



16
2ej

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

**ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS PROFESIONALES
" Z A R A G O Z A "**

**SINTESIS DE PROCESOS POR
METODOS ALGORITMICOS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A N :
RIGOBERTO LOPEZ MAYORAL
VICTOR MANUEL SANTA CRUZ NEGRETE



**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



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.

INDICE

INTRODUCCION

CAPITULO I

	PAGINAS
1. EVOLUCION DE UN PROCESO	1
1.1 DESARROLLO DE PROCESOS	3
1.2 DISEÑO E INNOVACION DE PROCESOS	4
1.2.1 SINTESIS DE PROCESOS	5
1.2.2 OPTIMIZACION	12
1.2.3 PROCEDIMIENTO GENERAL PARA RESOLVER PROBLEMAS DE OPTIMIZACION	16

CAPITULO II

2. SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION Y SU ENFOQUE A LA DESTILACION.	18
2.1 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION SIN INTEGRACION DE CALOR.	23
2.1.1 DESCRIPCION DE LA ESTRATEGIA DE SINTESIS POR EL METODO MILP.	29
2.1.2 DERIVACION DE LA SUPERESTRUCTURA PARA EL SISTEMA DE SEPARACION MILP.	30
2.1.3 DESCRIPCION DE LA ESTRATEGIA DE SINTESIS POR EL METODO MINLP.	36
2.1.4 DESCRIPCION DE LA SUPERESTRUCTURA PARA EL SISTEMA DE SEPARACION MINLP.	44
2.2 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION DE	

COLUMNAS COMPLEJAS.	49
2.2.1 LA IMPORTANCIA DE LA RELACION DE VAPOR MINIMA PARA LA OPTIMIZACION.	52
2.2.2 SECUENCIAS SIMPLES DIRECTAS VS. INDIRECTAS	55
2.2.3 COLUMNAS CON CORRIENTES LATERALES	61
2.2.4 COLUMNAS CON SECCIONES LATERALES	69
2.2.5 COLUMNAS PETYUK	77
2.2.6 COLUMNAS PETLYUK, COMPARACION CON SECUENCIAS SIMPLES.	84
2.2.7 SECUENCIAS CON PREFRACCIONADORES.	86
2.3 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION CON INTEGRACION DE CALOR.	96
2.3.1 DESCRIPCION DE LA ESTRATEGIA DE SINTESIS	97
2.3.2 SINTESIS DE SECUENCIAS DE DESTILACION USANDO PROGRAMACION MIXTA ENTERA.	107
2.4 METODOS EMPLEADOS EN LA SINTESIS DE PROCESOS.	119
2.4.1 METODOS HEURISTICOS/JERARQUIA EN LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION.	120
2.4.2 METODOS EVOLUTIVOS.	148
2.4.3 OBJETIVOS TERMODINAMICOS.	149

C A P I T U L O III

3. METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS	186
3.1 ALGORITMO MILP PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION SIN INTEGRACION DE CALOR.	189
3.2 ALGORITMO MINLP PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION SIN INTEGRACION DE CALOR.	197
3.3 ALGORITMO MILP PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION CON INTEGRACION DE CALOR.	203

3.3.1 GENERACION DE LA SUPERESTRUCTURA.	205
3.3.2 LA FUNCION OBJETIVO DEL MILP.	207
3.3.3 RESTRICCIONES DE BALANCES DE MASA.	208
3.3.4 RESTRICCIONES DE INTEGRACION DE CALOR.	210
3.3.5 RESTRICCIONES DE INTEGRIDAD.	221
3.3.6 FORMULACION COMPLETA DEL MILP.	223

C A P I T U L O V

4. APLICACION DE LA PROGRAMACION MIXTA ENTERA.	228
4.1 EJEMPLOS DE APLICACION PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS MEDIANTE MILP.	234
4.2 EJEMPLOS DE APLICACION PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS MEDIANTE MINLP.	245
4.3 EJEMPLOS DE APLICACION USANDO EL CRITERIO DEL CONSUMO DE TRABAJO NETO.	298
4.4 EJEMPLOS DE APLICACION DE SINTESIS DE SECUENCIAS CON INTEGRACION DE CALOR.	240
4.5 EJEMPLOS DE APLICACION DE SECUENCIAS DE DESTILACION CON INTEGRACION DE CALOR USANDO MILP	281
4.6 APLICACIONES DE MILP EN SISTEMAS DE SERVICIOS	293
4.6.1 REDES DE RECUPERACION DE CALOR	299
4.7 SISTEMAS DE PROCESAMIENTO COMPLETO	306
4.8 DESCOMPOSICION SECUENCIAL	316
4.9 OTRAS APLICACIONES CON MILP.	321

C A P I T U L O V

ANALISIS DE RESULTADOS.	326
-------------------------	-----

CAPITULO V**CONCLUSIONES.****333****BIBLIOGRAFIA****336**

INTRODUCCION

Los costos de los equipos de proceso y energía han aumentado dramáticamente debido a la crisis energética de los 70^s. El aumento en el precio de la energía es mayor al aumento en el costo de los equipos, esto ha traído como consecuencia un mayor énfasis en el diseño de procesos que sean eficientemente energéticos. Entre los procesos de separación, la destilación es uno de los más simples y el más ampliamente usado en la Industria Química de Proceso.

Este trabajo parte de la explicación e importancia de lo que es la síntesis de procesos en general, y posteriormente se concreta a la síntesis de secuencias de destilación, describiendo toda la gama de métodos que existen desde la elección de una secuencia prometedora hasta la obtención del "óptimo" por medio de algún método algorítmico y su herramienta fundamental que es la programación mixta entera (MIP).

INTRODUCCION

También se analiza a las secuencias de destilación complejas, es importante que se mencione que las secuencias de destilación compuestas de columnas simples son frecuentemente menos económicas que aquellas que tienen una o más columnas complejas tales como: purificadores laterales, rectificadores, prefraccionadores y columnas petlyuk. Se presentan modelos de diseño aproximados, expresiones simples para ahorros máximos y para las composiciones de alimentación donde estos se encontraron. Se adopta que la solución óptima es aquella que minimiza la relación de vapor total en el sistema combinado de columnas.

Al ser la destilación el principal sistema de separación en las plantas químicas, se han observado considerables ahorros en los costos de operación cuando se ajustan las presiones de las columnas en una secuencia que permita la transferencia de calor entre el condensador de una columna y el rehedidor de otra. En la síntesis de estos sistemas de separación con integración de energía existen dos problemas claves que son: la selección de las condiciones de operación y la secuencia de separación; y la determinación de las redes de intercambio de calor alrededor del sistema de destilación. Para determinar el óptimo varios métodos son propuestos basados en enfoques termodinámicos, heurísticos y algorítmicos, poniéndose mayor énfasis en estos últimos y en sus formulaciones MILP y MINLP.

Se intenta visualizar el papel tan destacado que juegan los métodos algorítmicos en la síntesis de procesos. Es importante mencionar que la programación mixta entera (MIP), proporciona un cuadro matemático general para problemas de síntesis. Estas ideas serán ejemplificadas mediante la revisión de diferentes aplicaciones

en las áreas de sistemas de servicios, redes de recuperación de calor y sistemas de procesamiento total. Otros ejemplos además mostrarán que la eficiencia computacional es posible con (MIP) y que se pueden evitar deficiencias asociadas con el uso de heurísticas y con esquemas de descomposición simplificada, los cuales pasan por alto soluciones más económicas.

Finalmente se discuten no solo ideas relacionadas a los métodos algorítmicos, también se muestran resultados actuales de problemas-ejemplo que han sido obtenidos con técnicas MIP. La primera motivación al escribir este trabajo es demostrar que la programación mixta entera es una herramienta útil en la síntesis de procesos, que puede auxiliar al Ingeniero en decisiones donde las reglas heurísticas u otros métodos fallaron en la obtención de soluciones de bajo costo. También es claro que las heurísticas y los métodos termodinámicos son esenciales al hacer problemas de síntesis y que el Ingeniero juega el papel central en este tipo de actividad. El planteamiento del conocimiento acerca de la síntesis que aquí se presenta, permite estructurarlo de tal modo que un sistema experto pueda ser traducido a un lenguaje de alto nivel, aunque esto sea el motivo de otra investigación, sólo se sientan las bases para poder desarrollar tal inquietud.

CAPITULO I

GENERALIDADES

1. EVOLUCION DE UN PROCESO

La realización de un nuevo proceso procede de una gran trayectoria, la cual tiene como primera etapa la "idea", es decir, la introducción de un nuevo producto al mercado, para esto se realizan experimentos exploratorios en el laboratorio y estudios de mercado, que tienen la finalidad de predecir si el nuevo producto es comercialmente atractivo a medida que avanza la investigación y de factibilidad económica, posteriormente la intervención de la Ingeniería llega a ser mayor y se establece la fase del diseño conceptual del proceso. Toda esta actividad es parte de lo que es el término denominado "desarrollo de procesos".

Cuando la evolución de la investigación llega a un punto en donde todos los indicadores para un éxito seguro son positivos, se emprende la fase del diseño del proceso preeliminar. Un punto importante, es que esta fase es una etapa clave en la evolución total del proceso.

El costo del diseño del proceso preeliminar se carga a gastos corporativos, es decir, no son capitalizados. Por lo tanto existe la presión de minimizar el costo, si es que se piensa llevar al proyecto hasta el final de la evaluación económica. Por lo tanto los resultados del diseño de proceso preeliminar, determinan si el proyecto continúa hasta la construcción de la planta. Los resultados del diseño del proceso preeliminar continúan con un documento llamado alcance del reporte, este documento es elaborado para solicitar un fondo de capital y está basado en un compromiso entre la exactitud técnica, gastos de trabajo y el tiempo para la producción comercial.

La decisión de la dirección para fondos apropiados de capital conduce al diseño del proceso final. Esto es la Ingeniería de detalle, la cual tiene poca flexibilidad para alterar las condiciones del proceso ya establecidas.

La Ingeniería lleva a una serie de documentos, incluyendo los diagramas de flujo. Estos documentos pertenecen al paquete "Diseño de Procesos".

Una etapa final de la Ingeniería de Procesos ocurre después que la planta esté operando. Esto es, la fase de innovación del proceso, la cual auxilia a la compañía en la búsqueda de producir, a bajo costo, los productos involucrados. El trabajo en la innovación del proceso

incluye: elementos de investigación exploratoria, investigación aplicada y desarrollo de técnicas así como de Ingeniería. El diseño, desarrollo e innovación del proceso son clasificados por la Ingeniería de Procesos y son definidos a continuación.

La Ingeniería de Procesos es la creación, cuantificación y análisis de esquemas de proceso que formarán parte de una planta económica, fácilmente operable y segura, ésta incluye actividades que requieren de contribuciones tales como:

- Desarrollo de procesos
- Diseño de procesos
- Innovación de procesos

1.1 DESARROLLO DE PROCESOS

Involucra la interacción entre el Ingeniero y el personal de investigación para el diseño conceptual del proceso y estudios de evaluación de investigación orientada, ésta incluye:

- Evaluación de procesos para el Departamento de Investigación
- Evaluación de procesos para compra externa.
- Ayuda al desarrollo de nuevos procesos en escalas de prueba y planta piloto.
- Revisión de los procesos existentes para innovación.

1.2 DISEÑO E INNOVACION DE PROCESOS

Antes de cualquier cálculo de diseño, es esencial establecer por escrito una base completa de diseño. Esta debe incluir la cantidad y calidad de productos deseados, las materias primas y sus características, los servicios y sus temperaturas, presiones y otros factores tales como la probable aplicación de subproductos.

También deben considerarse la selección de los factores de seguridad que se van a usar en el diseño y la fijación de la fecha en que se a de dar término al diseño de procesos.

En forma concreta el diseño de procesos involucra la formación del paquete siguiente:

- Bases de diseño
- Balances de masa y energía
- Diagrama de flujo
- Especificaciones del equipo
- Especificaciones de control básico
- Datos de servicios
- Datos de impacto ambiental
- Procedimiento de operación
- Análisis de seguridad y riesgos

Este diseño consta de dos partes: el preliminar, son las actividades y estudios dirigidos hacia la preparación de una solicitud

de asignación de fondos la cual puede incluir las siguientes actividades:

- Preparación de diagramas de flujo
- Preparación de balances de masa y energía
- Recolección de datos de propiedades de las sustancias o compuestos involucrados
- Retroalimentación al esfuerzo de diseño de procesos

El diseño final serán las actividades dirigidas hacia la compra de equipo e instalación e incluirán:

- Datos de funcionamiento de equipo
- Especificaciones de equipo
- Revisión de diagramas de tuberías, eléctricos e instrumentos

La innovación de procesos son las actividades dirigidas hacia la mejora de las instalaciones de proceso existentes y en algunos casos dirigidas hacia la mejora de las estrategias de operación.

1.2.1 SINTESIS DE PROCESOS

Tradicionalmente en la formación de Ingenieros Químicos se ha hecho incapie en dos aspectos fundamentales de la profesión: el primero es el análisis de proceso que consiste en predecir cuales serán los productos obtenidos en un proceso o mediante un equipo una vez que se han especificado las variables de diseño y las condiciones de operación, la simulación es la técnica que nos permite realizar

esta etapa más eficientemente. El segundo aspecto consiste en el diseño del equipo, para lo cual es necesario determinar las características, dimensiones y condiciones de operación del mismo que permitan la transformación del material que servirá de alimentación en uno o varios productos con características determinadas. Este problema es en cierta medida un problema de síntesis, sobre todo en lo que se refiere a la selección del tipo de equipo y al diseño de sus componentes entre las diferentes alternativas disponibles. Sin embargo, el entrenamiento dado raramente va más allá del simple uso de las herramientas de cálculo para determinar las dimensiones del equipo previamente especificado. Con esta preparación, el profesional que se está formando es capaz de hacerse cargo de los aspectos de Ingeniería involucrados en la construcción de plantas que emplean tecnología conocida, pero no está capacitado para desempeñar una de las funciones más importantes de la profesión, la de generar y adaptar la tecnología necesaria, adecuada a los problemas y condiciones específicas de nuestro país. Esto se debe a que uno de los renglones más descuidados en la formación de los Ingenieros Químicos ha sido el de la Ingeniería de Procesos que proporciona las herramientas necesarias para concebir y diseñar en forma integral, un proceso capaz de producir a un costo mínimo los productos deseados, conociendo únicamente los datos que se refieren a materias primas y servicios disponibles. La gran mayoría de los Ingenieros Químicos desconocen los trabajos realizados en los últimos años en el área de síntesis de procesos, trabajos que han conducido al desarrollo de una gama considerable de herramientas y

técnicas de diseño que permiten la generación y evaluación sistemático-ordenada de las alternativas más prometedoras para la configuración de un proceso. Si bien estas técnicas de síntesis no sustituyen a la experiencia de un buen Ingeniero de proceso, sí hacen mucho más fácil y expedita la adquisición de dicha experiencia.

Pero, ¿ Por qué las técnicas de síntesis de procesos, siendo ésta una actividad tan importante, han recibido tan escasa atención, mientras que las de análisis de proceso y diseño de equipo han logrado un estado tan grande de desarrollo?. La razón fundamental es que las técnicas de análisis (La separación de un todo en sus componentes para su estudio individual) implica una lógica deductiva, fácil de sistematizar, mientras que las técnicas de síntesis (La combinación de elementos separados para la integración de un todo coherente) requieren de una lógica inductiva que presenta mucho más dificultades metodológicas para su estudio y sistematización. En la fig. 1.1 se hace una comparación esquemática entre el análisis y la síntesis de proceso; en ella las corrientes de alimentación y de productos no se refieren exclusivamente a factores físicos sino también a corrientes de información, como sucede en el diseño de equipo donde se emplean técnicas de análisis para obtener los parámetros de diseño como producto principal.

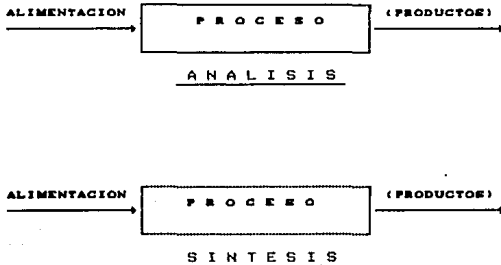


FIG. 1.1 COMPARACION ENTRE ANALISIS Y SINTESIS

Las técnicas de análisis han recibido una gran atención, sobre todo a partir del concepto de operación unitaria, y más recientemente se han visto reforzadas por el desarrollo teórico de los fenómenos de transporte y por la aparición de herramientas para la simulación de procesos, cada día más necesarias y poderosas, gracias al uso tan extendido de la computadora. Sin embargo no fué sino hasta años recientes cuando diversos investigadores emprendieron un esfuerzo organizado para desarrollar diferentes técnicas de síntesis de procesos que han resultado cada vez más útiles en la resolución de problemas industriales. El interés generado en la industria por estas técnicas se puede medir por el apoyo que se ha dado a las diferentes instituciones de investigación para intensificar los esfuerzos en ese campo.

Uno de los objetivos básicos que se persiguen al tratar de

desarrollar nuevas y más poderosas técnicas de síntesis de procesos es el de racionalizar el método inductivo que sigue un Ingeniero experimentado para llegar a la selección de un proceso en particular a partir de unas especificaciones dadas.

La síntesis de procesos es una de las más importantes áreas dentro del diseño de procesos químicos, puesto que trata con el problema de cómo integrar secuencias de procesos para manufacturar procesos químicos.

Idealmente el objetivo es derivar estructuras de secuencias que son económicamente atractivas, energéticamente eficientes y las cuales al mismo tiempo exhiben buenas características de operatividad así como flexibilidad, elasticidad y seguridad.

La síntesis de procesos es el acto de determinar la interconexión más viable de las unidades de proceso, así como el tipo y diseño de éstas dentro del sistema. La interconexión de las unidades de proceso es llamada la estructura del proceso. La tarea es seleccionar un sistema en particular fuera del gran número de alternativas, el cual encuentra el funcionamiento especificado.

La síntesis de procesos puede ser llevada mediante los siguientes pasos:

- Definir los objetivos del sistema
- Definir criterios para evaluar el sistema
- Seleccionar la tecnología para alcanzar los objetivos
- Descomponer el problema en un conjunto de tareas interconectadas

- Realizar las tareas con la tecnología seleccionada

Los primeros tres pasos son llamados "proceso de planeación" y los dos últimos "proceso de diseño" (Ichikawa, 1971). Es sorprendente encontrar la poca atención que se da a la teoría de procesos en materia de síntesis, antes del trabajo pionero de Rudd y Watson. Esto es quizá debido a la naturaleza combinatoria de los problemas de síntesis de procesos, los cuales son bien documentados en previas revisiones de artículos (Hendry, 1973; Ichikawa, 1972; Hlavacek, 1978; Westerberg, 1979). Se puede ilustrar el problema considerando la síntesis de la secuencia de separación siguiente.

Para una mezcla de N componentes a ser separados en N productos puros, usando M métodos de separación el número de posibles secuencias de separación es dado por (Thompson y King, 1972).

$$R = \frac{(2(N-1))!}{N^{N-1} N!(N-1)!} \quad (EC.1.1)$$

Cada separador debe dividir su mezcla de alimentación en dos corrientes de producto, cada componente en la alimentación debe salir en sólo una de estas corrientes.

Una consecuencia es que la ec. 1.1 es restringida a secuencias donde cualquier agente de "separación masa" (semejante al agente usado en la destilación extractiva) es recuperado por reciclo en un separador adjunto al cual fue introducido.

Cualquier aproximación basada en la enumeración completa y

evaluación de todas las alternativas es claramente una abrumadora tarea computacional igualmente para valores bajos de N y M (Tabla 1.1) Este problema combinatorio es muy difícil de atacar.

Así una mayor atención debe enfocarse para encontrar medios eficientes que eviten la naturaleza combinatoria de los problemas de síntesis de procesos.

Tres problemas importantes existen en la síntesis de procesos (Motard y Westerberg, 1978):

a) **PROBLEMA DE REPRESENTACION.** ¿ Puede una representación ser desarrollada bastante para permitir que todas las alternativas sean incluidas y exhibir hábilmente opciones no factibles?

b) **PROBLEMA DE EVALUACION.** ¿ Pueden las alternativas evaluarse efectivamente de manera que sean comparadas?

c) **PROBLEMA DE ESTRATEGIA.** ¿ Puede una estrategia ser desarrollada para localizar rápidamente las mejores alternativas sin enumerar totalmente las opciones?

Ninguno de los problemas anteriores es fácil de resolver, pero la síntesis de procesos es la herramienta que buscará responder a las preguntas antes formuladas.

TABLA 1.1

NUMERO DE SECUENCIAS DE SEPARACION NITIDAS PARA VALORES DE N Y M

NUMERO DE COMPONENTES <u>M</u>	NUMERO DE METODOS <u>M</u>	NUMERO DE SECUENCIAS
3	1	2
3	2	8
5	1	14
5	3	1134
9	5	558,729,973

1.2.2 OPTIMIZACION

La optimización es una de las mejores herramientas cuantitativas en la mecánica de toma de decisiones. Una amplia variedad de problemas en el diseño, construcción, operación y análisis de plantas químicas (así como otros muchos procesos industriales) pueden ser resueltos por optimización.

La meta de la optimización es encontrar los valores de las variables en los procesos las cuales produzcan el mejor valor del criterio de ejecución (función objetivo), por ejemplo, en la operación de plantas, se puede mejorar el funcionamiento de éstas, incrementando

la producción de los productos (o reduciendo la producción de contaminantes), disminuyendo el consumo de energía o aumentando las relaciones de procesamiento.

La solución de problemas de optimización involucra varias características matemáticas. Consecuentemente, la formulación de un problema de optimización debe ser vía expresión matemática, aunque ésta no necesariamente implique un alto grado de complejidad. A continuación se describe como deberán ser organizados algunos problemas de proceso, complejos o simples, para los cuales se desea la solución óptima. Primeramente se debe considerar (a) el modelo que representa el proceso y (b) la elección de una función objetivo conveniente, que guíe a la toma de decisión.

En general, todos los problemas de optimización contienen tres categorías esenciales:

1. Al menos una función objetivo a ser optimizada (Función ganancia, Función costo, etc.).
2. Restricciones de igualdad (Ecuaciones).
3. Restricciones de desigualdad.

Las categorías 2 y 3 comprenden el modelo del proceso o equipo; la categoría 1 es llamada al mismo tiempo el modelo económico.

Una solución factible en un problema de optimización, significa que un conjunto de variables, deben de satisfacer las categorías 2 y 3. La figura 1.2 ilustra la región factible, que es la región de

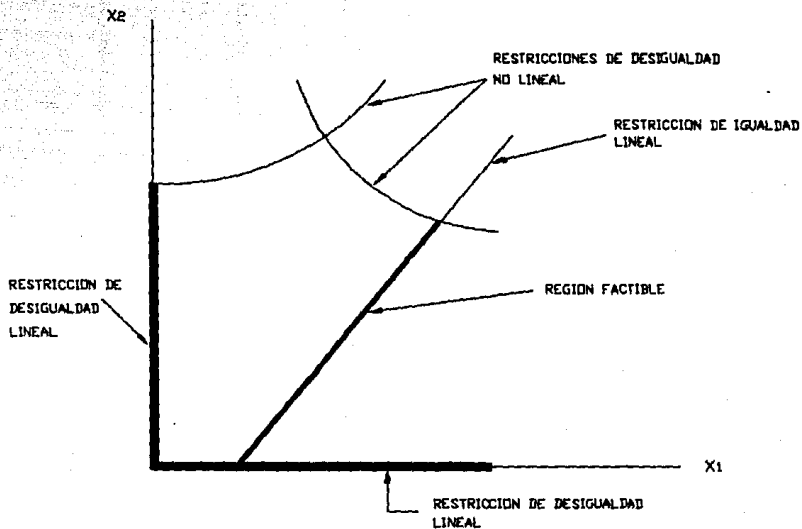


FIG. 12 REGION FACTIBLE

soluciones factibles, definidas por las categorías 2 y 3. En este caso la región factible consiste de una línea limitada por dos restricciones de desigualdad. Una solución óptima es un conjunto de valores de las variables que satisfacen el sistema de ecuaciones de las categorías 2 y 3, y además proporcionan un valor óptimo para la función en la categoría 1. En muchos casos la solución óptima es única, y en otros no lo es, es decir, si el problema de optimización se formula de tal forma que los grados de libertad sean cero entre las variables y las ecuaciones de las categorías 2 y 3, la optimización no es necesaria, esto es, solo basta con resolver el sistema de ecuaciones y no es necesario preocuparse de un método de optimización, ya que la única solución factible es por definición la óptima. De otra forma, si las variables de proceso son mayores que las ecuaciones independientes en la categoría 2, el modelo es llamado indeterminado, esto es, el modelo tiene un infinito número de soluciones factibles en donde la función objetivo en la categoría 1 es el criterio adicional usado para reducir el número de soluciones y así encontrar la solución óptima. Finalmente, si las ecuaciones en la categoría 2 tienen más ecuaciones independientes que variables, entonces el modelo es sobredeterminado y no existe alguna solución que cumpla con las restricciones.

Por lo general, el modelo de optimización es representado como:

Minimizar : $f(x)$ función objetivo.

sujeto a: $h(x) = 0$ restricciones de igualdad

$g(x) \geq 0$ restricciones de desigualdad.

Donde x es un vector de n variables (x_1, x_2, \dots, x_n), $h(x)$ es un vector de ecuaciones de dimensiones m_1 , $g(x)$ es un vector de desigualdades de dimensiones m_2 . El total de restricciones es $m = (m_1 + m_2)$.

1.2.3 PROCEDIMIENTO GENERAL PARA RESOLVER PROBLEMAS DE OPTIMIZACION.

Los algoritmos de optimización pueden ser aplicados eficientemente para todos los problemas. El método elegido para algún caso en particular dependerá de:

- 1) El carácter de la función objetivo.
- 2) La naturaleza de las restricciones.
- 3) El número de variables dependientes e independientes.

A continuación se listan seis pasos generales para el análisis y solución de problemas de optimización. No necesariamente se debe de seguir este orden, pero si se deben de cubrir todos éstos.

- 1) Analizar el proceso de modo que sus variables y las características específicas de interés sean definidas, es decir hacer una lista de todas las variables.
- 2) Determinar el criterio de optimización y especificar la función objetivo en términos de las variables del punto 1 con sus respectivos coeficientes.

3) Desarrollar expresiones matemáticas que relacionen las variables de entrada y salida del proceso y sus coeficientes asociados. Incluye las restricciones de igualdad y de desigualdad. aquí se usan principios físicos (balances de masa, balances de energía), relaciones empíricas, conceptos implícitos, y restricciones externas. Se identifican las variables dependientes e independientes para obtener los grados de libertad.

4) Si la formulación del problema es demasiado grande en alcances:

(a) Dividir el problema en partes manejables y/o

(b) Simplificar la función objetivo y el modelo.

