1972). La alimentación de la mezcla es :

ESPECIES	% Mol	Volatilidad Relativa ^a		CES _I
		(α) _I	(α) _{II}	
A : Propano	1.47	2.45		2.163
B : 1-Buteno	14.75	1.18	1.17	3.485
C : n-Buteno	50.29	1.03	1.70	1.510
D : 2-trans-Buteno	15.62			
E : 2-cis-Buteno	11.96	2.50		9.404
F : n-Pentano	5.90			

^a(α)_I = Volatilidad relativa adyacente a 150 °F para el método de separación I, destilación ordinaria.

(α)_{II} = Volatilidad relativa adyacente a 150 °F para el Método II de separación, destilación extractiva.

Las listas ordenadas (RL) de decrecientes volati

TAHLA 5. Comparación de las Secuencias reportadas para el ejemplo IIB

SECUENCIA	METODO HEURISTICO (Madgir y Liu 1984)	METODO HEURISTICO- EVOLUTIVO (Rath y Motard 1981)	METODO HEURISTICO- ALGORITMICO (Thompson y King 1972)	METODO ALGORITMICO (Newserberg y Ste- phanopoulos 1975)
2a*	Secuencia Inicial (mejor)	Secuencia Final \$ 600,395/año (mejor)	Secuencia Final \$ 694,000/año (mejor)	Secuencia Mejor \$ 602,760/año (mejor)
2b*	Segunda Secuencia mejor			Segunda Secuencia Mejor \$ 642,068/año (6.5%)
2c*	Tercer Secuencia mejor	Secuencia Inicial \$ 663,385/año (10.5%)	Segunda Secuencia mejor \$ 760,000/año (9.5%)	Tercer Secuencia mejor \$ 685,632/año (13.8%)

lidades relativas adyacentes correspondientes a los métodos de separación I y II están dadas por:

RL(I) : ABCDEF

RL(II) : ACBDEF

Los productos deseados son los siguientes: A, C, BDE y F .

La secuencia de separación se obtiene siguiendo las reglas :

Paso 1 Regla M1 : Usar destilación extractiva para la división C/DE y ordinaria para las otras.

Paso 2 Regla M2 : Usar temperatura baja y presión atmosférica.

Paso 3 Regla D1 : Evitar la división DE, pues ambos productos están juntos y combinados con B.

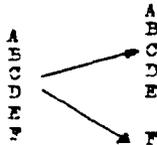
Paso 4 Regla S1 : No aplica.

Paso 5 Regla S2 : Puesto que la división C/DE es difícil y requiere destilación extractiva, podría realizarse hasta el final en ausencia de A ,B y F.

Paso 6 Regla C1 : Aunque C está presente en gran parte de la alimentación, éste no podrá separarse primero debido a la regla precedente S2 .

Paso 7 Regla C2 : Para separar ABCDEF, la división ABC/

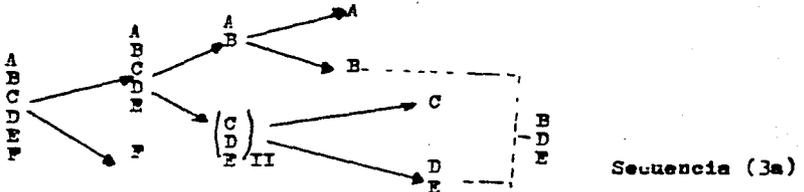
DEF es realizada hasta el final, por lo que se eligen las restantes divisiones : A/BCDEF, AB/CDEF y ABCDE/F. La última división es la elegida debido a su gran valor de CES_I de 9.404:



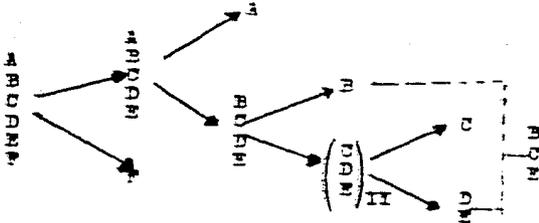
Para separar ABCDE, las posibles divisiones son A/BCDE y AB/CDE, puesto que :

	$\frac{A/BCDE}{1.47/92.63}$	$\frac{AB/CDE}{16.22/77.88}$
	$\frac{145}{2.301}$	$\frac{18}{3.749}$
$\left(\frac{F}{CES} - 1 \right) \times 100$		

De lo anterior la división AB/CDE es la preferida, obteniendo se la secuencia la cual divide A/B y C/DE al final:

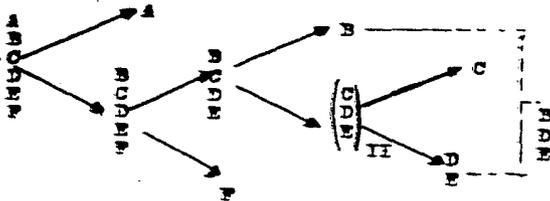


Una segunda secuencia es obtenida por la división A/BCDE hecha primero en lugar de AB/CDE :

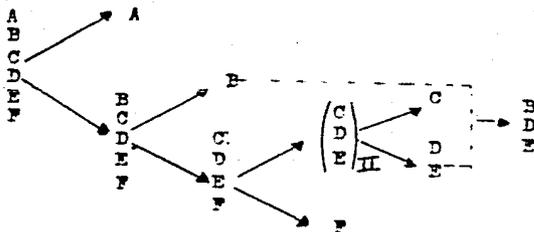


Secuencia (3b)

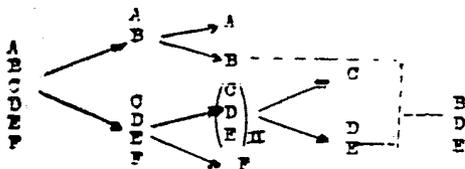
La tabla 6 compara las secuencias sintetizadas por diferentes métodos para este problema. Las secuencias adicionales 3e a f presentadas en la tabla, son las siguientes:



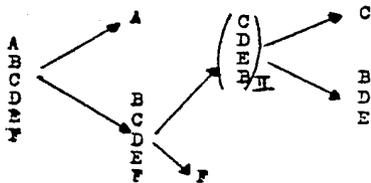
Secuencia (3c)



Secuencia (3d)



Secuencia (3e)



Secuencia (3f)

TABLE 6. Comparación de las secuencias reportadas para el ejemplo 111.

SECUENCIA	METODO HEURISTICO (Wadgir y Liu 1984)	METODO ALGORITMICO (Handry y Hughes 1972)	METODOS HEURISTICOS-EVOLUTIVOS (Seader y (Nath y Motard 1981) Weusterberg 1977)	
3a	Secuencia Inicial (mejor)	\$ 867,400/ año (0.8%)		
3b	Segunda Secuencia mejor	\$ 878,200/ año (1.8%)		
3c		\$ 878,000/ año (2.0%)	Secuencia Inicial \$ 878,000/ año (2.0%)	
3d		\$ 872,400/ año (1.5%)	Segunda Secuencia \$ 878,400/ año (1.5%)	Segunda Secuencia \$ 669,844 / año (1.7%)
3e		\$ 860,400/ año (mejor)	Secuencia Final \$ 860,400/ año (mejor)	Secuencia Final \$ 658,737/ año (mejor)
3f		\$ 1,095,600/ año (27.3%)		Secuencia Inicial \$ 1,171,322/ año (77.8 %)

Las secuencias anteriores son incluidas por el hecho de que fueron obtenidas por el método de Nath y Motard (1981) y el de Seader y Westerberg(1977) como producto de una evolución.

IV.- Separación de productos de un cracking térmico de hidrocarburos:

Considere las separaciones multicomponente involucradas en la manufactura industrial de etileno y propileno a través de un cracking térmico de hidrocarburos, Rudd et al (1973):

Especies	Moles/Hr	Punto Normal de Ebullición °C	ΔT	CES
A : Hidrógeno	18	- 253	92	23.0
B : Metano	5	- 161	57	19.6
C : Etileno	24	- 104	16	14.6
D : Etano	15	- 88	40	18.1
E : Propileno	14	- 48	6	1.1
F : Propano	6	- 42	41	4.0
G : Pesados	8	- 1		

Se desea separar la alimentación en los siguientes productos : AB, C, D, E, F y G .

Paso 1 Reglas W₁ y W₂ Usar destilación ordinaria con refrigeración a alta presión.

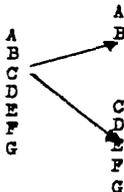
Paso 2 Regla D1 Evitar la división AB debido a que es un sólo producto.

Paso 3 Regla S1 No aplica.

Paso 4 Regla S2 Realizar las divisiones C/D y E/F hasta el final debido a su pequeño ΔT de 6 a 16 °C.

Paso 5 Regla C1 No aplica.

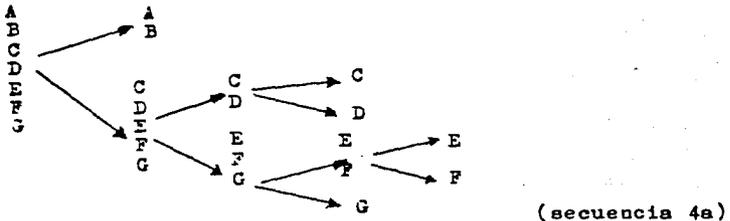
Paso 6 Regla C2 Para separar ABCDEFG, la mejor división es AB/CDEFG, la cual tiene un valor alto del CES= 19.6 y además retiene el producto AB:



Para separar DEFG, la división C/D y E/F son realizadas al último, así que las divisiones restantes elegidas son CD/EFG y CDEF/G. De las anteriores se elige la primera - por su alto valor del CES = 28.7:

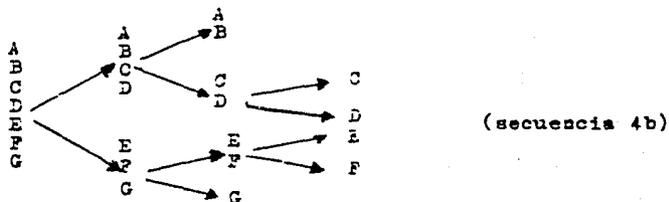
	CD/EFG	CDEF/G
r	28/39	8/59
ΔT	40	41
CES	28.7	5.6

La secuencia resultante, la cual realiza hasta el final las divisiones C/D y E/F, es la siguiente :



Esta es exactamente la misma que se practica en la industria como lo reporta Rudd et al (1973).

Una segunda secuencia puede ser obtenida haciendo - primero la división ABCD/EFG, la cual tiene el segundo valor más alto de CES = 18.1 , obteniéndose :



Esta última, algunas veces es usada industrialmente como lo ha reportado King (1980).

IV. 2 . Evolutiva

En este caso se analizan tres técnicas, las cuales corresponden a Seader y Westerberg (1977), Nath y Motard -- (1981) y Lu y Motard (1982).

IV.2.1. Método de Seader y Westerberg (1977):

La técnica inicia de la siguiente forma: Stephanopoulos y Westerberg (1976) trazan el panorama para la Síntesis Evolutiva, la cual requiere 4 ideas básicas:

- 1.- Un diagrama de flujo inicial.
- 2.- Reglas para hacer pequeños cambios sistemáticos al diagrama anterior, llamándolo aproximado.
- 3.- Una estrategia para aplicar tales reglas.
- 4.- Un medio para comparar el diagrama original con -- cualquier aproximación.

Una vez establecido lo anterior, las siguientes reglas se utilizan para apoyar los conceptos 1 y 3:

Heurística 1, Divisiones prohibidas: Para reducir la magnitud del problema se hace una selección preliminar de los métodos de separación, para ello se puede aplicar el método gráfico de Souders (1964), el cual es simple y conveniente. Se inicia con un análisis de la técnica factible de destilación ordinaria, la cual, en principio es aplicable a la región de coexistencia de la fase de líquido-vapor. Primero se determina la presión de operación de la columna, si se requiere refrige-

ración para el condensador del domo, se tienen como alternativas la absorción y absorción con el reboiler en lugar de destilación ordinaria. También la extracción líquido-líquido con varios solventes puede utilizarse cuando se requiere destilación ordinaria a vacío. Cuando la volatilidad relativa entre los componentes claves es menor o aproximada a 1.05 la destilación ordinaria no es factible económicamente, en ese caso se puede emplear extracción líquido-líquido o destilación extractiva.

Heurística 2: Para cada método, desarrollar una lista ordenada de los componentes de acuerdo a su volatilidad u otro índice de separación. Entonces, para cada par adyacente de componentes I, J , estimar su volatilidad relativa adyacente:

$\alpha_{ij} = K_i/K_j > 1$; cuando la de los componentes en la alimentación varía ampliamente, secuenciar las divisiones en el orden decreciente de las volatilidades relativas adyacentes, - King (1971).

Heurística 3: Secuenciar las separaciones para remover los componentes en el orden decreciente de su porcentaje molar en la alimentación, cuando éste varía ampliamente pero no la

volatilidad relativa, Leckhart (1947).

Heurística 4: Cuando no varían la volatilidad relativa ni el porcentaje molar en la alimentación, remover los componentes uno por uno como productos del domo. La estructura resultante es llamada Secuencia Directa, en ésta, cuando se usa destilación ordinaria, la presión tiende a ser alta en el primer separador y se reduce en cada subsecuente, Rudd, Powers y Sirola (1973).

Heurística 5 : Cuando se usa un agente de separación masa (MSA), se debe de remover en el separador siguiente al que -- fue introducido, Hendry y Hughes (1972).

Heurística 6: Cuando los productos multicomponentes están especificados, favorecer secuencias que produzcan éstos directamente e con un número mínimo de combinaciones a menos que las volatilidades relativas sean apreciablemente menores que para una secuencia que requiera mezcladores y separadores adicionales, Thompson y King (1972).

La técnica para ejecutar las cuatro ideas básicas antes mencionadas es la siguiente:

1.- Usar las 5 reglas heurísticas en el orden establecido para generar el diagrama inicial, solamente si alguna no aplica utilizar la siguiente, (notar que el mismo orden de las reglas es una heurística).

2.- Considere la corriente del diagrama inicial:

A. Generar cada posible aproximación,

B. Conservar las aproximaciones como posibles candidatos, solo si :

(i) Podría ser generada por una regla, la cual esté clasificada anteriormente.

(ii) Es casi equivalente elegir el uso de la misma regla .

C. El orden de la aproximación retenida refleja la regla responsable de ello, por ejemplo: si un diagrama es retenido por la regla 2, en la lista de diagramas estará antes de los resultantes de la regla 3 y después de los de la 1.

3.- Evaluar en orden los diagramas generados en el paso 2 hasta que:

A. Encontrar un mejor diagrama,

B. No encontrarlo, y si se encuentra uno mejor repetir el paso 2, de otro modo ir a 4.

4.- Antes de aceptar el mejor diagrama aparente, exami

nar todas las aproximaciones que puedan ser menos plausibles pero posibles.

IV.2.1.1. Ejemplos Ilustrados

I.- Purificación de n-Butileno por destilación extractiva y ordinaria:

Este problema corresponde al de Hendry y Hughes (1972) y se especifica de la siguiente forma:

$$T = 37.4 \text{ }^{\circ}\text{C} ; P = 10.3 \text{ Bars}$$

Especies	Alimentación (Kgmol/Hr)
A : Propano	4.55
B : 1-Buteno	45.50
C : n-Butano	155.00
D : 2-trans-Buteno	48.20
E : 2-cis-Buteno	36.80
F : n-Pentano	18.20

-Productos deseados : A, BDE (Butenos), C y F.

-Métodos de separación :

I : Destilación Ordinaria

II : Destilación Extractiva con furfural.

-Orden de los componentes:

I : ABCDEF (A más volátil)

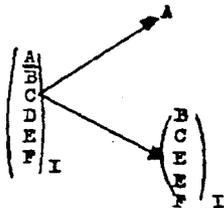
II : ACBDEF

-Volatilidades relativas adyacentes (a 66 °C)

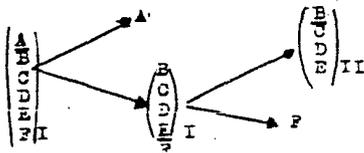
I :	$\alpha_{AB} \approx 2.45$	$\alpha_{BC} \approx 1.18$	$\alpha_{CD} \approx 1.03$
	$\alpha_{EF} \approx 2.50$	$\alpha_{AC} \approx 2.89$	
II :	$\alpha_{CB} \approx 1.17$	$\alpha_{CD} \approx 1.70$	

Para este problema se encuentra que todas las columnas de destilación ordinaria operan por arriba de la presión atmosférica y condensadores que enfrían con agua. Por lo tanto la regla heurística 1 solo se considera para destilación de las fracciones (A/B ...), (B/C,...), (...E/F), (A/C ...) y una prohibida para la división (...C/D...).

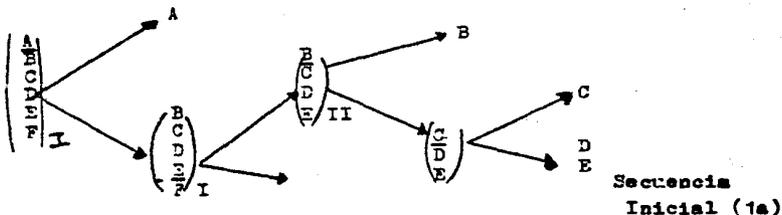
Las divisiones (A/B,...)_I y (...E/F)_I tienen los valores de volatilidad relativa adyacente y como son casi iguales pueden colocarse en la primera secuencia, por lo que se elige la siguiente:



Siguiendo la separación de A y F por destilación ordinaria, puede aplicarse la regla heurística 5 para (C/BDE)_{II} por destilación extractiva, seguida de la recuperación del agente de separación masa, (MSA). La secuencia resultante produce directamente el producto multicomponente BDE :



Sin embargo la volatilidad relativa adyacente de - (C/BD)_{II} es solamente 1.17. Alternativamente, puede emplearse la división (C/DE)_{II} con una volatilidad relativa de 1.70 precedida de la división (E/CDE)_I para separar B y seguido de la recuperación del MSA con el producto BDE :



Debido al fuerte efecto de la volatilidad sobre el costo de la secuencia anterior (\$ 878,000 /año), puede ser preferible a pesar de la necesidad de una destilación ordinaria adicional con una baja volatilidad relativa.

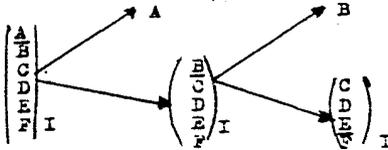
Para evolucionar la secuencia 1a los siguientes intercambios son posibles utilizando la regla evolutiva 1 :

- (a) $(A/B \dots)_I$ con $(\dots E/F)_I$
- (b) $(\dots E/F)_I$ con $(B/C \dots)_I$
- (c) $(C/D \dots)_{II}$ con $(B/C \dots)_I$

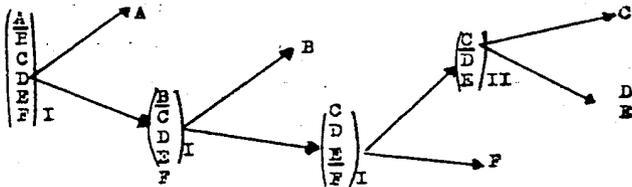
El intercambio (a) no es probable que cause un cambio apreciable en el costo de la secuencia cuando se consideran las reglas heurísticas 1 y 2. Debido a que sus volatilidades relativas son casi idénticas y ambos componentes A y F no están presentes en gran cantidad en la alimentación.

El intercambio (b) puede ser efectivo, ya que en la alimentación hay mas B que F y de acuerdo a la regla heurística 2, los componentes en mayor cantidad en la alimentación deben ser separados primero. Sin embargo se ignoró ésta y se usó la

1 para desarrollar la secuencia inicial. Por lo tanto haciendo este intercambio, B puede ser separado primero de la secuencia.



El intercambio (c) produciría directamente BDE, sin embargo es probable que esta secuencia sea más costosa debido a la pequeña volatilidad relativa para la separación de (C/BDE)_{II} por destilación extractiva. Por lo tanto se podrá hacer otro intercambio con el resultado mostrado a continuación:



Costo \$ 872,400/año

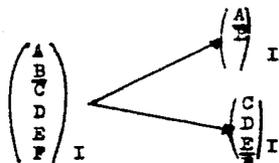
Secuencia (1b) Resultado del primer intercambio.

Si ahora se aplica la regla evolutiva 1 a la secuencia anterior, los cambios posibles son :

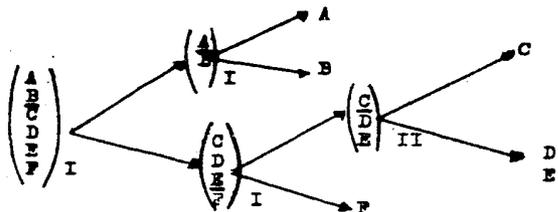
(d) $(A/B...)_I$ con $(...E/C...)_I$

(e) $(...E/F)_I$ con $(C/D...)_II$

El intercambio (d) se opone a la regla heurística 1 pero admite la 2. Esta última puede dominar aquí, debido a la pequeña cantidad de A y grande de B :



El intercambio (e) podría ofrecer menores ventajas que el (d) con la dificultad de la división $(C/D...)_II$, pero como se son posibles mayores cambios, la secuencia final es :



Costo \$ 860,400/año Secuencia (1c) Resultado del segundo intercambio.

Esta es la mejor secuencia y corresponde a la encontrada por Hendry y Huges (1972).

II.- Separación de Olefinas Ligeras y Parafinas con Destilación Ordinaria.

Considere ahora este problema presentado por --- Thompson y King (1972) como una modificación al de Rodrigo y Seader (1975):

$$T = 37.8 \text{ } ^\circ\text{C} \quad ; \quad P = 1.0 \text{ bar}$$

Especies	Flujo(Kgmol/Hr)
A : Etano	9.1
B : Propileno	6.8
C : Propano	9.1
D : 1-Buteno	6.8
E : n-Butano	6.8
F : n-Pentano	6.8

- Productos deseados (con alta recuperación)

A, B, C, D, E y F

- Orden de los componentes:

ABCDEF (A más volátil)

- Volatilidades relativas adyacentes:

$$\alpha_{AB} = 3.5$$

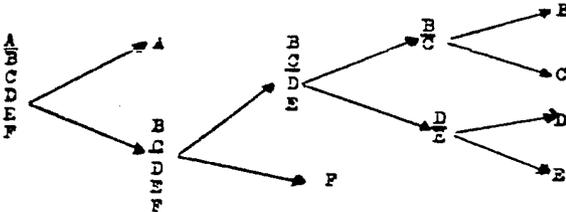
$$\alpha_{BC} = 1.20$$

$$\alpha_{CD} = 2.70$$

$$\alpha_{DE} = 1.21$$

$$\alpha_{EF} = 3.00$$

Con divisiones no prohibidas el paso 1 de la estrategia general produce la siguiente secuencia:

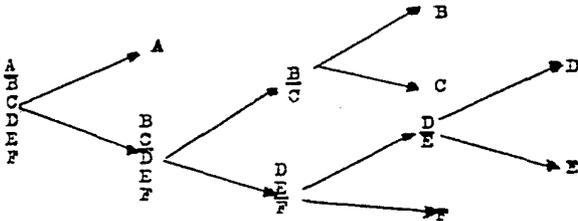


Costo \$ 1 234 000 /año Secuencia inicial(2A)

En esta secuencia se ha aplicado la regla heurística 2 desde el principio hasta el fin, así el gran valor de la volatilidad relativa AB de 3.5 dicta que la primera separación es A/BCDEF, como también el valor de EF = 3.0 dicta la siguiente separación BCDE/F. Similarmente las últimas divisiones son BC/DE seguidos por B/C y D/E.

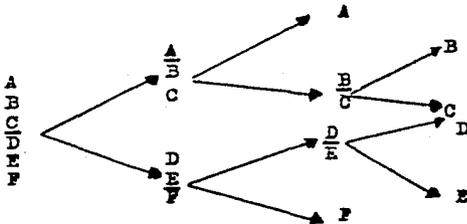
Notando que α_{AB} , α_{CD} y α_{EF} son razonablemente

aproximados en magnitud, lo que sugiere que se consideren los intercambios (...C/D...) y (...E/F) se produce la siguiente secuencia:



Costo \$ 1 213 000 /año Secuencia resultante del primer intercambio (2b).

Esta secuencia puede ser aún mejorada intercambiando (A/B...) y (...C/D...) las que tienen volatilidades relativas aproximadas produciendo:



Costo \$ 1 153 000 /año Secuencia 2C final.

Esta última secuencia tiene el menor costo y ya no puede ser mejorada, desafortunadamente no es la mejor, la cual tiene un costo de \$ 1 064 000 /año y se obtiene por un cambio adicional entre los problemas E/F y D/E. La falla se debe al pequeño pero importante efecto del n-pentano sobre la volatilidad relativa de 1-buteno/ n-butano.

En los datos del problema $\alpha_{DE} = 1.21$, sin embargo como demuestran Gomez y Seader (1976) $\alpha_{DE} = 1.197$ cuando están presentes solamente D y E, pero $\alpha_{DE} = 1.226$ cuando está presente el n-pentano. El resultado es que el costo de la división D/F es 15% menor que el costo para la división D/E, y el costo de la secuencia se reduce haciendo la división D/EF antes de la E/F.

IV.2.2. Método de Nath y Motard (1981).

Esta técnica consiste en descomponer el problema en dos fases. En la primera una estructura inicial es creada u-

sando reglas heurísticas y en la segunda, tal estructura es sucesivamente mejorada por reglas evolutivas.

Los sistemas que se pueden manejar son destilación ordinaria y extractiva con cualquier agente de separación masa, (MSA), además de que puede extenderse a otros tipos de separadores.

La técnica se inicia con la definición del problema:

" Dada una corriente de alimentación con condiciones conocidas (composición, flujo, presión, temperatura, etc.) una síntesis sistemática del proceso puede aislar los productos específicos a un mínimo costo":

$$\text{Mín} \left[\sum C_i \right] \dots\dots\dots(4.3.)$$

donde:

$i \in I$ = Unidad factible de separación

C_i = Costo total anual de la unidad de separación i

I = Subconjunto de S

S = El conjunto de todas las posibles configuraciones que pueden producir los productos deseados.

Algunos de los términos usados a lo largo de este método son:

- Factor de Separación entre dos componentes: Es la proporción de los coeficientes de distribución de éstos.
- Coeficiente de Distribución o Factor de Distribución : Es la relación de la fracción mol de un componente en la fase ligera así como en la pesada, en el equilibrio a alimentación.
- Agente de separación masa (MSA): Es un componente que ayuda a la unidad de separación a efectuar su trabajo.
- Listas Ordenadas : Es el ordenamiento de los componentes en la alimentación de acuerdo al decreciente de su coeficiente de distribución.

Las reglas heurísticas empleadas para crear la estructura inicial son:

1. Favorecer conjuntos pequeños de productos.

Para procesos en los cuales los productos deseados son simples, esta regla es trivial, sin embargo donde se tienen conjuntos de productos la estructura resultante surgirá con pocas unidades y con un potencial -

menor costo. En el caso de que la estructura inicial no pueda ser completada por que cualquier producto multicomponente no puede ser aislado directamente o por que al aislarlos violan la regla heurística 5 produciendo un conjunto nuevo de productos, se debe entonces intentar de nuevo la creación de la nueva estructura inicial.

Como esta regla no produce una buena estructura, se cambia durante la evolución.

2.- Favorecer destilación

La destilación o métodos usando energía como agente de separación son favorecidos porque minimizan el número de unidades. En el caso de usar un MSA se requiere una unidad más para separar el agente. En suma, el flujo interno es usualmente más alto para las separaciones que usan un MSA, aunque esta desventaja puede compensarse en virtud de que las separaciones que utilizan un MSA aumentan el factor de separación haciendo posible la separación de productos multicomponentes cuando ésto no es factible de otra manera. Por lo tanto para generar la estructura inicial se prueba primero destilación

la cual si no es factible se considera un método de separación usando un MSA.

3.- Separaciones fáciles se hacen primero

Cuando se tienen varias posibles divisiones de una corriente, el problema es encontrar cual de todas será la mejor. Por lo que se propone seleccionar la que sea más fácil, lo cual cualitativamente puede elegirse en base a las siguientes reglas :

- 3a. Favorecer grandes ^{LK}HK
- 3b. Favorecer una columna balanceada
- 3c. Favorecer divisiones desalineadas de componentes claves
- 3d. Favorecer pocos productos del destilado

Las reglas 3a y 3c son ampliamente aceptadas, ya que retrasan las separaciones difíciles. La 3b es favorecida cuando los productos del domo y fondo son aproximadamente los mismos. Finalmente la 3d es favorecida por que los costos para una columna varían directamente con la cantidad de destilado, consecuentemente una separación con poca cantidad de destilado implica menores costos de operación.

Para cualquier división propuesta donde las cuatro reglas son favorecidas se puede asegurar que se obtendrá

una buena estructura. Sin embargo, en algunos casos las reglas pueden entrar en conflictos, en éste caso se debe recurrir a un valor numérico para cada división proporcionado por la dificultad de separación. Este valor puede representar las cuatro reglas de manera cuantitativa y recibe el nombre de Coeficiente de Dificil separación, el (CDS) :

$$CDS = \frac{\log \left(\frac{SP_{LK}}{1 - SP_{LK}} \cdot \frac{SP_{HK}}{1 - SP_{HK}} \right)}{\log \frac{LK}{HK}} \cdot \left(\frac{V}{V + L} \right) \cdot \left(1 + \left(\frac{V - L}{V + L} \right) \right) \quad (4.4)$$

El primer término es el número teórico de etapas y toma en cuenta las reglas 3a y 3c, el segundo es la fracción de destilado y toma a la 3d y el último es un término que penaliza a las columnas no balanceadas. Cuando $V = L$, la columna esta balanceada y el término es 1, para cualquier otro valor el término es mayor a la unidad. Por lo que éste es matemáticamente análogo a la subregla 3b.

El CDS se aplica a cada corriente a dividir de manera cuantitativa, probando aquellas con CDS menor, si no es factible, se prueban los siguientes valores mayores, hasta ob-

tener la estructura inicial.

- 4.- Un método de separación que usa un MSA no puede ser usado para aislar otro MSA.

Esta corresponde con la regla 2, favorecer destilación, las cuales eliminan la posibilidad de secuencias no factibles, en las que se utiliza un MSA para aislar otro MSA y así sucesivamente.

- 5.- Una separación con $\alpha_{LK-HK} < \alpha_{\min}$ no es aceptable.

Las secuencias que presentan el valor anterior son elixisadas. Esta suposición es completamente sensible puesto que valores muy bajos de α producen columnas extremadamente costosas. Para el presente método, α_{\min} es un conjunto arbitrario de valores de 1.1, el cual elimina las separaciones difíciles de la estructura inicial.

- 6.- La presión de operación debe ser cercana a la ambiente.
- 7.- La división de fracciones claves son especificadas por el usuario.
- 8.- El reflujo de operación es igual a 1.3 veces el mínimo para cada columna.

Estas tres últimas reglas, proveen especificaciones

para la selección de condiciones de operación para una unidad de separación. Estas, una vez obtenida la estructura inicial son optimizadas durante la evolución de la estructura.

Una vez creada la estructura inicial, el segundo paso es modificar ésta aplicandole varias reglas evolutivas en un orden jerárquico, el cual prevé que si alguna no produce alguna mejora, se aplique la siguiente, terminando la estrategia cuando no se logra una mejora más. Sin embargo, si se detecta una modificación en alguna parte de la estructura, ésta se elimina corriente abajo y se crea una nueva estructura, aplicando el primer paso (reglas heurísticas), aunque se conserva la estructura corriente arriba. Si la nueva estructura es superior, se reemplaza por la inicial evolucionándose ésta, si es inferior se almacena en la memoria de la computadora y también es evolucionada.

Las reglas evolutivas que se emplean son:

1.- Dedar de la regla heurística 1.

Para la creación de la estructura inicial se eligieron pequeños conjuntos de productos de acuerdo a la regla heurística 1. Para retener éstos, algunas veces se usa una

unidad con un agente de separación masa , para ello se necesita adiconar un separador que aisle el MSA que en algunos casos conduce a un diagrama mejor. Un ejemplo simple ilustra la regla evolutiva 1, para una mezcla ternaria conteniendo A,B y C para ser aislada en A yB como un producto y C como otro, usando dos métodos de separación, destilación extractiva con un solvente x y destilación ordinaria. Las listas ordenadas correspondientes a estos métodos son:

HL (I) : A C B

RL (II) : A B C X

La estructura inicial para este caso requiere destilaciones extractiva seguida de una destilación para recuperar el solvente, aplicando la regla evolutiva 1 el producto AB es roto y la nueva estructura podría requerir dos pasos de destilación con un remezclado de A y B, y podría ser más económicamente que la estructura inicial, si el factor de separación para la destilación extractiva no es suficientemente alto que para destilación ordinaria.

2.- Examine las estructuras aproximadas si:

- a) El CDS está dentro de un 10%.
- b) Refrigeración es requerida para condensar el reflujo.

Esta regla toma en cuenta algunas desviaciones del CDS, ya que éste no puede distinguir entre dos diseños competitivos y aproximados, para compensar esto, diseños con un CDS dentro de un 10% es tratado igualmente, así cualquier diseño que se encuentre dentro de ese 10% es conservado durante la creación de la estructura.

El costo de la refrigeración para condensar el reflujo es extremadamente alto, y el CDS no lo predice, consecuentemente éste no da una representación de la dificultad de separación, por lo que en éstos casos se deben señalar cuando se crea la estructura inicial.

3.- Dudar de la regla heurística 2.

De acuerdo a esta regla, al crear la estructura inicial se usa destilación pero se tiene como alternativa usar un MSA, el cual requiere un separador adicional para aislarse. El uso de una unidad con MSA podría ser económicamente superior a la destilación, sólo si la unidad de separación usando el MSA pudiera tener un factor de separación entre los compo-

nentes ligeros claves y pesados suficientemente alto que para destilación. Por lo que como una primera aproximación se puede suponer que el número actual de etapas N para una división específica es:

$$N \propto \frac{1}{\ln \alpha} \dots\dots\dots(4.5)$$

Si α para la separación usando un MSA tiene una magnitud igual al cuadrado de α para destilación, el número de etapas para la unidad que usa un MSA podría ser la mitad que para destilación y por lo tanto también el costo. En este caso, el costo de la unidad de separación que usa el MSA y la del que lo separa, puede ser menor que el costo total de la unidad de destilación. Basado en lo anterior, el siguiente criterio se considera para separaciones que usan un MSA en lugar de destilación: $\alpha_{MSA} \geq 1.95 \alpha$

donde α_{MSA} se refiere al factor de separación entre LK y HK para la separación que usa un MSA y α se refiere al de la destilación. Generalizando el criterio anterior para cualquier corriente se tiene:

$$\text{Max}_{\text{todas divisiones}} (\alpha_{MSA}) \geq \text{Max}_{\text{todas divisiones}} (\alpha)^{1.95} \quad (4.6)$$

4.- Examinar las aproximaciones para decidir si la remoción del MSA debe ser retrasada.

El MSA es generalmente un solvente polar pesado con un valor bajo del coeficiente de distribución. Por lo anterior se debe investigar si el retrasar la separación del MSA mejora la estructura inicial, ya que generalmente se separa inmediatamente en el siguiente separador del que fue usado.

5.- Dudar de la regla Heurística 3 si :

- a) R_{min} del inmediato sucesor $\gg R_{min}$ de la unidad en consideración
- b) El costo del inmediato sucesor \gg costo de la unidad en consideración.

Para estructuras multietapa las cuales son generadas por el presente método, las separaciones fáciles en cualquier etapa no siempre conducen al mejor . Una separación fácil puede de hecho hacer una difícil posteriormente y conducir a un diagrama más costoso. La regla evolutiva 5 está basada en la lógica anterior. Por lo tanto si se detectan alguna de las dos condiciones anteriores (reglas 5a o 5b) la división para la primera separación es cambiada, produciéndose una nueva que puede ser superior a la inicial.

Para este método las unidades de destilación ordinaria y extractiva son diseñadas por el método corto de Fenske-Underwood-Gilliland, para la destilación extractiva se utiliza un solvente a 67 % mol del total de la alimentación líquida. Las reglas que seleccionan la presión de las columnas son obtenidas del trabajo de Thompson y King (1972).

IV.2.2.1. Ejemplos Ilustrados

I.- Separación C6:

Considere la separación C6 descrita por Rodrigo y Seader (1975). La corriente de alimentación consiste de 3 - compuestos C6, los cuales se desean aislar en forma pura. La destilación ordinaria y extractiva usando como MSA fenol son apropiadas.

Corriente 1 alimentación Componente	Nombre Componente	Fracción Mol
1	n-Hexano	0.3333
2	Benceno	0.3333
3	Ciclohexano	0.3334

Productos deseados	Componentes
Componentes	
1	1
2	2
3	3

- Métodos de separación apropiados:

I : Destilación

II : Destilación extractiva con fenol

- Orden inicial de los componentes a 57.4 °C:

I : 1, 2, 3

II : 1, 2, 3, 4

- Flujo total = 170.1 Kgmol/Hr ; - Temperatura = 37.8 °C

- Presión = 1.033 Kg/cm²abs.

1.- Creación de la estructura inicial:

Primero se considera la corriente de alimentación, dos tentativos diseños son seleccionados:

Diseño 1 : LK = 1, HK = 2 , Tipo de separación ST = I, α = 1.36
CDS = 1.222

Diseño 2 : LK = 2, HK = 3, ST = I , α = 1.18 , CDS = 4.461

El primer diseño tiene un valor menor del CDS -

per lo que es probado, y así produciendo dos nuevas corrientes, 2 y 3. La primera contiene la mayor parte del producto 1 y la otra el resto. Por lo que la corriente 3 es procesada mas adelante :

Diseño 1 LK = 2 HK = 3 ST = I α = 1.18 CDS = 2.508

Durante el cálculo detallado las propiedades de la corriente 3 son recalculadas a las actuales condiciones de operación. La α_{LK-HK} es 1.04 la cual tiene un nivel menor y no aceptable. Consecuentemente, este diseño es abandonado y uno nuevo es propuesto :

Diseño 1 : LK = 3 HK = 2 ST = II α = 1.76 CDS = 0.750

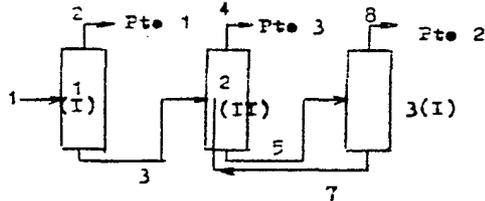
Nuevamente el cálculo detallado retorna a un diseño factible de dos nuevas corrientes, 4 y 5, la primera contiene el producto 3 y la otra el 2, además del MSA usado en el separador 2.