5) Aplicar una técnica de optimización conveniente para el argumento matemático del problema.

6) Checar las respuestas, y examinar la sensibilidad de los resultados para cambios en los coeficientes en el problema y en las suposiciones.

CAPITULO II

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

2. SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION Y SU ENFOQUE A LA DESTILACION

La síntesis de procesos, analiza el problema descomponiéndolo en subtarear para la selección de los métodos de separación de las mezclas para un proceso dado. La jerarquía de la síntesis de separación (SSH) se organiza en un sistema estructurado de preguntas.

Esta jerarquía divide el problema de síntesis de separación total en subproblemas o tareas. Estas tareas pueden ser resueltas esencialmente independientemente la una de la otra. Cada tarea consiste de una serie de heurísticas ordenadas basadas en las propiedades de los componentes puros y en las características del

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

proceso. En su forma actual, (SSH) se limita a la separación de mezclas multicomponentes usando ocho métodos significativos industrialmente: destilación simple, destilación azeotrópica, destilación extractiva, extracción líquido-líquido, lavado, adsorción, permeación mediante membranas y cristalización.

En los últimos 15 años, se ha realizado un esfuerzo considerable en desarrollar métodos sistemáticos para la separación de columnas de destilación. Métodos heurísticos ordenados y evolutivos han sido satisfactoriamente útiles para este tipo de campo de problemas de búsqueda (Nishida, 1981; Kelley, 1987).

Aunque la destilación es el principio de la industria de la separación, existe un número considerable de situaciones en donde la destilación no es la mejor opción. El problema industrial más general de síntesis de separación, usando un número de diferentes métodos de separación, ha recibido poca atención. Este apartado intenta describir la descomposición del problema, para la selección y métodos de separación para mezclas líquidas multicomponentes.

La jerarquía de la síntesis de separación es organizada en un sistema de cuestionamientos estructurados. Esta jerarquía divide la síntesis de separación total en subproblemas o tareas. Cada tarea puede ser resuelta independientemente de las otras tareas. La jerarquía de la síntesis de separación, está siendo desarrollada explícitamente para el ataque de problemas de una manera sistemática.

En su implementación actual, (SSH) está limitada a la separación primaria de mezclas líquidas multicomponentes por alguno de los siguientes métodos:

- Destilación simple
- Destilación azeotrópica
- Destilación extractiva
- Extracción líquido-líquido
- Lavado
- Adsorción
- Permeación con membranas
- Cristalización

Existen métodos que requieren una sustancia externa para efectuar la separación, estos procesos son llamados: procesos de agentes de separación másica (MSA). Todos los métodos en la lista anterior excepto la destilación simple, la cristalización (y algunas destilaciones azeotrópicas) son procesos MSA. Tanto la destilación simple y la cristalización requieren sólo la adición o retiro de energía. Los procesos que involucran agentes de separación másica se dividen en métodos que requieren solventes físicos o extractores (Procesos PSE - destilación azeotrópica/extractiva, extracción líquido-líquido y lavado), y métodos que requieren agentes en fase sólida (Procesos SPA - adsorción y permeación en membranas).

El término destilación azeotrópica es comunmente usado para referirnos a dos diferentes tipos de separación azeotrópica.

El primer tipo se refiere a los azeótropos que requieren únicamente la adición de energía para efectuar la separación. El segundo tipo de destilación azeotrópica es un proceso PSE. Una sustancia externa, llamada extractor, la cual forma un azeótropo con uno o más componentes se adiciona a la mezcla. la separación del

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

azeótropo resultante proporciona la separación deseada.

En términos generales el problema de síntesis de separación en Ingeniería Química para mezclas líquidas puede ser establecido como sigue:

Dada (1) una mezcla líquida multicomponente, (2) datos de propiedades físicas de la mezcla, (3) especificaciones de los productos y (4) un catálogo de técnicas de separación potenciales; encontrar los métodos y secuencias de separación que (1) proporcionen los productos deseados con sus purezas, (2) Generen mínimos costos de separación y (3) proporcionen un número limitado de factibilidades, es decir diseños de procesos realizables.

La síntesis de secuencias de separación es un problema de diseño clásico de Ingeniería Química. Tal función ha sido hecha satisfactoriamente por décadas. Sin embargo debido a la inherente singularidad y complejidad de cada nuevo problema de diseño, se ha eludido un método comprensivo y sistemático para síntesis de procesos; de tal forma las siguientes preguntas permanecen como incógnitas:

- (1) ¿Qué conocimiento es necesario para determinar cual técnica de separación puede usarse y en que orden se llevaría a cabo?
- (2) ¿Cómo se organiza el conocimiento en la jerarquía de la síntesis de separación para hacer el diseño?

La síntesis de secuencias de separación comprende tres categorías: (1) Búsqueda, (2) selección y (3) diseño.

El problema de búsqueda surge de la necesidad para explorar sistemática y eficientemente las secuencias de separación potenciales. Paralela a la secuencia está la selección de un método de separación

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

para una división dada en una mezcla multicomponente.

La necesidad de modelar procesos cortos y evaluaciones económicas lleva a combinar problemas de diseño.

Por lo tanto, la situación es complicada por la necesidad de manipular una gran base de datos de propiedades físicas y químicas.

Las cuestiones importantes desde un punto de vista de Ingeniería son: (1) pueden los problemas de búsqueda-selección-diseño ser acoplados o descompuestos en subproblemas tratables y (2) ¿Cuál es el modo más efectivo para representar y estructurar el conocimiento del diseño de separación para uso en la jerarquía de síntesis de separación?.

En el pasado, un número de estructuras jerárquicas basadas en reglas útiles (DENDRAL, (Fegenbaum, 1971), y MYCIN (Buchanan y Shortliffe, 1984)) han sido construidas. En un sistema basado en reglas, el conocimiento base y los mecanismos de inferencia son típicamente separados uno del otro. Las reglas por si mismas frecuentemente no indican explícitamente el orden en el cuál ellas podrían ser usadas.

El método de tareas orientadas para el diseño de la jerarquía de la síntesis, representa una estrategia de organización de conocimiento explícito (Chandrasekaran, 1986). El método es basado en las siguientes premisas:

(1) Un problema complejo puede ser descompuesto en términos de problemas "genéricos" o "tareas". Un problema grande se compone por tareas interrelacionadas.

(2) El dominio del conocimiento se agrupa en bloques, cada uno de los

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

cuales resuelve una tarea simple.

(3) Las tareas pueden ser agrupadas en jerarquías estructuradas, las cuales resuelven el problema complejo total.

El problema descompuesto en esta forma puede ser el propósito de un grupo de especialistas cada uno trabajando tareas separadas. Las tareas en los niveles superiores de la jerarquía son más abstractas en naturaleza; mientras que aquellas en los límites inferiores son más concretas.

La clave al método de tareas orientadas es la descomposición del problema y la estructuración del conocimiento. Los Ingenieros de Procesos expertos son capaces de seleccionar y combinar satisfactoriamente pasos de procesos independientes en soluciones de problemas coherentes.

Por cierto se dispone de información considerable sobre procesos de separación, a pesar de que mucha se encuentra en forma no apropiada para adecuarla directamente a las tareas. La jerarquía de la síntesis de separación representa el método en la descomposición del problema y organización del conocimiento para la síntesis de separación.

2.1 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION SIN INTEGRACION DE CALOR CON COLUMNAS SIMPLS

Las secuencias de separación basadas en destilación existen en casi todos los procesos químicos, tales sistemas de separación son usados para preparar alimentaciones, separación de productos terminados y tratamientos residuales.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACIÓN

Debido a la significativa contribución de las secuencias de destilación a los costos de capital y operación del proceso químico total, el desarrollo de un cuadro sistemático que seleccione la secuencia de destilación óptima se convierte en una importante búsqueda.

La secuencia de destilación multicomponente puede ser clasificada en dos categorías (a) secuencias de destilación convencionales que involucran una corriente de alimentación multicomponente a ser separada en sus componentes puros y (b) secuencias de destilación generales que contienen diferentes corrientes de alimentación multicomponente a ser separadas en diferentes corrientes de productos multicomponentes especificados. En las últimas dos décadas un gran número de métodos de síntesis han sido propuestos para identificar la secuencia de destilación convencional óptima entre un gran número de secuencias alternativas. Estos métodos de síntesis pueden ser caracterizados como: (a) métodos heurísticos, los cuales se basan en la experiencia del Ingeniero, (b) las estrategias evolutivas que determinan la secuencia óptima a través de los mejoramientos a una secuencia seleccionada inicialmente y (c) métodos algorítmicos los cuales emplean herramientas de optimización de programación matemática. Existen buenas revisiones de métodos de síntesis para secuencias de destilación convencional, algunas de estas propuestas por Nishida (1981) y Westerberg (1985).

Es sorprendente observar que no obstante el desarrollo de muchos métodos de síntesis para el problema de destilación convencional ha sido menor la investigación sobre la separación para destilación

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

general. Rudd (1973) investigó el problema general de separación y desarrolló un método heurístico para la síntesis de secuencias de separación multicomponente como parte de una estrategia que genera secuencias totales. Menciona un número de importantes aplicaciones que involucran operaciones de mezclado de hidrocarburos, los cuales vienen de una variedad de orígenes, para hallar especificaciones de octanaje, lo que trae ahorros sustanciales.

Mahalco & Motard (1977a y b) propusieron el programa BALTAZAR para síntesis de secuencias completas el cual puede además ser usado para atacar el problema de separación general. Su método involucra el desarrollo de secuencias de separación alternativas que puede eliminar la discrepancia entre corrientes multicomponentes en diferentes partes de la secuencia total y las corrientes de productos multicomponentes especificados. Los métodos mencionados anteriormente aunque proporcionan mejoras no producen la calidad deseada de la solución.

Muraki & Hayakawa (1984) estudiaron un subproblema de secuencia de separación general que es la identificación de las secuencias de separación óptimas que producen una corriente de alimentación en dos corrientes de productos multicomponentes, ellos desarrollaron un método de síntesis de dos etapas, en la primera etapa se lleva a cabo una búsqueda de la secuencia de separación óptima vía el uso de una estrategia evolutiva (Seader & Westerberg, 1977; Stephanopoulos & Westerberg, 1976) la que es aplicable a la síntesis de secuencias de separación que genera productos con componentes puros, en la segunda etapa se obtienen ventajas de la representación gráfica de los procesos de separación mediante el uso del diagrama de distribución de

SINTESES DE SECUENCIAS DE SEPARACION

materia (Nath, 1977), de esta manera se optimiza el proceso de separación mediante la realización de divisiones y mezclado de corrientes.

Muraki (1986) propuso un método para construir un diagrama de distribución de materia modificado (MMAD) que representa gráficamente el problema de destilación mostrando una corriente de alimentación multicomponente que será separada en diferentes corrientes de producto multicomponente. Basados en la información por el MMAD, desarrollaron un método de síntesis de dos pasos, que consiste en encontrar la mejor secuencia de separación y las proporciones de división óptimas de las corrientes, para el proceso de separación que involucra una alimentación y diferentes productos multicomponentes. Su método de síntesis sin embargo, utiliza estrategias evolutivas que requieren esfuerzos de ensayo/error y están limitados a subproblemas del problema de separación general, dado que el primer método es para una alimentación y dos productos multicomponentes, mientras que el segundo método es para una alimentación y diferentes productos multicomponentes.

Floudas (1987) discutió el problema de separación general que involucra diferentes alimentaciones multicomponentes en diferentes productos multicomponentes. Una superestructura es propuesta para el problema de separación general que tiene incluidas todas las configuraciones alternativas de interés y tiene unidades separadoras que están definidas en cada punto de rompimiento de separación. De esta manera una superestructura fue formulada y resuelta como un problema de programación no lineal NLP, el cual tiene como incógnitas

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

las interconexiones de corrientes, llevando a la secuencia de separación óptima.

En este trabajo se propone un método de síntesis para la separación de diferentes alimentaciones multicomponentes en diferentes productos multicomponentes por medio de columnas de destilación. Este método se basa en una formulación de programación lineal mixta entera (MILP) de una superestructura que incluye varias secuencias de destilación alternativas junto con división, mezclado y by-pass de las corrientes. Minimizando una función objetivo que representa el costo de las columnas de destilación postuladas sujeta al conjunto de restricciones que describen la superestructura, la secuencia de destilación óptima que separa diferentes alimentaciones multicomponentes en diferentes productos multicomponentes es obtenida, la efectividad del método de síntesis es ilustrado con dos ejemplos, en el capítulo IV.

El problema que se discute en esta sección del trabajo se plantea como sigue:

un conjunto de corrientes de alimentación multicomponentes de condiciones conocidas (por ejemplo, composición, flujo, temperatura y presión) y un conjunto de corrientes de productos multicomponentes especificados serán dados. El problema entonces es sintetizar una secuencia de un costo anual total mínimo de columnas de destilación que pueden separar las corrientes de alimentación multicomponente en diferentes corrientes de productos multicomponentes. Las configuraciones potenciales que son consideradas pueden involucrar arreglos en serie y/o paralelo de columnas de destilación, así como

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

división de corrientes, mezclado y by-pass.

Las consideraciones básicas que serán hechas para este método de síntesis de secuencias de separación basadas en destilación general son:

- (1) Cada columna de destilación ejecuta una separación de alta recuperación (nítidas).
- (2) Cada columna de destilación representa una tarea de separación simple.
- (3) No se permite integración de calor entre columnas de destilación y la temperatura y presión en cada unidad de separación es fijada.
- (4) Las cargas de calor en el condensador y el rehedidor son iguales.
- (5) Expresiones de cargo fijo lineal son consideradas para el costo de inversión de cada columna de destilación.

La primera consideración indica que cada columna de destilación separa la alimentación en productos sin distribución de sus componentes. La segunda consideración especifica que cada columna de destilación contiene una alimentación y dos productos.

Por lo tanto el uso de columnas de destilación complejas con corrientes de alimentación múltiple y corrientes laterales, así como el uso de columnas con distribución de componentes en las corrientes de producto no se permite por las primeras dos consideraciones.

La tercera consideración indica que los servicios de enfriamiento y calentamiento son utilizados en el condensador y rehedidor de cada columna. La cuarta consideración ha sido identificada por todas las simulaciones ejecutadas en cada columna, se puede justificar aplicando un balance de energía alrededor de cada columna. Teniendo la corriente

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

de alimentación los productos de domos y fondos como líquidos saturados, entonces el efecto neto de estas corrientes en el balance de energía es sólo la diferencia de calor sensible entre los productos y la alimentación. Puesto que el condensador y el rehedidor, tienen grandes cargas de calor latente, las cargas de calor sensible se ignoran. La 5ª consideración introduce una aproximación lineal de la expresión de costo no lineal general que se basa en la regla del factor de los seis décimos.

2.1.1 DESCRIPCION DE LA ESTRATEGIA DE SINTESIS POR EL METODO MILP

El método propuesto para la síntesis de secuencias basadas en destilación para separar diferentes corrientes de alimentación multicomponente en diferentes corrientes de productos multicomponentes contiene los siguientes pasos:

(1) Se desarrolla una superestructura para cada corriente de alimentación multicomponente, esta involucra sólo columnas de destilación asignadas a cada tarea de separación. Cada superestructura de la corriente de alimentación involucra todas las distintas columnas de destilación y contiene muchas opciones alternativas estructurales que incluyen arreglos en serie y/o paralelo, división de corrientes, mezclado y by-pass. Entonces la superestructura completa es el conjunto de todas las superestructuras de las corrientes de alimentación.

(2) Cada columna de destilación distinta de la superestructura completa es simulada a diferentes flujos totales para determinar su

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

modelo de costo de cargo fijo y sus cargas de calor características.

(3) La superestructura completa se caracteriza por desconocer las conexiones de las corrientes, es formulada como un problema MILP en el cual se minimiza el costo de la secuencia de destilación sujeta a un conjunto de restricciones que son balances de masa para cada componente aplicado a cada superestructura basada en destilación.

(4) La solución a la formulación MILP proporciona la secuencia de costo mínimo total de columnas de destilación con información de las conexiones de las corrientes desconocidas, esto es, los flujos de las correspondientes corrientes y las composiciones de cada componente en cada corriente.

2.1.2 DERIVACION DE LA SUPERESTRUCTURA PARA EL SISTEMA DE SEPARACION MILP

Para derivar una superestructura completa para el sistema de separación (destilación), primeramente se clasifican las tareas de destilación para cada corriente de alimentación multicomponente. Cada superestructura de corriente de alimentación que involucra diferentes tareas de separación, se deriva de una manera que tenga incluidas muchas alternativas estructurales de interés.

Estas estructuras alternativas permiten división de corrientes, mezclado y by-pass junto con la incorporación de todas las series de secuencias potenciales de columnas de destilación.

Para ilustrar la derivación de una superestructura se supone que existe una corriente de alimentación multicomponente con cuatro

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

componentes A, B, C, y D, que implica diez tareas de destilación potenciales. El objetivo es separar esta corriente de alimentación de cuatro componentes en dos corrientes de productos multicomponentes especificados.

Una superestructura que involucra columnas de destilación asignadas a distintas tareas de destilación puede ser postulada para la corriente de alimentación y esta se muestra en la fig. 2.1.

Los pasos principales en la derivación de la superestructura de la corriente de alimentación de cuatro componentes, se basa en columnas de destilación simples sin distribución y son las siguientes:

(1) Dividir la corriente de alimentación de cuatro componentes en cuatro corrientes, tres de las cuales son dirigidas a las entradas de las columnas de destilación que involucran cuatro componentes (es decir, las corrientes 1, 2, 3 a las tareas A/BCD, AB/CD, y ABC/D, mientras la cuarta corriente es un by-pass total (corriente cuatro).

(2) Dividir las corrientes de salida de cada columna de destilación de acuerdo a los siguientes tres casos:

CASO A: si la corriente de salida de una columna de destilación involucra un componente entonces dividir la salida en un número de corrientes igual al número de productos (es decir, dos corrientes) las cuales son dirigidas a los mezcladores previos a los productos multicomponentes finales P1 y P2 (es decir, dividir la salida de la corriente cinco de A/BCD en las corrientes 5P1 y 5P2.

CASO B: si la corriente de salida de una columna de destilación involucra dos componentes dividir esta corriente en (1) una corriente que es dirigida a la entrada de la columna de destilación ejecutando

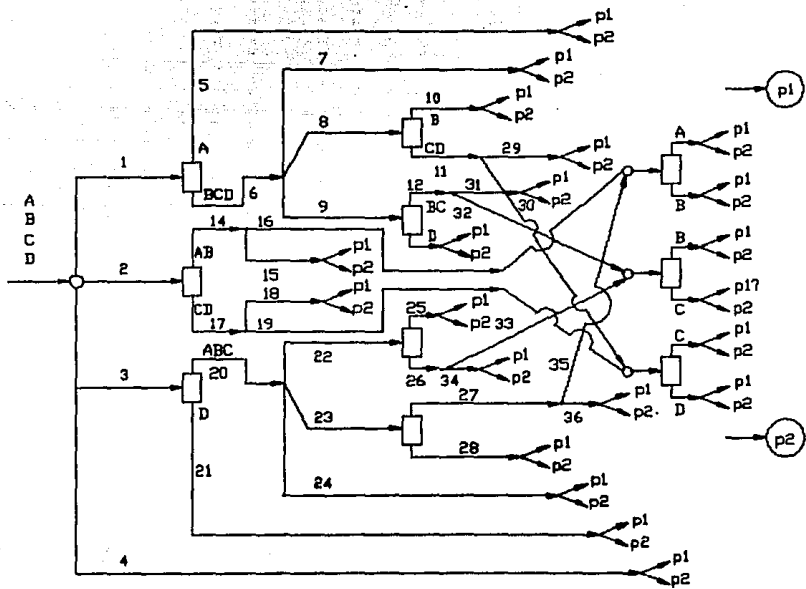


FIG. 2.1 SUPERESTRUCTURA PARA EL PROBLEMA DE SEPARACION GENERAL

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

la tarea de separación de dos componentes (es decir, la corriente 14 dividida en la corriente 16 que es dirigida a la columna AB), (2) dos corrientes que son dirigidas a los productos multicomponentes finales (es decir, dividir la corriente 14 en 15 P1 y 15 P2).

CASO C: si la corriente de salida de una columna de destilación involucra tres componentes dividir esta corriente en: (1c) dos corrientes que son dirigidas a las columnas de destilación exhibiendo las dos tareas de destilación de tres componentes distintos (es decir, dividir la corriente 6 en las corrientes 8 y 9 que son dirigidas a las tareas de destilación B/CD y BC/D, respectivamente; y (2c) dos corrientes que son dirigidas a las corrientes finales (es decir, dividir la corriente 6 en las corrientes 7 P1 y 7 P2).

(3) Dividir la corriente de by-pass total de la secuencia de destilación (es decir, la corriente 4 en dos corrientes dirigidas a los productos finales, corrientes 4 P1 y 4 P2).

La superestructura de la corriente de alimentación de 4 componentes se muestra en la figura 2.1, la cual ha incluido muchas secuencias de columnas de destilación que pueden ser verificadas ajustando los flujos de algunas de las corrientes a valor igual a cero. Las configuraciones son las siguientes:

- (1) Las secuencias de las columnas de destilación A/BCD, B/CD y C/D en serie sin by-pass ajustando $F_1, F_5, F_6, F_8, F_{10}, F_{11}$ y $F_{30} = 0$ y el resto de secuencias iguales a cero.
- (2) Las secuencias de las columnas de destilación A/BCD, AB/CD y ABC/D en paralelo sin by-pass ajustando $F_1, F_2, F_3, F_7, F_{15}, F_{18}$ y $F_{21} = 0$.
- (3) Las secuencias de destilación de las columnas A/BCD, B/CD y AB/CD

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

en paralelo y en serie con C/D ajustando F1, F2, F8, F11 y F19 \neq 0.

(4) Las secuencias de destilación de las columnas A/BCD en serie con B/CD y BC/D en paralelo ajustando F1, F8 y F9 \neq 0.

(5) La secuencia de destilación de las columnas A/BCD y B/CD en serie con by-pass ajustando F1, F8, F7 y F4 \neq 0.

Por lo tanto la derivación de cada superestructura de corriente de alimentación puede fácilmente ser generalizada para cualquier número de componentes y productos involucrados, cada superestructura de corriente de alimentación consiste de:

(1) Un divisor inicial de la corriente de alimentación, un divisor de cada corriente de salida de todas las columnas de destilación y un divisor de todas las corrientes de by-pass.

(2) Un mezclador en la entrada de tareas comunes de destilación y un mezclador antes de cada corriente de producto multicomponente deseado.

Es sorprendente comparar la superestructura de separación descrita anteriormente con la superestructura propuesta por Floudas (1987) ver figura 2.2, para el problema de separación general. Donde las tareas de separación son definidas por el punto de rompimiento de esta separación. En este caso las columnas de destilación A/BCD, A/BC y A/B serán tratadas como tarea de separación S1, las columnas de destilación AB/CD, B/CD, B/C y AB/C como S2 y las columnas de destilación ABC/D, BC/D y C/D serán manejadas como tareas de separación S3. Entonces puede observarse que muchas estructuras alternativas de la superestructura para el problema de separación general en el cual la tarea de separación no está definida son incorporados en la superestructura de destilación propuesta. Por

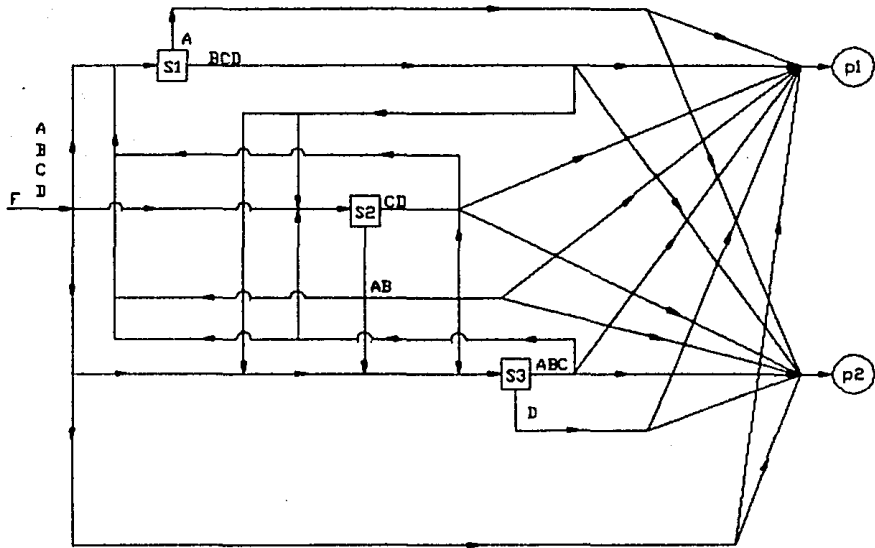


FIG. 2.2 SUPERESTRUCTURA DE UNA CORRIENTE DE 4 COMPONENTES A SER SEPARADA EN DOS PRODUCTOS DE 4 COMPONENTES

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

ejemplo los siguientes casos son algunos de los que se incluyen en la superestructura propuesta.

- (1) S1, S2 y S3 en paralelo resulta de ajustar F1, F2 y F3 \neq 0.
- (2) S1, S2 y S3 en serie resulta de ajustar F1, F8 y F30 \neq 0 y el resto de flujo de las corrientes igual a cero.
- (3) S1 y S2 en paralelo y en serie con S3 resulta de ajustar F1, F2, F9 y F19 \neq 0 y el resto de los flujos igual a cero.
- (4) S1 en serie con S2 y S3 en paralelo y teniendo un by-pass como resultado de ajustar F1, F8, F9 y F4 \neq 0 y el resto de los flujos igual a cero.

Puede observarse que el mezclado de las corrientes que pertenecen a cada superestructura de corriente de alimentación se permite sólo si estas corrientes tienen la misma composición, ya que el costo de cada columna de destilación dependerá de la composición de la corriente de destilación. Una importante característica de la superestructura propuesta es que puede ser formulada como un problema MILP cuya solución proporciona la configuración óptima de diferentes corrientes de alimentación multicomponente en diferentes corrientes de productos multicomponentes.

2.1.3 DESCRIPCION DE LA ESTRATEGIA DE SINTESIS POR EL METODO MILP

En esta parte del trabajo se trata con el problema de síntesis de secuencias de separación para obtener diferentes corrientes de alimentación multicomponente en diferentes corrientes de productos multicomponentes. Una superestructura es propuesta para este problema

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

de separación que tiene incluidas todas las alternativas de las configuraciones de separación de interés. Esta superestructura tiene unidades con tareas de separación e involucra opciones de secuencias en serie y/o paralelo, así como división de corrientes, mezclado y by-pass. Formulando y resolviendo esta superestructura como un problema de programación no lineal que desconoce la interconexión de las corrientes, se obtiene como resultado una secuencia de separación óptima. Esta secuencia involucra muy pocas unidades de separación de aquellas incluidas en la superestructura. El método de síntesis es ilustrado con cuatro problemas de ejemplo en el capítulo IV.