Para la corriente 5, solamente un diseño es propuesto :

Diseño 1 : LK = 2 HK = 4 ST = I α = 14.4 CDS = 0.117

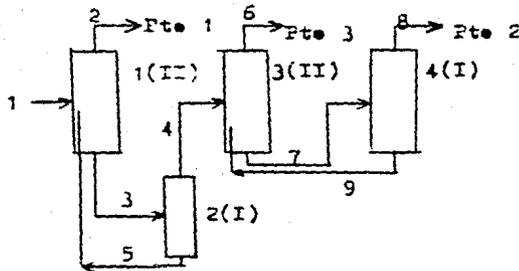
Al aplicar de nuevo los cálculos se generan las corrientes 6 y 7, conteniendo el producto 2 y el MSA que es

recirculado al separador 2, respectivamente. No se generan ya más corrientes, por lo que la estructura inicial está creada, teniendo un costo de \$ 274,803/año, además de conservarse como referencia:



2.- Evolución de las estructuras:

Aquí se aplican las reglas evolutivas para determinar posibles modificaciones a la estructura inicial. La regla 1 no aplica, la 2 no sugiere ningún cambio, la 3 sugiere un cambio en el método de separación para la unidad 1 puede dar como resultado una mejor estructura. Consecuentemente la estructura corriente abajo de la corriente 1 es destruida. En este caso la Síntesis es reiniciada por la implementación de modificación propuesta. Por lo tanto una nueva estructura es creada (E - 1), la cual tiene un costo de \$ 214,675/año. -



Como esta estructura es mejor que la inicial, se preserva como futura referencia.

La estructura E - 1 es nuevamente evolucionada , y a la cual las reglas 2 y 3 no sugieren cambio alguno, sin embargo la 4 propone una modificación en la división del separador 2 para retrasar la remoción del MSA. Resultando eliminada la estructura corriente abajo del separador 2 y así repitiendo el procedimiento se crea una nueva estructura la cual tiene un costo de \$ 158,699/año(E - 2):

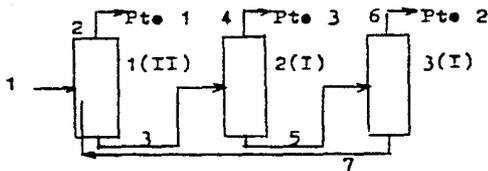


TABLA 7. Comparación de varios métodos para el ejemplo I.

$N_s = 9$ (número de posibles configuraciones)

$N_{usp} = 16$ (número único de posibles problemas)

METODO	No Configuraciones desarrolladas N_{sa}	No único de problemas desa- rrollados N_{spa}
Rodrigo y Seader 1975	4	10
Gomez y Seader 1976	-	8
Nath y Metard 1981	3	6

Ahora nuevamente repitiendo la técnica se encuentra que no se pueden obtener mejoras a la última estructura a -- aplicando las reglas 2, 3, 4 y 5. Por lo tanto es la mejor , - lo cual corresponde con lo obtenido con Rodrigo y Seader -- (1975), aunque el costo reportado por éstos es ligeramente distinto, debido al procedimiento de computación usado. La tabla 7 da una comparación de los distintos métodos usados para resolver este problema.

II.- Sistema de Purificación de n-Butileno:

Considere el problema para la purificación de n-Butileno, estudiado en detalle por Hendry y Hughes (1972). La corriente de alimentación es la salida estabilizada de una u nidad de Dehidrogenación de Butano en una planta procesadora de Butadieno, y consiste de cuatro componentes. Se utilizan como métodos de separación la destilación ordinaria y extractiva con furfural como MSA ,(agente de separación masa).

Alimentación

(corriente 1)

Componente 1

Nombre
Componente

Fracción Mol

1	Propano	0.0147
2	n-Butano	0.5029
3	1-Buteno	0.1475
4	2-trans-Buteno	0.1563
5	2-cis-Buteno	0.1196
6	Pentano	0.0590

- Flujo total = 303.04 Kgmol/Hr ; - Temperatura = 53.89 °C

- Presión = 5.62 Kg/cm² abs

- Productos deseados :

	componentes
1	1
2	2
3	3, 4 y 5
4	6

- Métodos de separación :

I : Destilación

II : Destilación extractiva con furfural(componentes 7)

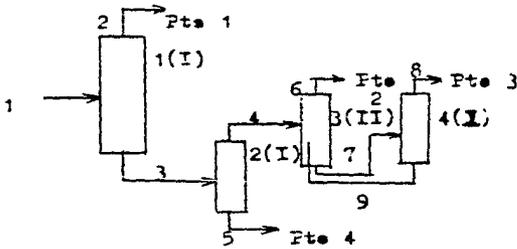
- Orden inicial de los componentes a 54.4 °C :

I : 1, 2, 3, 4, 5, 6

II : 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7

1.- Creación de la estructura inicial:

El cálculo crea la estructura inicial siguiendo las reglas heurísticas, la cual tiene un costo de \$ 1,171,322/año:

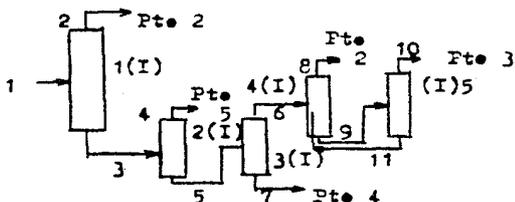


2.- Evolución de las estructuras:

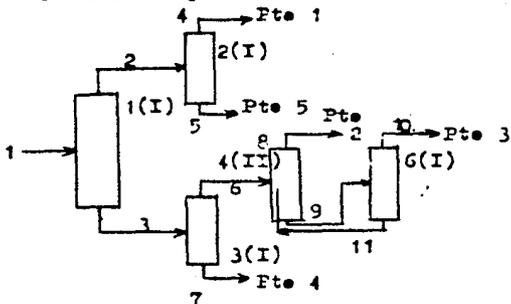
En este caso la regla 3 dicta un cambio para el rompimiento del producto 3, puesto que el MSA fue usado en la estructura inicial para aislarlo. El nuevo conjunto de productos es :

Producto	Componentes
1	1
2	2
3	4, 5
4	6
5	3

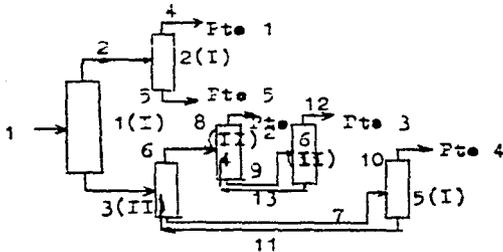
Usando los datos anteriores, se sintetiza una nueva estructura, con un costo de \$ 669,844/año, que es superior a la primera :



E - 1 es ahora evolucionada, aunque en este caso las reglas 2, 3 y 4 no dictan cambios, sin embargo la 5 sugiere una modificación en división del separador 2, anulando la estructura corriente abajo y obteniéndose E - 2 con \$ 658,737 /año de costo y además superior a la anterior:



Nuevamente para E - 2 el procedimiento indica que las reglas 2, 3 y 4 no la modifican, pero 5 si. Esta regla - indica un cambio en la división del separador 3, y así otra vez la estructura corriente abajo es destruida, implementán dose la mejora para producir E - 3 que tiene un costo mayor de \$ 701,786/año, por lo tanto E - 2 es retenida:



Finalmente como la estructura E - 2 no puede ser e volucionada es la mejor, la cual corresponde a la presentada - por Hendry y Hughes (1972), aunque difieren los costos, debi do a los diferentes métodos empleados para el diseño. La ta bla 8 da una comparación de los distintos métodos usados -- para resolver el mismo problema.

TABLA 8. Comparación de varios métodos para el ejemplo II.

$N_s = 376$ (número de posibles configuraciones)

$N_{usp} = 92$ (número único de posibles problemas)

METODO	No Configuraciones desarrolladas N_{sa}	No único de problemas desarrollados N_{upa}
Heudry y Hughes 1972	4	64
Westerberg y Stephanopoulos 1975	4	43
Stephanopoulos y Westerberg 1976 (evolutive)	10 19	
Redrige y Seader 1975	14	23
Genes y Seader 1976		21
Seader y Westerberg (1977)	3	11
Hath y Motard 1981	4	12

IV.2.3. Método de Lu y Motard (1982):

Proponen la siguiente técnica para sintetizar el - mejor diagrama. Para ello inician con la aplicación de 7 reglas heurísticas para crear la estructura inicial :

- Regla 1 : Generar pocos productos
- Regla 2 : Favorecer la destilación
- Regla 3 : Elegir la separación potencialmente más barata
- Regla 4 : No usar un MSA para aislar otro MSA
- Regla 5 : No se acepta una separación con $\alpha > \alpha_{\text{min}}$
- Regla 6 : Usar la heurística como guía para el diseño de la unidad de separación
- Regla 7 : Si la destilación no es factible, probar otro tipo de separación.

En este caso las reglas 1, 2 , 4 y 5 permanecen igual, pero la 3, 6 y 7 son modificadas:

Heurística 3 : Evaluación de la Función Heurística:

Durante la creación de la estructura inicial, para cada corriente que tiene más de una posible división, se debe establecer la más cercana a la mejor.

Para destilación se deben además usar las siguientes reglas :

- (a) Reducir la carga total de separación en la secuencia.
- (b) Favorecer grandes α_{LK-HK}
- (c) Favorecer una columna balanceada
- (d) Dejar las fracciones de alta recuperación (99%) hasta el final
- (e) Favorecer menos productos del destilado

Una función Heurística toma en cuenta las reglas anteriores, y organizándolas dentro de ésta, se representan:

$$H = H_L + H_D \dots\dots(4.7)$$

donde:

H_L = Costo estimado de la corriente de separación

H_D = Costo estimado de todas las separaciones restantes corriente abajo.

La función H evalúa el costo estimado de la secuencia total, y para ello los términos corresponden a las funcion

nes heurísticas previamente propuestas por Nath y Motard (1981) y Thompson y King (1972), tales como "seleccionar primero la secuencia de separación más barata", etc.

La expresión matemática para la expresión H en destilación es :

$$H_L = \frac{\log \left(\frac{s_{PLK}}{1-s_{PLK}} \times \frac{s_{PHK}}{1-s_{PHK}} \right)}{\log \frac{LK}{LK-HK}} \times \left[1 + \left(\frac{2D}{D+B} \right) \times \left[1 + \left(\frac{D-B}{D+B} \right) \right] \right] \dots (4.8)$$

$$H_D = EML \times AVG \times W \dots (4.9)$$

donde :

s_{PLK} s_{PHK} = Fracción de la división de componentes pesados claves

D = Flujo del destilado

B = Flujo del fondo

= Factor de separación

EML = Estimación de la carga másica de separación corriente abajo

AVG = Número promedio de etapas por unidad de carga másica de separación corriente abajo

W = Factor de peso para las separaciones corriente a bajo.

H_L = Estima el costo reducido de la corriente de separación por unidad de masa y puede ser dividido en tres términos:

El primero es el número mínimo de etapas teóricas para la separación y toma en cuenta las reglas 3b y 3d.

El segundo la heurística 3e.

El último es un término que penaliza las columnas sin balancear y toma en cuenta la regla 3c.

- H_D = Estima el costo reducido de la separación corriente abajo y toma en cuenta la heurística 3a.

- EML = Es la estimación de la carga molar de separación que indica el flujo molar que debe ser procesado por todas las unidades del proceso corriente abajo del separador en consideración antes de que todos los productos deseados sean aislados. El valor numérico de EML es una probabilidad de peso de cada posible secuencia corriente abajo sin referirse a las propiedades físicas de los componentes.

Consideremos los siguientes casos simples:

Asignar A, B, etc. siendo la identificación de las especies(también como flujo molar).

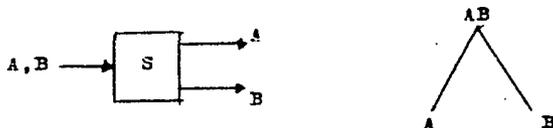
CASO 1 : Corriente conteniendo un sólo componente;

Puesto que la corriente contiene sólo un componente , no se necesita procesar alguno más, por lo tanto :

$$EML_1 = 0 \dots\dots(4.10)$$

CASO 2 : Corriente conteniendo dos componentes para ser aislados:

El flujo molar para estos componentes es A y B :

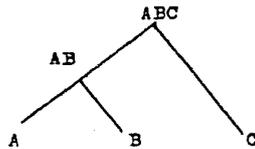
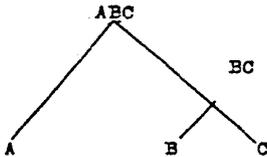


Esto es sólo una posibilidad para separar A y B sin usar un MSA. Por ejemplo : $A + B$, puede ser separado directamente en A y B. Por lo tanto para una corriente de 2 componentes :

$$EML_2 = A + B \dots\dots(4.11)$$

CASO 3 : Corriente conteniendo tres componentes:

Usando una estructura de representación tipo árbol , las dos posibles configuraciones son:



Para la primera estructura, la carga másica de separación es por ejemplo la suma de los flujos molares en cada forma:

$$(A + B + C) + (B + C) = A + 2B + 2C \quad ..(4.12)$$

similarmente para la otra estructura la carga másica de separación es :

$$(A + B + C) + (A + B) = (2A + 2B + C) ..(4.13)$$

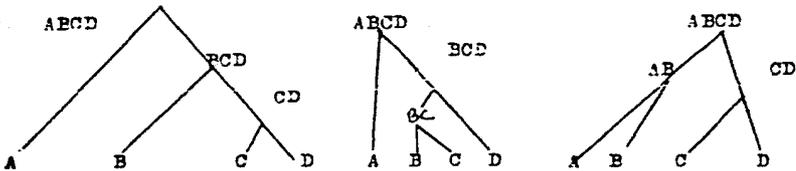
Sin considerar cualquier heurística la posibilidad de que ocurra cada estructura es de $\frac{1}{2}$. Por lo tanto para aislar una mezcla de tres componentes en tres especies puras es:

$$EML_2 = \frac{1}{2} (A + 2B + 2C) + \frac{1}{2} (2A + 2B + C) = \frac{3}{2} A + 2B + \frac{3}{2} C \quad \dots(4.14)$$

Se puede observar que el efecto de B es más serio que el de los otros dos.

CASO 4 : Corriente conteniendo cuatro componentes:

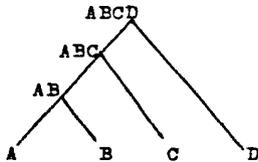
Las estructuras de árbol para todas las posibles - configuraciones son:



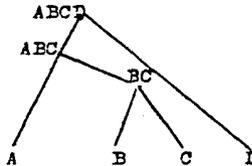
Probabilidad: $1/3 \times \frac{1}{2} = 1/6$

$1/3 \times \frac{1}{2} = 1/6$

$1/3$



$1/3 \times \frac{1}{2} = 1/6$



$1/3 \times \frac{1}{2} = 1/6$

El EML puede calcularse como:

$EML_4 = 11/6A + 5/2B + 5/2C + 11/6D \dots\dots(4.15)$

Recurriendo a una fórmula para EML tenemos:

Asignar EML $x_1 - x_n$ para la estimación de la carga másica de separación para una corriente conteniendo n productos con flujos molares x_1, x_2, \dots, x_n respectivamente:

$$\text{EML } x_1 - x_n = \sum_{i=1}^n x_i + \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} (\text{EML } x_1 - x_i + \text{EML } x_{i+1} - x_n) \quad (4.16)$$

Usando esta fórmula, el EML para una corriente de 5 componentes puede ser calculado como sigue:

$$\begin{aligned} \text{EML } x_1 - x_5 = & (x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5) + 1/4 (\text{EML } x_2 - x_5 + \text{EML } x_1 - \\ & x_2 + \text{EML } x_3 - x_5 + \text{EML } x_1 - x_3 + x_4 - x_5 + \text{EML } x_1 - x_4) \dots (4.17) \end{aligned}$$

como algunos EML para 2, 3 o 4 corrientes están disponibles se tiene entonces:

$$\text{EML } x_1 - x_5 = 25/12x_1 + 17/6 + 3x_2 + 3x_3 + 17/6x_4 + 25/12x_5$$

similarmente para 6 y 7 componentes se tiene:

$$\text{EML}_6 = 137/60x_1 + 37/12x_2 + 10/3x_3 + 10/3x_4 + 37/12x_5 + 137/60x_6 \quad \dots (4.18)$$

$$EML_7 = 49/20x1 + 197/60x2 + 43/12x3 + 11/3x4 + 43/12x5 + \\ 197/60x6 + 49/20x7$$

Puede observarse que la síntesis de secuencias de separación basadas totalmente en criterios de EML (por ejemplo eligiendo valores pequeños de EML en cada etapa) podría resultar en una secuencia con muy poca o mínima carga másica de separación.- Esto puede ilustrarse con el siguiente ejemplo:

Si una corriente de alimentación contiene A, B, C y D componentes clasificados en orden decreciente de volatilidades, con una fracción molar :

$$A = 0.1, B = 0.2, C = 0.3, D = 0.1, E = 0.3$$

En la primera etapa existen cuatro posibles divisiones :

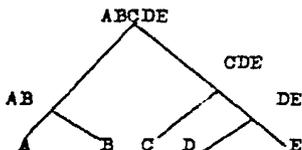
$$EML (A/B) = 0 + (11/6 \times 0.2 + 0.3 \times 5/2 + 0.1 \times 5/2 + 11/6 \times \\ 0.3) = 1.97$$

$$\text{Similarmente, } EML (B/C) = 1.4 ; EML (C/D) = 1.4 \text{ y } EML (D/E) \\ = 1.6167$$

Si se continúa la Síntesis por el criterio de míni

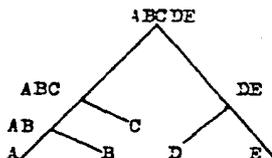
mo EML, dos estructuras podrían crearse representando B/C o C/D como primera decisión:

Estructura 1 :



Carga total de
separación = 2.4

Estructura 2 :



Carga total de
separación = 2.3
(mínima carga)

La segunda estructura tiene la propiedad de la ---
mínima carga másica total de separación y la primera es un -
valor muy aproximado.

- AVG : El número promedio de etapas por unidad de sepa
ración(carga másica) para las separaciones corriente abajo se
define como:

$$AVG = \frac{\sum_{i=1}^k \log \left(\frac{sp_{iLK}}{1-sp_{iLK}} \frac{sp_{iHK}}{1-sp_{iHK}} \right) (X_{iLK} + X_{iHK})}{\sum_{i=1}^k (X_{iLK} + X_{iHK})} \dots\dots(4.19)$$

El primer término en el numerador es el mínimo número teórico de etapas para cada división de la separación corriente abajo a reflujo total.

- W : Factor de peso

En la función heurística H_L , la dificultad de la corriente separación está definida como el producto de tres términos. El producto de los últimos dos da un valor entre 2 y 6, lo cual puede ser considerado como una falta en el primero. La estimación de la dificultad de separación corriente abajo involucra a ENL, AVG y W. ENL estima la carga máxima de separación corriente abajo e implica que tan gruesa debe ser la columna, AVG indica la altura de la misma.

Entonces el factor de peso a usar es de 1.3 a 1.7

En un valor de $W = 0$, es interesante notar que --
 corresponde a la función heurística, la cual selecciona prime
 ro la separación fácil, y para un valor alto de W se elige -
 la separación más difícil.