Los procesos de separación multicomponente pueden ser clasificados en las siguientes dos categorías:

P1: Separación de una corriente de alimentación multicomponente en corrientes de producto que son sustancias puras.

P2: Separaciones de diferentes corrientes de alimentación multicomponente, en diferentes corrientes de producto multicomponente.

Los problemas de separación P1, involucran corrientes de producto, cada una de las cuales contiene una especie simple, y el objetivo de este problema es determinar una secuencia de separación óptima que obtenga de una corriente de alimentación multicomponente, corrientes de producto con componentes puros. En las últimas dos décadas, varios métodos han sido propuestos para la búsqueda de la secuencia de separación óptima entre muchas candidatas potenciales.

Una muy buena revisión de los métodos de síntesis para el problema P1 se encuentran en Nishida (1981).

Es interesante observar que aunque se ha dado énfasis para

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

resolver el problema P1, es menor el estudio sistemático del problema P2, el cual es el problema de separación general. Rudd (1973) estudió la síntesis de separación del problema P2 para reducir la separación de carga masica en áreas tales como aviación y de motores de combustión. Donde es común mezclar hidrocarburos de una variedad de fuentes para hallar especificaciones de octanaje y puntos de flasheo. Operaciones de mezclado de esta especie pueden traer considerables ahorros ya que la separación de especies puede requerirse para alcanzar el grado del combustible. Los autores desarrollaron un método heurístico para la síntesis de secuencias de separación multicomponente, como parte de una estrategia general que sintetiza secuencias alternativas de forma adaptativa.

Gary & Handrewerk (1984) indican que se observa aumento en la flexibilidad de operación y beneficios cuando las operaciones de refinería producen corrientes intermedias básicas que pueden ser mezcladas para producir una variedad de productos terminados y proporcionan un número de aplicaciones que involucran corrientes de productos multicomponentes. Mahalec y Motard (1977a,b) proponen el procedimiento Baltazar para la síntesis de procesos químicos completos usando heurísticas, en este método, las secuencias de separación son desarrollados para salvar la discrepancia entre las corrientes multicomponentes encontradas en ciertas partes de la secuencia y las corrientes de productos multicomponentes potenciales requeridas por las especificaciones de diseño. No obstante los logros propuestos por estos procedimientos, no producen la solución cualitativamente deseada.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

Es claro que debido a muchas complicaciones involucradas en el problema P2, no se ha desarrollado un método de síntesis que pueda atacar el problema de una forma rigurosa y eficiente.

Nath (1977) presentó un caso de estudio de un subproblema de P2, que es la separación de una corriente de alimentación multicomponente en dos productos multicomponentes, a lo que se considera como problema P3. En este caso de estudio dos estructuras son determinadas directamente por el uso de diferentes reglas heurísticas que son dependientes del caso de estudio, aún no es claro cómo extender este método a casos donde el número de especies en un producto es más de tres.

Muraki & Hayakawa (1984) realizaron una investigación del problema P3 y desarrollaron un método de síntesis de dos pasos. En el primer paso, una búsqueda de la separación óptima se lleva a cabo, mientras que en el segundo paso se optimiza el proceso de separación mediante la introducción de divisiones y mezclado. Estos dos pasos son repetidos hasta que se halla el proceso de separación óptimo. Para el primer paso se usaron estrategias evolutivas (Seader y Westerberg, 1977; Stephanopoulos y Westerberg, 1976) que fueron desarrollados para la síntesis de secuencias de separación de productos de un componente. Para el segundo paso, ellos desarrollaron un nuevo método evolutivo en el que el diagrama de distribución de materia MAD (Nath, 1977) es usado para reducir la carga másica de separación.

Ellos aceptaron la ventaja de que el MAD muestra el proceso de separación gráficamente, y obtiene útil información sobre el posible flujo de cada especie en cada punto de separación y la factibilidad

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

del proceso de separación modificado. Su método sin embargo utiliza estrategias evolutivas que requieren considerable esfuerzo de ensayo y error, y esto es restringido para el problema P3, el cual es un subproblema de P2, sin hacer claro como este método puede ser extendido en apoyo para resolver el problema de separación general con diferentes corrientes de alimentación multicomponente y corrientes de producto.

En esta parte del trabajo un procedimiento de síntesis basado sobre un método de programación matemática es presentado para la separación de diferentes corrientes de alimentación multicomponente en diferentes corrientes multicomponentes de productos, la idea básica en el método de síntesis propuesto es derivar una superestructura que englobe todas las posibles configuraciones de secuencias de separación y todas las posibles opciones de división y mezclado de las corrientes. La secuencia de separación óptima que puede separar alimentaciones múltiples en diferentes productos multicomponentes es generada minimizando una función objetivo expresada en términos de la carga de separación y la dificultad de separación a través de una formulación de programación no lineal para la estructura propuesta.

La efectividad de este método de síntesis es ilustrado con cuatro problemas de ejemplo, que se desarrollarán en el capítulo IV.

El problema a ser discutido en esta parte del trabajo puede ser planteado como sigue: dado un conjunto de corrientes de alimentación multicomponente de condiciones conocidas (Por ejemplo, composición, flujo, temperatura, presión), sintetizar una secuencia de separación que pueda separar las corrientes de alimentación en diferentes

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

corrientes de productos multicomponentes de condiciones conocidas con un costo mínimo, el cual es en general calculado de los datos de diseño, ecuaciones y datos de costo peculiares a el método de separación, con esto se plantea la siguiente función objetivo:

$$\text{Min}_{j, D} \sum_j C_j (d_j) \quad (\text{EC. 2.1})$$

Donde $j \in J$ denota a una unidad de separación en una secuencia factible; C_j es el costo anual total del separador j ; J es un subconjunto de S ; S es el conjunto de todas las posibles configuraciones de los separadores que pueden producir los productos esperados; d_j son las variables de diseño del separador j ; y D es la unión de d_j .

El propósito de este estudio es desarrollar un método de síntesis que no sea dependiente del método de separación, y de la función objetivo de cada método. Para simplificar la solución, la siguiente función objetivo es usada:

$$\text{Min}_{r_n^k} \sum_{j=1}^{NS} \left[\left(\sum_{k=1}^{NFS} r_n^k \right) D_j \right]^b \quad (\text{EC. 2.2})$$

Donde r_n^k es el flujo de la corriente de entrada a cada separador j que corresponde a la alimentación fuente k (es decir, carga música); D_j es la dificultad de la separación j ; NS es el número de diferentes tareas de separación; NFS es el número de corrientes de alimentación

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

multicomponentes "fuentes" involucradas; y b es una constante. Entonces, la secuencia de separación será seleccionada de modo de minimizar esta función objetivo. La dificultad de separación de la tarea j , D_j , corresponde a la volatilidad relativa o diferencia de temperatura de ebullición en el caso ideal para destilación como tarea de separación. Si el método de separación es conocido, es natural usar una función objetivo derivada para este método de separación.

Sin embargo, la efectividad del método de síntesis que se presenta en este trabajo es que éste no es dependiente de método de separación.

Las consideraciones básicas que serán hechas para el problema de síntesis son:

1. Sólo existe un método de separación.
2. Las propiedades físicas de los componentes sobre las cuales se basa la separación se mantienen en el mismo orden.
3. La separación es simple e involucra divisiones perfectas.
4. No se permite la integración de calor entre los separadores.

La primera consideración es deseable para la operación y control del proceso y reduce el número de separaciones tanto como sea posible. La segunda consideración excluye la posibilidad de diferente orden de las propiedades físicas de los componentes. La tercera consideración indicará que en cada tarea de separación una corriente simple de alimentación es separada en dos productos, los cuales pueden ser multicomponentes, y que cada componente entrando en la corriente de alimentación sale en sólo un producto. Por lo tanto el uso de

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

separadores con múltiples alimentaciones y corrientes laterales así como el uso de separadores con distribución de componentes en las corrientes de producto no se permiten. La cuarta posibilidad excluye la posibilidad de secuencias de separación con integración de calor.

Como se indica en la figura 2.3, el procedimiento sugerido para la síntesis de secuencias de separación para el problema P2 consiste de los siguientes pasos:

1. Se deriva una superestructura para cada corriente de alimentación multicomponente que tiene como separadores a las tareas de separación de acuerdo al número de componentes que están involucrados (es decir, una tarea de separación para cada punto de partición). Esta superestructura contiene conexiones desconocidas que podrían determinar arreglos en serie y/o paralelo, divisiones de corrientes, mezclado y by-pass. Entonces la superestructura completa es considerada como el agregado de todas las superestructuras de las corrientes de alimentación.
2. La superestructura completa es formulada como un problema de programación no lineal (NPL) que tiene como función objetivo la ecuación 2.2 y como restricciones los balances de masa aplicadas a cada superestructura.
3. La solución al problema NPL del paso 2 proporcionará la secuencia de separación óptima, los flujos de las correspondientes corrientes y las composiciones de los componentes de cada corriente.

Esto muestra que muchas corrientes en la superestructura tendrán la tendencia a desaparecer, lo que implica que la secuencia de separación óptima seleccionada, no es complicada.

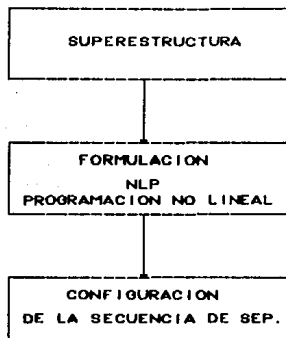


FIG. 2.3 DESCRIPCION DE LA ESTRATEGIA DE SINTESIS

2.1.4 DERIVACION DE LA SUPERESTRUCTURA PARA EL PROBLEMA DE SEPARACION MINLP

La característica importante de la superestructura completa propuesta es que puede ser fraccionada en un conjunto de superestructuras que corresponden a cada corriente de alimentación multicomponente. Cada superestructura de las corrientes de alimentación es derivada de tal manera que tenga incluidas las configuraciones de interés para el proceso de separación. Así las alternativas sobre las secuencias de separación en serie, paralelo, serie-paralelo, paralelo-serie, y opciones sobre la división de

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

corrientes de alimentación, mezclado y by-pass son incorporadas en cada superestructura de la corriente de alimentación.

Para demostrar cómo puede ser desarrollada una superestructura, se supone aquí una corriente de alimentación multicomponente con cuatro componentes A,B,C,D y existen tres tareas de separación S1,S2,S3 en los puntos de rompimiento entre A y B, B y C, C y D respectivamente.

El objetivo es separar esta corriente de alimentación en tres productos multicomponentes especificados. Entonces se puede postular una superestructura para la corriente de alimentación como se muestra en la fig. 2.4. Donde los cuadros indican las tareas de separación y los círculos los productos multicomponentes deseados.

Los elementos básicos en la derivación de la superestructura de la corriente de alimentación son los siguientes:

1. Dividir la corriente de alimentación multicomponente en cuatro corrientes, tres de las cuales son direccionadas a la entrada de las tareas de separación (corrientes 1, 2, 3) mientras que la 4 es considerada como un by-pass total para la secuencia de separación (corriente 4).

2. Dividir la salida de las corrientes de cada separación de acuerdo a las siguientes dos condiciones:

Condición A: si la corriente de producto involucra sólo un componente, entonces dividir la corriente a su vez en tres corrientes que son dirigidas a los puntos de mezclado anteriores a los productos multicomponentes finales (es decir, la corriente de división 5 en las corrientes 11, 12 y 13).

Condición B: si la corriente de productos involucra dos o más

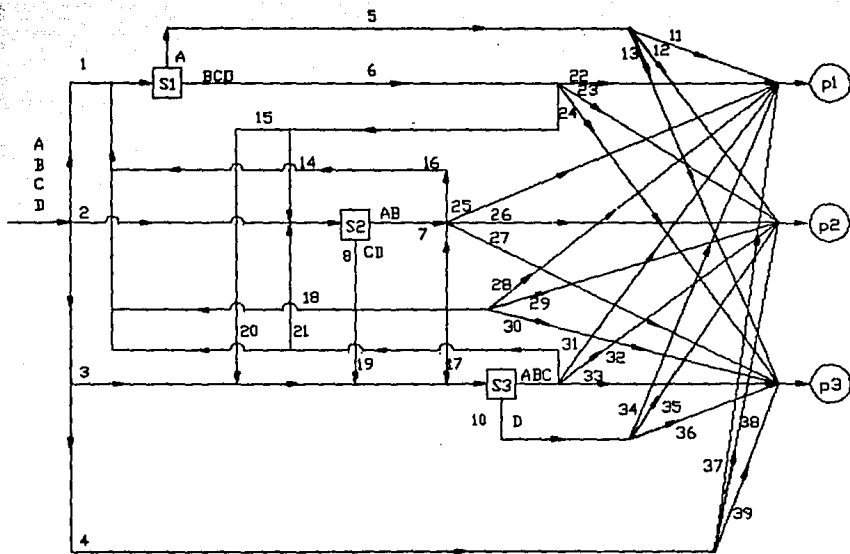


FIG. 2.4 SUPERESTRUCTURA DE UNA CORRIENTE DE ALIMENTACION DE 4 COMPONENTES A SER SEPARADA EN TRES PRODUCTOS DE CUATRO COMPONENTES.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

componentes, dividir la corriente en:

(a) Dos corrientes que son mezcladas con las corrientes de entrada de las otras tareas de separación (es decir, dividir la corriente 6 en las corrientes 14 y 15).

(b) tres corrientes que son direccionadas a los productos multicomponentes deseados (es decir, la corriente dividida 6 en las corrientes 22, 23, 24).

3. Dividir la corriente de by-pass total (corriente 4) en tres corrientes dirigidas a los productos deseados (corrientes 37, 38, y 39).

De la superestructura para la corriente de alimentación multicomponente mostrada en la figura 2.4, muchas configuraciones en serie y paralelo pueden ser verificadas ajustando los flujos de algunas de las corrientes internas a valor cero. Por ejemplo los siguientes casos son algunas de las alternativas en serie y en paralelo.

- SECUENCIA DE SEPARACION S1, S2, S3 en paralelo resulta de ajustar $F_{14} = F_{15} = F_{16} = F_{17} = F_{18} = F_{19} = F_{20} = F_{21} = F_{22} = F_{23} = F_{24} = 0$.

- SECUENCIA DE SEPARACION S1, S2, S3 en serie resulta de ajustar $F_4 = F_{15} = F_2 = F_3 = F_{16} = F_{17} = F_{18} = F_{20} = F_{21} = 0$.

- SECUENCIA DE SEPARACION S1, S2, en paralelo y en serie con S3 resulta de ajustar $F_3 = F_4 = F_{14} = F_{16} = F_{17} = F_{18} = F_{20} = F_{21} = 0$.

- SECUENCIA DE SEPARACION S1 en serie con S2, S3 en paralelo y un by-pass resulta de ajustar $F_2 = F_3 = F_{16} = F_{17} = F_{18} = F_{19} = F_{20} = F_{21} = 0$.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

Por lo tanto, esta superestructura puede fácilmente ser generalizada para cualquier número de tareas de separación que es especificada del número de componentes de la corriente de alimentación. En particular, cada superestructura de alimentación multicomponente consiste de:

1. Un divisor inicial de la corriente de alimentación.
2. Un divisor en cada corriente de producto de cada tarea de separación y un divisor en la corriente de by-pass total.
3. Un mezclador en la entrada de cada tarea de separación.
4. Un mezclador anterior a cada producto multicomponente deseado.

Como se observa el mezclado de las corrientes que pertenecen a la superestructura de la corriente de alimentación es posible en los mezcladores localizados anteriormente a cada tarea de separación de la superestructura. La opción de mezclar las corrientes de alimentación anteriores a cualquier separación no es necesario de incluir en la superestructura debido al hecho de que la función objetivo, ecuación 2.2, minimiza la sumatoria de los flujos de entrada en cada tarea que es determinada de la separación de los puntos de ruptura. Así se observa que la mayor ventaja de la superestructura presentada en este trabajo es que puede ser formulada como un problema de programación no lineal para extraer una configuración de separación óptima de diferentes corrientes de alimentación multicomponente en diferentes productos multicomponentes.

2.2 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION DE COLUMNAS COMPLEJAS

Las columnas de destilación complejas han proporcionado resultados en ahorros en costos de operación y de capital en diferentes estudios de destilación en la literatura, sin embargo hay tres grandes dificultades asociadas con el uso de tales columnas. Primero, hay frecuentemente falta de experiencia e intuición en lo referente a tales columnas, por ejemplo, el número y elección propia de las variables de operación independientes, así como una carencia de experiencia en la construcción y operación. Segundo, el diseño óptimo de torres complejas no está muy entendido. Por ejemplo los procedimientos de diseño simple equivalentes a los métodos de Fenske, Underwood y Gilliland para columnas simples no han sido desarrollados; el diseño de columnas complejas no es frecuentemente enseñado en las universidades y también no se menciona en muchos textos. Finalmente las políticas de control para columnas complejas no han sido suficientemente estudiadas, aunque la extensión de los métodos existentes y la experiencia del control de columnas convencionales para estos esquemas complejos podría ser posible.

Algunos trabajos han sido hechos sobre el diseño de métodos para columnas complejas individuales, pero estos no son completos y la importancia de las columnas complejas en sistemas de separación no ha sido suficientemente estudiado. Corda & Westerberg presentaron una metodología de diseño para columnas de destilación de sección lateral y Petlyuk, pero ésta es muy complicada.

Glinos & Malone derivaron métodos aproximados para el diseño de

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

torres con salidas laterales, rectificador lateral y secciones de agotamiento laterales, que están basadas en las ecuaciones bien conocidas de Underwood. En realidad estos métodos aproximados pueden hacer el diseño de columnas complejas casi tan simple como el diseño de torres convencionales en la ausencia de rigurosa no idealidad.

En resumen el procedimiento proporciona una visión, que es útil en el diseño y operación de columnas complejas. Tedder & Rudd además usaron métodos basados en una extensión de las ecuaciones de Underwood para el diseño de torres complejas, pero su desarrollo es incorrecto en la evaluación del flujo de vapor mínimo para torres prefraccionadoras, esto se tratará posteriormente. En su trabajo pionero sobre una columna Petlyuk, Stupin & Lockhart emplearon además una extensión de las ecuaciones de Underwood para calcular la generación de vapor mínima, pero la forma en que ellos evaluaron la distribución interna de los flujos es arbitraria. La confusión ha sido resuelta recientemente por el excelente análisis de Fidkowski & Krolikowski.

La incorporación de diseños de columnas complejas en la síntesis de sistemas de separación aumenta la complejidad del problema tremendamente. Usando ocho tipos de alternativas de columnas, Tedder reportó que 110415 diseños distinguibles existen para la separación de una mezcla de cinco componentes; este número baja a 14 cuando sólo se consideran columnas simples. Sin duda esto es indeseable para sintetizar y evaluar miles de alternativas, aún cuando métodos eficientes de diseño corto estén disponibles. Se necesitan técnicas de selección potentes, las cuales indiquen cuando una estructura compleja

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

tiene una mayor ventaja sobre las secuencias de columnas simples convencionales y proporcione las alternativas más prometedoras.

En esta parte del trabajo, se trata con torres complejas así como con columnas con corrientes laterales, agotador lateral, columnas rectificadoras laterales, prefraccionadores y columnas Petlyuk acopladas térmicamente. Brevemente se presentan estimados de relaciones de vapor mínimas para los diseños y entonces se compara cada uno de éstos a las secuencias convencionales directas e indirectas. Una de nuestras metas es la de resumir algunos de los métodos que están presentes en otras fuentes, así como desarrollar un análisis paralelo para las columnas Petlyuk y prefraccionadoras.

Además se examina un rango de casos típicos, para ofrecer una visión e intuición para cuando una torre compleja tiene alguna ventaja sobre una secuencia convencional de columnas. Heurísticas cuantitativas pueden entonces ser derivadas.

La base sobre la cual se compara la ejecución de varios esquemas, es el vapor total mínimo generado por los rehervidores.

Volatilidades relativas y flujos molares constantes en cada sección de columna son considerados a lo largo de ella. Los resultados, sin embargo, podrían ser cualitativamente correctos para casos medianamente no ideales, para el mismo alcance donde el método de Underwood es útil.

El tratamiento considera mezclas ternarias pero puede ser extendido a más componentes.

Se comienza por argumentar que la relación de vapor mínima es una medida razonable del costo total de una estructura de separación.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

Posteriormente se examinan las regiones óptimas para las secuencias simples directas e indirectas y entonces se procede a las configuraciones de la columna compleja. En una de las secciones posteriores se resume un procedimiento para la evaluación sistemática de las alternativas.

2.2.1 LA IMPORTANCIA DE LA RELACION DE VAPOR MINIMA PARA LA OPTIMIZACION

Malone mostró que los costos relativos de secuencias simples pueden compararse basados en los requerimientos de vapor total. Este argumento se basó sobre los costos de modelos y simplificaciones de las ecuaciones de diseño; la interpretación física es que el área transversal de la columna y la carga de servicios dominan el costo. El efecto del número de platos es mínimo en la comparación relativa, dado que no se involucran presiones muy altas o componentes corrosivos. Tedder & rudd además agregaron que la relación de vapor es la variable más importante en la estimación del costo, También Eliceche & Sargent alcanzaron la misma conclusión.

El argumento anterior no es exactamente correcto cuando se consideran torres complejas. Por ejemplo, en columnas con corrientes laterales y secciones laterales se encuentra que tienen menos platos que la secuencia correspondiente de columnas simples y por lo tanto tendrá costos de capital algo bajos. Glinos prueba esto analíticamente para torres con salidas laterales, mostrando que una reducción del orden del 10% en el número de platos fué típico para columnas de

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

sección lateral.

Esto además concuerda con los resultados del caso de estudio reportado por Cerda & Westerberg. Aquí la selección de alternativas provechosas de diseños complejos basadas en relaciones de flujo de vapor tan sólo es conservativo en este caso. Por el contrario las torres Petlyuk y columnas con prefraccionadores son esperadas a tener más platos que las secuencias simples correspondientes, debido a que estos esquemas tienen seis secciones de columnas en lugar de cuatro. Un ejemplo particular resuelto por Cerda & Westerberg muestra un 13% de aumento en el número de platos para una columna Petlyuk.

Debe tenerse en cuenta que en la etapa de diseño conceptual, se está interesado en el escrutamiento de las numerosas alternativas que surgen cuando se consideran columnas complejas. La selección puede ser hecha eficientemente sobre las bases de los requerimientos de vapor total y cálculos más detallados así como evaluación de costos podrían ser realizados cuando las alternativas han sido reducidas a un número razonable de candidatas.

En el trabajo de Tedder y Rudd, fueron comparadas alternativas de diseño, después de haber sido optimizadas con respecto a su estado de operación. El costo de cada una de las torres fue minimizado con respecto a presión de operación, calidad de alimentación y vapor para minimizar la relación de vapor.

La presión de operación fue encontrada a ser la variable de optimización más importante, ya que el medio de enfriamiento usado en el condensador depende de la temperatura de la parte superior, la cual en turno es una función de la presión de domos. A bajas presiones el

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

costo de operación es muy alto porque tienden a usarse refrigerantes en vez de agua de enfriamiento. Por lo tanto, el costo cae conforme la presión aumenta, aproximadamente hasta el punto en donde el agua de enfriamiento puede ser usada. Después de esto, hay aumento de costo principalmente debido a la disminución de las volatilidades relativas a altas presiones, pero la dependencia es muy débil. Así esta optimización puede ser evitada si la presión de domos es ajustada, si es posible, de modo que el agua de enfriamiento sea usada en el condensador (total o parcial). En casos donde esto no es posible, la más alta temperatura de servicio podría ser usada para enfriar. Con respecto a la segunda variable de optimización, Tedder y Rudd reportaron que el costo es muy insensitivo a la calidad de la alimentación, la reducción de costo fue aproximadamente del 5%. Así esta optimización puede ser omitida. La tercera variable de optimización es el vapor para minimizar la relación de vapor, con un valor óptimo generalmente entre 1.05 y 1.15.

En la práctica sin embargo, una torre es normalmente operada a relaciones de vapor significativamente arriba del mínimo para asegurar control y operatividad. Es seguro por lo tanto considerar a esta variable con un valor de 1.2.

Se concluye que la etapa de optimización de las torres no es crítica, si se selecciona una correcta presión de operación. En resumen, para el costo total a ser evaluado se necesita considerar niveles de vapor disponibles y asignar valores a los costos de capital de equipo y servicios. Estas constantes son variables, pues cambian con la posición y el tiempo, lo cual podría tener un efecto sobre la

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

generalidad de los resultados obtenidos por un método detallado; tales evaluaciones podrían ser hechas después de la etapa de diseño conceptual. Resumiendo; la comparación de estas alternativas de columnas complejas sobre las bases de la relación de vapor total mínima proporciona simplemente, velocidad y generalidad, lo cual justifica las pequeñas pérdidas en exactitud.

Es además sorprendente observar que el criterio de relación de vapor predice correctamente los mejores 5 de 136 diseños complejos examinados por Tedder y Rudd, así como su orden, dando resultados que son los mismos que el modelo de costo riguroso no lineal para propósitos de escrutamiento.

En la discusión siguiente, se empleará la relación de vapor mínima como el criterio primario para optimizar. Aunque hay pequeñas diferencias si la razón de vapor actual es usada, basada sobre una relación de reflujo 20% arriba del mínimo, lo cual no es significativo en nuestro propósito.

2.2.2 SECUENCIAS SIMPLES DIRECTAS VS INDIRECTAS

En las fig.2.5 a,b,c, se muestran las regiones óptimas para secuencias simples directas e indirectas en el plano de las composiciones de la alimentación. Las volatilidades relativas son marcadas en el paréntesis para los componentes A, B y C, respectivamente. La línea $V_D = V_I$ es encontrada igualando la relación de vapor mínima total requerida por la secuencia directa con aquella para la indirecta. Todas las relaciones de vapor son calculadas usando

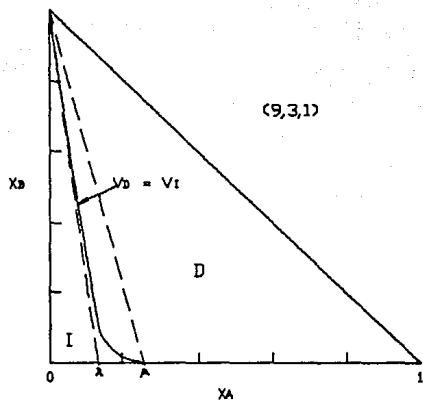


FIG 2.5a REGIONES OPTIMAS PARA LA SECUENCIA DIRECTA VS INDIRECTA.
VOLATILIDADES BALANCEADAS

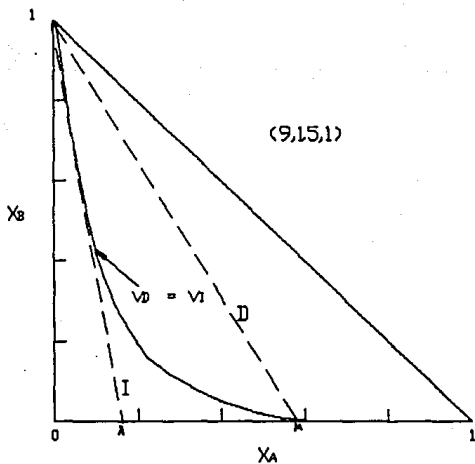


FIG. 2.5b REGIONES OPTIMAS PARA LA SECUENCIA DIRECTA VS INDIRECTA.
 A/B COMO SEPARACION FACIL Y B/C COMO SEPARACION DIFICIL

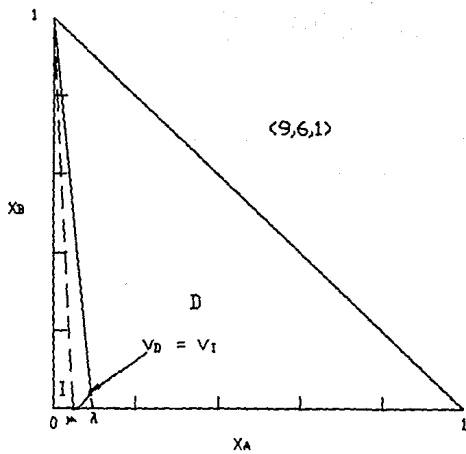


FIG. 2.5c REGIONES OPTIMAS PARA LA SECUENCIA DIRECTA VS INDIRECTA.
A/B COMO SEPARACION FACIL AL IGUAL QUE B/C

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

las ecuaciones de Underwood, se consideran separaciones nítidas en todo.

Se observa que la secuencia indirecta aumenta sus probabilidades de ser óptima conforme X_c aumenta, lo cual concuerda con todas las observaciones previas y heurísticas.

No obstante, la secuencia directa podría ser óptima aún si se encuentra el 80% del componente más pesado en la alimentación.

Por ejemplo, con volatilidades de (9,3,1) y composiciones de alimentación $X_A = X_B = 0.15$, y $X_C = 0.7$, la secuencia directa es más óptima; ver fig.2.5a. Es además importante observar que la región óptima para la secuencia indirecta disminuye conforme la división A/B se vuelve más difícil que la división B/C. Esto contradice la heurística comúnmente usada "hacer las separaciones fáciles primero" y dejar las separaciones difíciles al último. Este resultado ha sido observado por Malone.

La línea de separación de las dos secuencias simples puede ser acotada de ambos lados, si trazamos dos aproximaciones lineales como se muestra en la figura 2.5a. Conforme $X_B \rightarrow 0$, las coordenadas del punto μ se encuentra que son $(\alpha_{AB} - 1 / \alpha_A - 1, 0)$; las coordenadas del punto λ son $(1/\alpha_A + 1, 0)$. Estas son útiles para identificar tres regiones: una donde la secuencia indirecta es preferida, una donde la directa es preferida y una región entre éstas, donde el cálculo de V deberá realizarse. Observe que $\mu > \lambda$ cuando $2\alpha_{AB} < \alpha_A + 1$, mientras que $\mu < \lambda$ cuando $2\alpha_{AB} > \alpha_A + 1$. Una transición ocurre en $\lambda = \mu$ y en este punto el límite entre las regiones (D) y (I) es lineal sobre su extensión completa.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

Para secuencias simples y alimentaciones de líquidos saturados, se puede derivar el criterio cuantitativo de las ecuaciones de Underwood .

- Use la secuencia directa cuando:

$$X_A / (X_A + X_C) > \max(\mu, \lambda)$$

- Use la secuencia indirecta cuando:

$$X_A / (X_A + X_C) < \min(\mu, \lambda)$$

- Calcule la relación de vapor si:

$$\max(\mu, \lambda) > X_A / (X_A + X_C) > \min(\mu, \lambda)$$

Donde:

$$\mu = \frac{\alpha_{AB} - 1}{\alpha_A - 1} \quad (\text{EC. 2.3})$$

$$\lambda = \frac{1}{\alpha_A + 1} \quad (\text{EC. 2.4})$$

La primera desigualdad está de acuerdo con una intuición que escoge la secuencia directa cuando la cantidad del componente menos volátil es pequeña; la segunda es un resultado similar para la secuencia indirecta cuando el componente más pesado se presenta bastante en la alimentación. La naturaleza cuantitativa de los principios y la dependencia en composición y volatilidad evita conflictos que pueden surgir cuando heurísticas o principios más cualitativos, que no son basados en soluciones asintóticas de las ecuaciones de diseño, son empleados. Esto es similar al método sugerido por Malone, pero es más simple de evaluar.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

2.2.3 COLUMNAS CON CORRIENTES LATERALES

Una columna de destilación con corriente lateral de líquido arriba de la alimentación es mostrada en la fig. 2.6. En esta columna, la cual simultáneamente ejecuta las dos separaciones A/B y B/C se requieren tres secciones de columna en lugar de cuatro. En efecto, la división A/B es realizada en la sección simple arriba de la salida lateral. Así las especificaciones de diseño factibles para la separación son establecidas.

La separación primaria es llevada en las secciones 2 y 3. En la fig. 2.6, esto es la separación AB/C, la cual puede ser llevada a cualquier grado deseado; las recuperaciones de B y C o la composición de los fondos puede ser arbitrariamente especificada. La separación en la sección 1 es así secundaria en el sentido que esta puede ser hecha económicamente sólo al grado que la relación de vapor requerida por la separación primaria lo permita. En realidad hay una máxima concentración de B (y una mínima concentración de A) en la corriente lateral, la cual es alcanzada si el número de platos en la sección 1 es infinito (Glinos & Malone)

$$(X_{A,P})_{\text{MIN}}^{\infty} = \left[1 + \frac{X_B}{R_2(X_A + X_B)} + \frac{1}{R_2(Q_{AB} - 1)} \right] (X_{A,P})_{\text{min}} + \frac{X_A / (1 - X_C)}{R_2(Q_{AB} - 1) = 0} \quad (\text{EC. 2.5})$$

$$(X_{B,P})_{\text{max}} = s - (X_{A,P})_{\text{min}} - X_{C,P} \quad (\text{EC. 2.6})$$

Y

$$R_2 = \frac{V_2}{P + D} - 1 \quad (\text{EC. 2.7})$$

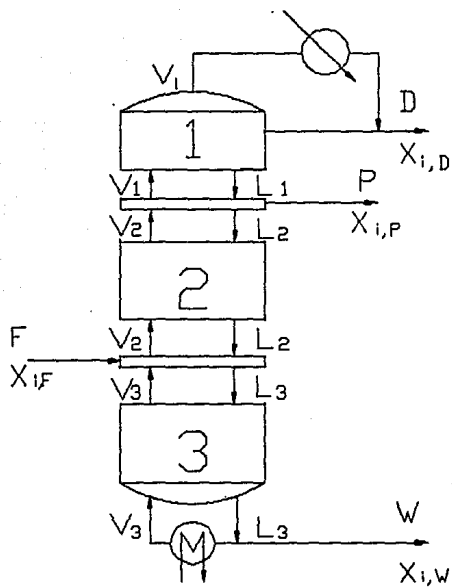


FIG. 2.6 COLUMNA CON SALIDA LATERAL LIQUIDA SOBRE LA ALIMENTACION

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

La ecuación 2.5 es valida cuando un producto de domos relativamente puro es requerido, $X_{A,D} \approx 1$, lo cual es frecuentemente el caso. La evaluación de $(X_{A,P})_{\min}$ requiere que Q_2 (o V_2 , F y D) sea fijado por la separación primaria. Para evaluar Q_{\min} se empleará la ecuación de Underwood o la expresión aproximada de Glinos y Malone para la división nítida AB/C ($q=1$).

$$Q_{\min} = \frac{X_A}{Q_A - 1} + \frac{X_B + X_C}{(Q_B - 1)(1 + X_A X_C)} \quad (\text{EC. 2.8})$$

La cual es generalmente inferior en un 4% comparada con la solución exacta. Cualquier pureza de A arriba o cualquier recuperación de B en la corriente lateral puede ser especificada; sin embargo, no podemos especificar arbitrariamente la pureza de la corriente lateral. Este cálculo es el primero a realizarse, usando las ecuaciones 2.5 y 2.6, las columnas con corriente lateral son limitadas a los casos donde la pureza de la corriente lateral es satisfactoria a nuestros propósitos. Si la pureza deseada es alcanzada, entonces el consumo de vapor estimado de la torre debe ser comparado con el consumo de vapor de la secuencia simple (se observa que la columna con una corriente lateral arriba de la alimentación es más barata que la secuencia indirecta equivalente, la misma calidad de vapor puede usarse en los rehervidores).

En la fig. 2.7, se muestran curvas de nivel para los ahorros de vapor. Las líneas punteadas reflejan una composición máxima de B en la corriente lateral; las curvas de nivel son trazadas sólo a la izquierda de estas líneas, es decir, sobre la parte de la gráfica donde al menos un valor de la composición $(X_{B,P})_{\max}$ de la corriente

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

lateral puede obtenerse. Las composiciones de la alimentación donde máximos ahorros de vapor fueron observados son marcados con cuadrados, junto con los porcentos de ahorros. El % de ahorro es definido como:

$$100 * \frac{\min(V_{\min, \text{direct}}, V_{\min, \text{indirect}}) - V_0}{\min(V_{\min, \text{direct}}, V_{\min, \text{indirect}})} \quad (\text{EC. 2.9})$$

Donde V_0 es el flujo de vapor mínimo total para la columna compleja. Se observa, sin embargo, que el punto de máximo ahorro de vapor en la fig. 2.7 representa sólo casos límites ya que todos estos puntos son localizados sobre las líneas límites y se requieren un número infinito de etapas en la sección 1 para obtener la composición deseada en la corriente lateral (mientras que la secuencia simple opera con un número finito de etapas). Por otro lado, las composiciones de la corriente lateral que están dentro del 5% del valor límite pueden generalmente ser obtenidas con un número moderado de etapas en la sección 1.

Las corrientes laterales relativamente puras pueden ser recuperadas para X_A suficientemente bajos, aún cuando las volatilidades no son favorables, fig. 2.7a y 2.7b. Sin embargo, los ahorros aumentan para valores altos de X_A . Es quizá inesperado encontrar que los ahorros son más significativos para separaciones difíciles y volatilidades balanceadas. Por ejemplo, para $X_{A,1} \geq 0.90$, los ahorros caen de 33.3% para la mezcla con volatilidades (4,2,1) a 28% para la mezcla (9,3,1). Así se encuentran dos tendencias conflictivas.

Para una separación A/B mucho más fácil que la separación B/C,

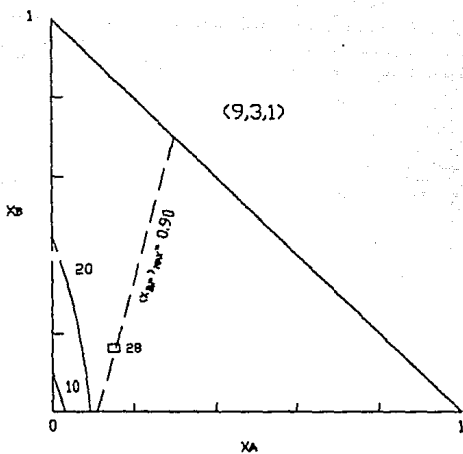


FIG. 2.7a AHORROS DE VAPOR Y PUREZAS ALCANZADAS PARA LA COLUMNA DE LA FIG. 2.6. VOLATILIDADES BALANCEADAS Y SEPARACIONES FACILES

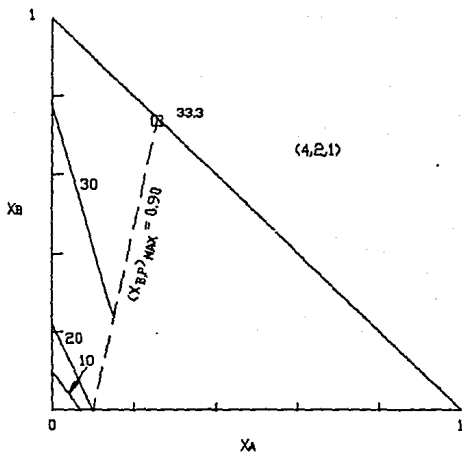


FIG. 2.7b AHORROS DE VAPOR Y PUREZAS ALCANZADAS PARA LA COLUMNA DE LA FIG. 2.6. VOLATILIDADES BALANCEADAS Y SEPARACIONES DIFICILES

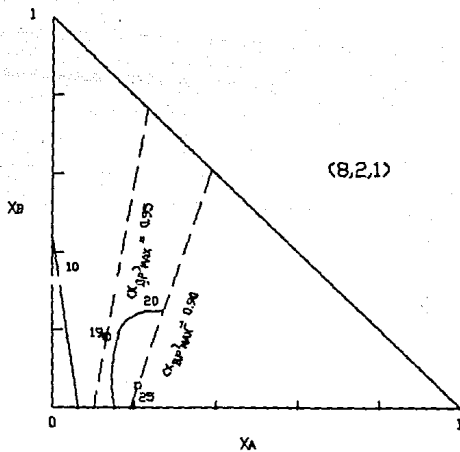


FIG. 2.7c AHORROS DE VAPOR Y PUREZAS ALCANZADAS PARA LA COLUMNA DE LA FIG. 2.6. A/B SEPARACION FACIL Y B/C SEPARACION DIFICIL

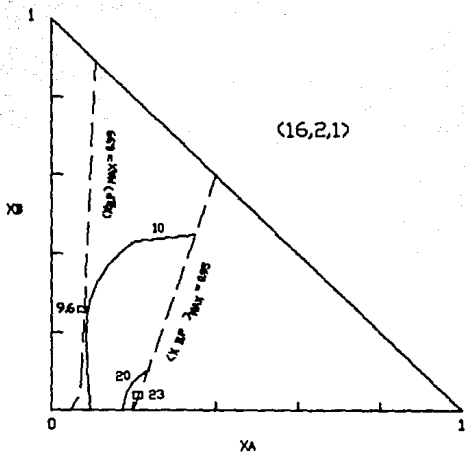


FIG. 2.7d AHORROS DE VAPOR Y PUREZAS ALCANZADAS PARA LA COLUMNA DE LA FIG. 2.6. A/B SEPARACION MUY FACIL Y B/C SEPARACION DIFICIL

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

es decir, $Q_{AB} \gg Q_{AC}$, podemos obtener corrientes laterales con alta pureza pero sólo se alcanzan ahorros moderados. Por otra parte, las volatilidades balanceadas resultan en ahorros más significativos pero con menos pureza de las corrientes laterales.

El caso para corrientes laterales, líquida o vapor, abajo del plato de alimentación puede tratarse de manera similar (para ecuaciones de diseño equivalentes a 2.5 - 2.6; Glinos & Malone).

2.2.4. COLUMNAS CON SECCIONES LATERALES.

La fig. 2.8 es un esquema de una columna con agotador lateral. Dos separaciones son llevadas a cabo simultáneamente (clave ligero/clave medio) y (clave medio/clave pesado) en cuatro secciones de columna, de modo que cualquier recuperación especificada y purezas pueden ser obtenidas para los tres componentes claves en las corrientes de producto. Una vez que los flujos de productos externos son ajustados mediante balances de masa, hay dos flujos internos a ser evaluados, es decir V_A y V_B . Glinos & Malone desarrollaron ecuaciones generales para predecir los valores mínimos para estos flujos de vapor, los cuales son exactos bajo pocas consideraciones. Para una mezcla ternaria con volatilidades constantes y separaciones nítidas se tiene:

$$V_{\min} = \left[1 - q + \frac{X_C}{K_2 - 1} \right] F \quad (\text{EC. 2.10})$$

y

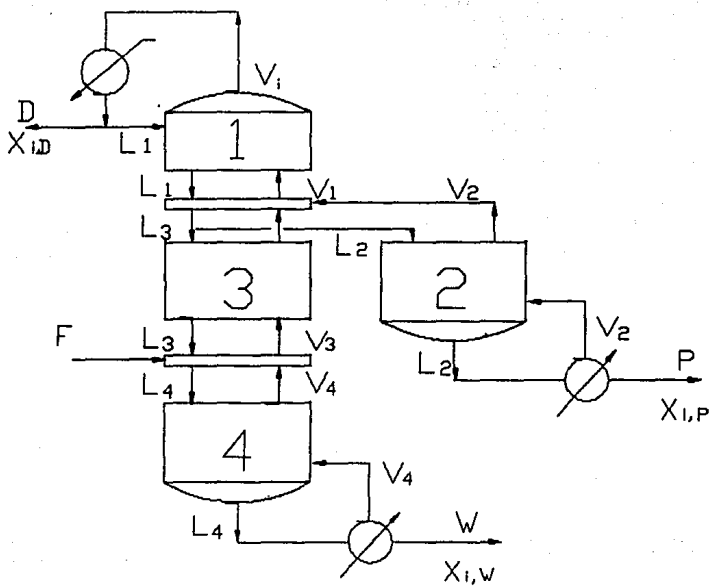


FIG. 2.8 COLUMNA CON UN AGOTADOR LATERAL

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

$$V_{\min} = \frac{X_A X_C \xi_2}{\alpha_B (\xi_2 - 1) - X_C \xi_2 (\alpha_B - 1)} F \quad (\text{EC. 2.11})$$

Donde: $\alpha_B > \xi_2 > 1$ es una raíz de la ecuación de Underwood

$$\frac{\alpha_A X_A}{\alpha_A - \xi} + \frac{\alpha_B X_B}{\alpha_B - \xi} + \frac{X_C}{1 - \xi} = 1 - q \quad (\text{EC. 2.12})$$

La generación de vapor en el primer rehornador es $V_1 = V_2 - (1-q)F$, y $V_2 = V_1 - V_2$ en el segundo.

Glinos y Malone derivaron además expresiones más simples para el caso de alimentaciones líquidas saturadas que no requieren la solución de la ecuación (2.12); un método para estimar el número de platos puede ser encontrado en Glinos.

La fig. 2.9 es un esquema de una columna con un rectificador lateral. Las características de esta columna son las mismas que una columna con agotador lateral, Glinos desarrolló ecuaciones generales para estimar los flujos de vapor mínimos, para separaciones nítidas (de alta recuperación de una mezcla ternaria).

$$V_2 = \left[\frac{\alpha_A X_A}{\alpha_A - \xi_1} + \frac{\alpha_A X_A X_B \xi_1}{X_A \xi_1 (\alpha_A - 1) - \alpha_A + \xi_1} + 1 - q \right] F \quad (\text{EC. 2.13})$$

Donde V_2 es el vapor generado por el rehornador, y ξ_1 es la raíz de la ec. (2.12) que satisface: $\alpha_A > \xi_1 > \alpha_B$.

Se encuentra que para el caso de separaciones de alta recuperación de ternarios y $q=1$, el vapor total generado por los dos rehornadores en una columna con agotador lateral es exactamente igual a los requerimientos de vapor en el rehornador simple de una columna con rectificador lateral. Esto es, las ecuaciones (2.11) y (2.13)

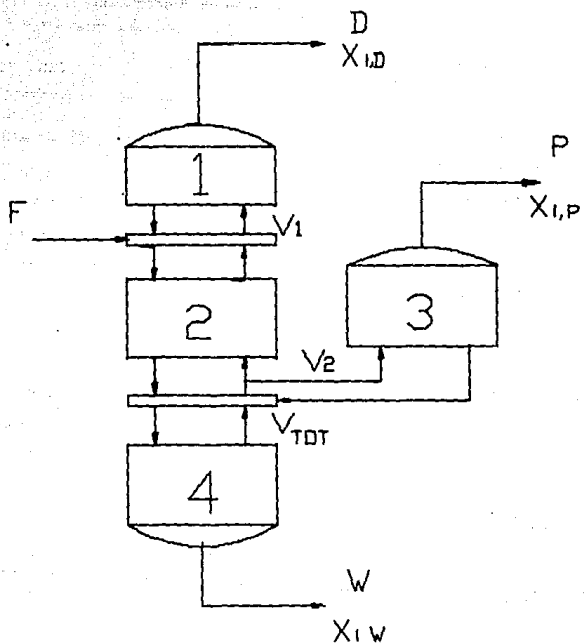


FIG. 2.9 COLUMNA CON RECTIFICADOR LATERAL

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

tienden a la misma expresión. Los costos de operación sin embargo, pueden diferir para las dos columnas complejas, ya que el rehervidor de la sección de agotamiento lateral opera a temperaturas más bajas que el rehervidor de la columna con rectificador lateral y podría utilizar una fuente de calor menos costosa.

Puesto que ambas clases de columnas de sección lateral tienen los mismos requerimientos de vapor, se consideran conjuntamente y comparadas con las secuencias simples, puede ser comprobado que estos esquemas complejos requieren menos vapor total que las secuencias simples directas e indirectas. En la fig.2.10 se muestran las curvas de nivel para 10, 20, y 30% de ahorros de vapor sobre el plano, para tres casos de volatilidades relativas. (La comparación es realizada con respecto a la secuencia simple que es óptima en cada punto, y esto sucede donde surgen discontinuidades en pendiente). Como puede observarse de las figuras, los ahorros de vapor son siempre mayores para valores de X_B pequeños. Esto está en buen acuerdo con los resultados reportados por Tedder y Rudd. El efecto de las volatilidades relativas es cambiar los ahorros para bajos o altos valores de X_A dependiendo sobre cual de las divisiones A/B o B/C es más difícil. En general, los ahorros son más significativos para separaciones difíciles B/C y fáciles A/B. Los ahorros además aumentan conforme ambas separaciones se vuelven más difíciles, las líneas de nivel se mueven más arriba cuando las volatilidades caen desde (9,3,1) a (4,2,1), pero este resultado no es mostrado aquí por razones de brevedad.

Los máximos ahorros siempre ocurren en el punto $(\mu, 0)$. En este

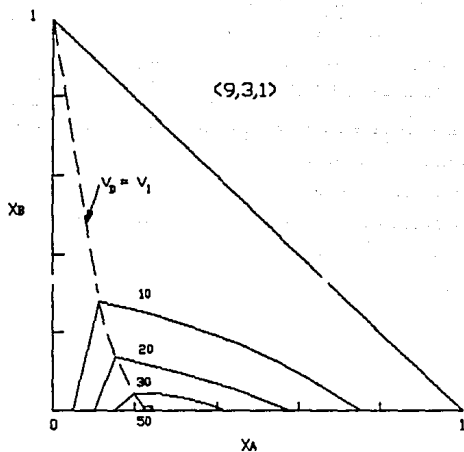


FIG. 2.10a AHORROS DE VAPOR PARA EL AGOTADOR LATERAL
VOLATILIDADES BALANCEADAS Y SEPARACIONES FACILES

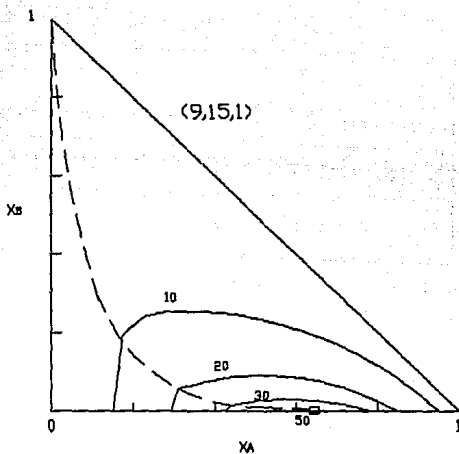


FIG. 2.10b AHORROS DE VAPOR PARA EL AGOTADOR LATERAL
A/B COMO SEPARACION FACIL Y B/C COMO SEPARACION DIFICIL

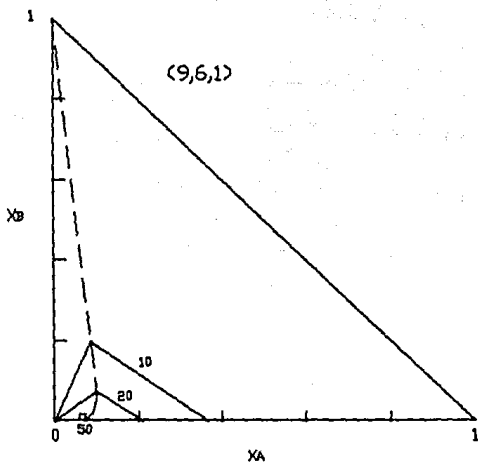


FIG. 2.10c AHORROS DE VAPOR PARA EL AGOTADOR LATERAL
A/B SEPARACION DIFICIL Y B/C SEPARACION FACIL

SINTESES DE SECUENCIAS DE SEPARACION

punto, los flujos de vapor total para las secuencias simples directa e indirecta son los mismos y haciendo que X_B tienda a cero se encuentra que el flujo de vapor de una columna con agotador lateral en este punto es $V_{0B} = \alpha_{AB} / (\alpha_A - 1)$.

Usando este hecho, se puede mostrar que los máximos ahorros son independientes de las volatilidades y, son constantes a un valor del 50%; esto siempre ocurre para $X_A = \mu$ y para valores de X_B que son pequeños, pero al mismo tiempo bastante grandes para requerir la división B/C (de otra manera una columna simple ejecutando la división A/C es suficiente).

2.2.5 COLUMNAS PETLYUK : DISEÑO APROXIMADO

Un esquema es mostrado en la fig. 2.11, se dispone de seis secciones de columna para llevar a cabo las separaciones LK/MK/HK.

Para una mezcla ternaria, el prefraccionador, secciones 1 y 2, es usado para separar los componentes A y C, con distribución de B; entonces las secciones pares (3,4) y (5,6) ejecutan esencialmente las separaciones binarias A/B y B/C, respectivamente.

Para una separación de alta recuperación entre A y C en el prefraccionador, hay dos parámetros de operación independientes para la columna. Si dos flujos internos cualesquiera son fijados, con todos los flujos de alimentación y productos especificados por algún método de distribución de especies y balances de masa, entonces todos los flujos internos pueden ser hallados.