Existen funciones heurísticas para otros tipos de
 separadores y aplican cuando la segunda regla heurística (fa-
 vorecer la destilación) no aplica, es decir, cuando las se-
 paraciones usan MSA's:

- Destilación extractiva (4.20)

$$H = \frac{\text{LOG} \frac{s_{PLK}}{1-s_{PLK}} \frac{s_{PHK}}{1-s_{PHK}}}{\text{Log} \alpha_{LK-HK}}$$

- Extracción (4.21)

$$H = \frac{\log \frac{s_{PLK}}{1-s_{PLK}} \cdot \frac{s_{PHK}}{1-s_{PHK}}}{\log \alpha'_{LK-HK}}$$

- Absorción (4.22)

$$H = 3 \cdot \ln \left(\frac{0.286}{1-s_{PHK}} \right) + 0.714$$

$$\text{si } M = \frac{1 - \frac{1.4}{\alpha}}{1 - (\frac{1.4}{\alpha})^{N+1}} \geq s_{PLK}$$

- Agotamiento (4.23)

$$H = 3 \cdot \ln \left(\frac{0.286}{1-s_{PLK}} \right) + 0.714$$

$$\text{si } M = \frac{1 - \frac{1.4}{\alpha}}{1 - (\frac{1.4}{\alpha})^{N+1}} \geq s_{PHK}$$

$$H = 3 \cdot \ln\left(\frac{0.286}{1-\alpha_{PHK}}\right) + C.714 \cdot \frac{\alpha_{PLK}}{M} \quad H=3 \cdot n\left(\frac{0.286}{1-\alpha_{PLK}}\right) + 0.714 \cdot \frac{\alpha_{PHK}}{M}$$

... (4.24) ... (4.25)

$$\text{si } M = \frac{1 - \frac{1.4}{\alpha}}{1 - (1.4) \alpha} \cdot N + 1 < \alpha_{PLK} \quad \text{si } M = \frac{1 - 1.4}{1 - (1.4) \alpha} \cdot N + 1 < \alpha_{PHK}$$

Para extracción, un factor de separación α' es usado debido a que la eficiencia de etapa para extracción es menor que para destilación extractiva, y se debe estimar el número de etapas teóricas por el método de Sourders (1964), donde los factores de separación para destilación ordinaria, extractiva y extracción están dados. Se puede convertir el valor real α de extracción en uno equivalente, por ejemplo α' para destilación extractiva, donde ambos MSA's puedan efectuar la separación de los mismos componentes claves. La correlación usada es:

α' = Factor equivalente de separación
 α = Factor real de separación para extracción

$$\alpha' = 0.0967 + 0.294 \alpha - 0.0268 \alpha^2 \cdot \ln \alpha \text{ si } \leq 6 \quad \dots (4.26)$$

$$\alpha' = (1.317 - 0.0476 \alpha + 0.002354 \alpha^2) \cdot \ln \alpha \text{ si } > 6 \quad \dots (4.27)$$

Con este factor de separación modificado, se puede definir la función H para extracción y del mismo modo para destilación extractiva.

Para absorción y agotamiento la ecuación de Kremser -Souders-Brown se usa para calcular el número teórico de etapas en la definición de H, suponiendo un factor de absorción de 1.4 al igual que para agotamiento.

Heurística 6 : Algunas de las guías para el diseño de unidades son resumidas como sigue:

- 6.1 La presión de operación debe ser aproximadamente la ambiente.
- 6.2 Establecer divisiones de fracciones de los componentes claves para un valor previamente especificado
- 6.3 Para destilación ordinaria o extractiva establecer el reflujo de operación como 1.3 veces el mínimo
- 6.4 Establecer un factor de agotamiento de 1.4 para extracción
- 6.5 Establecer un factor de absorción de 1.4 para absorción
- 6.6 Establecer un factor de 1.4 para agotamiento

Estas reglas proporcionan las especificaciones para seleccionar las condiciones de operación de una unidad de separación.

Heurística 7 : En este método la destilación es identificada como no factible bajo las siguientes condiciones:

- (a) Existe una gran cantidad de componentes no condensables en la corriente de proceso.
- (b) Algunos componentes de alto grado de ebullición están presentes, provocando que la temperatura en el reboiler exceda a la permitida.
- (c) El factor de separación entre los componentes claves ligeros y pesados o la elección del usuario es menor de 1.1.
- (d) Un producto multicomponente puede ser roto si se usa la destilación ordinaria.

Para el primer paso se prueba absorción, para el segundo extracción líquida y para 3 y 4 destilación extractiva o extracción.

Una vez establecida la estructura inicial tomando

en cuenta las heurísticas anteriores, se procede a la evolución de la misma. Para ello se emplean las siguientes reglas evolutivas:

- 1.- Dudar de la regla heurística 1
- 2.- A. Si se usa refrigeración probar absorción
B. Si se usa una columna de vacío probar extracción
- 3.- Examinar las estructuras aproximadas; si H está dentro de un 5 %
- 4.- Probar un separador usando un MSA si :
$$\text{M A X}_{\text{todas divisiones}}(\alpha_{\text{MSA}}) \geq \text{M A X}_{\text{todas divisiones}}(\alpha)^{1.95}$$
- 5.- Examinar todas las aproximaciones para decidir si la separación del MSA debe retrasarse.
- 6.- Probar las siguientes mejores separaciones si :
 - A. R_{min} del inmediato sucesor >> R_{min} de la unidad en consideración
 - B. El costo del inmediato sucesor >>> costo de la undad en consideración.

En el caso de la regla 2, el uso de condiciones extremas de temperatura y presión para destilación hace muy al

to el costo o conduce a degradaciones térmicas; entonces --- otros tipos de separadores deben considerarse.

Si refrigeración tiene que ser usada para condensar el reflujo en la destilación, indicando que algunos de los - componentes son muy volátiles, quizá entonces la absorción - con un solvente líquido podrá ser mejor. En este caso la columna que usa refrigeración es eliminada y se prueba absorción.

Si la corriente de alimentación contiene algunos pe- sados, los cuales fuerzan una columna de vacío para evitar A' temperaturas extremas en el reboiler, entonces considerar --- una extracción líquido-líquido.

En cuanto a la regla 3, ella toma en cuenta algu- nas de las diferencias o deficiencias de la función H. Esto se debe a que la función es aproximada puesto que no conside- ra el reflujo de operación, la presión o efectos de la compo- sición sobre la volatilidad. Para compensar lo anterior los diseños con valores dentro de un 5 % son tratados igualmente , por lo tanto durante la creación de una estructura, las di- visiones que se encuentren dentro del valor anterior se con- servan.

IV.2.3.1. Ejemplos Ilustrados

I.- Separación de Hidrocarburos:

La corriente de alimentación contiene seis hidrocarburos. Cuatro productos en forma relativamente pura deben ser aislados. Diez métodos de separación están disponibles :

Alimentación:

Componentes	Nombre	Fracción Mol
1	Etano	0.20
2	Propano	0.20
3	Butano	0.15
4	Pentano	0.15
5	Propeno	0.15
6	1-Buteno	0.15

- Flujo total = 1,000 lbMol/Hr; - Temperatura = 100 °F

- Presión = 14.7 psi

-- Productos deseados:

Productos	Componentes	Fracción dividida
1	1	0.98

2	2	0.98
3	3, 4	0.98
4	5, 6	0.98

- Métodos de separación disponibles:

- 1.- Destilación
- 2.- Destilación extractiva con Tetrahidrofurano
- 3.- Destilación extractiva con fenol
- 4.- Destilación extractiva con n- Hexano
- 5.- Extracción con Benceno como solvente
- 6.- Extracción con n-Heptano como solvente
- 7.- Extracción con isopropanol como solvente
- 8.- Agotamiento con nitrógeno
- 9.- Absorción con n-Eicosano
- 10.- Absorción con Hexacloro-Benceno.

La corriente de alimentación es considerada pri -
mera. Obteniendose dos diseños :

Diseño 1 : $LK = 1$, $HK = 5$, $ST = 1$, $\alpha = 3.456$, $H = 6.15$

Diseño 2 : $LK = 6$, $HK = 3$, $ST = 1$, $\alpha = 1.246$, $H = 13.66$

El primer diseño tiene un menor valor de H y es --

probado, produciendo dos nuevas corrientes, la 2 y 3. La corriente 2 contiene la mayor parte del producto 1, la otra contiene el resto. La corriente 3 además necesita ser procesada más adelante.

Diseño 1 : LK = 6 , HK = 3 , ST = 1 , α = 1.246 , H = 10.695

Este diseño es probado y se encuentra que es factible, entonces las corrientes 5 y 6 son generadas. La primera contiene en mayor cantidad el producto 3 y la otra el resto. Ahora la corriente 4 es considerada. Diseños utilizando el método de separación 1 no es posible sin dividir los productos, consecuentemente otros métodos deben ser probados. El procedimiento genera los siguientes diseños:

Diseño 1 : LK = 2 , HK = 5 , ST = 2 , α = 1.071 , H = 113.37

Diseño 2 : LK = 2 , HK = 5 , ST = 3 , α = 1.298 , H = 29.82

Diseño 3 : LK = 5 , HK = 2 , ST = 5 , α = 1.262 , H = 393.06

Diseño 4 : LK = 5 , HK = 2 , ST = 6 , α = 1.019 , H = 393.06

Diseño 5 : LK = 6 , HK = 2 , ST = 7 , α = 2.651 , H = 22.306

Otros tipos de separadores son eliminados debido a que requieren de la división de productos. El diseño 1 y 3 no son aceptables debido a los valores pequeños de α . El 5 con una H pequeña es probado primero, pero se generan diseños no factibles, debido a que el solvente es miscible con -

cuatro líquidos extractivos. Por consiguiente se prueba el número 2, pero tampoco es factible por que los fondos forman dos fases líquidas para separar por destilación extractiva. Puesto que no existe un diseño alternativo, esto determina que el rompimiento del producto 4 es necesario. Efectuando tal rompimiento se generan los componentes 5 y 6 como corrientes separadas y que serán remezcladas.

Para el conjunto de productos 2, el procedimiento de creación de la estructura inicial es repetido. Para la corriente 1, el procedimiento genera 4 diseños :

Diseño 1 : LK = 5 , HK = 2 , ST = 1 , α = 1.202 , H = 13.71

Diseño 2 : LK = 1 , HK = 5 , ST = 1 , α = 3.456 , H = 9.33

Diseño 3 : LK = 2 , HK = 6 , ST = 1 , α = 2.722 , H = 8.03

Diseño 4 : LK = 6 , HK = 3 , ST = 1 , α = 1.246 , H = 17.59

El diseño 3 es calculado y es factible, produciendo las corrientes 2 y 3, conteniendo productos 1; la primera 1 y 4 y la segunda 3 y 5. Para la corriente 2, hay dos diseños factibles :

Diseño 1 : $LK = 1$, $HK = 5$, $ST = 1$, $\alpha = 3.456$, $H = 5.88$

Diseño 2 : $LK = 5$, $HK = 2$, $ST = 1$, $\alpha = 1.292$, $H = 13.95$

En este caso el primero es calculado y se encuentra que es factible, generando las corrientes 4 y 5. La primera corriente contiene mayor cantidad de producto 1 y la segunda los productos 4 y 2.

Para la corriente 3 el procedimiento suministra solo un diseño :

Diseño 1 : $LK = 6$, $HK = 3$, $ST = 1$, $\alpha = 1.246$, $H = 8.578$

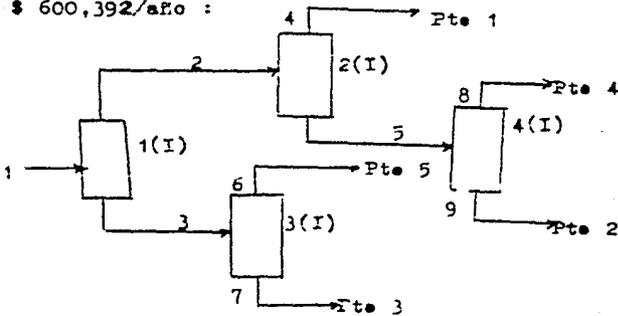
Este diseño es probado y produce dos corrientes, la 6 y la 7, la primera contiene el producto 5, la otra el 3.

Igualmente para la corriente 5 solo se genera un diseño :

Diseño 1 : $LK = 5$, $HK = 2$, $ST = 1$, $\alpha = 1.202$, $H = 9.81$

Nuevamente repitiendo el procedimiento, se obtienen las corrientes 8 y 9. La 8 contiene producto 4, la otra producto 2.

Entonces la estructura inicial es creada, cuyo costo es de \$ 600,392/año :



El factor de peso a través de todo el proceso ha sido de 1.5. Ahora aplicando las reglas evolutivas, tres separadores son intentados en la red inicial, probando que no existe mejora factible. De aquí que ésta sea la mejor.

Esta estructura ha sido obtenida también por Westerg y Stephanopoulos (1975), Thompson y King (1972) y Nath y Motard (1981) usando diferentes enfoques (tabla 9).

TABLA 9. Comparación de varios métodos para la separación de una mezcla de hidrocarburos.

METODO	No de Configuraciones actualmente desarrolladas
Westerbeg y Stephanopoulos 1975	5
Thompson y King 1972	5
Nath y Metard 1981	3
Lu y Metard 1982	1

IV. 3. Algorítmica

En el caso de las técnicas de solución algorítmicas, éstas se aplican a la Síntesis de Secuencias de separación con Integración de Energía, debido a esto solo se dará un panorama general de los métodos de solución, en virtud de que la integración de calor no es un objetivo del presente trabajo.

Para ilustrar estas técnicas se ha tomado como base los trabajos de Andreceovich y Westerberg (1985) divididos en tres partes, en virtud de ser las más recientes.

Andreceovich y Westerberg (1985), presentaron una investigación dividida en tres partes. La primera presenta un método nuevo, el cual podrá facilitar la selección de la mejor secuencia de destilación con integración de energía de forma rápida y fácil. La clave del método está en el hecho de suponer que Q_{AT} , el producto del requerimiento de calor del condensador e reboiler y la diferencia de temperatura entre éstos, es constante en un amplio rango de presiones. Usando tal suposición y los principios de la destilación de múltiple efecto al nivel más bajo del requerimiento de servicios para la realización de una destilación simple, puede cal

cularse fácilmente los diseños que involucren columnas simples de dos productos que puedan ser o no de múltiple efecto.

El primer paso para encontrar la mejor configuración, es calcular el límite inferior del requerimiento mínimo de servicios para cada posible secuencia. Para lo anterior, es necesario entender la destilación de múltiple efecto y lo significativo de $Q\Delta T$. Lo primero no es un método ampliamente usado, y consiste en introducir la alimentación a dos columnas en lugar de una sola que cuente con un condensador y un reboiler. La presión en una de las columnas debe ser lo suficientemente alta, así como la temperatura del condensador y reboiler de la otra columna que debe estar a baja presión. El calor eliminado en el condensador de la columna a alta presión puede ser usado en lugar del vapor del reboiler en la columna de baja presión. La desventaja de este procedimiento es que el calor usado es degradado a lo largo del rango de temperaturas de la columna simple.

El producto $Q\Delta T$ es una función de la temperatura e presión a la cual es operada la columna. Este producto se incrementa en forma lineal y puede duplicarse en el rango de una a 25 atmósferas, aunque en esta parte se supone --

constante e independiente de las condiciones de operación. Esta cantidad es importante para el cálculo del límite inferior del requerimiento mínimo de servicios, aunque puede ser usada para evaluar la mejor secuencia para separar una alimentación multicomponente.

Para estimar el requerimiento mínimo de servicios de una secuencia de destilación, $Q_{\text{min}}(K)$, se puede utilizar el límite de éste y el diagrama T-Q para desarrollar un diagrama de múltiple efecto, el cual sería muy cercano al que predice el mínimo requerimiento de servicios

El procedimiento para encontrar la configuración de columnas a menor costo que pueda efectuar la separación de una mezcla multicomponente está descrita por el algoritmo llamado de " Menor Costo " :

- 1.- Identifique y liste todas las secuencias de destilación que generen los productos deseados.
- 2.- Liste todas las destilaciones, las cuales puedan efectuarse en cualquiera de las secuencias generadas en el paso anterior. Calcule $Q \Delta T$.

3.- Para cada secuencia calcule el coste mínimo de servicios, el de capital y el anualizado. El requerimiento mínimo de servicios para cada secuencia está dado por :

$$Q_{\min}(K) = \sum_{i \in S(K)} Q_i \Delta T_i / \Delta T_{\text{avail}} \dots (4.28)$$

$Q_{\min}(K)$ = Requerimiento mínimo de servicios para la secuencia K.

$S(K)$ = Índice de destilaciones en la secuencia K

Q_i = Requerimiento del condensador o reboiler en la columna i

ΔT_i = Diferencia de temperatura entre el condensador y reboiler en la columna i

ΔT_{avail} = Diferencia de temperatura entre los servicios disponibles de calentamiento y enfriamiento.

Para el coste mínimo de servicios de cada secuencia, éste se obtiene multiplicando el requerimiento mínimo de servicios, $Q_{\min}(K)$, por el coste de requerimientos de calor, C_{HU} , y por el coste de los requerimientos de enfriamiento, C_{CU} , obteniéndose :

$$C_{\text{util},\min}(K) = Q_{\min}(K)(C_{\text{CU}} + C_{\text{HU}}) \dots (4.29)$$

El costo de capital mínimo para una configuración es la suma de los costos individuales de las columnas:

$$C_{\text{cap, m\u00edn}}(K) = \sum_{i \in S(K)} C_{\text{cap, i}} \dots \dots \dots (4.30)$$

El costo anualizado m\u00ednimo de cada configuraci\u00f3n - est\u00e1 dado por:

$$C_{\text{ann, m\u00edn}}(K) = (1/\alpha)C_{\text{cap, m\u00edn}}(K) + \beta C_{\text{util, m\u00edn}}(K) \dots (4.31)$$

donde: α es el tiempo de amortizaci\u00f3n del capital de inversi\u00f3n y β es el factor referido al impuesto sobre la renta.

- 4.- Colocar Z^+ , un l\u00edmite superior sobre la mejor soluci\u00f3n e igual a M un n\u00famero muy grande.
- 5.- De la lista generada en el paso 3 elija la secuencia con el menor l\u00edmite inferior para el costo anualizado. Si la lista est\u00e1 llena, parar; la mejor soluci\u00f3n es la configuraci\u00f3n correspondiente al valor de Z^+ . De otro modo, conociendo Z^+ , $C_{\text{cap, m\u00edn}}(K)$ y $C_{\text{util, m\u00edn}}(K)$, es posible calcular los l\u00edmites superiores del requerimiento de servicios y del costo de

esta secuencia. El límite superior es :

$$Q^+(K) = \left[Z^+ - C_{\text{cap}, \text{mín}}(K) / \alpha \right] / \beta (C_{\text{HU}} + C_{\text{CU}}) \dots (4.32)$$

Cualquier configuración de la secuencia K con requerimiento de servicios como $Q^+(K)$ no puede ser más económico que el de Z^+ . El límite superior del capital de inversión es:

$$C_{\text{cap}}^+(K) = \alpha \left[Z^+ - \beta Q_{\text{mín}}(K) (C_{\text{HU}} + C_{\text{CU}}) \right] \dots (4.33)$$

Cualquier configuración de esta secuencia con un costo de capital tan grande como $C_{\text{cap}}^+(K)$ no puede ser más económico que Z^+ .

- 6.- Determine una configuración inicial para la secuencia elegida. Esta configuración debe tener $Q_{\text{mín}}(jK) < Q^+(K)$ y $C_{\text{cap}}(j, K) < C_{\text{cap}}^+(K)$.
- 7.- Determine si la configuración elegida en el paso 6 puede ser operada entre la temperatura útil más caliente y la más fría. También determine el requerimiento de servicios para esta configuración.
- 8.- Si el requerimiento de servicios de la secuencia K :

$Q(j,K) > Q_{\min}(j,K)$, recalcule Z , el costo de la configuración j de la secuencia K . De otro modo continúe:

- a) Si $Z < Z^+$, entonces $Z^+ = Z$ y recalcule $Q^+(K)$ y $C_{\text{cap}}^+(K)$ como en el paso 5 y retorne al paso 6.
- b) Si $Z > Z^+$ y $C_{\text{cap}}(K) < C_{\text{cap}}^+(K)$ poner $Q^+(K) = Q(j,K)$ y retorne al paso 6.
- c) Si $Z > Z^+$ y $C_{\text{cap}}(K) \geq C_{\text{cap}}^+(K)$, elimine la secuencia K generada en el paso 3. También eliminar cualquier otra secuencia con $C_{\text{ans},\min}(K) > Z^+$. Retornar al paso 5.