Una disminución en L eventualmente genera condiciones límites

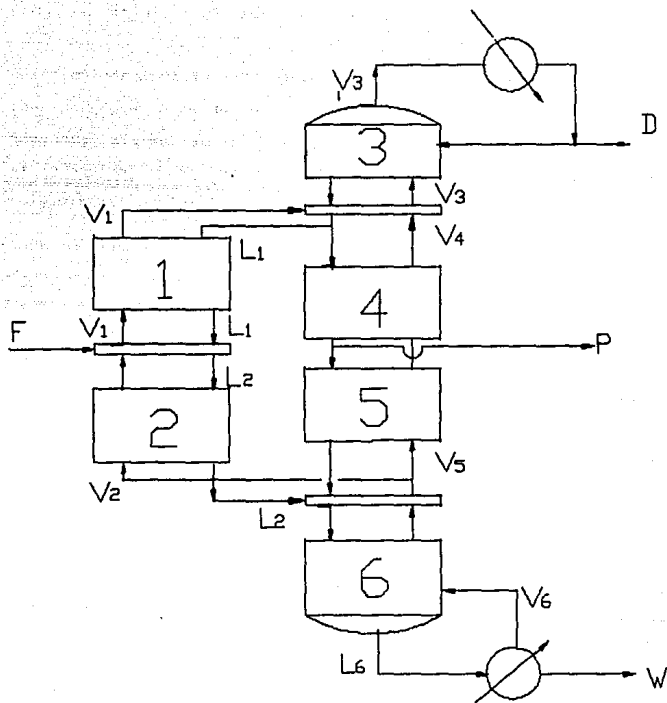


FIG. 2.11 COLUMNA DE DESTILACION TERMICAMENTE ACOPLADA

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

alrededor de la alimentación superior o inferior de la columna, dependiendo sobre cual de los dos es controlante. El flujo de vapor mínimo en las secciones 3 o 6 de la segunda columna es el mayor de los valores para los flujos de vapor mínimos evaluados para las condiciones límites en las secciones (3 y 4) o (5 y 6). Considerando que se quieren recuperar productos puros relativamente (esencialmente A en el destilado, B en el producto intermedio y C en el fondo), con una prueba similar a la descrita por Glinos & Malone se puede demostrar que:

$$V_{s,\min}^U = \frac{\alpha_A X_A}{\alpha_A - \xi_1} F \quad (\text{EC. 2.14})$$

Donde "U" se establece para el control de la columna superior y ξ_1 es la raíz de la ecuación de Underwood para la alimentación superior a la segunda columna que es $\alpha_A > \xi_1 > \alpha_B$. Por lo tanto, ξ_1 es además una raíz de la ec. (2.12), a condición de que el prefraccionador opere bajo condiciones límites, lo cual permite que el componente A es el clave ligero para la división que tiene lugar aquí. En otras palabras, la ec. (2.14) con ξ_1 obtenida de la ec. (2.12), es válida si una división AB/BC (con B distribuido) o una separación A/BC nítida o distribuida es llevada a cabo en las secciones 1 y 2. Similarmente;

$$V_{s,\min}^L = \frac{X_C}{\xi_2 - 1} F \quad (\text{EC. 2.15})$$

Donde "L" indica control de la columna inferior y $\alpha_B > \xi_2 > 1$. Además, ξ_2 es una raíz de la ec. (2.12) a condición de que esta

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACIÓN

aplique para el cálculo de los flujos límites en el prefraccionador, es decir, una división nítida o una división nítida/distribuida A/BC es realizada en las secciones de la columna 1 y 2.

Los balances de masa muestran que si $q = 1$ entonces $V_B = W_B$; el vapor mínimo es por tanto:

$$V_{B,\min} = \max \left[\frac{\alpha_A X_A}{\alpha_A - 1}, \frac{X_C}{\alpha_B - 1} \right] F \quad (\text{EC. 2.16})$$

La ecuación 2.16 es simple y exacta bajo las consideraciones establecidas anteriormente; sin embargo las soluciones de la ec. 2.12 son requeridas. Se observa que la ec. 2.14 da el mismo flujo de vapor mínimo para la separación nítida A/BC y puede ser escrita $V_{\min}^{\text{A/BC}} = (R_{\min}^{\text{A/BC}} + 1) X_A F$; similarmente, la ec. 2.15 da $V_{\min}^{\text{AB/C}} = (R_{\min}^{\text{AB/C}} + 1.0)(X_A + X_B) F$. Glinos y Malone dieron expresiones aproximadas para las relaciones de reflujo; por ejemplo:

$$R_{\min}^{\text{A/B}} = \frac{\alpha_A (X_A + X_B)}{X_A (\alpha_A - 1)} + \frac{X_C}{X_A (\alpha_A - 1)} \quad (\text{EC. 2.17})$$

Si $R_{\min}^{\text{AB/C}}$ es dado por la ec. 2.8 entonces la ec. 2.16 se convierte en:

$$V_{B,\min} = \max \left[X_A (R_{\min}^{\text{A/BC}} + 1), (X_A + X_B) (R_{\min}^{\text{AB/C}} + 1) \right] F \quad (\text{EC. 2.18})$$

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

Como ejemplo se consideró la separación de una mezcla ternaria de líquido saturado con los flujos y volatilidades relativas mostradas en la tabla 2.1. La ec. 2.16 da $V_{6,min} = 0.99$ lo cual es idéntico al resultado calculado por Cerda & Westerberg. La ec. 2.18 produce un valor de 1.0 la cual tiene solo el 1% de error.

El flujo de vapor V_6 , determina los costos de operación pero no el diámetro de las secciones de la columna 1,2,4 y 5; este depende de V_6 . V_6 es independiente de V_4 , con tal de que el valor correcto de ξ sea usado para la evaluación de los flujos límites en el prefraccionador, y que a V_4 no le sea asignado un valor que altere la alimentación controlante. Aquí hay un número infinito de soluciones para V_4 y para la distribución de los flujos internos; esto se explica con más detalle posteriormente.

Cuando la alimentación inferior de la columna corriente abajo es controlante, $V_{min}^L > V_{min}^U$, y una separación nítida AB/BC es realizada por las secciones 1 y 2, la cantidad neta de B recuperada en el domo de la sección 1 y entrando con la alimentación superior de la segunda columna es $X_B^{AB/BC}$. La fracción recuperada de clave medio es dada por:

$$j_B^{AB/BC} = \frac{\alpha_B - 1}{\alpha_A - 1} \quad (EC. 2.19)$$

Las secciones 3 y 4 operan bajo condiciones arriba del mínimo, de modo que ellas puedan manejar cantidades de B mayores que las de la alimentación. Esto es, no se puede diseñar para una separación distribuída AB/C y llevar más B a domos, con $J_C \approx 1$ y $1.0 > J_A > J_B^{AB/BC}$.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

(observe que como la columna inferior controla, la ec. 2.14 no aplica). Sin embargo, hay un límite superior sobre J_B . En un cierto punto, llamando J_B^* , el flujo de vapor mínimo requerido en la sección 3 y 4 será igual a $V_{s,\min}$ y la columna inferior no será controlante.

Por lo tanto, si la columna inferior controla, los valores

factibles para $V_{s,\min}^L$ son limitados por:

$$V_{s,\min}^{AB/BC} < V_{s,\min}^L < V_{s,\min}^{AB/C} \quad (\text{EC.2.20})$$

con $V_{s,\min}^L$ evaluada de:

$$V_{s,\min}^L = \left[\frac{\alpha_A X_A}{\alpha_A - \xi z} + \frac{\alpha_B X_B}{\alpha_B - \xi z} \right] F \quad (\text{EC.2.21})$$

$\alpha_B > \xi z > 1.0$ es una raíz de la ec. 2.14.

De la misma forma exactamente, si la columna superior controla, entonces las secciones 5 y 6 están sobrerrefluadas y pueden aceptar cantidades de B más grandes que $X_B(1.0 - J_B^{AB/BC})F$, lo cual corresponde a la separación nítida AB/BC en el prefraccionador. Por lo tanto, se puede ejecutar una separación distribuida A/BC en las secciones 1 y 2 pero la recuperación de B es ahora limitada abajo por J_B^* y

$$V_{s,\min}^{AB/BC} < V_{s,\min}^U < V_{s,\min}^{AB/C} \quad (\text{EC. 2.23})$$

con $V_{s,\min}$ evaluada con la ec. 2.21, pero con ξ_1 en lugar de ξ_2 .

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

TABLA 2.1. UN EJEMPLO TERNARIO

COMPONENTES	F	D	P	V	α
A	0.22	0.222			0
B	0.224		0.224		2
C	0.222			0.224	1

Por lo tanto el número infinito de soluciones para los flujos internos en una torre Petlyuk descansan en la región limitada por las ecuaciones 2.20 y 2.22. Fidkowski & Krolikowsky presentaron un tratamiento matemático riguroso del problema anterior y derivaron una expresión simple para j_B^*

$$j_B^* = \frac{(\alpha_A - \alpha_B)V_{B,\min} - \alpha_A \alpha_A F}{(\alpha_A - \alpha) V_{B,\min} - (\alpha_A X_A + X_B)} \quad (\text{EC. 2.23})$$

La característica más importante del diseño Petlyuk es la familia de soluciones que existe para los flujos internos; esto proporciona a la columna flexibilidad para manejar una variedad de alimentaciones y condiciones de operación, sin aumentar la ebullición sino simplemente alterando los flujos en las secciones 1,2,4 y 5. Stupin & Lockhart reportaron esta infinidad de soluciones y flexibilidad para condiciones límites y de operación. Una multiplicidad de soluciones fue además encontrada por Wayburn & Seader quienes usaron el método de Newton con una homotopía para encontrar soluciones múltiples. Sus simulaciones de una columna Petlyuk de 50 platos muestra tres posibles valores para el flujo líquido de retorno al prefraccionador en cada valor de la relación de reflujo.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

Puede parecer que $V_{i,\min}$ es el más pequeño de todas los posibles flujos de vapor mínimos en la sección 1. El flujo de vapor en las secciones 4 y 5 de la columna es dado por $V_4 = V_5 = V_3 - V_1$. Ya que $V_3 = V_6$ para $q = 1$ es fijada de la ec. 2.16, V_4 , y de aquí el diámetro de la sección 4, se incrementará cuando V_1 decrece, pero éste nunca alcanzará a V_6 el cual determina el diámetro en la sección 3. Debido a esto no es deseable construir columnas con áreas que son muy diferentes entre secciones, es óptimo diseñar la torre para el mayor valor posible de V_4 que es menor de V_6 , el cual corresponde a un flujo de vapor $V_{i,\min}$ en el prefraccionador. Glinos & Malone muestran que para una alimentación de líquido saturado y volatilidades constantes, esta relación de vapor es dada exactamente por:

$$V_{i,\min}^{AB/BC} = \frac{\alpha_A X_A + \alpha_B X_B + X_C}{\alpha_A - 1} \quad (\text{EC. 2.24})$$

Por lo tanto, la ec. 2.24 da el flujo de vapor mínimo posible para el prefraccionador, y aplica para cada control superior o inferior de la columna. La correspondiente recuperación fraccional es dada por la ec. 2.19.

2.2.6 COLUMNAS PETLYUK : COMPARACION CON SECUENCIAS SIMPLES.

Las curvas de nivel de los ahorros de vapor para 4 mezclas de alimentación son graficadas en la fig. 2.12. Se consideran divisiones nítidas y los ahorros son calculados usando la ec. 2.9.

El plano de composición es dividido en tres regiones por las líneas $V_D = V_L$ y $V_{D,\min}^U = V_{D,\min}^L$ (la línea $V_U = V_L$). La alimentación superior a la torre Petlyuk controla, si la composición de la alimentación es localizada a la derecha de la última línea, mientras que la alimentación inferior controla en el caso opuesto. Ambas líneas intersectan el eje $X_B = 0$ en el punto $(\mu, 0)$ definido por la ec. 2.3. La línea $V_U = V_L$ intersecta el eje $X_C = 0$ en el punto $(X_A^*, 1 - X_A^*)$ donde X_A^* es dada por:

$$X_A^* = \frac{\alpha_B(\alpha_A - 1)(\alpha_A - 2\alpha_B + 1)}{(\alpha_A - \alpha_B)(\alpha_A \alpha_B - 2\alpha_B + 1)} \quad (\text{EC. 2.25})$$

Donde $\alpha_B \leq (\alpha_A + 1)/2$, lo cual corresponde a $X_A^* \geq 0$. Las curvas de nivel en los ahorros de vapor son aproximadamente rectas, excepto para un punto que es localizado en la región entre la separación de las dos líneas.

Se pueden obtener soluciones analíticas para muchas de las curvas, de modo que las gráficas podrían ser aproximadamente construidas si solo se conoce las volatilidades relativas de las mezclas.

Los ahorros máximos para este tipo de columna son además 50% y no dependen de las volatilidades relativas, esto ocurre en el mismo punto que para las columnas con agotador lateral, $X_A = \mu$ y $X_B \rightarrow 0$.

No obstante, aquí puede haber ahorros significativos, igualmente para alimentaciones que contienen grandes concentraciones del componente intermedio, dado que las curvas de nivel no son cerradas

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

alrededor del punto $(\mu, 0)$. Esto pasa cuando la línea $V_u = V_L$ está cerca del lado izquierdo de la gráfica y no interseca las curvas de nivel de los ahorros de vapor, como se muestra en las figs. 2.12b y 2.12d. En otras palabras, X_A^* , dada por la ec. 2.25 debe ser negativa o no muy grande, lo cual sucede cuando α es mayor o no mucho menor que $(\alpha_A + 1)/2$.

Cuando $\alpha \approx (\alpha_A + 1.0)/2$, las líneas límite aproximadamente coinciden e intersecan el eje $X_B = 0$ en $(\lambda, 0)$.

Por otro lado, si α se aprox. a 1, la línea $V_u = V_L$ se aproxima al eje $X_B = 0$, fig. 2.12c; entonces las curvas de nivel alrededor $(\mu, 0)$ sin pasar a través de valores de X_B grandes ec. 2.25 muestran que $X_A^* \rightarrow 1$ para $\alpha \rightarrow 1$.

Finalmente comparando las figs. 2.12a y 2.12d, se concluye que los ahorros se hacen más significativos cuando ambas volatilidades se reducen proporcionalmente.

2.2.7 SECUENCIAS CON PREFRACCIONADORES

El prefraccionador es una columna convencional con rehervidor y condensador y no está térmicamente acoplado a la torre; este esquema complejo no tiene las características de flexibilidad del diseño Petlyuk.

Se muestra un esquema en la fig. 2.13. El prefraccionador ejecuta una separación nítida de alta recuperación entre A y C, de modo que muy poco de C alcanza el destilado y, del mismo modo, la cantidad de A en el producto de fondos es pequeña. El menor de todos los posibles

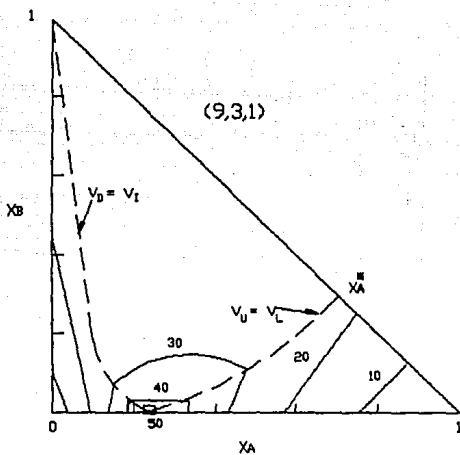


FIG. 2.12a AHORROS DE VAPOR PARA LA COLUMNA PETLYUK.
VOLATILIDADES BALANCEADAS Y SEPARACIONES FACILES

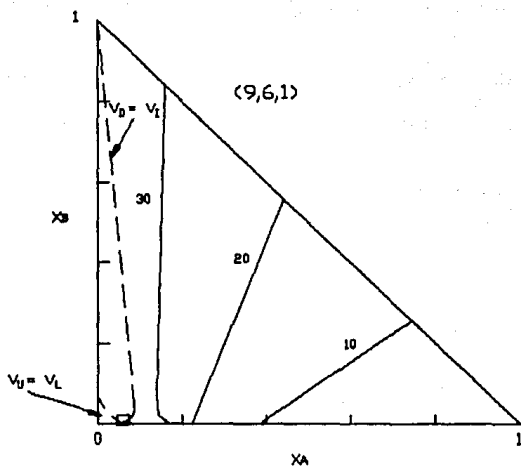


FIG. 2.12b AHORROS DE VAPOR PARA LA COLUMNA PETLYUK
A/B COMO SEPARACION DIFICIL Y B/C SEPARACION FACIL

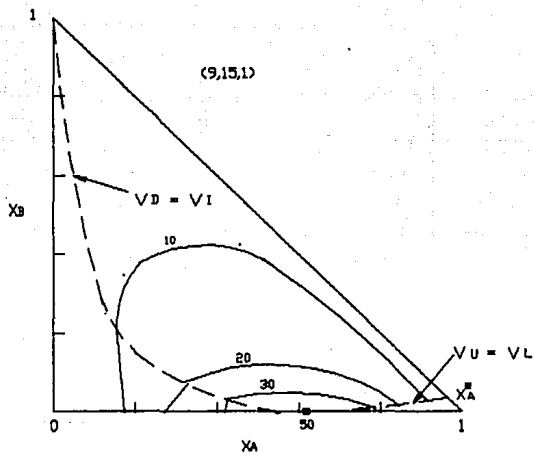


FIG. 2.12c AHORROS DE VAPOR PARA LA COLUMNA PETLYUK.
 A/B SEPARACION FACIL Y B/C SEPARACION DIFICIL

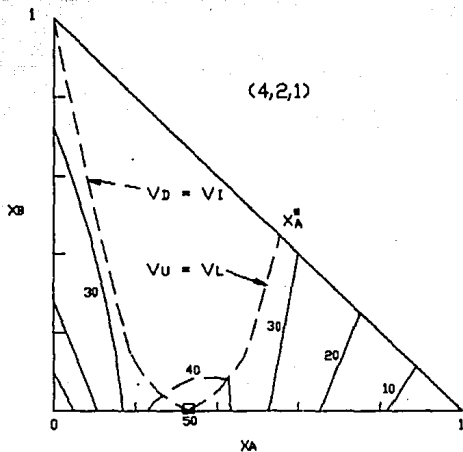


FIG. 2.12d AHORROS DE VAPOR PARA LA COLUMNA PETLYUK.
VOLATILIDADES BALANCEADAS Y SEPARACIONES FACILES

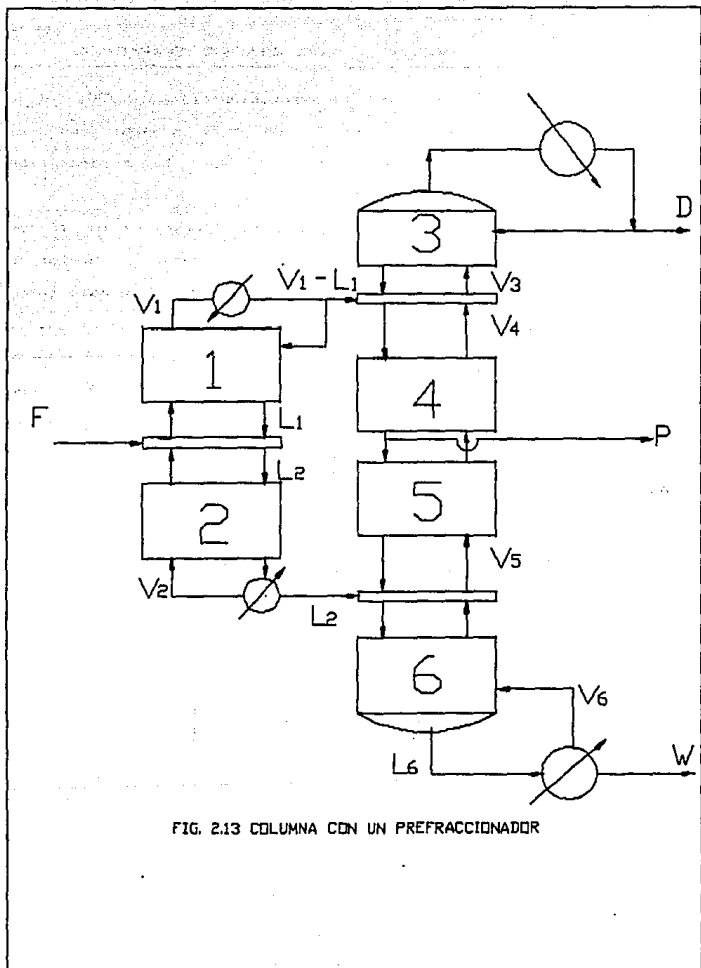


FIG. 2.13 COLUMNA CON UN PREFRACCIONADOR

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

flujos de vapor mínimos es V_{\min} para la separación nítida AB/BC, dado por la ec. 2.24. La cantidad de B que está presente en el prefraccionador producto de domos es $X_B J_B F$ con la recuperación fraccional dada por la ecuación 2.19.

El flujo de vapor mínimo para la columna es el mayor de los flujos de vapor mínimos calculados para control de alimentación superior e inferior, es decir, de las ecuaciones 2.14, 2.15 y 2.16. En este caso, las ecuaciones 2.14 y 2.15 podrían ser escritas en forma analítica. Ya que ambas alimentaciones a la segunda columna son líquidos saturados y las separaciones realizadas en las secciones 3 y 4 o 5 y 6 son esencialmente binarias, A/B y B/C respectivamente, podemos aproximar la relación de reflujo por $R_{\min} = 1/(X_A(\alpha - 1))$.

haciendo el ordenamiento siguiente se obtiene:

$$V_{d,\min} = \left[\frac{\alpha_A X_A}{\alpha_A - \alpha_B} + \frac{\alpha_B (\alpha_B - 1) X_B}{(\alpha_A - 1)(\alpha_A - \alpha_B)} \right] F \quad (\text{EC. 2.26})$$

y

$$V_{s,\min} = \left[\frac{X_C}{\alpha_B - 1} + \frac{\alpha_B (\alpha_A - \alpha_B) X_B}{(\alpha_A - 1)(\alpha_B - 1)} \right] F \quad (\text{EC.2.27})$$

El vapor total generado por los rehervidores para $q = 1$ es dado por:

$$V_{\min,\text{tot}} = V_{d,\min} + V_{s,\min} \quad (\text{EC. 2.28})$$

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

En la fig. 2.14, se muestran las curvas de nivel de los ahorros de vapor para dos casos de volatilidades relativas. Los resultados para volatilidades de (9,1.5,1) no son mostrados, porque los ahorros fueron menores al 10% en todas las composiciones. Así como en el caso de las columnas Petlyuk, el plano de composiciones es dividido en tres regiones por las líneas $V_b = V_c$ y $V_u = V_L$. La última intersecta al eje $X_c = 0$ en el punto $(X_A^*, 1 - X_A^*)$ con X_A^* dado por la ec. 2.25. Se observa que las curvas son ahora convexas, en lugar de cóncavas.

Los máximos ahorros logrados no son constantes, dependen de las volatilidades. Si la alimentación superior controla los máximos ahorros fraccionales son: $(\alpha_A - \alpha_B)/(\alpha_A - 1)$, lo cual ocurre conforme $X_A \rightarrow 1$, con tal de que este punto esté dentro de la región donde $V_{b,min}$ controla. Si la alimentación inferior es controlante, entonces los ahorros máximos son obtenidos para $X_c = 0$ y son iguales a $(\alpha_B - 1)/(\alpha_A - 1)$. En ambos casos, los máximos ahorros son siempre menores que o iguales al 50%; la igualdad es alcanzada para $\alpha_B = (\alpha_A + 1)/2$. Así el prefraccionador puede tener una ventaja significativa para X_A cuando la separación B/C no es difícil comparada con la división A/B. Se observa en la fig. 2.14 como las curvas de nivel se aproximan alrededor del punto (0,1). No obstante podemos probar que los ahorros de vapor logrados con este tipo de columna son menores a los ahorros para el diseño Petlyuk para todos los casos de volatilidades relativas y composiciones de alimentación.

En suma, estos esquemas podrían resultar en costos de capital grandes, debido a las columnas auxiliares adicionales.

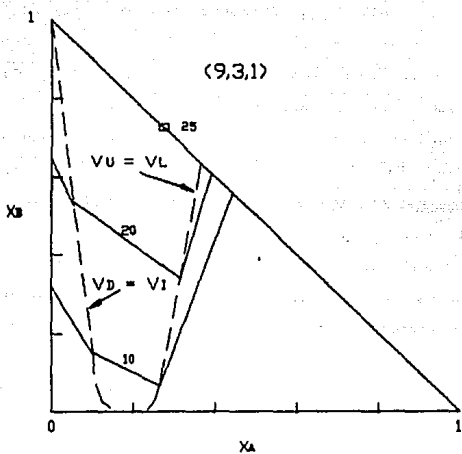


FIG. 2.14a AHORROS DE VAPOR DEL PREFRACCIONADOR
VOLATILIDADES BALANCEADAS Y SEPARACIONES FACILES

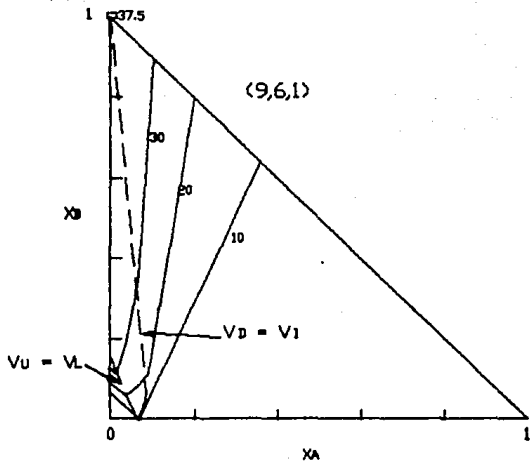


FIG. 2.14b AHORROS DE VAPOR DEL PREFRACCIONADOR.
A/B COMO SEPARACION DIFICIL Y B/C SEPARACION FACIL

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

2.3 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION CON INTEGRACION DE CALOR.

La técnica que reduce el consumo de energía en secuencias de destilación es la integración térmica. Esto es, en donde una corriente caliente (vapor de domos) es combinada con una corriente fría (líquido de los fondos) para intercambiar calor y por consecuencia eliminar la necesidad de servicios de enfriamiento/calentamiento y algún intercambiador. Muchos métodos para diseñar secuencias de destilación con integración de calor han aparecido en la literatura. Amplias revisiones de estas técnicas son presentadas en Westerberg (1980), Nishida (1981) y Kattan (1984).

A continuación se describen dos métodos generales para síntesis de columnas de destilación con integración de calor. El primero involucra 4 pasos.

1. Se identifican todos los subproblemas de separación.
2. Se optimizan las variables de operación de las columnas en cada subproblema.
3. Una red de intercambio de calor es ajustada al subproblema optimizado.
4. Los subproblemas son nuevamente arreglados para encontrar la mejor secuencia.

El segundo método ataca el problema como un todo, de la siguiente manera:

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

1. Se identifican las mejores secuencias no integradas.
2. Se optimizan las variables de operación de las columnas en las secuencias.
3. Una red de recuperación de calor es ajustada a las secuencias.

Ambos métodos tienen la desventaja de que las secuencias completas no pueden optimizarse una vez que se ha hecho la integración de calor del proceso.