El desarrollo y uso de este algoritmo está basado sobre varias suposiciones, la más importante es que $Q\Delta T$ para una columna de destilación es independiente de las condiciones de operación de la misma, también que el calor sensible asociado con el precalentamiento o preenfriamiento de corrientes es insignificante comparado con los requerimientos de calor latente en condensadores y reboilers, además de suponer una presión en las columnas de 100 Kpa, alimentación de líquido saturado, reflujo de 1,2 veces el mínimo y el máximo flujo que pueda ocurrir en un problema dado.

Una deficiencia de este método es que la manera de agrupar las columnas entre las temperaturas disponibles no es única, pero tiene la ventaja de que el agrupamiento mantiene la presión baja en todas las columnas, que es necesario para los compuestos de volatilidad alta a menor temperatura.

IV.3.1. Ejemplos Ilustrados :

I.- Los datos de este ejemplo fueron tomados de King (1971); Separación de una mezcla de hidrocarburos:

COMPONENTES	X_f	T_b, K
A. Etanol	0.25	351.5
B. Isopropanol	0.15	355.4
C. n-propanol	0.35	370.4
D. Isobutanol	0.10	381.0
E. n-butanol	0.15	390.9

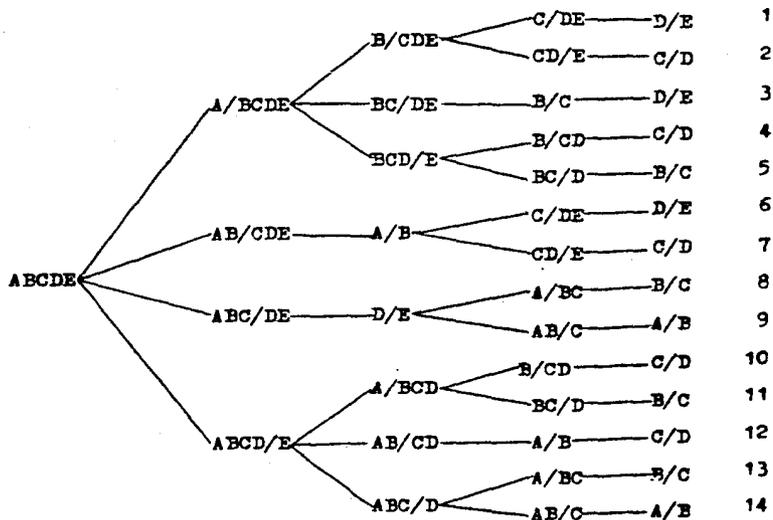
Flujo alimentación = 0.139 Kgmol/s ; alimentación de líquido saturado a 100 Kpa; $\Delta T_{mf} = 10 K$.

Los servicios disponibles son :

SERVICIOS	T_u, K	Costo $\$/10^3/10^{12} J$
Agua de enfriamiento	305	0.16
Vapor agotado	373	1.08

Vapor(448 Kpa)	421	2.63
Vapor(1069Kpa)	462	3.51
Vapor(4241Kpa)	527	4.01

La aplicación del algoritmo de menor costo del paso 1 al 3 son mostrados en la sig. figura y dos tablas más:



PARAMETROS Y COSTOS DE TODAS LAS COLUMNAS

	Requerimientos de		Diferencia	Q Δ T	Costo
	Columnas	Condensador	Reboiler		
	MW	MW	K	MWK	\$103 J
A/B	16.44	16.55	13.9	230.0	1832
B/C	5.28	5.73	25.0	143.2	319
C/D	8.42	7.96	20.6	164.0	624
D/E	4.70	4.92	19.9	97.7	474
A/BC	18.30	19.26	23.4	450.7	972
AB/C	6.85	7.48	27.5	205.7	373
B/CD	5.55	6.03	27.0	162.8	319
BC/D	9.49	9.16	26.1	239.8	588
C/DE	8.74	8.64	26.2	226.4	525
CD/E	7.31	7.61	28.5	216.9	484
A/BCD	18.70	19.74	25.5	503.4	910
AB/CD	7.05	7.68	29.5	226.6	333
ABC/D	11.06	10.94	31.4	343.5	576
B/CDE	5.88	6.42	30.6	196.4	313
BC/DE	9.82	9.84	31.7	311.9	512
BCD/E	8.16	8.57	33.9	290.5	471
A/BCDE	19.27	20.53	28.9	593.3	841
AB/CDE	7.29	7.97	33.1	286.9	367
ABC/DE	11.30	11.63	37.0	430.3	511
ABCD/E	9.53	10.21	39.5	403.3	475

CLASIFICACION DE LAS SECUENCIAS POR EL COSTO DE SERVICIOS ANUAL

Secuencia	Requerimiento de servicios mínimo MW	Costo mínimo de servicios \$ 10 ³ /año	Costo mínimo de capital \$ 10 ³	Costo mínimo anualizado \$ 10 ³ /año
1	5.54	834	2153	1295
3	6.73	859	2145	1305
8	6.59	841	2276	1348
2	6.88	878	2262	1361
4	7.11	907	2255	1374
5	7.43	948	2219	1381
10	7.25	925	2328	1412
11	7.57	966	2292	1419
13	7.87	1004	2342	1459
6	4.94	630	3198	1607
9	5.66	722	3190	1651
7	5.27	672	3307	1672
12	6.01	767	3304	1720
14	5.94	826	3256	1763

En el paso 4 un límite superior inicial para la solución óptima es calculado. Se coloca a Z^+ = 5 veces el límite inferior de la secuencia más costosa, secuencia 14 :

$$Z^+ = 5 \times 1,763 = 8,815$$

Se elige ahora la secuencia menos costosa de la última tabla, es decir la secuencia 1. Entonces se calcula el límite superior del requerimiento mínimo de servicios y el costo de capital para ésta, siendo :

$$Q^+(1) = 120 \text{ MW}$$

$$C_{\text{cap}}^+(1) = 21,000 \times 10^3 \text{ \$/año}$$

En el paso 6 se selecciona una configuración de la secuencia 1, la cual tiene un requerimiento de servicios menor que $Q^+(1)$ y uno de capital también menor a $C_{\text{cap}}^+(1)$. Por lo tanto se elige una configuración en donde una columna realiza cada separación, y se le llama configuración 1-1-1-1 de la secuencia 1.

Para esta configuración el requerimiento mínimo de servicios es :

$$Q_{\text{mín}} = \text{Máx}(20.53, 6.42, 8.64, 4.91) = 20.53 \text{ MW}$$

Donde la división A/B puede referirse a cualquiera de las siguientes secuencias : A/B, A/BC, A/BCD, A/BCDE.

Puesto que ésta es menor que Q^+ (120 MW) la configuración es aceptable en base al requerimiento de servicios, y debe ser comparado el $C_{cap}^+(1)$ con el costo de capital, dando:

$$C_{cap}(j.K) = 2,153 < C_{cap}^+(1) = 21000$$

La secuencia 1 es aceptable basada en los límites del requerimiento de servicios y costo de capital.

Ahora se debe de checar si la configuración es factible basada en la diferencia de temperatura disponible. La diferencia de temperatura disponible es:

$$\Delta T_{avail} = (527 - 10/2) - 351.5 = 170.4 \text{ K}$$

Aplicando la parte a del paso 8 produce:

$$T = 28.9 + 30.6 + 26.2 + 19.9 = 105.6 < 170.4 \text{ K}$$

Esto hace que la configuración 1-1-1-1 de la secuencia 1 sea factible.

Ahora calculando el costo anualizado de esta configuración tenemos (basado sobre un costo de capital de \$ 2153 $\times 10^3$ y un requerimiento de servicios de 20.53MW). El costo es:

$$Z = \$ 2223 \times 10^3/\text{año}$$

Puesto que $Z < Z^+$, hacer $Z^+ = 2223$ y recalculer Q^+ y C_{cap}^+ para la secuencia 1, estos valores son :

$$Q^+(1) = 20.53 \text{ MW}$$

$$C_{\text{cap}}^+(1) = \$ 4472 \times 10^3/\text{año}$$

Regresando al paso 6 se encuentra con otra configuración de la secuencia 1 con $Q < Q^+$ y $C_{\text{cap}} < C_{\text{cap}}^+$. La siguiente configuración considerada es 2-1-1-1, puesto que solamente dividiendo la columna A/BCDE por su requerimiento de servicios - puede disminuir el costo. Entonces $Q_{\text{mfn}}(j,K)$ es :

$$Q_{\text{mfn}}(j,K) = \text{Máx} (20.53/2), 6.42, 8.64, 4.91 = 10.26 \text{ MW}$$

Este valor es menor al de $Q^+(1)$.

El costo de capital de esta secuencia es la suma - de los costos individuales de las columnas. Entonces el costo de capital de la secuencia 2-1-1-1 (de la primera secuencia) es

$$C_{\text{cap}}(j,K) = \$ 2420 \times 10^3$$

Puesto que este valor es menor que $C_{cap}^+(1)$, ésta - configuración es aceptable basada en el límite superior. Cuando su factibilidad de acuerdo al paso 7 da:

$$\sum \Delta T = 163.4 < 170.4 K$$

Así, la configuración es factible. Y su costo anualizado el cual tiene un costo de capital de $\$ 2420 \times 10^3$ y - un requerimiento de servicios de 20.52 MW es :

$$Z = \$ 1649 \times 10^3/\text{año}$$

Haciendo a $Z^+ = 1649$ y recalculando Q^+ y C_{cap}^+ se retorna al paso 5.

El resto de datos obtenidos con este algoritmo es mostrado en la siguiente tabla. La configuración de menor costo que fue desarrollada por este procedimiento, también es mostrada a continuación.

RESULTADOS OBTENIDOS APLICANDO EL ALGORITMO DE MENOR COSTO

Secuencia	Configuración	Z^+ \$10 ³ /año	C_{cap}^+ \$10 ³	Q^+ MW	C_{cap} \$10 ³	Q MW	C_{ann} \$10 ³ /año	Observaciones
1	1-1-1-1	8815	21000	120.00	2152	20.53	2223	
	2-1-1-1	2223	4473	20.52	2420	10.26	1649	
	3-1-1-1	1649	3038	10.26	2590	8.64	1509	
	3-1-2-1	1609	2937	8.64	2752	6.84	1555	
	4-1-2-1	1555	2802	6.84	2854	6.54	1575	$C_{cap} > C_{cap}^+$
3	2-1-1-1	1555	2771	10.49	2415	10.26	1647	
	3-1-1-1	1555	2771	10.26	2510	9.84	1657	
	3-2-1-1	1555	2771	9.84	2761	6.84	1558	
	4-2-1-1	1555	2771	6.84	2822	6.73	1575	$C_{cap} > C_{cap}^+$
8	2-1-2-1	1555	2794	9.71	2710	9.63	1723	
	2-1-3-1	1555	2794	9.63	2975	6.60	1628	$C_{cap} > C_{cap}^+$
2	3-1-1-1	1555	2746	9.80	2717	7.96	1615	
	3-1-1-2	1555	2746	7.96	2801	7.61	1625	$C_{cap} > C_{cap}^+$
4	3-1-1-1	1555	2708	9.84	2692	8.57	1645	
	3-2-1-1	1555	2708	8.57	2785	7.96	1642	$C_{cap} > C_{cap}^+$
5	3-1-1-1	1555	2655	10.06	2632	9.16	1660	
10	2-3-1-1	1555	2685	9.40	2940	7.96	1704	$C_{cap} > C_{cap}^+$
11	2-3-1-1	1555	2632	9.62	2807	9.16	1731	$C_{cap} > C_{cap}^+$
13	2-2-3-1	1555	2582	9.32	3150	7.87	1782	$C_{cap} > C_{cap}^+$

En la segunda parte de su trabajo Andrecovich y - Westerberg (1985), La Síntesis de Secuencias de Separación - con Integración de Energía, es formulada y resuelta como un problema de optimización de una superestructura mixta entera lineal, aplicándolo a la destilación convencional y a la de múltiple efecto. La formulación empleada aproxima este problema a la técnica de programación lineal mixta entera, denominada MILP.

En esta parte se presentan dos formas de generar la superestructura necesaria y entonces se le aplica el modelo de programación requerido. El método es computacionalmente rápido, lo que permite encontrar soluciones que involucran separaciones de múltiple efecto, si son económicamente mejores.

La superestructura ideal es aquella que puede ser generada por cualquier problema dado que posea las siguientes propiedades : contener cada una de las soluciones factibles y que éstas puedan ser fácilmente investigadas. La superestructura ideal para una secuencia de destilación con integración de energía debe incluir todas las secuencias, estructuras de integración de energía y condiciones de operación factibles.

La superestructura puede ser generada, determinando primero los tipos de columnas, que a su vez deben estar incluidas en la misma, entonces conectarlas para formar la secuencia. El número de columnas es determinado por las oportunidades para la integración de energía de éstas. Una vez realizado lo anterior existen dos algoritmos que pueden generar la superestructura, el primero es llamado "de temperatura en condensador/reboiler", éste tiene la ventaja de que la superestructura generada contiene un gran número de columnas. El otro enfoque usado es el que caracteriza cada destilación por una diferencia de temperatura, la cual refleja las temperaturas del condensador y reboiler, además de la diferencia de temperatura permitida para el intercambiador de calor. El algoritmo es denominado de "temperatura característica". La temperatura característica de éste se obtiene de :

$$\Delta T_{char,i} = T_{reb,i} - T_{cond,i} + \Delta T_{hx,i} \dots\dots(4.34)$$

Donde la temperatura del reboiler, ($T_{reb,i}$), y la del condensador, ($T_{cond,i}$), se calculan a condiciones arbitrarias. La diferencia de temperatura para el intercambiador de calor, $\Delta T_{hx,i}$, es variable. Al igual que en el primer enfoque se obtiene una superestructura, pero en este caso con menor

número de columnas, por lo que es recomendable para generar dicha superestructura.

Para representar la superestructura generada y las posibilidades de integración de energía dentro de ella, se emplea la formulación del programa lineal mixto entero. Para ello, se necesita generar una función objetivo, que es usada para comparar las diferentes alternativas y elegir la mejor. Una función objetivo puede ser el costo del proyecto, que está compuesto del costo de equipo y operación. Entonces la función puede formularse como :

$$VC = (CAC/\alpha) + \beta (OPC) \dots\dots\dots(4.35)$$

donde: VC = Costo anualizado del proceso

CAC = Costo de capital instalado

OPC = Costo de operación anual

α = Tiempo de amortización del capital de inversión

β = Corrección a los costos de operación por el impuesto sobre la renta.

Esta función esta sujeta a tres tipos de restricciones: (1) Balance de Materia, que describe las rutas permitidas por el flujo de materiales de columna a columna; (2) In-

tegración de Energía, está asociada a la cantidad de energía entre el condensador y reboiler; (3) Integrales, que aseguran la consistencia entre variables continuas e íntegras.

Las posibilidades factibles de encontrar una solución dentro de la superestructura para la Síntesis de secuencias con integración de energía pueden ser descritas usando métodos desarrollados para redes de intercambiadores de calor, formulados como problemas de transporte a la programación lineal, Cerda (1983), o transite a programación lineal, Papoulias (1982).

Por lo tanto, para formular el programa lineal mixto estere se pueden emplear dos formas; el modelo de transporte y el de transite. Estas formulaciones son:

a) Modelo de Transporte

Utilizar la siguiente serie de ecuaciones:

$$\begin{aligned} \text{MIN } & \frac{1}{\alpha} \sum_{k \in \text{COLS}} \left[FC_k y_k + V_k F_k \right] + \frac{1}{\alpha} \sum_{i \in \text{CS}} \sum_{j \in \text{FM}_i} C_{\text{HX},ij} q(ij) + \\ & \beta \sum_{i \in \text{CU}} C_{\text{CU},i} \sum_{j \in \text{FM},i} q(ij) + \beta \sum_{j \in \text{HU}} C_{\text{HU},j} \sum_{i \in \text{FM},j} q(ij) \\ & \dots (4.36) \end{aligned}$$

Puesto que :

$$\sum_{k \in \text{FS}_p} F_k = F_{\text{TOT}} \dots\dots\dots(4.37)$$

$$\sum_{i \in \text{FS}_m} F_i - \sum_{j \in \text{FS}_m} F_j = 0 \quad m \in \text{IP} \dots\dots(4.38)$$

$$Q_k - K_k F_k = 0 \quad k \in \text{COLS} \dots\dots\dots(4.39)$$

$$\sum_{i \in \text{FM}, j} q(ij) = Q_H(j) \quad j \in \text{HS} \dots\dots(4.40)$$

$$\sum_{j \in \text{FM}_i} q(ij) = Q_C(i) \quad i \in \text{CS} \dots\dots(4.41)$$

$$F_k - U_k y_k \leq 0 \quad k \in \text{COLS}$$

$$y_k = 0 \text{ o } 1 \quad k \in \text{COLS}$$

Las variables de decisión en esta formulación son : binarias, y_k ; el flujo de cada columna, F_k , y la cantidad de calor transferido entre las corrientes frías y calientes, $q(ij)$.

b) Modelo de Tránsito :

Utilizar las siguientes ecuaciones:

$$\text{MIN } \frac{1}{\alpha} \sum_{k \in \text{COLS}} \left[F_C y_k + V_k F_k \right] + \frac{C_{\text{HLX,sys}}}{\alpha} \left[\sum_{k \in \text{COLS}} Q_k + \right.$$

$$\sum_{i \in CU} Q_C(i) \Big] + \beta \sum_{i \in CU} C_{CU,i} Q_C(i) + \beta \sum_{j \in HU} C_{HU,j} Q_H(j) \dots (4.42)$$

Puesto que:

$$\sum_{k \in PS_P} F_k = F_{TOT} \dots \dots \dots (4.43)$$

$$\sum_{i \in PS_m} \left\{ i P_i - \sum_{j \in PS_m} F_j \right\} = 0 \quad m \in IP \dots (4.44)$$

$$Q_k - K_k F_k = 0 \quad k \in COLS \dots \dots (4.45)$$

$$Q_{m-1,m} + \sum_{j \in HS_m} Q_H(j) - \sum_{i \in CS_m} Q_C(i) - Q_{m,m+1} = 0 \dots \dots (4.46)$$

$m = 1, 2, \dots, NI$

$$F_k - U_k y_k \leq 0 \quad k \in COLS$$

$$y_k = 0 \text{ o } 1 \quad k \in COLS$$

Las variables de decisión para esta formulación son: variables binarias, y_k , el flujo de cada columna, F_k , la cantidad de calor residual transferido entre los intervalos $Q_{m,m+1}$ y $Q_{m-1,m}$, además de la cantidad de cada servicio requerido, $Q_H(j)$ y $Q_C(i)$.

donde la nomenclatura para ambos modelos es:

- α = Tiempo de amortización del capital de inversión
- $C_{CU,i}$ = Costo anualizado por unidad de flujo de calor al servicio más frío
- $C_{HU,j}$ = Costo del área por unidad de calor transferido desde una fuente j a un destino i
- $C_{HX,ref}$ = Referido al costo de intercambiadores de calor
- COLS = Índice de todas las columnas en la superestructura
- CS = Índice de los destinos de calor
- CU = Índice de todos los servicios de enfriamiento
- F_k = Flujo de alimentación de la columna k
- P_{TOT} = Alimentación total del proceso
- FC_k = Costo de la carga fija para la columna k
- FH_1 = Índice entre todas las igualdades factibles entre fuentes y destinos de calor 1
- FM_j = Índice de todas las igualdades factibles entre las fuentes de calor j y los destinos
- FS_m = Índice de todas las columnas que tienen un producto m en la alimentación
- HS = Índice de todas las fuentes de calor
- HU = Índice de todos los servicios de calor

- IP = Índice de todos los productos intermedios
- K_k = Constante relativa al flujo de calor en la alimentación para la columna k
- NI = Número de intervalos de temperatura
- PS_m = Índice de todas las columnas que producen al producto m ya sea como destilado o fondos
- $Q_C(1)$ = Flujo de calor para un destino k en el condensador de una columna
- $Q_R(j)$ = Flujo de calor de una fuente j en el reboiler de una columna
- q_{ij} = Transferencia de calor de una fuente j a el destino i
- Q_k = Flujo de calor para una columna (suponiendo que los requerimientos de calor en el condensador y reboiler son aproximadamente iguales)
- $Q_{m-1,m}$ = Flujo de calor para el intervalo de temperatura m-1 a m
- U_k = Límite superior del flujo de alimentación a la columna k
- V_k = Coeficiente para la estimación de variables de costo para la columna k
- y_k = Variable binaria (0 a 1)

β = Constante que toma en cuenta el impuesto sobre la renta para los costos de operación

ξ_i = Fracción de la alimentación, en la que puede existir un producto del destilado o fondo

El modelo que se ha presentado es una mejora a los desarrollos previos, en virtud de que es más rápido, incluye destilaciones de múltiple efecto y puede ser usado en sistemas de proceso total que incluyan destilaciones con integración de energía.