Esto ocurre si la columna optimizada o subproblema no puede ser óptimamente integrada con el resto de la secuencia. Este inconveniente es superado mediante la ejecución simultánea de los pasos 2 y 3 anteriormente citados, teniendo como resultado secuencias óptimas con integración de calor.

El método de síntesis optimiza las condiciones de operación de la columna con integración de calor, mediante el uso de técnicas de máxima recuperación de energía, para estimar el costo de la red de intercambio de calor óptima en una secuencia de destilación, con cada conjunto de condiciones de operación. Este método disminuye el tamaño del problema realizando simultáneamente la síntesis de columnas de destilación y la red de recuperación de calor factible.

2.3.1 DESCRIPCION DE LA ESTRATEGIA DE SINTESIS.

La síntesis completa de la secuencia con integración de calor es llevada a cabo de la siguiente manera:

1. Se identifican las mejores secuencias no integradas.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

2. Las condiciones de operación son optimizadas considerando máxima recuperación de energía para estimar costos de la red de recuperación de calor.
3. Las secuencias factibles con los costos más bajos son integradas térmicamente.
4. Diferentes factores son considerados para identificar la mejor secuencia, si el óptimo se acerca a una distribución de costo.

Los pasos 1 y 3 no son nuevos y no presentan una contribución a la síntesis de secuencias de separación, en cambio el paso 2 sí contribuye y es el principal foco de interés en esta sección del trabajo. El paso 4 minimiza la elección entre las secuencias atractivas.

- IDENTIFICACION DE SECUENCIAS NO INTEGRADAS.

El número de posibles secuencias para la separación de un sistema de N-componentes, usando destilación simple de alta recuperación es proporcionada por Rathore (1974), como :

$$\text{Número de secuencias} = \frac{(2(N - 1))!}{N!(N - 1)!} \quad (\text{EC. 2.29})$$

El número de secuencias aumenta rápidamente conforme el número de componentes aumenta. Aquí un método debe ser adoptado para seleccionar sólo aquellas secuencias que tienen el potencial para producir las mejores configuraciones con integración de calor. La identificación de las mejores configuraciones de destilación no integradas debe llevarse

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

a cabo mediante cualquiera de las siguientes tres técnicas de síntesis:

- Síntesis heurística
- Síntesis algorítmica
- Síntesis evolutiva

Las heurísticas son reglas empíricas basadas en la experiencia pasada del diseño de Ingeniería. Las técnicas de síntesis algorítmica son basadas en la evaluación sistemática de todas las posibles secuencias usando búsquedas rigurosas y algoritmos de evaluación.

Este procedimiento garantiza que sean encontradas las secuencias óptimas debido a la rigurosidad de los métodos. La síntesis evolutiva es llevada a cabo modificando un diseño factible ya existente. Las variaciones pueden ser volver a arreglar el equipo o utilizar diferentes técnicas de separación para llevar a cabo una tarea dada. Una presentación más detallada de estas técnicas de síntesis pueden encontrarse en Westerberg, (1980) y Kattan (1984).

El método heurístico fue adoptado debido a su simplicidad y al hecho de que la configuración óptima está generalmente incluida dentro del mejor conjunto de secuencias predecidas. La aplicabilidad de heurísticas en la síntesis de secuencias de destilación sin integración de calor ha sido confirmada por diferentes autores tanto cuantitativa como cualitativamente (Stephanopolous, 1981). Las heurísticas son aplicadas generalmente en cada paso en la secuencia, y en el caso de un conflicto entre las heurísticas, es recomendable

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

seguir todos los pasos independientemente, es decir, escoger todas las secuencias recomendadas por cada heurística independiente de la otra. Este método minimizará la posibilidad de eliminar cualquier secuencia que pueda ser potencialmente óptima, aunque esto podría aumentar el número de secuencias a ser optimizadas.

Las heurísticas sugeridas por Stephanopolous, (1981) son las siguientes:

1. Las separaciones difíciles se llevan a cabo al último.
2. Favorecer divisiones cercanamente equimolares entre los productos de domos y de fondos.
3. Remover el componente predominante al principio de la secuencia.
4. Favorecer la secuencia directa.

- OPTIMIZACION CON INTEGRACION DE CALOR.

El paso clave en este método es que las columnas de destilación y la red de intercambio de calor se optimizan simultáneamente para dar la secuencia con mejor integración de calor.

Un algoritmo del programa de optimización se observa en la fig.2.15. El cálculo comienza mediante la configuración de las especificaciones de una secuencia, condiciones de las corrientes y límites en las variables de operación para cada columna. Posteriormente para un conjunto dado de condiciones de operación las columnas de destilación individuales son diseñadas y se calculan los

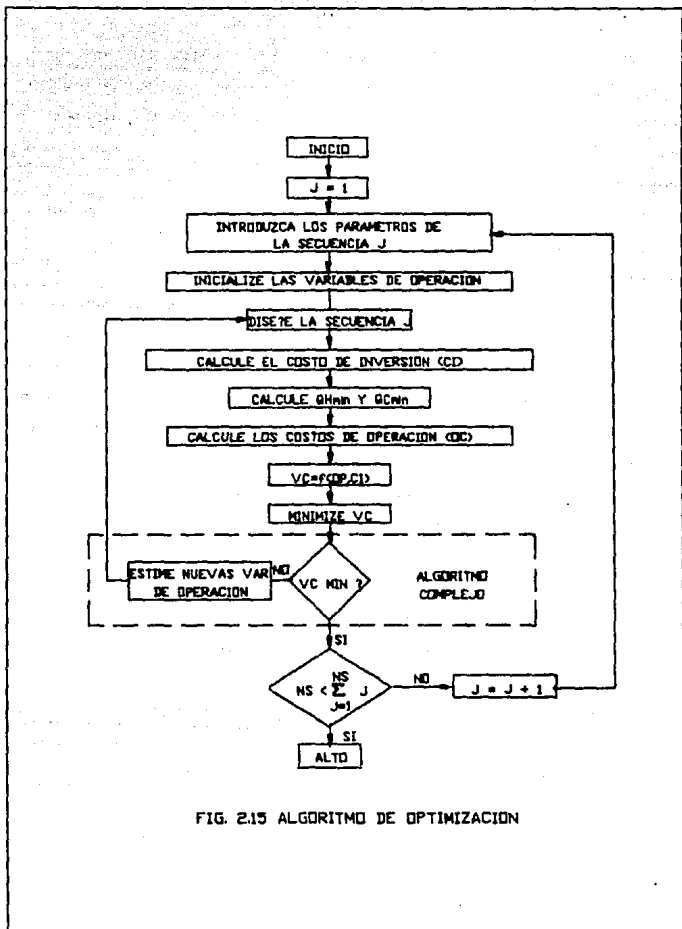


FIG. 2.15 ALGORITMO DE OPTIMIZACION

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

requerimientos mínimos de calentamiento y enfriamiento. Un estimado del costo basado en el diseño de la torre y requerimientos de servicios es evaluado. Finalmente el así llamado costo hipotético (HVC) es minimizado por la variación de variables de operación del proceso.

El mismo procedimiento es repetido en todas las secuencias seleccionadas por las heurísticas en los pasos previos.

Para una secuencia dada con condiciones de operación específicas, la evaluación de la red de recuperación de calor óptima fue estimada por el siguiente procedimiento:

1. Usando el algoritmo del problema de la tabla (Linnhoff & Turner, 1981), los requerimientos mínimos de calentamiento (QH_{min}) y enfriamiento (QC_{min}) fueron evaluados mediante una temperatura mínima de acercamiento. QH_{min} y QC_{min} son los servicios mínimos requeridos para satisfacer las demandas de calentamiento y enfriamiento de todas las corrientes de proceso. QH_{min} y QC_{min} son calculadas sobre bases termodinámicas y se considera que una red de intercambio de calor óptima puede ser obtenida.
2. Considerando máxima recuperación de energía, los costos de operación de la red basada sobre QH_{min} y QC_{min} fueron calculados. Los servicios requeridos para enfriar la corriente menos caliente (condensante) fueron costeados primero, seguida por la segunda corriente menos caliente y así sucesivamente hasta que todo el QC_{min} es agotado. Esto fue hecho porque todas o parte de las corrientes contribuyen a que QC_{min} no pueda ser

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

calentado por las corrientes menos calientes del proceso, de este modo también los servicios de enfriamiento tienen que ser usados. Lo mismo fue hecho para QH_{min}, donde los servicios requeridos para la corriente menos fría se realizaron primero.

3. Los costos de capital de la red fueron calculados sin considerar la integración de calor. En otras palabras, sólo enfriadores y calentadores son usados. El área de superficie de los intercambiadores fue calculada basada en la temperatura de acercamiento alcanzada si los servicios del proceso fueran usados en toda la red.

La consideración de máxima recuperación de energía aplica ya que la red la cual proporciona máxima o casi máxima recuperación de energía será óptima o cercanamente óptima, ya que los costos de los servicios son más importantes que los costos de capital (Rathore & Power, 1975). El uso de una secuencia no integrada para calcular los costos de capital es una aproximación cercana de la red de calor. Un cálculo exacto de los calentadores y enfriadores es ejecutado, mientras el costo de los intercambiadores es estimado como la diferencia entre el costo de capital aproximado de la red de calor y el costo de los enfriadores y calentadores requeridos, ya que no hay manera de saber el tamaño real antes de realizarse la integración de calor.

Para una secuencia dada la minimización de HVC, es representada matemáticamente por:

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

$$\text{MIN} \quad \text{HVC} = \text{HVC}(P_i, R/R_{\text{min}_i})$$

ST

$$P_L < P_i < P_U$$

$$R/R_{\text{min}_L} < R/R_{\text{min}_i} < R/R_{\text{min}_U}$$

Donde, HVS, costo hipotético es una combinación de costos de capital y operación de columnas de destilación y un estimado de los costos de la red de calor (\$/año); P, presión de operación de las columnas (kPa); R/R_{min}, reflujo para mínima relación de reflujo; i, es el índice de columna, i=1,2,...,NC donde, NC es el número de columnas en una secuencia dada; u,1, son los límites superior e inferior respectivamente.

El Algoritmo Complex, Box (1965), fue adoptado para realizar la optimización. Modificaciones sugeridas por Guin (1968) fueron implementadas para mejorar la convergencia.

A primera instancia parecería ventajoso optimizar la presión y R/R_{min} simultáneamente. Este método no es siempre efectivo debido a que pueden ocurrir discontinuidades a medida que la presión es optimizada.

Las discontinuidades surgen de diferentes formas, por ejemplo un pequeño cambio en la temperatura de un condensador puede evitar el empleo de refrigeración costosa y sustituirla por agua de enfriamiento barata. Cambios pequeños en las temperaturas de algunas de las corrientes pueden permitir o prevenir la aplicación de ciertos intercambiadores en la red de recuperación de calor creando

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

discontinuidades nuevamente.

Para aliviar problemas causados por saltos y discontinuidades, la optimización fué realizada en dos etapas. Primero R/R_{\min} fueron mantenidos constantes mientras que las presiones de operación de las columnas se variaron. Posteriormente, las presiones fueron fijadas en el valor óptimo obtenido y R/R_{\min} fueron variados. Los límites superiores en la presión fueron escogidos para evitar exceder la presión crítica de los componentes en el problema. El límite inferior en la presión se empleo para prevenir el uso de temperaturas extremadamente bajas y vacío.

Otras restricciones más rigurosas pueden ser empleadas tales como la temperatura máxima de vapor disponible o la mínima temperatura del medio deseado.

La optimización fue realizada en más de un punto de arranque para garantizar o al menos aproximar una optimización global.

- INTEGRACION DE CALOR

En esta etapa, se encuentran las condiciones de operación requeridas para producir la mejor secuencia con integración de calor.

Las secuencias con el mínimo HVC han sido identificadas y son integradas térmicamente. Este paso final es realizado usando los procedimientos de integración de calor sugeridos por Linnhoff & Flower (1978). El costo actual (AVC) de cada configuración es calculado, y las secuencias con el mínimo costo son seleccionadas.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

- SELECCION DE LA MEJOR SECUENCIA

Frecuentemente, la diferencia en el costo entre las secuencias óptimas y cercanamente óptimas es pequeña (menos del 4%).

En tal caso factores adicionales pueden ser considerados para identificar la mejor configuración. Estos son presentados enseguida:

1. Preferir secuencias en donde las presiones de operación están descendiendo en forma de cascada conforme la separación avanza y donde las presiones están cerca de las ambientales.
2. Preferir secuencias que involucren la destilación más directa esto permite corrientes de producto más puros.
3. Favorecer secuencias con el mínimo número de intercambiadores y aquellas que usen el mínimo número de éstos en una columna simple. La primera parte de esta regla identifica la secuencia que requiere menos intercambiadores de calor auxiliares y ésta podría ser óptima si la integración de calor fuese impedida por algunos problemas de operación. La segunda parte tiende a minimizar la dependencia de otras columnas en la operación de una columna simple.
4. Favorecer secuencias con los mínimos requerimientos de servicios. Esto puede mantener la secuencia más económica si ciertos intercambiadores fuesen descartados.

Algunos de estos factores podrían haberse incluido en el paso de optimización, sin embargo los costos asociados son difíciles de obtener o pequeños comparados con las otras unidades en la secuencia.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

Por ejemplo el costo de cambiar las condiciones de las corrientes intermedias es generalmente menor comparado con el costo de una columna de destilación en la secuencia.

2.3.2 SINTESIS DE SECUENCIAS DE DESTILACION CON INTEGRACION DE CALOR USANDO PROGRAMACION MIXTA ENTERA.

La separación eficiente de alguna mezcla química multicomponente es aún un problema básico en síntesis de procesos e integración. Esto es, dada una mezcla multicomponente, ¿cómo hacer para llegar a la secuencia óptima, de menor costo o al arreglo de unidades de separación que permita producir productos puros o mezclas específicas mientras se minimizan los requerimientos totales de calor para el proceso?. La destilación es el mecanismo más común de separación en la industria y esta sección se enfoca a ella, pero sus ideas pueden ser utilizadas para otros métodos de separación. Aquí, sólo serán consideradas las separaciones nítidas.

La tarea de sintetizar la secuencia óptima de columnas de destilación se hace difícil por el gran número de secuencias posibles. Por ejemplo, para separaciones nítidas simples (2-productos) hay 14 posibles secuencias para una mezcla de cinco componentes, y 1430 para una mezcla de nueve componentes. El problema se hace más complicado si se toma en cuenta las siguientes consideraciones. La primera es la destilación multiefecto, donde la alimentación para cada una de las destilaciones es dividida para un número de columnas paralelas

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

(efectos) cada una operando con una presión específica. El número de tales efectos y la fracción de separación de la alimentación serán las variables del problema de síntesis. La segunda consideración importante es la integración de calor dentro del proceso completo. La destilación es una operación unitaria intensiva en energía requiriendo adición de calor en el rehedvidor y removiendo calor en el condensador. Los requerimientos totales de calor para un proceso en particular pueden ser minimizados mediante el diseño de las columnas que permitan la apropiada combinación de los condensadores (fuentes de calor) y rehedvidores (receptores de calor). La consideración final es la inclusión de las columnas térmicamente acopladas (complejas) junto con las columnas convencionales (2-productos). Ejemplo de columnas complejas son columnas convencionales con condensadores y rehedvidores laterales, y las columnas Petlyuk (ver figs. 2.17 y 2.19). Dependiendo del problema de separación, tales columnas, debido a su carga de vapor baja, comparadas con columnas convencionales equivalentes, son generalmente más económicas. Con la consideración de columnas complejas, integración de calor y destilación multiefecto para cada una de las tareas (incluyendo las separaciones complejas), el número de alternativas se incrementa dramáticamente y el problema global llega a ser altamente combinatorio y acoplado. Consecuentemente, la solución por métodos rigurosos se hace necesaria.

En un intento por resolver el problema de síntesis citado anteriormente, se presentan dos subtareas principales. La primera es la determinación del arreglo óptimo o estructura de las tareas individuales de separación, el segundo es la determinación de los

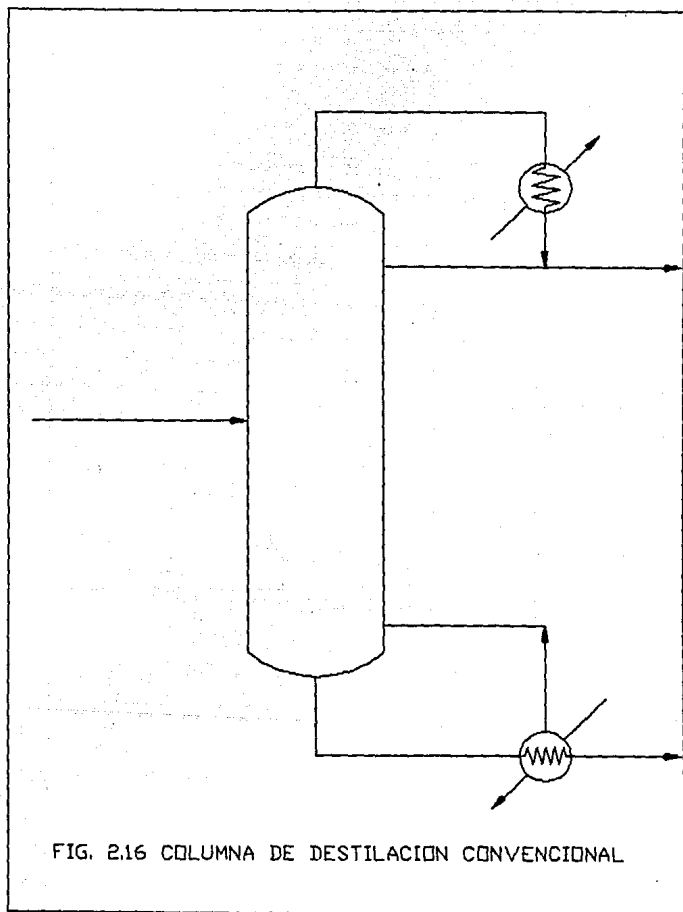


FIG. 2.16 COLUMNA DE DESTILACION CONVENCIONAL

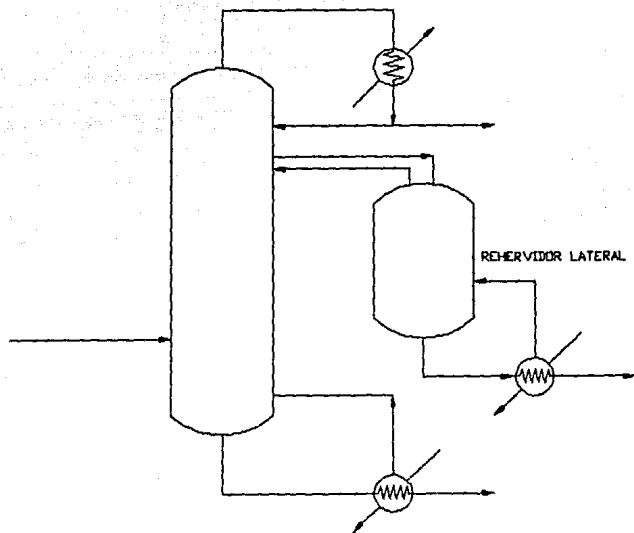


FIG. 2.17 SISTEMA DE DESTILACION CON UN AGOTADOR LATERAL (TIPO 2)

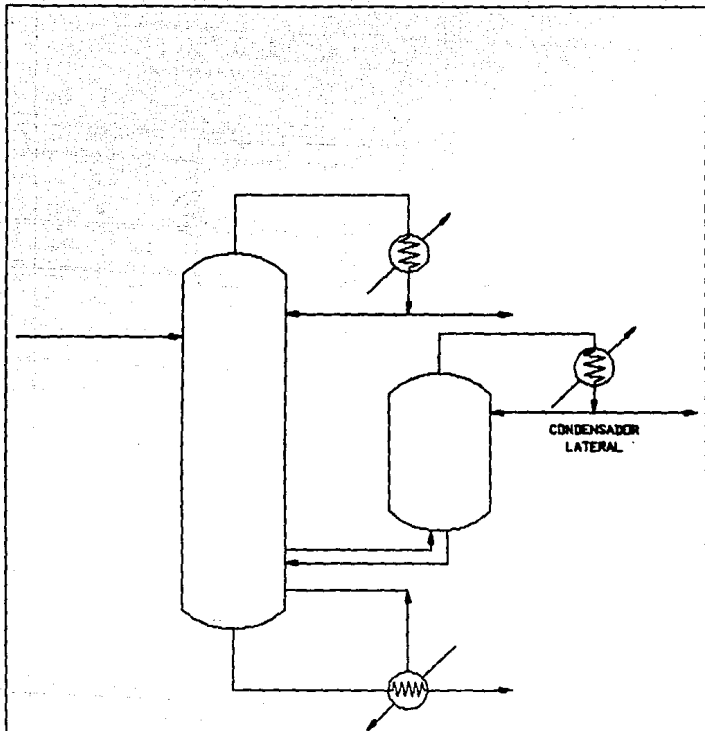


FIG. 2.18 SISTEMA DE DESTILACION CON UN RECTIFICADOR LATERAL (TIPO 3)

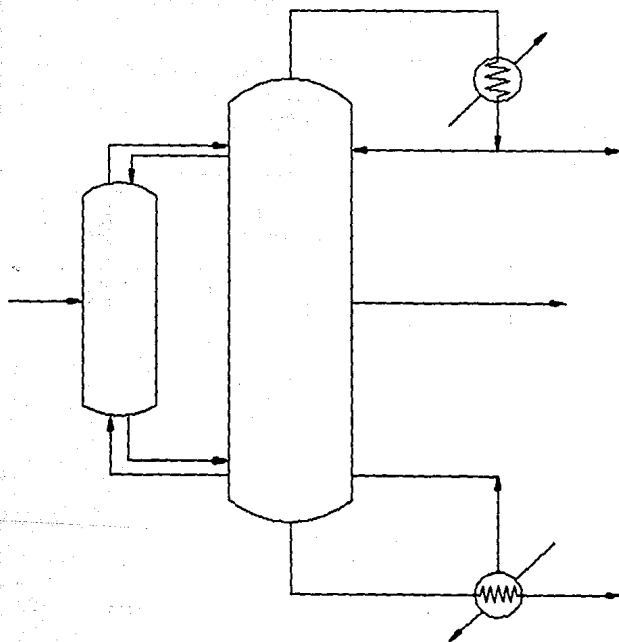


FIG. 2.19 SISTEMA DE DESTILACION TERMICAMENTE
ACDPLADA. PETLYUK (TIPO 4)

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

niveles o valores que ajustan los parametros de diseño (presión, flujo, etc.) de las columnas individuales en el arreglo óptimo de tal forma que se llegue a un costo mínimo total en el proceso.

Ambas subtareas, especialmente cuando se considera integración de calor, y el alto acoplamiento pueden ser resueltos simultáneamente por algún método seguro.

Una multitud de artículos, incluyendo varias revisiones, han sido publicados sobre esta materia. Dos enfoques principales pueden ser deducidos por la literatura. El primero es basado en la heurística (incluyendo el así llamado método evolutivo.), mientras el segundo aplica varios métodos de programación matemática (optimización).

Los métodos de Lagrange (Morari & Faith) y más recientemente la programación mixta entera (Andrecovich & Westerberg) abordaron rigurosamente todo el problema de síntesis. También, Elicheche & Sarget (1981) aplican una técnica de optimización para síntesis de sistemas de destilación el cual incluye columnas complejas pero no tratan el problema de integración de calor en general.

Los métodos que emplean heurísticas, total o parcialmente, tienden a proporcionar una base simple para una fácil y rápida proyección de todas las secuencias de destilación cuando se consideran columnas simples y sin integración. Para estos casos, la principal desventaja es el hecho de que cada uno tiene una regla heurística predominante la cual puede conducir a malos cálculos, o a un conjunto de heurísticas conflictivas que deben ser valoradas unas con otras de una manera muy subjetiva. Para casos de secuencias con integración de calor y/o inclusión de columnas complejas el uso de heurísticas no es

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

ciertamente un método de solución muy atractivo. Esto se debe al alto acoplamiento del problema y al gran número de alternativas, especialmente cuando se considera la destilación multiefecto. Aún usando heurísticas para seleccionar unas cuantas secuencias (no integradas) antes de aplicar métodos rigurosos de integración de calor como sugieren algunos autores, se tiene la probabilidad de dejar fuera muchas secuencias o columnas las cuales con una apropiada integración de calor pueden ser económicas con respecto a la eventualmente "óptima" obtenida. Los métodos de programación matemática ofrecen una clara ventaja en la formulación del problema ya que en la mayoría, si no es que en toda, las posibles alternativas/combinaciones pueden ser incluidas. La principal desventaja del común de métodos de programación matemática, ya sea programación dinámica o métodos basados en Lagrange, es que debido a las complejas formulaciones generadas, son necesarias grandes cantidades de tiempo computacional y esfuerzo para problemas de considerable magnitud. Sin embargo, en este trabajo, se presenta una aproximación matemática basada en la programación mixta entera (MIP), la cual obtiene soluciones óptimas en tiempos muy cortos. Además, debido a las características del MIP, ha sido posible derivar y resolver modelos los cuales puedan simultáneamente considerar columnas complejas junto con columnas simples, integración de calor y destilación multiefecto para todos los tipos de columnas, sin el uso de heurísticas. Primeramente, se presenta una breve discusión del MIP y sus aplicaciones.

Algunos problemas de decisión (con un objetivo a ser maximizado o

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

minimizado) en donde algunas o todas las variables de decisión (cuantificables) asumen valores no fraccionarios o discretos pueden ser clasificados como un problema de optimización entera. Una definición del programa general entero puede ser dado como (Taha, 1975):

maximize (o minimize)

$$z = g_0(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (\text{EC. 2.30})$$

$$g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \begin{cases} M \\ N \end{cases} b, \quad i \in M \equiv \{1, 2, \dots, m\} \quad (\text{EC. 2.31})$$

$$x_j \geq 0, \quad j \in N \equiv \{1, 2, \dots, n\}$$

sujeto a

$$x_j = \text{un entero}, \quad j \in I \leq N$$

Si $I=N$; entonces todas las variables son restringidas a variables enteras, el problema es llamado un problema entero. De otro modo, si $I \subset N$ entonces es tratado como un problema mixto entero. El programa entero definido arriba será lineal o no lineal dependiendo de la naturaleza de la función objetivo, z (ec.(2.30)) y las restricciones g_i (ec.(2.32)). En particular, usando la notación matricial, un programa lineal mixto entero (MILP) puede ser escrito como:

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

maximize

$$\underline{c} \mathbf{x} + \underline{d} \mathbf{y} = z \quad (\text{EC. 2.32})$$

sujeto a

$$\underline{A} \mathbf{x} + \underline{D} \mathbf{y} \leq \underline{b} \quad (\text{EC. 2.33})$$

y

$$\mathbf{x} \geq 0, \mathbf{y} \geq 0$$

 \mathbf{x} entero

Donde:

 $\underline{A}(a_{ij})$ es una matriz m por n (restricción). $\underline{b}(b_i)$ es un vector columna m de constantes. $\underline{c}(c_j)$ es un vector fila n (o costo). $\underline{d}(d_j)$ es un vector fila n (o costo). $\underline{D}(d_{ij})$ es una matriz m por n (restricciones) $\mathbf{x}(x_j)$ es un vector n de variables enteras $\mathbf{y}(y_j)$ es un vector n de variables continuas.