La principal desventaja que presenta el método es que está limitado para encontrar soluciones que solamente están incluidas en la superestructura.

II. Separación de una Mezcla de Hidrocarburos

Considerando la separación de cinco hidrocarburos estudiado por Heaven (1969) :

Componente	X_F
A. Propano	0.05
B. Isobutano	0.15
C. n-butano	0.25
D. Isopentano	0.20
E. n-pentano	0.35

Flujo de la alimentación = 907.2 Kg/mol/hr

$$T_{\text{min}} = 10 \text{ K}$$

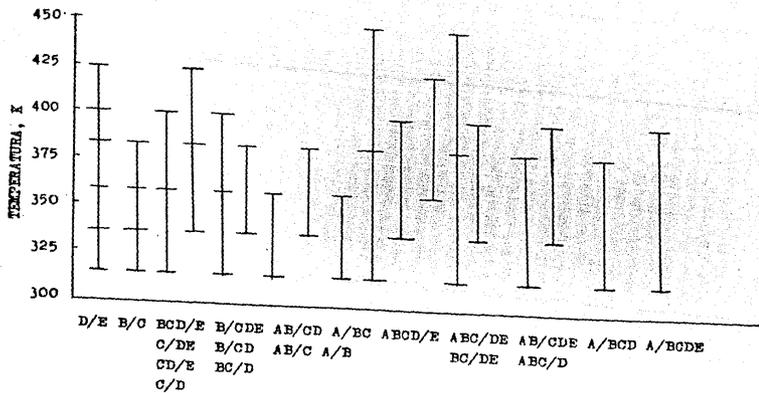
Productos deseados :

Propano, isobutano, n-butano, isopentano y n-pentano puros.

La recuperación en todas las columnas está especificada como 98%.

Servicios	TempK	Costo $\$10^6$ kJ
1. Agua de enfriamiento	305	0.159
2. Vapor a 172 KPa	389	1.653
3. Vapor a 414 KPa	418	2.709
4. Vapor a 1138 KPa	459	3.980
5. Vapor a 2862 KPa	504	4.885

En este problema lo primero es generar la superestructura, para ello se aplica el algoritmo de Temperatura -- Característica, en virtud de que genera un menor número de -- columnas. Por consiguiente la superestructura generada es :

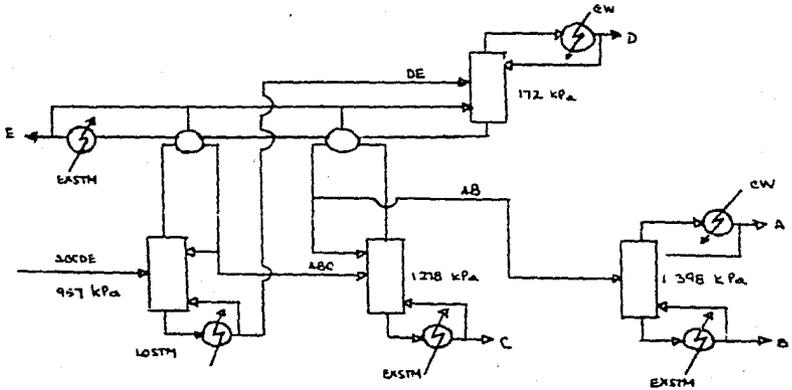


El MILP usado en este problema produce los siguientes resultados :

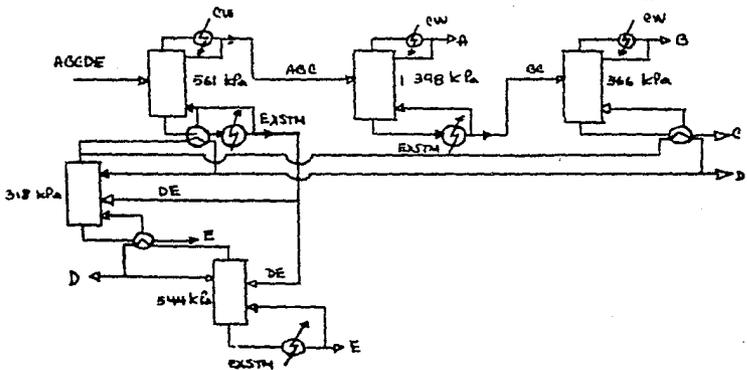
Cada destilación fue evaluada a diferentes presiones entre 101.4 y 1520.3 KPa. Los costes para cada columna fueron obtenidos usando el método de Guthrie (1969), con un índice de costes de 266.1 (septiembre de 1980) para ajustar los costes reportados en este ejemplo.

Este problema fue resuelto aplicando el modelo de tránsito para la integración de energía. El procedimiento produce 55 variables binarias, 121 continuas y 131 restricciones. La solución requiere de 74.2 segundos de DEC-20 en la computadora. El coste para la solución es de \$ 2,221,000 / año. La siguiente mejor solución se encuentra al incluir una restricción integral para eliminar la mejor solución , y su coste es de \$ 2,260,000 / año. La tercera tiene un coste de \$ 2,272,000 / año.

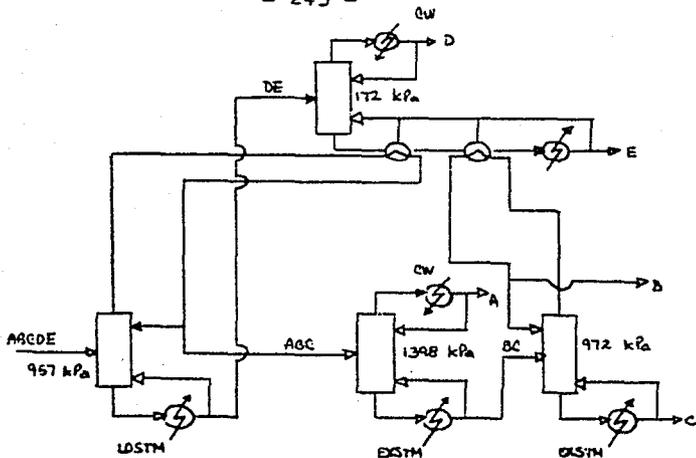
Los esquemas de estas soluciones se muestran a continuación :



Costo de mejor solución = \$ 2,221,000/año



Segunda mejor solución Costo = \$ 2,260,000/año



Tercer mejor solución Costo = \$ 2,272,000/año

Al comparar estas soluciones con las obtenidas por Rathore (1974) , Sophos (1978) y Morari y Faith (1980) se puede observar que los costos con el algoritmo MILP son más bajos.

Finalmente Andrecovich y Westerberg (1985) en la tercera parte de su trabajo, confirma los resultados obtenidos en la primera parte, ya que utilizan los mismos ejemplos, pero ahora no supone constante el producto $Q\Delta T$. Concluyendo que es una buena suposición.

V. CONCLUSIONES

Las conclusiones del presente trabajo son :

- La Síntesis de Procesos ha sido usada como una herramienta necesaria para el diseño de todo proceso químico.
- La Síntesis de Secuencias de Separación es muy importante desde el punto de vista de un diseño eficiente al menor coste para cualquier proceso de separación.
- En el caso de las Técnicas y metodologías para la Síntesis de Secuencias de Separación sin Integración de Energía se tiene que :

a) Heurísticas:

Estas basadas en experiencias anteriores, con las que generas una serie de reglas que pueden ser confiables o no, por lo que se recomienda usar esta técnica para generar estructuras iniciales básicas. No obstante en la solución de las mismas se pueden encontrar estructuras mejores que incluso las generadas por

Las técnicas evolutivas. Las estructuras iniciales generadas son simples, eficientes y de bajo costo.

b) Evolutivas:

Esta metodología utiliza una estructura inicial generada con las reglas heurísticas, la cual es sucesivamente mejorada o evolucionada a través de una serie de reglas evolutivas que conducen a la mejor estructura, siempre y cuando la estructura inicial esté bien seleccionada.

c) Algorítmicas:

Se puede ver que esta técnica produce mejores estructuras. Generalmente, pero presenta el problema de un cálculo más complejo. Los algoritmos empleados permiten generar y evaluar todas las posibles alternativas y determinar la mejor. Estos métodos están limitados a la resolución de problemas con características definidas, además de que el enfoque que se le ha dado es hacia las Secuencias de Separación con Integración de Energía.

- Es recomendable usar técnicas combinadas como Heurís-

ticas-Evolutivas y Heurísticas-Algorítmicas, las cuales en la mayoría de los casos obtienen la mejor estructura.

- Recientemente se han presentado estudios basados en principios termodinámicos, los cuales sintetizan secuencias de Separación, por medio del desarrollo y clasificación de reglas heurísticas. Este enfoque utiliza algoritmos que no son complejos y tediosos para obtener mejores estructuras, no obstante si no ocurriera ello, ésta sería una excelente estructura inicial para la aplicación posterior de un proceso evolutivo que genere la mejor solución.

- También existen trabajos enfocados hacia el diseño y síntesis de destilaciones homogéneas azeotrópicas, que se basan en utilizar un conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales aproximadas en lugar de las diferencias finitas convencionales de un balance de masa y energía plato a plato, además de la cantidad de reflujo mínimo aplicada, y haciendo un análisis de las curvas de curvas de residuo para distinguir entre secuencias factibles y no factibles.

VI. BIBLIOGRAFIA

- 1.- Agaihotri R. and Motard R.
"Reaction Path Synthesis in Industrial Chemistry"
ACS Symposium Series, Computer Applications To Chemical
Process Design and Simulation, 124, 193, 1981.

- 2.- Andrecovich M. and Westerberg A.
"A Simple Synthesis Method Based on Utility Bounding for
Heat-integrated Distillation Sequences"
AIChE J., Vol. 31, No 3, pp 363-375, March 1985.

- 3.- Andrecovich M. and Westerberg A.
"An MILP Formulation for Heat-integrated Distillation Se-
quences Synthesis"
AIChE J., Vol 31, No 9, pp 1461-1474, September 1985.

- 4.- Andrecovich M. and Westerberg A.
"Utility Bounds for Nonconstant Q T for Heat-integrated
Distillation Sequence Synthesis"
AIChE J., Vol 31, No 9 , pp 1475-1479, September 1985.

5.- Bakshi U.S. y Gaddy

Optimal Synthesis of Separation Systems by Flowsheet Simulation .

70th Annual AIChE Meeting, New York, NY. 1977.

6.- Bellman R.E.

" Dynamic Programming "

Princeton University Press, New Jersey 1957.

7.- Cerda J.

"Minimum Utility Usage in Heat Exchanger Network Synthesis- A Transportation Problem"

Chem. Eng. Sci., 38 (3), 1373, 1983.

8.- Corey E. and Jorgensen W.

"Computer Assisted Synthetic Analysis Strategies Based on Appendages and the use of Reconnective Transforms".

J.Am.Chem.Soc., 98, 189, 1976.

9.- Doherty M. and Calderola A.

"Design and Synthesis of Homogeneous Azeotropic Distillation III. The Sequencing of Columns for Azeotropic and Extractive Distillations"

Ind.Eng. Chem. Fundam., Vol 24, No 4, pp 474-485, 1985.

- 10.- Doherty M and Perkins J.
J. Chem. Eng. Sci., 34, 1401, 1979.
- 11.- Donaldson R., Paterson W., and Poston J.
"Design of Complex Heat Recovery Networks"
Synthesis, Simulation and Uncertainty, 1976.
- 12.- Doukas N. and Luyben W.
"Economies of Alternative Distillation Configurations for
the Separation of Ternary Mixtures"
Ind. Eng. Chem. Process Design Development, 17, 272, 1978.
- 13.- Dryden C. y Farlow R.
" Chemical Engineering Cost "
Ohio State University, Columbus, OH. 1966.
- 14.- Flower J.R. y Linnhoff
" The use of Entropy in Process Design "
4 th Research Meeting Instn.Chem. Eng. Swansea Wales,
1977.

15.- Freshwater D. and Henry B.

"Optimal Configuration of Multicomponent Distillation Systems".

Chem. Eng. , 533, Sep., 1975.

16.- Freshwater D. and Hendry B.

" The Configuration of Multicomponent Distillation Systems"

AICHE J., 1981.

17.- Freshwater D.

" Some Present and Future Trends in the Design of Process"

1 st Iranian Congress on Chemical Engineering, Shiraz, 2, 485, 1973.

18.- Gelernter H., Sridharan N., Hart A. , Fowler F., and Shue H.

"An Application of Artificial Intelligence of the Problem of Organic Synthesis Discovery"

Technical Report, Department of Computer Science and Chemistry, Susy at Stony Brook, August 1971.

19.- Glinos K. and Malone M.

"Minimum Reflux, Product Distribution and Lumping Rules
for Multicomponent Distillation"

Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev. 23,764, 1983.

20.- Glinos K. , Malone M. , and Douglas J.

"Simple, Analytical Criteria for the Sequencing of Distillation Columns"

AICHE J., Vol 31, No 4 , pp 683-689, April 1985.

21.- Gomez A. and Seader J.

"Separator Sequence Synthesis by a Predictor Based Ordered Search"

AICHE J., 22, 970, 1976.

22.- Gomez A. and Seader J.

"Synthesis of Distillation Trains by Thermodynamic Analysis"

Computers and Chem. Eng., Vol 9, No 4, pp 311-341, 1985.

23.- Govind R. and Powers G.

"Interaction Analysis in the Synthesis of Control Structures"

AICHE 80 th Annual Meeting, New York 1977.

24.- Govind R. and Powers G.

"A Chemical Engineering View of Reaction Path Synthesis"

Computer Assisted Organic Synthesis, ed. W.T. Wipke, 61
p 81, ACS Symposium Series, 1977.

25.- Govind R. and Powers G.

"Synthesis of Process Control Systems"

IEEE Trans. on Sys Man and Cyber, SMC-8, No 11, p 792, 1978.

26.- Grossman I. and Santibanez J.

"Applications of Mixed-Integer Linear Programming in Pro-
cess Synthesis"

Computers and Chem. Eng., No 4, pp 205-214, 1980.

27.- Grunberg j.

"The Reversible Separation of Multicomponent Mixtures"

Advances in Cryogenic Engineering 2, New York 1960.

28.- Guthrie K.

"Capital Cost Estimating"

Chem. Eng., 114, March 1969.

29.- Happel J. and Jordan D.

"Chemical Process Economics"

2nd ed. , 385, Marcel Dekker, New York 1975.

30.- Harbert V.

"Wich Tower Goes Where?"

Petroleum Refiner, 36, No 3, pp 169-174, March 1957.

31.- Heaven L.

"Optimum Sequencing of Distillation Columns in Multicomponent Fractionation"

M.S. Thesis, Univ. of Calif. Berkeley, 1969.

32.- Hendrickson J.

"A General Protocol for Systematic Synthesis Design"

Topics in curr. Chem., 62, 49, 1976.

33.- Hendry J. and Hughes R.

"Generating Separation Process Flowsheets"

Chem. Eng. Prog., 68, 69, 1972.

34.- Hlavacek V.

" Synthesis in the Design of Chemical Process "

Computers and Chemical Engineering, Vol 2 , pp 67 - 75
1978.

35.- Hersley L.

" Azeotropic Data III "

American Chemical Society, Washington, D.C., 1973.

36.- Hwa C.

"Mathematical Formulation and Optimization of Heat Ex--
Change Networks Using Separable Programming"

AIChE-Intern. Chem. Eng. Symp. Series, No 4, 102, 1965.

37.- Kafarev V. , Petlyuk A., Greisman E., Tolkev K., and
Belov V.

" Synthesis of Optimum Schemes for Fractionating Multi-
component Mixtures by the Dynamic Programming Methods"

Theor. Found. Chem., 9, 235, 1975.

38.- Kesler M. and Parker R.

"Optimal Networks of Heat Exchanger"

Chem. Eng. Progr. Syn. Series, No 92, 61, 111, 1969.

39.- King C.

"Separation Process"

Ed McGraw-Hill, New York 1971.

40.- Krishna R.

"A Thermodynamic Approach to the Choice of Alternatives to Distillation"

I.Chem. E. Symposium Series, No 54, p 185, 1978.

41.- Levy S. and Van Dongen D.

"Design and Synthesis of Homogeneous Azeotropic Distillations II. Minimum Reflux Calculations for Nonideal and Azeotropic Columns"

Ind. Eng. Chem. Fundam., No 4, pp 463-474, 1985.

42.- Liapis A. y Walter H.

"The use of Concepts of Thermodynamic Efficiency in the Synthesis of Heat Exchanger Networks"

4th Research Meeting Instn. Chem. Eng., Swansea Wales, 1977.

43.- Limshoff B.

"Thermodynamic Analysis in the Design of Process Networks"

Ph.D., Thesis, Univ. of Leeds, England, 1979.

44.- Liu A., Williams S., Nishida N. and Lapidus L.

"Studies in Chemical Process Design and Synthesis IV .

Optimal Synthesis of Process Systems with Vector-Valued
or Multiple Performance Indices"

AICHE Nat'l Meeting, Atlantic City, New Jersey 1976.

45.- Lu M. and Motard R.

"A Strategy for the Synthesis of Separation Sequences"

Inst. Chem. Eng. Symp. Ser. ,No 74, pp 141-151, 1982.

46.- Lu M. and Motard R.

"Computer-Aided Total Flowsheet Synthesis"

Computers and Chem. Eng., Vol 9, No5, pp 431-445, 1985.

47.- Lockhart J.

"Multi-column Distillation of Natural Gasoline"

Petroleum Refiner, 26, 104, 1947.

48.- Mahalec V. and Metard R.

"Procedures for the Initial Design of Chemical Process--
ing Systems"

Computer and Chem. Eng., I, 57, 1977(a)

49.- Mahalec V. and Metard R.

"Evolutionary Search for an Optimal Limiting Process --
Flowsheet"

Computer and Chem. Eng., I, 149, 1977(b).

50.- Maikov U.D.

"Synthesis of Optimal Structure for Fractionating System"

Theor. Found. Chem. Tech., 8, 3, 435, 1974.

51.- Matsuyama H. and Nishimura H.

Chem. Eng. Jpn., 10, 181, 1977.

52.- May D. and Rudd D.

"Development of Selvay Clusters of Chemical Reactions"

Chem. Eng. Sci., 31, 59, 1976.

53.- Morari M and Faith D.

"The Synthesis of Distillation Trains with Heat-Integration"

AICHE J., 26, 916, 1980.

54.- Merezeva L.V. and Platenev V.M.

"Digital Computer Analysis of the Structure of n-Component Phase Diagrams and Conditions for Azeotropic Mixture Separation"

Theor. Found. Chem. Techn., 8, 4, 483, 1974.

55.- Madgir M. and Liu Y.

"Studies in Chemical Process Design and Synthesis. V A Simple Heuristic Method for the Systematic Synthesis of Initial Sequences for Multicomponent Separations"

AICHE J., 29, 6, 926, 1983.

56.- Nath and Metard

"Evolutionary Synthesis of Separation Processes"

85th, National Meeting of AIChE, Philadelphia, 1978.

57.- Nath R. and Metard R.

"Evolutionary Synthesis of Separation Processes"

AICHE J., 27, 578, 1981.

- 58.- Nishida K., Stephanopoulos G. and Westerberg A.
"A Review of Process Synthesis"
AIChE J. ,27, 3, pp 221-351, 1981.
- 59.- Nishimura H. and Hiraizumi Y.
"Optimal System Patterns for Multicomponent Distillation Systems"
Intern. Chem. Eng., 11, 128, 1971.
- 60.- Petlyuk B. , Platonov V. and Slavinskii D.
"Thermodynamically Optimal Method for Separating Multicomponent Mixtures"
Intern. Chem. Eng. . 5, 555, 1965.
- 61.- Fho T. and Lapidus L.
"Topics in Computer-Aided Design II. Synthesis of Optimal Heat-Exchanger Networks by Tree Search Algorithms"
AIChE J. , 19, 1182, 1973.
- 62.- Fowers G.
"Heuristic Synthesis in Process Development"
Chem. Eng. Progr. , 68, 88, 1972.

- 63.- Powers G. , Rudd D. , and Siirela J.

"Process Synthesis"

Chap 4, Separation Technology, pp 105 - 154, Prentice

- Hal, Englewood Cliffs, New Jersey, 1973.

- 64.- Rathore R., VasWormerk and Powers G.

"Synthesis of Distillation Systems with Energy Integration"

AICHE J., 20, 940, 1974 (b).

- 65.- Rathore R., VasWormerk and Powers G.

"Synthesis Strategies for Multicomponent Separation Systems with Energy Integration"

AICHE J., 20, 491, 1974 (a)

- 66.- Rivas R. and Rudd D.

AICHE J., 20, 320, 1974.

- 67.- Rod U. and Marek J.

"Separation Sequences in Multicomponent Rectification"

Collect. Czech. Chem. Commun., 24, 3240, 1959.

68.- Rodrigo B. and Seader J.

"Synthesis of Separation Sequences by Ordered Branch Search"

AICHE J., 21, 885, 1975.

69.- Rotstein E. and Stephanopoulos G.

"Searching for Chemical Reactions to Obtain Specific Chemicals"

Annual AIChE Meeting, Chicago, 1980.

70.- Rudd D.

"Process Synthesis"

37, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.W., 1973.

71.- Seader J. and Westerberg A.

"A Combined Heuristic and Evolutionary Strategy for the Synthesis of Simple Separation Sequences"

AICHE J., 23, 951, 1977.

72.- Schreinemakers A.

Phys. Chem. Stoichiom Verwandschaftsl., 43, 671, 1903.

- 73.- Shah V. and Westerberg A.
"Evolutionary Synthesis of Heat Exchanger Networks"
AIChE Annual Meeting, Los Angeles, 1975.
- 74.- Sirola J., Powers G. and Rudd D.
"Synthesis of Systems Designs III. Toward a Process
Concept Generator"
AIChE J., Vol 17, No 4, 677, 1971.
- 75.- Sirola J. and Rudd D.
"Computer Aided Synthesis of Chemical Process Design"
Ind. Eng. Chem. Fundam. , 10, 353, 1971.
- 76.- Simulation Sciences
"Process Simulation Program Input Manual "
Palerton, CA, 1982.
- 77.- Sophos A., Stephanopoulos G. and Morari E.
"Synthesis of Optimum Distillation Sequences with Heat-
Integration Schemes"
71 st, Annual AIChE meeting, Miami FL, 1978.

- 78.- Saphes A. , Stephanopoulos G. and Linnhoff B.
"Decomposition and the Synthesis of Heat-Integrated
Distillation Columns"
The Inst. of Chem. Eng. , Symposium Series, 74, 1982.
- 79.- Stephanopoulos G.
"Synthesis of Process Flowsheets: An Adventure in Heuristic
Design or a Utopia of Mathematical Programming"
Foundations on computer-aided chemical process design,
engineering foundation, 1981.
- 80.- Stephanopoulos G. and Westerberg A.
"Studies in Process Synthesis II. Evolutionary Synthesis
of Process Flowsheets"
Chem. Eng. Sci. , 31, 195, 1976.
- 81.- Tedder W. and Rudd D.
"Parametric Studies in Industrial Distillation. I and II
Comparisons and Heuristic Optimizations"
AIChE J. , 24, 303, and 316, 1978 (ayb).

82.- Thompson R. and King C.

"Systematic Synthesis of Separation Schemes"

AICHE J. , 18, pp 941, 1972.

83.- Therman K.

"Destillieren und Rektifizieren"

A. Spamer , Leipzig, 1928.

84.- Ugi I. , Gillespie P. , and Gillespie C.

"Chemistry and Logical Structure VI. A Finite Me--
tric Topology, as Exercise in Algebra

Trans. NY. , acad. Sci., 34, 416, 1972.

85.- Umeda T. and Kuriyama T.

" A Logical Structure for Process Control Systems --
Synthesis"

Proceed of IFPAC Congress, Helsinki, Finland.
1978.

86.- Umeda T., Niida K. and Shiroko K.

"A Thermodynamic Approach to Heat Integration in Distillation Systems"

AICHE J., 25, 423, 1979.

87.- Umeda T.

"Computer Aided Process Synthesis"

Computer and Chem. Eng., Vol 17, No 4, pp 279-309, 1983.

88.- Underwood J.

Inst. Pet., 32, 598, 1946.

89.- Van Dongen D. and Doherty M.

"Design and Synthesis of Homogeneous Azeotropic Distillation.I. Problem Formulation for Single Column"

Ind. Eng. Chem. Fundam., Vol 24, No 4, pp 454-463, 1985.

90.- Westerberg A. and Stephanopoulos G.

"Studies in Process Synthesis.I. Branch and Bound Strategy with List Techniques for the Synthesis of Separation Schemes"

Chem. Eng. Sci., 30, 963, 1975.

91.- Westerberg A.

"A Review of Process Synthesis"

ACS Symposium Series, No 124, 1980.

92.- Wipke T. and Braus G.

"SECS in Computer Assisted Organic Synthesis"

Wipke, W. T. and W.J. HOWE Eds., ACS Sym. Series, 61
, p 97, 1977.

93.- Young S.

Trans. Chem. Soc., 81, 707, 1902.

APENDICE A
PROCESOS DE SEPARACION

Una vez establecida la ruta de reacción y el flujo de materiales a través de un proceso, el problema es la separación de éstos. Para separar económicamente los materiales, los ingenieros deben de crear el sistema por el cual éstos puedan ser separados, para ello, se deben examinar las diferencias entre las propiedades físicas y/o químicas de los materiales. Por ejemplo algunos materiales en una mezcla pueden flotar, otros pasar de una fase a otra, algunos disolverse, otros pasar por membranas, etc.

La tabla A-1 resume una extensa variedad de métodos de separación de uso común. Estas operaciones están agrupadas en tres grandes categorías, dependiendo de que tipo de separación sea : (i) El resultado de una fase de equilibrio, (ii) La diferencia es el tipo de algunos procesos y (iii) Un proceso mecánico. Esta tabla también incluye el agente de separación que es utilizado en cada caso.

NOMBRE	FASE ALIMENTACION	AGENTE DE SEPARACION	FASE DEL PRODUCTO	PROPIEDAD EXPLOTADA
A) PROCESOS DE SEPARACION EN EQUILIBRIO (agente energía)				
1.- Evaporación	líquida	calor	líquido-vapor	diferencias en volatilidad (presión de vapor)
2.- Expansión Flash	líquida	reducción de presión	líquido-vapor	"
3.- Destilación	líquida y/o vapor	calor	líquido-vapor	"
4.- Cristalización	líquida	enfriamiento o calentamiento	líquido-sólido	diferencias en la solubilidad a la congelación
5.- Secado de sólidos húmedos	sólido húmedo	calor	sólido seco + vapor húmedo	evaporación de agua
B) PROCESOS DE SEPARACION EN EQUILIBRIO (agente masa)				
1.- Aglutinación	líquida	gas no condensable	líquido + vapor	diferencia en volatilidad
2.- Absorción	gas	líquido no volátil	líquido + vapor	solubilidad preferencial
3.- Extracción	líquida	líquido inmiscible	dos líquidos	diferencias solubilitades de diferentes componentes
4.- Adsorción	gas o líquida	sólido adsorbente	fluido-sólido	diferencia en las potenciales de adsorción

TABLA A 1 CLASES DE PROCESOS DE SEPARACION

TIPO DE PROCESO	FASE ALIMENTACION	CONDICIONES DE SEPARACION	FASES DEL PRODUCTO	PROPIEDAD EXPLORADA
5.- Precipitación	líquida	reactivo químico	líquido + sólido	formación de un precipitado insoluble
C) PROCESOS DE SEPARACION (según masa y energía)				
1.- Destilación Azeotrópica Extractiva	líquida y/o vapor	líquido y calor	líquido-vapor	diferencias en volatilidad
D) PROCESOS DE SEPARACION SEGUN POR EL COSTO				
1.- Difusión Ósmosis	gas	gradiente de presión	gases	diferencias en los gastos de Estados
2.- Difusión Térmica	gas o líquido	gradiente de temperatura	gases o líquidos	diferentes gastos de difusión térmica
3.- Difusión	líquida	membrana selectiva o adsorción	líquidos	diferentes gastos de transporte difusional a través de una membrana
4.- Ósmosis Inversa	solución líquida	gradiente de presión	dos soluciones líquidas	diferentes conductividades de solubilidad
5.- Destilación Molecular	mezcla líquida	calor-vacío	líquido-vapor	diferencia en el gasto medio de vaporización en la teoría cinética

TABLA A-1 CLASES DE PROCESOS DE SEPARACION (CONT.)

NOMBRE	FASE ALIMENTACION	AGENTE DE SEPARACION	FASES DEL PRODUCTO	PROPIEDAD EXPLOIADA
B) PROCESOS DE SEPARACION MECANICAS				
1.- Centrifuga (sedimenta)	liquido + solido	densidad	liquido-solido	diferencias de densidad
2.- Ciclones	gas-solido-liquido	Flujo (inercia)	gas + solido + liquido	diferencias de densidad
3.- Filtración	liquido + solido	retención de partículas (energía)	liquido + solido	tamaño del solido menor que el poro
4.- Centrifuga (filtración)	liquido + solido	Fuerza centrifuga	liquido + solido	
5.- Flotación	burbuja de solido en polvo	solución de surfactantes	dos solidos	hidrofobia de los surfactantes - la adherencia de uno de los solidos
6.- Precipitación Electrosmolítica	solidos finos + gases	campo electrico	solidos finos + gases	causan en la floculación de las partículas - solidos

TABLA A-1 CLASES DE PROCESOS DE SEPARACION (CONT.)

La selección de una propiedad física y/o química - que sea la diferencia entre las especies y su aprovechamiento es el mayor problema en la Síntesis de Procesos, puesto que - generalmente los materiales a separar podrán diferir en una variedad de formas. Los factores que se toman en cuenta en la selección de una propiedad particular que de la diferencia - en la separación incluyen: la misma propiedad, su magnitud, la cantidad de material a manejar, las proporciones relativas de las diferentes especies en el material, la pureza requerida, la necesidad de recuperación de otras especies en el material, el procedimiento químico del material durante la separación, las fases involucradas, la corrosividad del material, y en general el conocimiento y experiencia disponibles.

Dentro del campo de la tecnología de separación existen tres principales grupos que aprovechan ciertas propiedades de los materiales para separarlos; estos grupos se basan en la separación de: a) Sólidos de una mezcla de sólidos, b) líquidos de una mezcla de líquidos aprovechando la diferencia de volatilidad entre estos y c) gases de líquidos o de una mezcla de gases aprovechando las diferencias de solubilidad.

a) Separación de Sólidos

La figura A - 1 muestra algunas de las diferencias en las propiedades que son aprovechadas para la separación de sólidos. Para separar estos materiales se requiere que previamente estos sean triturados, molidos y/o cualquier otra operación para reducir el tamaño. Frecuentemente las operaciones de molienda y trituración son secuenciales.

Entre las principales propiedades aprovechadas para separar sólidos están:

— Diferencias de Solubilidad.

La extracción de sólidos con solventes es comúnmente usada en mineralogía, la química y el procesamiento de alimentos para remover un sólido soluble de otro material insoluble. El material disuelto o solute debe ser separado del solvente, lo cual por el diseño debe de ser fácil de hacer.

Una selección cuidadosa del solvente puede ser aprovechada como una ventaja en el problema de separación. Normalmente se podría buscar el solvente más barato, el de mayor extracción, que no sea peligroso, de fácil recuperación, el que no produzca propiedades indeseables a los productos, etc. La tabla A - 2 muestra algunos de los solventes de uso comercial para extracción de sólidos.

Diferencias de propiedades dominantes

solubilidad					
color, apariencia					clasificación
único tamaño				tamizado	
		ciclones líquidos			
		hidroseparadores-clasificadores			
centrifugas		dimensionamiento			
única densidad		ciclones	comos		tambores
tamaño y densidad					
		tabelas húmedas			
permeabilidad magnética		separadores magnéticos			
conductividad eléctrica		separadores electrostáticos			
superficie humedecida					
		flotación			
0.001	0.01	0.1	1.0	10	100

Figura A-1 Diferencias de propiedades explotadas por métodos comunes de separación de sólidos

EXTRACCION	ALIMENTACION	SOLVENTE
cloruro de potasio	silvinita	cloruro de sodio de soluciones sa- madas para recu- perar potasa
sales	casaca de uva	soluciones amon- iacas
agujetas y resinas de madera	trozos de ma- dera	acetona
Carbón activado	desechos de pulpa	ácido sulfúrico
ácido fosfórico	rocas fosfóricas	ácido sulfúrico, sulfúrico e clor- hídrico
aluminato de sodio	Bauxita	solución caustica
arsenito ácido	mineral de arsénico	ácido o carbonato de sodio
elementos de las tierras raras	residuos de elementos de las tierras raras	ácido sulfúrico caliente
dicromato de sodio	mineral de croma	"
sulfato de titanio	ilmenita	ácido sulfúrico
sulfato de cobre	mineral de cobre	"
hierro	mineral de hierro	"
platino y oro	minerales	solución caustica
siguel	minerales	amoníaco amoníaco o ácidos
iodo	rocas	ácido sulfúrico

**TABLA A-2 Solventes comerciales para
Extracción Líquido-Sólido.**

-- Diferencias en Apariencia

Esta propiedad se usa para separar diamantes de materiales de desecho. Se han desarrollado métodos que detec--tan la decoloración y oscurecimiento de los diamantes, los -cuales son 99.98% solubles. Para separarlos se utilizan equipus que automáticamente los separan aprovechando su apariencia bajo una luz difusa de iluminación. A menos que las separaciones basadas en apariencia puedan ser automatizadas, éstas se hacen más costosas en la práctica.

--Diferencias en Tamaño y Densidad

Las fuerzas gravitacionales que actúan sobre una -partícula son proporcionales a su masa, las boyantes a su volumen y las de superficie al área de su superficie. El ajuste cuidadoso de estas fuerzas en el propio equipo puede conducir a una separación económica de los sólidos que difieren en tamaño y densidad. En este proceso los materiales que son más densos que el fluido se hunden y aquellos que son menos densos flotan; si un líquido puede ser encontrado con una --densidad intermedia entre los sólidos, éstos pueden ser separados por este método de hundir-flotar. Puesto que muchos sólidos son más densos que el agua, se requieren otros líquidos, como los líquidos orgánicos pesados, tales como el te--

tracelerure de carbene o tetrabromure de acetilene; aunque es-
tes son tóxicos y costosos, además de difíciles de recuperar.
Soluciones de clorure de calcio saturadas han sido usadas en
el proceso del carbón, pero este conduce a problemas de corro-
sión y recuperación de la sal. En la década de los treinta, -
algunos investigadores encontraron que suspensiones de agua
con sólidos finamente molidos conducen a líquidos pesados. Se-
luciones de magnetita y ferrosilicio en agua pueden lograr -
gravidades específicas entre 1.25 y 3.7; además estos sólidos
pueden ser recuperados fácilmente por separación magnética.

Esta propiedad de separación es aprovechada para la
recuperación de acero, cobre, fluorita, carbón, estaño, grava,
diamantes, ilmenita y manganeso.

-- Diferencias magnéticas y electrostáticas

Un número limitado de materiales pueden ser influe-
nciados por campos magnéticos; pero gran número de materiales
son influenciados por campos eléctricos.

La separación electrostática ha sido aplicada a pro-
cesos como el de tabaco y ceces; a la separación de potasio y
fluorita y para concentrar acero, plata, grafito, circonio, ilme-
nita, estaño y resaca fosfórica.

-- Diferencias en superficies húmedas

El zinc, molibdeno, cobre, antimonio y níquel se obtienen de sus minerales por el método de flotación. Este método también se aplica al tratamiento de desechos municipales e industriales y el procesamiento de alimentos. La flotación se puede aplicar cuando cualquiera de las diferencias químicas o estructura de los cristales crea una superficie húmeda, causando la adherencia selectiva de las partículas sólidas a las burbujas de aire que suben a través de la pasta formada. Las sustancias no polares como el azufre, grafito, diamante y carbón natural tienden a adherirse a las burbujas de aire; pero algunos materiales requieren una modificación en su superficie. Esta modificación se puede realizar moliendo finamente los materiales a separar.

b) Separación de líquidos aprovechando su volatilidad

Para separar los líquidos aprovechando su volatilidad, el problema es buscar las diferencias en sus puntos de ebullición. Estas diferencias en una substancia pura son una indicación de la diferencia en la volatilidad de mezclas

Las diferencias de volatilidad deben existir para que a través de una operación de vaporización y condensación, --

sea aprovechada efectivamente, ya que, de lo contrario si los puntos de ebullición son similares, la separación se efectúa y solo existe un enriquecimiento.

Los puntos de ebullición de sustancias puras, su presión de vapor y su volatilidad relativa son las medidas cuantitativas para saber si puede efectuarse una separación o un enriquecimiento; debiendo vaporizar parcialmente la mezcla líquida o condensar parcialmente los vapores de una mezcla gaseosa. La volatilidad relativa entre dos componentes en una solución se define como:

$$\alpha_{12} = \frac{Y_1/X_1}{Y_2/X_2}$$

donde: Y y X son las fracciones mol del líquido y vapor en la fase de equilibrio. Si $\alpha_{12} > 1$, el enriquecimiento del componente 1 puede ocurrir si el líquido fuera parcialmente vaporizado y el líquido restante podrá ser enriquecido por el componente 2.

Para soluciones ideales, la volatilidad relativa se define como:

$$\alpha_{12} = \frac{P_1}{P_2}$$

donde: P_1 y P_2 son las presiones de vapor de las sustancias puras.

La tabla A-3 muestra diversos valores de P_1/P_2 a diferentes temperaturas para una variedad de soluciones ideales.