Los programas mixto entero (o enteros) en donde las variables enteras son restricciones 0 o 1 son llamados programas mixto entero (o entero) cero-uno. Esto demuestra que todo programa mixto (o entero) en los cuales las variables están limitadas a lo antedicho pueden ser formuladas como un problema mixto (o entero) cero-uno.

La importancia de la programación mixta entera (o entera) consiste en el hecho de que muchas situaciones de la vida real producen formulaciones de programas con alguna o todas las variables necesariamente enteras. Por ejemplo, en los problemas de síntesis, el número de diferentes unidades de procesamiento como reactores,

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

separadores, etc. tiene que ser entero para evitar aproximaciones erróneas de algunas unidades de proceso (como 2.4 evaporadores se puede aproximar a 2 o 3 unidades). En particular, en secuencias de columnas de destilación, un programa mixto entero considera el número de columnas de destilación como la variable entera y como variables continuas al flujo y el calor intercambiado.

La principal desventaja en aplicar MIP es que se requiere una cierta cantidad de herramientas en la formulación de modelos buenos y eficientes y, para problemas grandes, es necesario tener controles adicionales para alcanzar la solución en un tiempo corto. Controles muy efectivos para problemas grandes serían un buen límite inferior (para un problema de minimización) y un buen punto inicial para el algoritmo de búsqueda.

Los paquetes de solución comercial usan variantes del algoritmo original de ramificación y acotamiento de Land & Doig (1960). El espacio de solución de los problemas enteros es un subconjunto del espacio continuo. Así, si la solución óptima continua es toda entera, entonces también es óptima para el problema entero. De otro modo, las operaciones de ramificación y acotamiento tienden a utilizarse y la solución óptima entera es entonces encontrada por una técnica de búsqueda involucrando soluciones de una secuencia de LPs, formulada por el relajamiento de las restricciones de integridad en las variables enteras, al mismo tiempo que se mantiene los límites apropiados. La solución LP en algunos nodos se usa como un límite superior (para problemas de minimización) para todas las soluciones enteras que puedan ser generadas de este nodo. El procedimiento de

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

ramificación y acotamiento asegura que el óptimo global sea siempre obtenido.

Normalmente, las formulaciones exactas de muchos problemas de síntesis usando MIP conducen a programas mixto enteros no lineales (MINLP). Esto se debe al comportamiento no lineal de muchas funciones tales como el costo de equipo vs. Área. Sin embargo, generalmente los paquetes de solución confiables para el MINLP aún no han sido completamente desarrollados. Por lo tanto, tales funciones no lineales tienen que ser aproximadas a una lineal, ya que muchos paquetes de solución sólo aceptan programas mixto enteros lineales (MILP). Esto no debe constituir una seria desventaja, ya que el principal propósito en esta etapa de diseño es el análisis de un gran número de alternativas.

En sus respectivos artículos, Papoulias & Grossman (1983) usan la técnica MILP para resolver problemas en síntesis de proceso. Ellos usaron modelos de MILP cero-uno para sintetizar sistemas de servicios, redes de intercambiadores de calor y sistemas de procesamiento total. Marcopoulos & Cornish (1985) aplican el MILP a la solución del subproblema de integración de calor en secuencias de destilación. Andreovich & Westerberg (1985) fueron los primeros en utilizar MILP para la solución de problemas completos de síntesis de secuencias de destilación. Sin embargo ellos no consideran el tipo importante de columnas acopladas térmicamente o complejas y suponen que las cargas del condensador y del rehedidor para una columna en particular son iguales. La última suposición es relajada aquí y, lo más importante, es que los tres tipos de columnas complejas son consideradas. Para el primer cálculo, se da un enfoque sistemático libre de heurísticas, el

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

separadores, etc. tiene que ser entero para evitar aproximaciones erróneas de algunas unidades de proceso (como 2.4 evaporadores se puede aproximar a 2 o 3 unidades). En particular, en secuencias de columnas de destilación, un programa mixto entero considera el número de columnas de destilación como la variable entera y como variables continuas al flujo y el calor intercambiado.

La principal desventaja en aplicar MIP es que se requiere una cierta cantidad de herramientas en la formulación de modelos buenos y eficientes y, para problemas grandes, es necesario tener controles adicionales para alcanzar la solución en un tiempo corto. Controles muy efectivos para problemas grandes serían un buen límite inferior (para un problema de minimización) y un buen punto inicial para el algoritmo de búsqueda.

Los paquetes de solución comercial usan variantes del algoritmo original de ramificación y acotamiento de Land & Doig (1960). El espacio de solución de los problemas enteros es un subconjunto del espacio continuo. Así, si la solución óptima continua es toda entera, entonces también es óptima para el problema entero. De otro modo, las operaciones de ramificación y acotamiento tienden a utilizarse y la solución óptima entera es entonces encontrada por una técnica de búsqueda involucrando soluciones de una secuencia de LPs, formulada por el relajamiento de las restricciones de integridad en las variables enteras, al mismo tiempo que se mantiene los límites apropiados. La solución LP en algunos nodos se usa como un límite superior (para problemas de minimización) para todas las soluciones enteras que puedan ser generadas de este nodo. El procedimiento de

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

cual sintetiza las columnas complejas y simples mientras que simultáneamente considera la integración de calor y la destilación multiefecto. Aunque los métodos presentados aquí son ilustrados con tres tipos de columnas complejas (figs. 2.17-2.19), otros tipos de columnas complejas pueden fácilmente ser incluidas siguiendo el procedimiento delineado aquí.

2.4 METODOS EMPLEADOS EN LA SINTESIS DE PROCESOS.

En los últimos treinta años, varios métodos y aproximaciones han sido propuestos, con la mayoría de ellos desarrollados en los últimos diez años. Todos estos métodos pueden ser divididos en varias categorías, en esta sección se tratará mas profundamente la siguiente división.

- Métodos heurísticos:

Estos métodos emplean reglas basadas en la experiencia y los conocimientos fisico-químicos de las técnicas de separación.

- Estrategias evolutivas:

Estas intentan identificar el mejor sistema de separación a través de una secuencia evolutiva de mejoramientos.

- Objetivos termodinámicos

Estos métodos caracterizan las secuencias de separación como óptimas, cuando éstas muestran altas eficiencias de energía, tomando en consideración un punto de vista económico.

- Métodos algorítmicos:

Emplean varios algoritmos desarrollados en el área de programación

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

lineal y no lineal. Cada clase de método tiene sus ventajas y desventajas como se verá más adelante en el capítulo III.

2.4.1 METODOS HEURISTICOS. JERARQUIA EN LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION.

Aquí la principal idea es aplicar reglas empíricas que son basadas en juicios de Ingeniería o la experiencia.

La ventaja con las heurísticas es que ellas permiten rápidamente localizar estructuras de secuencias que frecuentemente están cerca de las soluciones óptimas. Sin embargo, la dificultad es generalmente que no hay maneras razonables para establecer la calidad de tales soluciones las cuales algunas veces pueden en realidad ser bastante pobres. Por lo tanto las reglas heurísticas para un problema en particular pueden ofrecer contradicciones unas con otras, así que se requiere el asignamiento de "clases arbitrarias" o "esquemas ponderados" para resolver estos conflictos.

Dentro de las heurísticas encontramos dos subclases: aquellas que sólo tratan con la síntesis de secuencias de destilación y las referentes con destilación extractiva, cristalización, absorción y otros métodos de separación.

La jerarquía de la síntesis de separación (SSH) consiste de tres tipos de tareas especializadas (1) separación de fases (2) selección del método de separación, selección MSA; y (3) diseño del equipo de separación. La fig. 2.20, representa la jerarquía completa de

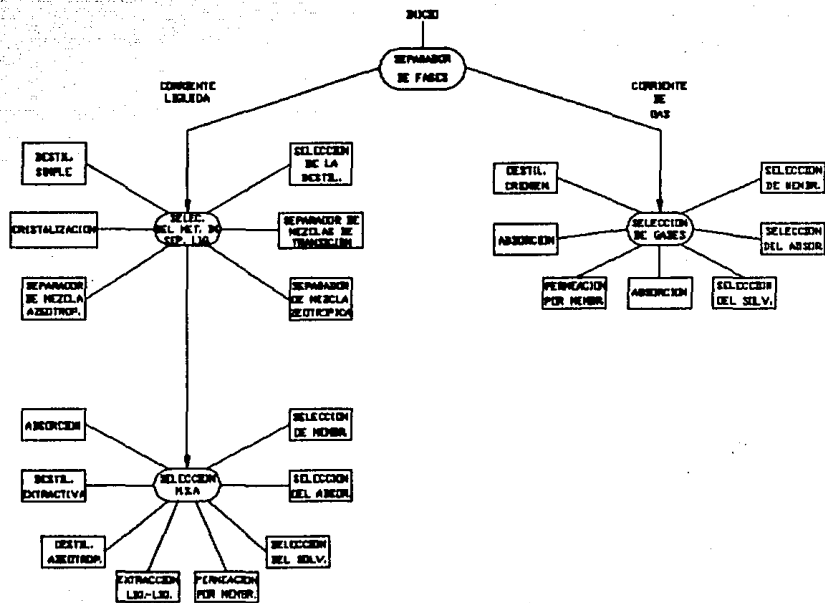


FIG. 2.20 JERARQUIA COMPLETA DE SELECCION/SECUENCIAMIENTO EN LA SINTESIS DE SEPARACION GENERAL

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

selección/secuenciamiento. Cada bloque indica una subtarea claramente definida independiente de la selección de separación completa y del problema desglosado.

Los métodos heurísticos publicados previamente han tratado con una versión simplificada de uno de estos bloques, la separación líquida. Estos métodos tratan casi exclusivamente con secuencias de separación.

Una de las heurísticas que es repetidamente citada en la literatura (King, 1980; Rudd, 1973) establece que el método de separación podría escogerse primero. En términos de los conceptos usados aquí, la heurística establece que toda tarea de selección podría hacerse primero.

El uso del método heurístico, en principio, reduce grandemente la magnitud del problema de síntesis de separación. Eliminando el problema de selección, se tendrá simplemente el problema de separación. Sin embargo se ha encontrado que el método de selección heurística es restrictivo.

Aunque se puede ganar cierta ventaja dentro de los muchos métodos de separación favorables para una separación dada, la selección final no puede ser hecha sino mucho después. Esto es especialmente verdadero para métodos que requieren agentes de separación másicos. Un juicio sobre el método de separación no puede ser hecho hasta que una lista de solventes potenciales o adsorbentes se posee. En turno la selección del solvente/adsorbente es influenciada por la composición de la mezcla a la cual es adicionado. Así el método de selección es dependiente de la tarea de elección del solvente/adsorbente y la secuencia de separación. La jerarquía de la síntesis de separación

SINTESES DE SECUENCIAS DE SEPARACION

refleja esta observación: tareas de selección y secuenciamiento son llevadas a cabo en todas partes.

La jerarquía es guiada por dos principios: antes que todo, los cálculos se reducen tanto como sea posible. Muchas decisiones en los niveles superiores de la jerarquía son basadas solamente sobre relaciones cualitativas. Información cuantitativa detallada es usada en comparaciones finales en el nivel del diseño.

El segundo principio es que la destilación es el método de separación de referencia al cual todos los otros métodos deben ser comparados. La destilación podría ser el primer método considerado para cualquier separación. Sin embargo, cuando otros métodos dan resultados comparables a la destilación, la confianza y la eficiencia hacen de ésta la elección probable.

Esto es reflejado en la jerarquía por la continua comparación al método de la destilación. Las siguientes secciones describen con más detalle la estructura de las tareas necesitadas para el análisis primario de mezclas líquidas.

- ETAPA DE SEPARACION DE FASES

En el nivel más alto de la jerarquía está la separación de fases (fig. 2.21). En la separación de fases se usan datos de equilibrio e información de puntos de ebullición normal para determinar si un sistema de separación líquido o gaseoso (o ambos posiblemente) es necesario. Hay dos propósitos de esta tarea: el primer propósito en esta tarea es dividir la corriente de entrada en subcorrientes de

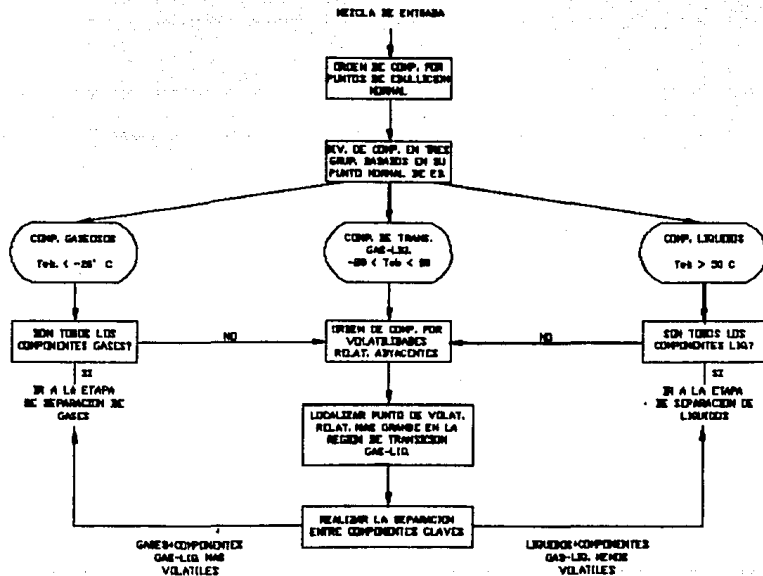


FIG 2.21 ETAPA DE SEPARACION DE FASES

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

componentes de volatilidad baja y alta, reduciendo la magnitud de la separación del problema. Aunque algunos de los componentes pueden distribuirse, dos problemas menores e independientes de secuenciamiento son creados. Estos problemas simplificados típicamente requerirán menor esfuerzo para resolverlos. Remover un componente de una mezcla multicomponente generalmente reducirá el número de posibles secuencias de separación por un orden de magnitud o más.

El segundo propósito de la tarea es reducir el problema de la selección del método para mezclas gaseosas, el número de separaciones potenciales es reducido a sólo 4 : absorción, adsorción permeación con membranas y destilación criogénica. Similarmente para líquidos, se necesita sólo considerar : destilación simple, destilación azeotrópica/extractiva, extracción líquido-líquido, adsorción, permeación con membranas, lavado y cristalización.

Un ejemplo simple ilustra la utilidad de la separación de fases. Thompson & King (1972) desarrollaron una ecuación que relaciona el número de componentes, N, a ser separados por M métodos de separación potenciales con el número de posibles secuencias, S :

$$S = \frac{(2N - 1)!}{N! (N - 1)!} M^{N-1} \quad (\text{EC. 2.34})$$

Para una mezcla de 6 componentes usando los 10 métodos de separación mencionados anteriormente, hay 4,200,000 posibles secuencias de separación. Considerando ahora 4 componentes en cada una de las subcorrientes líquida y gaseosa (es decir, dos componentes no claves distribuyen tanto al líquido como al gas). Tomando en cuenta 4

SINTESES DE SECUENCIAS DE SEPARACION

métodos de separación potenciales para la mezcla gaseosa y ocho métodos para la corriente líquida, el número de posibles secuencias es 320 y 2560, respectivamente. Para este caso, el número de posibles secuencias es reducido 99.9%.

El grupo de componentes dentro de las subcorrientes líquida y gaseosa se basa en la interrelación del punto de ebullición normal de un componente a la presión necesaria para realizar la separación de ese componente por destilación. Teóricamente, la destilación puede ser usada en el rango completo donde las fases líquida y vapor coexisten (es decir del punto de congelación al punto crítico). Sin embargo en la práctica la destilación a temperaturas y presiones extremas es frecuentemente cara. A esos límites, otros métodos de separación compiten favorablemente con la destilación.

Como gases se consideran a aquellos componentes con puntos de ebullición normal menores de -20°C . Las destilaciones de tales componentes requieren altas presiones (mayores de 25 atmósferas) y refrigeración. Los componentes que pueden ser condensados mediante agua de enfriamiento (punto de ebullición normal de 50°C o más) son considerados como líquidos. Las presiones de destilación son menores de 14.5 atm y pueden ser empleados condensadores totales.

Los componentes con punto de ebullición normal entre -20 y 50°C requieren de un análisis: los componentes en transición gas-líquido necesitan condensadores totales o parciales, con presiones de destilación entre 14.5 y 25 atm. En este punto en la decisión del proceso, no se puede hacer un claro juicio sobre el método de separación apropiado para compuestos de transición. Podría ser mejor

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

condensar estos componentes de modo de usar métodos de separación líquida. Por otra parte, las separaciones gaseosas son más económicas.

Una vez que el grupo de componentes es identificado, el próximo paso es calcular volatilidades relativas adyacentes a la presión y temperatura de la mezcla de entrada. En muchos casos habrá al menos un valor de volatilidad relativa adyacente grande entre dos componentes en la región de transición líquido-gas. La volatilidad relativa entre el gas menos volátil y el líquido más volátil será indudablemente grande. Los componentes con las volatilidades relativas adyacentes mayores en la región de transición líquido-gas son escogidos como los componentes claves.

La mezcla es dividida en corrientes de gas y líquido por una operación de equilibrio de fases a una presión y temperatura apropiada, de modo que la separación entre los componentes claves sea razonablemente nítida. Los líquidos con algunos compuestos de transición gas-líquido se direccionan al separador de líquidos. Similarmente los gases se direccionan al separador de gases.

- FUNCION DE LA SEPARACION DE LIQUIDOS

La fase siguiente en el proceso de síntesis involucra un esfuerzo preliminar en la secuencia de separación. El método enfatiza el uso de destilación para tantas separaciones como sea posible y darle preferencia. El propósito primario de la etapa separación de líquidos es realizar la mejor secuencia de destilación posible de aquellas separaciones donde la destilación simple es el método favorecido.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACIÓN

Separaciones que requieren agentes de separación másica o cristalización son direccionados a un nivel inferior en la separación.

El procedimiento de los cuatro pasos es descrito en la fig.2.22.

(1) Identificar corrientes de producto y especificaciones de producto. Esto asegura que no se realicen separaciones innecesarias.

(2) ordenar los componentes en orden decreciente de volatilidades relativas adyacentes. La volatilidad relativa es una fuerte indicación de la facilidad de la separación y la factibilidad de la destilación simple.

(3) Identificar todas las mezclas azeotrópicas que podrían interferir con la especificación de los productos. Los azeótropos requieren consideraciones especiales de procesamiento y podrían ser tratados con la información disponible.

(4) Realizar separaciones en el orden especificado por un conjunto de heurísticas secuenciales. Cada separación potencial es evaluada (mediante las secciones de separación azeotrópica/zeotrópica), como se muestra posteriormente. Si la destilación simple es el método favorecido, entonces la separación se lleva a cabo, y las subcorrientes resultantes son analizadas en la etapa de separación de líquidos. Si la destilación simple no es adecuada, la separación no se realiza, pero otros métodos de separación potencial son identificados. La siguiente separación especificada por la etapa de separación de líquidos es verificada para la aplicabilidad de destilación simple.

La separación de líquidos se guía por la consideración de que todas las destilaciones simples pueden realizarse primero. Esto se basa en la premisa de que la destilación, cuando es factible, es el

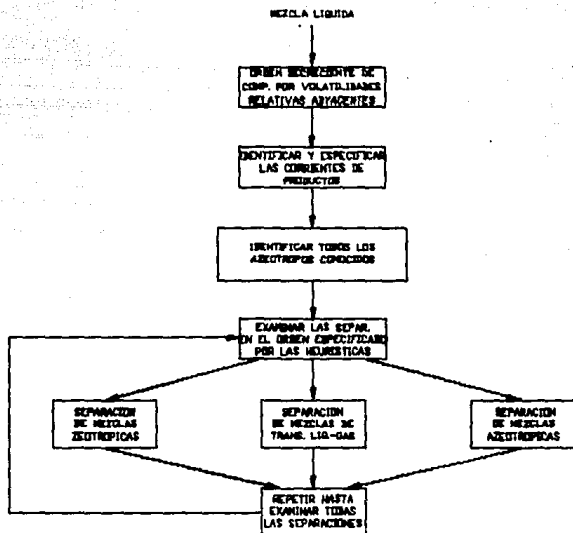


FIG. 2.22 ETAPA DE SEPARACION DE LIQUIDOS

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

método más fácil y rentable en separaciones multicomponentes. La presencia de componentes no claves tiende a complicar el diseño de procesos MSA (agentes de separación másica) y cristalizadores. Sin embargo como se mencionó previamente, el remover un componente de la mezcla reduce el número de posibles secuencias por un orden de magnitud o más.

Las separaciones azeotrópicas son difíciles de llevarse a cabo. Ellas deberán ser realizadas en la ausencia de otros componentes si es posible. Es importante identificar estas mezclas tan rápido como sea posible. Cuando se dispone de datos los azeótropos pueden ser identificados fácilmente. Sin embargo, para casos cuando la información disponible es incompleta el potencial de formación del azeótropo puede determinarse. Las siguientes 5 preguntas, en orden decreciente de certidumbre, son usadas para indicar la probabilidad de los azeótropos. En otras palabras, una respuesta de 'sí' a la pregunta 1 es una indicación bastante fuerte de que los azeótropos no están presentes, en cambio una respuesta de 'sí' a la pregunta 5 indica lo contrario.

1. ¿Son los componentes homólogos o isómeros de la misma familia química?
2. ¿Es la diferencia en puntos de ebullición normal mayor de 15°C?
3. ¿Son los componentes miembros de familias químicas improbables para formar azeótropos?
4. ¿Son los números de carbonos de los compuestos mayores de seis?

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

5. ¿Es la relación de presión de vapor menor que el coeficiente de actividad a dilución infinita?

$$P_{LK}^{SAT} / P_{HK}^{SAT} < \gamma_{HK} \quad (\text{EC. 2.35})$$

(Esta es una interrelación semicuantitativa, basada en las consideraciones de que la solución binaria es regular y las curvas del coeficiente de actividad son simétricas (Martin, 1975)).

Una vez que los azeótropos han sido identificados, una lista de heurísticas ordenadas es usada para obtener una secuencia de separación preliminar. La lista de heurísticas se basa en los trabajos de Hagdir & Liu (1983). Su lista se ha modificado para explicar azeótropos. Las heurísticas se aplican secuencialmente. Si una heurística no es aplicable, se considera la siguiente en la lista:

- (1) Remover materiales corrosivos y peligrosos primero.
- (2) Remover componentes reactivos primero
- (3) Realizar las separaciones entre azeótropos al último.

Las separaciones azeotrópicas tienden a ser difíciles y pueden ser realizadas en la ausencia de otros componentes.

(4) Realizar separaciones difíciles no azeotrópicas (zetrópicas) al último, pero antes de las separaciones azeotrópicas. Esta es una modificación de la heurística de Rudd (1973) & King (1980) estableciendo que separaciones de volatilidades relativas bajas podrían realizarse en la ausencia de otros componentes.

(5) Remover componentes en orden decreciente con respecto al porcentaje de la alimentación. Si la volatilidad relativa es razonable, un componente que constituye una fracción grande de la alimentación podría ser removido primero para disminuir el tamaño del

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

equipo de separación posterior.

(6) Favorecer separaciones 50/50. Si los porcentajes de la alimentación no varían ampliamente, favorecer secuencias que den productos equimolares y corrientes residuales con tal de que la volatilidad relativa sea razonable.

(7) realizar primero la separación con el menor coeficiente de dificultad de separación (CDS) Nath & Motard, 1981. El CDS cuantifica las tres últimas heurísticas:

$$CDS = \frac{\text{LN} \left[\frac{X_{LK}}{1 - X_{LK}} \frac{X_{HK}}{1 - X_{HK}} \right]}{\text{LN} \alpha_{LkHk}} \left(\frac{D}{D + B} \right) \left[1 + \left| \frac{D - B}{D + B} \right| \right]$$

(EC. 2.36)

El primer término es el número de etapas mínimas para destilación. El segundo y tercer términos penalizan distribuciones desiguales y destilaciones muy grandes. En esencia, el CDS es una medida de la aplicabilidad de la destilación.

Debe enfatizarse que la secuencia de separación especificada en este punto es preliminar. En la etapa de separación de líquidos se determina la mejor secuencia que puede ser hecha por destilación simple. Las separaciones que requieren métodos MSA (agentes de separación másica) o cristalización son identificados. El

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

secuenciamiento de estas separaciones se hace en un nivel inferior de la jerarquía.

- ETAPA DE SELECCION DE MEZCLAS ZEOTROPICAS/AZEOTROPICAS

Para cada separación seleccionada en la etapa de separación líquida, se debe determinar una lista de métodos de separación potenciales. Esta tarea es apoyada por una de las tres etapas de separación de mezclas.

Las separaciones de mezclas no indican un orden de métodos de separación del más favorecido al menos favorecido sino mejor dicho una lista desordenada de todos los procesos posibles. La etapa de separación de mezclas zeotrópicas se usa para separaciones entre componentes zeotrópicos (componentes no-azeotrópicos) fig. 2.23.

La etapa de separación de mezclas azeotrópicas es usada para separaciones entre componentes azeotrópicos fig. 2.24.

La etapa de separación de transición líquido-gas determina si un grupo de componentes identificados como componentes de zona de transición gas-líquido pueden condensarse o vaporizarse (es decir, determina si se emplean métodos de separación de gas o líquidos). La información cualitativa en este nivel de análisis es muy útil. Las etapas de separación de mezclas emplean criterios basados en datos de componentes puros, características del proceso, y si existen azeótropos presentes. Los resultados de estas simples comparaciones generalmente reducen el número de métodos potenciales a cuatro o menos.