Puesto que el punto de ebullición de una sustancia pura es la temperatura a la cual se igualan la presión de vapor y la atmosférica, entonces las diferencias en el punto de ebullición normal indican diferencias en la presión de vapor y de aquí la posibilidad de un enriquecimiento por una vaporización-condensación parcial. La operación anterior puede conducir más a un enriquecimiento que a una separación completa. Si la volatilidad relativa es muy grande, el enriquecimiento puede ser una operación completa, pero generalmente para efectuar una operación completa se requieren enriquecimientos múltiples. Para la vaporización o condensación parcial se requiere el suministro y remoción de calor, y estas operaciones pueden ser costosas, por lo que se recomienda aprovechar éstas como una ventaja económica, si al com

MEZCLA 1 y 2	1 °C	P1/P2 ^a	2 °C	P1/P2
Benceno-dicloroetileno	80.1	1.113	83.48	1.109
Benceno tolueno	80.1	2.61	110.7	2.315
Etanol-isopropanol	78.3	2.18	97.2	2.03
Hexano-nheptano	69.0	2.613	98.4	2.33
Metanol-etanol	64.7	1.73	78.1	1.64
Metanol-isobutanol	64.6	6.1	107.5	4.4
Metanol-propanol	64.6	3.89	97.2	3.15
Fenol-cresol	181.2	1.30	190.6	1.275
tolueno-cloruro de bencilo	110.7	7.75	178.0	4.45
Tolueno-clorotolueno	110.7	4.76	162.0	3.65
Agua-etilen glicol	100.0	49.8	197.0	13.2
Agua-glicerol	38.1	76.400	202.0	244.0

a : Los valores de P1/P2 (aproximadamente iguales a α) están dados a los puntos de ebullición de los componentes 1 y 2 respectivamente.

TAHLA A-3 Volatilidades relativas de Mezclas Ideales.

densar un vapor se vaporize al mismo tiempo un líquido. Esta integración de calor propicia el uso de equipo de destilación multietapa, que es usado comunemente en separaciones difíciles. La figura A - 2 ilustra una integración de calor usada durante una destilación multietapa. Esta secuencia de separación - involucra las siguientes etapas : (1) Vaporización parcial - del líquido alimentado, (2) condensación parcial del vapor resultante de (1) y (3) vaporización parcial del líquido resultante de (1). El líquido resultante de (2) es doblemente enriquecido por el componente más volátil, el líquido de (2) y el vapor de (3) que no están tan enriquecidos se recirculan a (1) para reprocesarlos; pero el vapor de (3) debe estar lo suficientemente caliente para poder vaporizar en (1). Además el líquido de (3) es doblemente enriquecido por el componente menos volátil.

Existen muchas soluciones que no son ideales, en las cuales la volatilidad relativa no es constante en un rango de composiciones. Conforme la volatilidad relativa de una solución binaria se acerca a la unidad, no ocurre un enriquecimiento durante la vaporización o condensación, si:

$$\alpha_{12} = \frac{Y_1/X_1}{Y_2/X_2} = 1$$

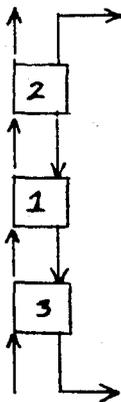
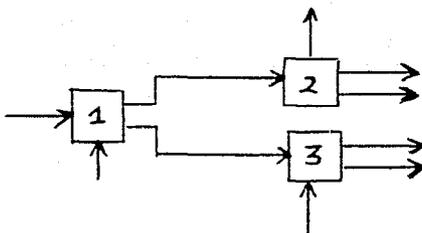


Figura A-2 Aprovechamiento del esriquecimiento causado por la diferencia en puntos de ebullición.

Entonces $Y_1/Y_2 = X_1/X_2$; en tal caso la composición del líquido y del gas es la misma.

Las soluciones en las que la volatilidad relativa varía con la composición se les llama soluciones no ideales, y si la volatilidad relativa tiende a 1, resulta una mezcla azeotrópica. Un azeótropo no puede ser enriquecido por una vaporización o condensación, por lo que se debe agregar un tercer componente que pueda alterar la volatilidad relativa lo suficiente para crear una mezcla azeotrópica diferente.

c) Separación de gases aprovechando su solubilidad.

La absorción de gases es la operación en la cual un gas soluble de una mezcla de gases es absorbido en un líquido, y el agotamiento es la operación inversa en la cual un gas volátil disuelto en un líquido es transferido a la fase gaseosa. Los absorbedores y agotadores se usan totalmente para el enriquecimiento de mezclas de gases y la efectividad de éstos depende de las solubilidades relativas de los gases en los líquidos elegidos como solventes. La figura A-3 es un diagrama de flujo típico de una combinación absorción agotamiento, el cual toma como ventaja que la solubilidad disminuye al aumen

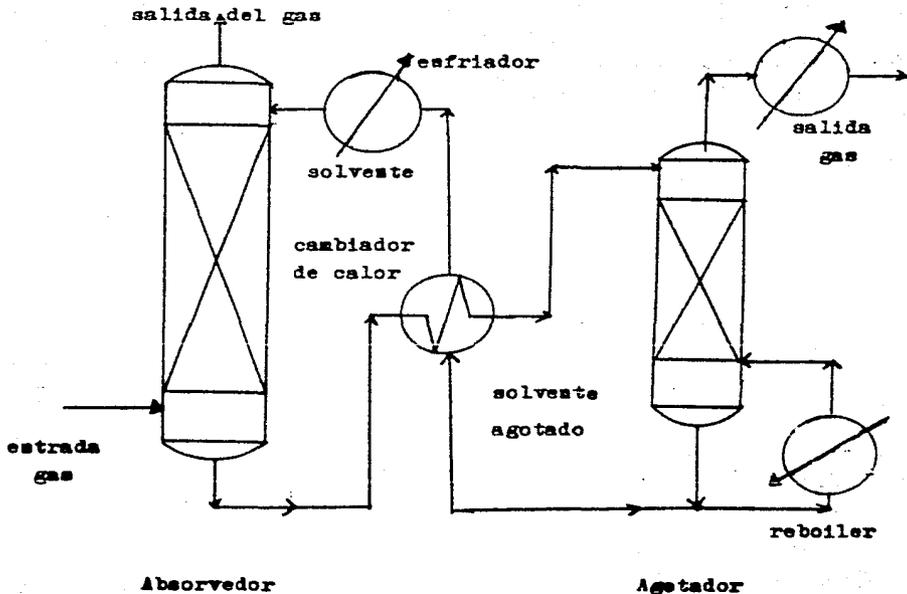


Figura A-3 Diagrama típico de una combinación Absorción Agotamiento.

tar la temperatura. La selección del solvente líquido a utilizar es una parte crítica para que la operación de absorción - agotamiento sea económica. Generalmente se prefieren líquidos en los cuales el gas es altamente soluble. El solvente debe ser barato, no corrosivo, estable, no viscoso, no espumoso y no inflamable; si es posible. El agua es uno de los líquidos usados como solvente para gases que son solubles en ella, aceite para hidrocarburos y solventes químicos especiales para gases como sulfuro de hidrógeno, dióxido de carbono y dióxido de azufre. La tabla A-4 muestra los sistemas de absorción de gases de mayor uso comercial.

La extracción líquido-líquido es una operación efectiva y similar para el enriquecimiento de mezclas soluto-solvente. En este caso un segundo solvente inmiscible es introducido, en el cual el soluto también es soluble, y se busca un equilibrio en la distribución entre el soluto y los solventes. La efectividad de la extracción líquido-líquido depende de la solubilidad relativa del soluto en el solvente. Aunque estas operaciones aprovechan la diferencia de solubilidad, - el equipo usado es totalmente diferente debido al manejo de las diferentes combinaciones de fases; gas-líquido y líquido-líquido.

SOLUTO	SOLVENTE	AGENTE AGREGADO PARA MEJORAR SOLUBILIDAD
CO ₂ , H ₂ S	agua	
CO ₂ , H ₂ S	agua	monoetanolamina
CO ₂ , H ₂ S	agua	dietaolamina
CO ₂ , H ₂ S	agua	K ₂ CO ₃ , Na ₂ CO ₃
CO ₂ , H ₂ S	agua	NH ₂
CO ₂ , H ₂ S	agua	NaOH, KOH
CO ₂ , H ₂ S	agua	K ₃ PO ₄
CO ₂	carbonato de propileno	
CO ₂	glicerol	
HCl, HF	agua	NaOH
SO ₂	agua	NH ₃
SO ₂	agua	dimetilazolina
SO ₂	agua	sulfato de aluminio
HCN	agua	NaOH

TAULA A-4 Sistemas de Absorción de Gases

Los usos comerciales de la extracción líquido-líquido son enormes y algunos de ellos son mencionados en la tabla A-5. Entre los principales usos está la industria petrolera, en la cual el petróleo es una mezcla de hidrocarburos que son inicialmente fraccionados aprovechando su diferencia de puntos de ebullición y posteriormente a estas fracciones se les aplica una extracción líquido-líquido volviéndolas a fraccionar.

La figura A-4 muestra un diagrama de flujo simplificado para la separación de dos materiales A y B en una solución, utilizando la extracción con un solvente S. En este caso el solvente es recuperado por destilación.

La extracción se puede llevar a cabo por contacto simple, contracorriente y corriente cruzada.

Cuando se presentan sistemas de tres fases (dos solventes y un soluto), frecuentemente los solventes son mutuamente solubles (parcialmente). Sin embargo, si se consideran solamente solventes inmiscibles, los datos de solubilidad pueden ser representados por la ecuación de distribución:

SOLUCION ALIMENTADA	SOLVENTE	PRODUCTOS
Aceite lubricante	furfural y fenol	aceite ajustado a la relación temperatura-viscosidad
Naftas	dioxido de sulfuro furfural y etilenglicol	Extracción de aromaticos
aceite de petróleo	hidróxido de sodio, y de potasio	remoción de compuestos conteniendo azufre
agua de mar	etil y butil amina	recuperación de agua
combustible de reactores nucleares	keroseno y tributil fosfato	recuperación de uranio y otros reactivos o productos nucleares
aceite de animales e plantas	hidróxido de sodio-carbonato de calcio o furfural	remoción de ácidos
Antibióticos	fosfato acuoso	purificación de antibióticos

TABLE A-5 Ejemplos de los muchos usos de la Extracción Líquido-Líquido.

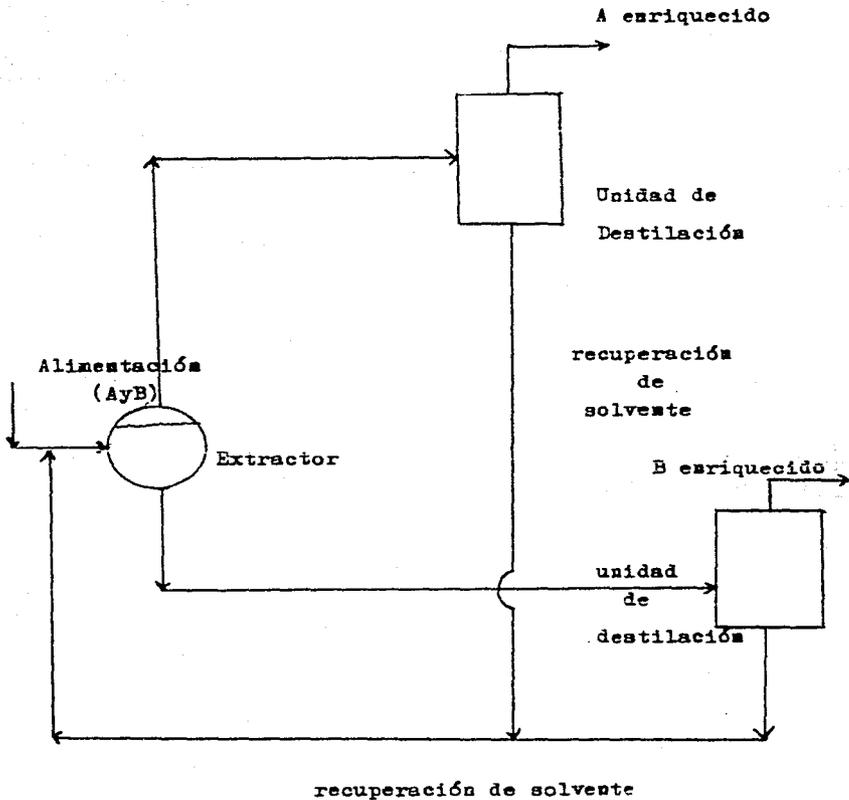


Figura A-4 Extracción Líquido-Líquido con recuperación de solvente.

$$Y = Kx$$

donde: Y= concentración molar del soluto B en el solvente A
y x= concentración molar del soluto B en el solvente C. La
tabla A-6 muestra los valores de K (coeficiente de distribución)
para varios sistemas acuosos.

Finalmente, se puede decir que muchos fenómenos físicos se pueden aprovechar para efectuar una separación de materiales efectiva, puesto que en los procesos gran parte de la economía de éstos dependen de los procesos de separación.

COMPONENTES		TEMP	COEFICIENTE DE
SOLUTOS B	A	°C	DISTRIBUCION K
Cloro	tetracloruro de carbono	0	5.0
Bromo	"	0	20
		25	27
		40	30
Iódo	"	25	55
Amoniaco	"	25	0.0042
Amoniaco	cloroformo	25	0.040
Dióxido de azufre	cloroformo	0	0.71
Acido Nítrico	eter etílico	25	0.012
Etanol	benceno	25	1.1
Isopropanol	benceno	25	0.50
Isopropanol	tolueno	25	0.21
Fesol	cloroformo	25	2.8
Acetona	cloroformo	25	5.5
Acido acetico	cloroformo	20	0.028
Diétilamina	cloroformo	25	2.2

TABLE A-6 Coeficiente de Distribución para Sistemas Acuósos.

APENDICE B

CLASIFICACION DE LOS MAPAS DE CURVAS DE RESIDUO

Las figuras B-1 a B-10 contienen una clasificación completa de los mapas de curvas de residuo para mezclas ternarias con al menos un azeótropo binario de ebullición mínima. Esta clasificación es una versión del Catálogo de Matsuyama y Nishimura.

La orientación de los triángulos presentados es de la siguiente forma: L, vértice superior, corresponde al componente de menor punto de ebullición (componente ligero), I, vértice inferior izquierdo, corresponde al componente de punto de ebullición intermedio y H, vértice inferior derecha, — siendo el componente de mayor punto de ebullición, (componente pesado).

Los tres dígitos que aparecen en los triángulos — significan lo siguiente: el tipo de azeótropo binario de acuerdo a los lados del triángulo, es decir, L-I, I-H y H-L. Los números son asignados de la siguiente forma:

- 0 No existe azeótropo
- 1 Azeótropo binario de ebullición mí-
nima, nodo (inestable)
- 2 Azeótropo binario de ebullición mí-
nima, punto silla
- 3 Azeótropo binario de ebullición máx
ima, nodo (estable)
- 4 Azeótropo binario de ebullición máx
ima, punto silla

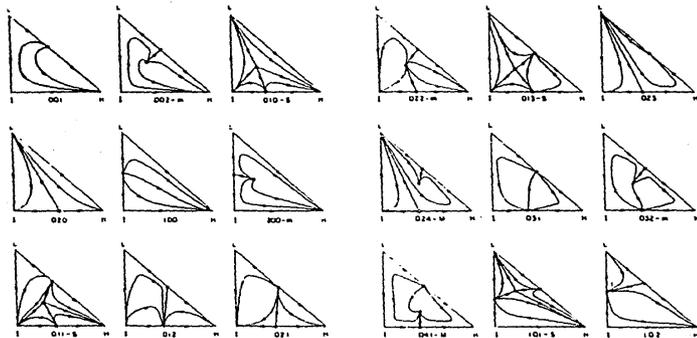
Las letras unidas a los tres dígitos significan el tipo de azeótropo ternario, es decir :

- m Azeótropo ternario de ebullición mí-
nima, (nodo inestable)
- M Azeótropo ternario de ebullición máx
ima, (nodo estable)
- S Azeótropo ternario de ebullición i-
termedia, (punto silla)

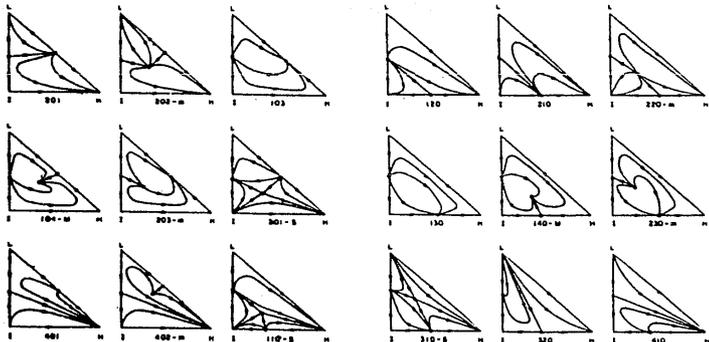
Esta clasificación produce un conjunto de curvas -
de residuo independientes.

El número total de mapas de curvas de residuo presentadas aquí es de 87. Los mapas están ordenados de acuerdo al número de azeótropos binarios presentes en la mezcla. De aquí que los primeros 6 mapas de la figura B-1 representan el conjunto completo de mapas con un azeótropo binario de ebullición mínima. Estos mapas cuentan con dos elementos cero y uno diferente de cero. Los siguientes 32 mapas (figuras — B-1 a B-5) son todos aquellos que cuentan con dos azeótropos binarios, con al menos uno de ebullición mínima. En este caso los mapas tienen un elemento cero y dos diferentes de cero. El resto de los mapas tienen tres azeótropos binarios con al menos uno de ebullición mínima.

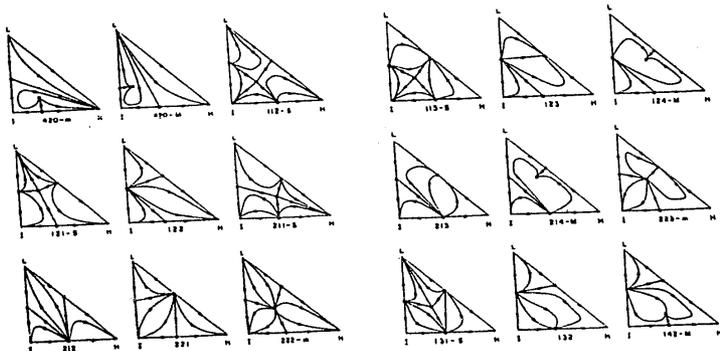
Existen otras formas de ordenar este catálogo, pero la presentada aquí tiene la ventaja de presentar una visión panorámica del incremento de la complejidad de los sistemas al adicionar un azeótropo binario.



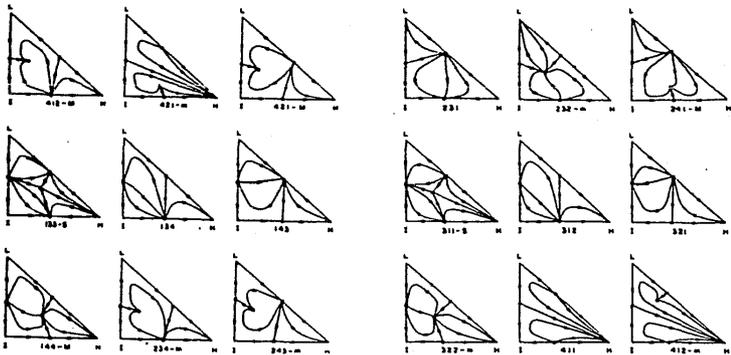
Figuras B-1 y B-2 Mapas de Curvas de Residuo.



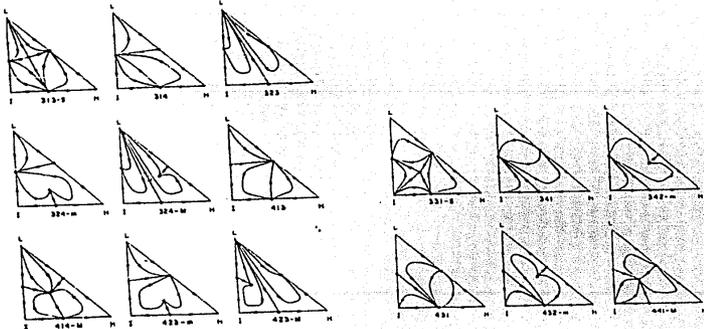
Figuras B-3 y B-4 Mapas de Curvas de Residuo



Figuras B-5 y B-6 Mapas de Curvas de Residuo.



Figuras B-7 y B-8 Mapas de Curvas de Residuo.



Figuras B-9 y B-10 Mapas de Curvas de Residue.