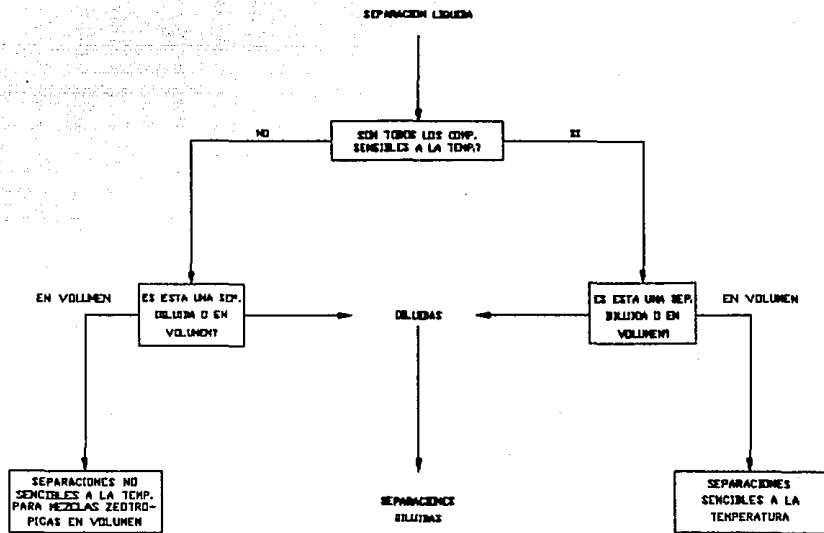


FIG. 2.23 SEPARACION DE MEZCLAS ZEOTROPICAS

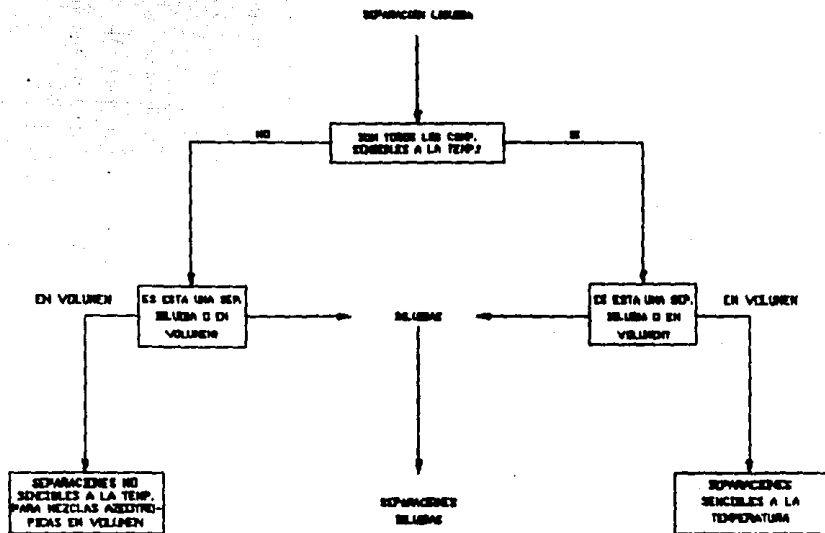


FIG 2.24 SEPARACION DE MEZCLAS AZEOTROPICAS

SINTEBIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

- IMPORTANCIA DE LAS PROPIEDADES DE LOS COMPONENTES PARA LA SELECCION DE LAS SECUENCIAS DE SEPARACION.

a) Volatilidad relativa

La volatilidad relativa, α , entre dos componentes indica la facilidad de separación por destilación simple. Para $\alpha > 1.5$, la destilación simple es generalmente el proceso más económico (posteriormente en características del proceso se mencionarán posibles excepciones a esta regla). Si $\alpha < 1.1$, la destilación requiere altos reflujos y un gran número de etapas. En estos casos la destilación es excluida. En el rango ($1.1 < \alpha < 1.5$), otros métodos de separación pueden competir con la destilación simple. Juicios firmes no pueden hacerse mediante estas comparaciones cualitativas.

b) Pendiente de la curva de presión de vapor

Si las pendientes de las curvas de presión de vapor de dos componentes difieren significativamente dentro de un intervalo aceptable de temperatura y presión, entonces la volatilidad relativa, puede generalmente ser alterada, posiblemente a más de 1.5. Los intervalos aceptables de presión y temperatura dependerán de las temperaturas del medio de calentamiento, agua de enfriamiento y la sensibilidad a la temperatura de los materiales que están siendo procesados.

SINTESES DE SECUENCIAS DE SEPARACION

c) Diferencias del punto de congelación

Los procesos de cristalización factibles requieren diferencias de 20 - 30 °C en el punto de congelación de los componentes puros. (Además, los puntos de congelación podrían estar en o arriba de temperaturas ambiente, así el gasto agregado de refrigeración es eliminado.

d) Similaridad de familias químicas

Los solventes físicos selectivos para procesos PSE logran separaciones sólo para componentes diferentes químicamente. Homólogos de similar tamaño e isómeros en la misma familia química generalmente no pueden ser separados por métodos PSE. Compuestos de peso molecular cercano y condiciones dentro de la misma familia química tienden a exhibir propiedades físicas comunes y de esta forma selectividad y solubilidad similar en solventes.

Conforme las diferencias en tamaño y forma aumentan, las propiedades físicas podrían diferir de manera considerable, igualmente para homólogos.

Típicamente, los puntos de ebullición de los compuestos de tamaño variable considerable, en la misma familia química serán suficientemente diferentes para permitir el uso de destilación simple.

Sin embargo, cuando la destilación simple no puede ser usada por otras razones (por ejemplo, sensibilidad de los compuestos a la

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

temperatura), los procesos PSE podrían no ser eliminados como métodos de separación potenciales para compuestos químicamente similares de tamaño variable considerable.

La efectividad de una membrana para una separación depende de la difusividad y la solubilidad de los diferentes componentes en la membrana. La solubilidad puede ser relacionada aproximadamente a la interacción entre los grupos funcionales en el material de la membrana y aquellos de los componentes a ser separados. Las diferencias en solubilidades de dos componentes dados será significativa sólo si los componentes en sí mismos contienen grupos funcionales diferentes. Así la permeación con membranas podría ser un método de separación factible si los componentes a ser separados están en diferentes familias químicas.

e) Características de estructura y tamaño

La permeación con membranas basada en los efectos de difusión y adsorción de tamiz molecular requiere diferencias de estructura y/o tamaño entre los componentes a ser separados. El efecto de la estructura y tamaño en la selectividad puede ser especialmente dramático para adsorción usando tamices moleculares de zeolitas y carbón activado.

Ciertos tamaños y formas de moléculas podrían ser excluidas completamente de los microporos del adsorbente debido a la distribución extremadamente restringida de tamaños de poro. Un número de separaciones de adsorción industrialmente importante son basadas en

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

este efecto de cribado molecular. Igualmente si las diferencias de tamaño y estructura son insignificantes, la adsorción podría ser una alternativa factible si las polaridades varían.

f) Diferencias de polaridades

Los adsorbentes comerciales pueden ser divididos en dos tipos: polares y no polares. Los adsorbentes polares, tales como la sílica gel, alúmina activada y zeolitas, tienden a envolver los compuestos polares.

Los adsorbentes no polares tales como el carbón activado, son más útiles para remover materiales menos polares de una mezcla de compuestos más polares. Para ambos adsorbentes: polares y no polares, se logra alta selectividad, cuando hay una gran diferencia de polaridad entre lo adsorbido y el líquido remanente. Sin embargo la adsorción podría ser una opción viable si las polaridades son similares, pero las diferencias de estructura y tamaño son grandes.

g) Intervalo de punto de ebullición

El intervalo de ebullición del componente a ser separado podría indicar el método favorecido. Por ejemplo, el lavado es preferido para separaciones de baja ebullición. Extracción líquido-líquido y destilación extractiva son mejores para alta ebullición.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

h) Sensibilidad a la temperatura

Algunos componentes podrían descomponerse o reaccionar desfavorablemente en la temperatura necesaria para la destilación. Por otra parte, el punto de congelación de un componente podría ser también alto para que la destilación se lleve a cabo a una presión y temperatura aceptable. Destilación simple, extractiva o azeotrópica no pueden emplearse en estas separaciones.

- CARACTERISTICAS DEL PROCESO EN LA ELECCION DE LA SECUENCIA DE SEPARACION.**(1) Tipo de separación (en volumen o diluida)**

A medida que la relación de destilado a fondos, D/B , se aleja de la unidad, otros métodos de separación compiten más favorablemente con la destilación. En general una destilación diluida no es económica. Una separación es considerada diluida cuando el destilado o fondos de una operación de destilación potencial es menor del 5% de la alimentación.

En resumen, una relación (D/B) destilado a fondos grande, tiene un mayor efecto económico en la destilación que una relación (D/B) pequeña. Mezclas compuestas de cantidades pequeñas de componentes de baja ebullición a ser separadas de una pequeña proporción (menor del 10-15%) de componentes de alta ebullición, requieren mayor cantidad de energía para vaporizar el 85-90% de la alimentación que aparecerá en

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

el destilado. Todas las formas de destilación (simple, extractiva y azeotrópica) pueden ser eliminadas como métodos potenciales para separaciones diluidas.

Durante los últimos 10 años, la adsorción ha ganado un lugar como un método de separación en volumen, además de su uso como herramienta de purificación diluida. Así la adsorción es un método potencial para separaciones diluidas y en volumen.

La permeación puede ser usada sólo para mezclas líquidas diluidas. Las separaciones líquidas en volumen no se hacen comercialmente. La cristalización está limitada a separaciones en volumen. La poca confianza y baja recuperación que llevan consigo los procesos de cristalización hacen inconveniente su uso como herramienta de purificación diluida. La extracción líquido-líquido y lavado pueden usarse para separaciones diluidas o en volumen, si se encuentra un solvente apropiado.

(2) Pureza

En la práctica, la destilación simple y la cristalización pueden alcanzar separaciones con altas purezas (99+%). La pureza de los productos obtenida por procesos PSE depende en gran medida del solvente escogido. Sin embargo, en principio, los procesos PSE pueden alcanzar separaciones de alta pureza si un solvente selectivo puede ser encontrado. Para la adsorción es similar, si un buen adsorbente selectivo es escogido, entonces se pueden alcanzar altas purezas.

La permeación con membranas por otra parte, tiende a proporcionar sólo un incremento en la pureza con cada paso a través de la membrana. Por lo tanto, productos de alta pureza no se obtienen con permeación

SINTEBIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

mediante membranas a menos que se planteé un esquema multietapas. Dependiendo de la selectividad de la membrana, al menos cuatro etapas son necesarias para alcanzar más del 90% de pureza, con una correspondiente relación de recuperación baja. De esta forma, si una alta pureza es necesaria, la permeación con membranas puede ser eliminada como un método de separación potencial.

(3) Recuperación

La recuperación es definida como el grado de separación obtenida entre corrientes de producto. En otras palabras una separación de alta recuperación produce dos productos de alta pureza. La destilación simple y los procesos PSE (con un solvente selectivo) pueden lograr separaciones de alta pureza. La recuperación en la adsorción puede ser alta para soluciones diluidas y en volumen dependiendo del adsorbente.

La recuperación en la cristalización se limita en la práctica por la presencia de los puntos eutécticos. En toda operación de cristalización, sólo un componente cristalino puro puede ser obtenido en un tiempo. Para sistemas simples, un segundo componente no cristalizará hasta que todo el primer componente sea removido de la solución. Sin embargo, si el sistema en cuestión forma un eutéctico, el segundo componente comenzará simultáneamente a cristalizar en alguna composición intermedia, Walas (1985). Aunque los dos cristales pueden algunas veces ser separados por diferencias de densidades, esto no es una opción razonable industrialmente. Así, el punto eutéctico representa un límite práctico en la recuperación de los procesos de cristalización. La recuperación fraccional máxima, R , de un componente

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

puede ser relacionada con la composición del punto eutéctico de la siguiente forma:

$$R = \frac{x_{fc} - x_{ec}}{x_{fc}(1 - x_{ec})} \quad (\text{EC. 2.37})$$

Donde x_{fc} es la fracción mol de alimentación del componente cristalizando y x_{ec} es la fracción mol eutéctica del componente cristalizando. En resumen la composición eutéctica determina cual componente puede ser obtenido como un cristal puro para una composición de alimentación dada. El componente para el que $x_{fc} > x_{ec}$ cristaliza primero.

La permeación con membranas es típicamente un proceso de enriquecimiento. La relación de fracciones mol de componentes es desplazada, pero el procedimiento no proporciona alta pureza. De esta manera si se requiere alta recuperación la permeación con membranas y la cristalización (dependen del punto eutéctico). Se pueden eliminar como método de separación potenciales.

(c) Separaciones Azeotrópicas.

Las separaciones azeotrópicas requieren del análisis adicional. (Ver fig. 2.24). Los sistemas que contienen azeótropos homogéneos no pueden ser separados por destilación simple a menos que la composición del azeótropo varíe con la presión. Cuando la composición cambia al menos 4-5% sobre una variación nominal de presión total, entonces es posible usar dos esquemas de columnas simples de destilación (Smith,

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

1963). Si la composición del azeótropo no es sensible a la presión, entonces la destilación simple puede ser inmediatamente eliminada como un método de separación potencial.

Existen un número de situaciones en las que diferentes métodos de separación posibles podrían emplearse para una separación dada. Las etapas de separación de mezclas determinan que métodos de separación podrían llevarse a cabo para una separación dada y también cuales métodos son claramente inadecuados.

Por ejemplo considerando que dos componentes claves están en diferentes familias químicas. los procesos PSE podrían ser considerados como métodos de separación potencial. Sin embargo, después de un análisis más detallado, no se encuentra un solvente con una selectividad suficiente (capacidad para hacer la extracción líquido-líquido competitiva). En este caso la extracción líq.-líq. puede ser eliminada como un método de separación potencial. Aunque en teoría éste podría ser usado.

El análisis en este alto nivel cualitativo no indica con bastante certidumbre si un método es favorecido sobre otro. Algunos métodos son más apropiados para ciertas situaciones especiales. Una lista de estas consideraciones especiales se proporciona en la tabla 2.2.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

T A B L A 2.2
SITUACIONES DE PROCESO ESPECIALES

METODO FAVORECIDO	CONDICION
EXTRACCION LIQUIDO-LIQUIDO	UNA SOLUCION DILUIDA (ENTRE 1 Y 5%) DE UN COMPUESTO POLAR DE EBULLICION ALTA; LA DESTILACION PODRIA REQUERIR VAPORIZACION DE UNA GRAN CANTIDAD DE LA ALIMENTACION.
LAVADO	UNA SOLUCION DILUIDA (< 5%) DE UN COMPONENTE DE EBULLICION BAJA; SI SE CUENTA CON UN SOLVENTE ALTAMENTE SELECTIVO, EL LAVADO PODRIA COMPETIR FAVORABLEMENTE CON LA DESTILACION.
DESTILACION EXTRACTIVA	UNA MEZCLA DE EBULLICION CERCANA EN LA QUE EL PRODUCTO ES EL COMPONENTE MENOS VOLATIL, EL AGENTE EXTRACTIVO SE INTRODUCE EN EL DOMO DE LA COLUMNA Y ALTERA LA VOLATILIDAD RELATIVA EN TODA ESTA.
DESTILACION AZEOTROPICA	UNA CONCENTRACION BAJA (< 10 - 15%) DEL COMPONENTE QUE FORMA UN AZEOTROPO DE EBULLICION MINIMA CON EL FLUIDO DE ARRASTRE, SE DIRIGIRA A LOS DOMOS Y LA CARGA DE VAPOR SE REDUCIRA DEBIDO A UNA BAJA CONCENTRACION DE ESTE COMPUESTO.
ADSORCION POR TAMIZ MOLECULAR	CUANDO LAS DIFERENCIAS DE POLARIDAD Y TAMAÑO SON GRANDES, LA SELECCION POR ADSORBENTES ES MEJORADA POR LA PRESENCIA DEL TAMIZADO MOLECULAR Y LOS EFECTOS DE POLARIDADES.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

- SINTESIS HEURISTICA DE SECUENCIAS DE DESTILACION

El intento más antiguo para optimizar síntesis de secuencias de destilación es acreditado a Lockhart (1947) quién examinó las tres secuencias encontradas en el proceso de la gasolina natural.

Los requerimientos de calor totales fueron considerados por Harbert (1957) como el factor más importante en la decisión del arreglo de columnas de destilación, por dominar esto el factor económico. En una modificación a la aproximación de Harbert, Rod & Marek (1959) identificaron el flujo de vapor total en la secuencia de destilación como el factor dominante en el costo.

Heaven (1969), en una investigación computacional extensiva con dimensionamiento detallado y costo de columna de destilación identificó diferentes reglas heurísticas que él usó en su estrategia de síntesis. Una aproximación heurística similar que promediaba varias heurísticas fue propuesta por Powers (1971).

Freshwater & Henry (1975) realizaron un trabajo computacional extensivo para analizar la validez y las regiones de aplicabilidad de las cuatro heurísticas sugeridas por Heaven. Ellos estudiaron el efecto de:

- a) La composición de una alimentación
- b) Volatilidad de los componentes
- c) Grado de recuperación de los componentes con respecto al costo anual total de todas las posibles secuencias de destilación para la separación de tres, cuatro y cinco componentes alimentados. De su

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

experiencia computacional aportaron las siguientes observaciones:

- Variaciones considerables ocurren entre las diferencias de costos de todas las posibles secuencias de destilación para una separación dada. Este punto justifica a posteriori todo el trabajo realizado en esta sección.
- Pequeñas variaciones (en los diferentes costos de secuencias alternativas) son en muchos casos restringidas a alimentaciones en las que los componentes menos volátiles son predominantes, mientras que diferencias mayores en los costos ocurren en la situación contraria.
- El valor absoluto del costo de todas las secuencias de destilación para una separación dada muestra variaciones considerables con la composición de la alimentación.

Una observación muy importante fue hecha cuando ellos notaron que en muchos casos la magnitud de las variaciones en el costo total sobre todas las posibles configuraciones no fue mayor del 10%. Esta característica fue particularmente evidente donde los niveles de recuperación mayores fueron requeridos y en muchas alimentaciones en la que los componentes menos volátiles fueron predominantes de acuerdo a Hlavacek (1978), tendencias similares han sido observadas por Kafarov et. al.(1975). Observaciones adicionales de los resultados incluyen lo siguiente:

- Si no hay separaciones difíciles, los componentes serán removidos en orden decreciente de volatilidad uno por uno como producto de domos (secuencia directa), excepto en casos donde un componente es predominante; en tal caso, este componente debe ser removido primero.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

- Las separaciones más difíciles se dejan al último.

2.4.2 METODOS EVOLUTIVOS.

Tradicionalmente, el desarrollo que han seguido la mayoría de los procesos industriales establecidos ha sido el siguiente: el grupo de investigación y desarrollo propone un diseño determinado para lograr los objetivos deseados, el cual, después de un análisis detallado y si resulta económicamente factible, se implementa comercialmente cristalizando en una o varias unidades productoras. Al pasar el tiempo se descubren posibles modificaciones al diseño que harían más simple o más económica la producción y éstas son incorporadas a las nuevas plantas, evolucionando paulatinamente el diseño original del proceso.

La técnica del diseño evolutivo tiene como meta la adquisición sistemática de la experiencia que permita proponer modificaciones al diseño base de un proceso, tendientes a mejorar la economía o confiabilidad del mismo, sin pasar por la etapa de implementación a escala comercial de cada una de las etapas intermedias.

El diseño evolutivo consiste en generar, empíricamente o a través de cualquiera de los otros métodos sistemáticos de diseño, una configuración base, de preferencia la más simple que sea posible, que satisfaga las restricciones impuestas al proceso y las especificaciones deseadas de los productos.

Esta configuración es evaluada, técnica y económicamente para determinar cuáles son los elementos que contribuyen más al costo del proceso o que pueden ser fuentes de problemas serios durante la puesta

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

en marcha y la operación. Una vez identificados dichos elementos se procede a seleccionar una modificación al proceso base que tienda a reducir la función objetivo seleccionada (costo global, confiabilidad, etc..) y se evalúa esta nueva configuración, si la modificación no tuvo éxito y la función objetivo no mejora, se rechaza la modificación introducida y se selecciona otra incorporándola al mismo proceso base. En cambio, si la modificación tuvo éxito, la nueva configuración se convierte en parte del proceso base y se repite el mismo procedimiento en forma iterativa hasta que no sea posible encontrar una modificación a la última configuración propuesta que logre mejorar la función objetivo seleccionada. fig. 2.25

2.4.3 OBJETIVOS TERMODINAMICOS.

La principal conjetura de esta aproximación es que los diseños caracterizados con altas eficiencias de energía están frecuentemente muy cerca de la solución óptima desde un punto de vista económico. Para ejecutar un análisis termodinámico se pueden derivar frecuentemente límites bajos en el consumo de energía, los cuales dan objetivos para el diseño de Ingeniería. Esta aproximación puede ser muy poderosa para reducir el problema combinatorio si la calidad de los límites es muy buena (es decir consumo de servicios mínimos en redes de recuperación de calor, y si la energía es en realidad el costo dominante en el proceso. La principal desventaja de esta aproximación es que consideraciones de costo de capital no pueden ser propiamente descritas, por lo que esto puede ser solamente hecho por

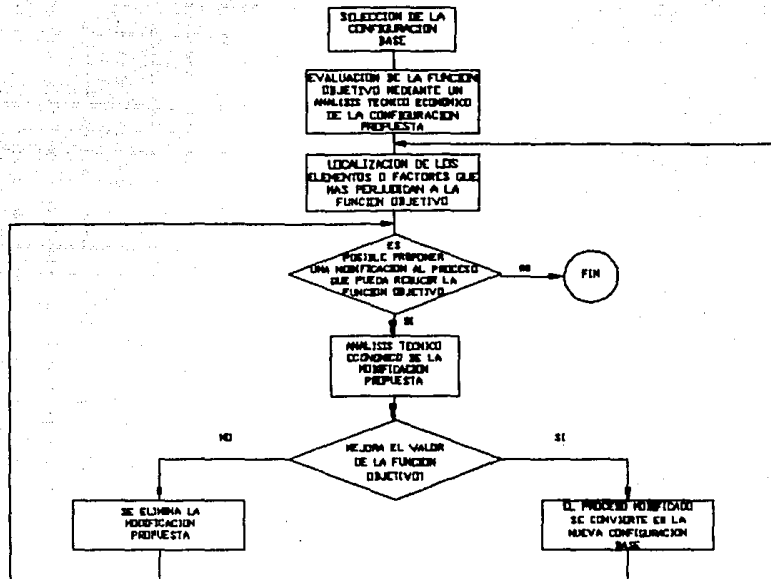


FIG. 2.25 PROCEDIMIENTO SEGUIDO DURANTE EL DISEÑO EVOLUTIVO

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

restricción de la eficiencia de energía (es decir a través de la mínima aproximación de temperatura). Además, puesto que los objetivos dan sólo una guía, se requiere que el Ingeniero de diseño tenga un panorama general así como que aplique ensayo y error para hallar las soluciones que están cerca de los objetivos predeterminados.

El funcionamiento termodinámico de estructuras de separación ha sido analizado por varios autores, King (1980) o Linnhoff y Carpenter (1981) Petyluk (1965), quienes propusieron argumentos termodinámicos para soportar los esquemas de destilación, mientras que Maikov (1972) y (1975) empleó tales principios para optimización y síntesis. En un artículo reciente, Gomez-Munoz y Seader (1985) aumentan el problema de síntesis por medio de funciones de objetivos termodinámicos; la estructura óptima para separar una mezcla multicomponente por destilación fué seleccionada para minimizar el trabajo reversible, o las pérdidas termodinámicas de trabajo en la separación. El método es eficiente y simple en su cálculo.

La utilidad, sin embargo, del enfoque termodinámico para problemas de síntesis no es claramente establecido desde un punto de vista práctico. Con buena razón, se puede argumentar que el factor económico es de primera importancia, así que el criterio de síntesis debe de optar por minimizar alguna combinación de los costos asociados con los requerimientos de energía de los procesos y la inversión de capital. Por esta razón principalmente, algunas industrias no están dispuestas a reconocer métodos que usen conceptos tales como "Trabajo mínimo Isotermico" o "Pérdidas de trabajo". En esta parte del trabajo, se discute el valor del enfoque termodinámico para la síntesis. Se

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

demostrará que, en algunos casos, "El consumo de trabajo neto" de una columna de destilación es la medida de funcionamiento más apropiada, y se proporciona además una expresión aproximada para estimarlo. También se discuten las aplicaciones para síntesis de sistemas de destilación e integración de calor. Primeramente, se revisarán los conceptos necesarios y relaciones del análisis de la segunda ley.

- ANALISIS DE LA SEGUNDA LEY

El consumo del trabajo neto, W_n , en un proceso de destilación es definido como (King, 1980):

$$W_n = \Sigma Q \left(1 - \frac{T_o}{T_i} \right) \quad (\text{EC. 2.38})$$

donde Q es la cantidad de calor entrando (+) o saliendo (-) del sistema a la temperatura T_i , T_o es la temperatura ambiente. Si algún trabajo de flecha es realizado en el proceso, se debe de añadir a la ec. 2.38. Cuando las temperaturas T_i no son constantes (Por ejemplo, la condensación de una mezcla), ellas son remplazadas por una temperatura media logarítmica T_{LM} , Linnoff y Carpenter (1981). W_n también es proporcional al incremento de entropía total para un proceso Isoentalpico, o, $W_n = \Delta H - T_o \Delta S_{total}$, donde ΔH es el cambio entalpico de los productos sobre la alimentación.

En el límite de un proceso completamente reversible, W_n se reduce al incremento en la energía disponible o "Exergía", e , de los productos sobre la alimentación, la cual es dada por:

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

$$W_{h,rev} = \Delta(E)_{corrientes} = \Delta H - T_0 \Delta S \quad (\text{EC. 2.39})$$

Esta es generalmente positiva para procesos de separación. Para separaciones nítidas con los productos y la alimentación a la misma temperatura (T_0) y presión, la ecuación 2.39 se reduce a la conocida expresión para el requerimiento de trabajo mínimo isotérmico:

$$W_{min,T_0} = -RT_0 \sum x_{iF} \ln(\gamma_i x_{iF}) \quad (\text{EC. 2.40})$$

Linnhoff (1979) y Linnhoff & Carpenter (1981) reportaron la exactitud de expresiones "cortas" para estimar los cambios de Exergía en las corrientes de proceso basado en los datos de balance de masa y calor junto con coeficientes de actividad para mezclas altamente no ideales. Las pérdidas de Exergía irreversible en un proceso de separación es siempre positivo y es dado por la formula:

$$\Delta(E)_{irrev} = -\Delta(E)_{corrientes} + W_h \quad (\text{EC. 2.41})$$

Observe que $\Delta(E)_{irrev} = T_0 \Delta S_{rrev}$, Linnhoff (1979), ya que $\Delta S_{total} = \Delta S_{rev} + \Delta S_{rrev}$.

Finalmente, una eficiencia termodinámica η puede ser definida como:

$$\eta = \frac{\Delta(E)_{corriente}}{W_h} \quad (\text{EC. 2.42})$$

- LA TERMODINAMICA Y LA SINTESIS DE SISTEMAS DE SEPARACION

Gomez-Muñoz y Seader (1985) reportaron que en la mayoría de los casos las soluciones de las funciones termodinámicas, concuerdan con los resultados obtenidos con el uso de funciones económicas (Tedder & Rudd, 1978). Por lo tanto, una pregunta razonable a formular es ¿ en cuales casos, las funciones de objetivos termodinámicos suplementan, o son preferibles a las funciones económicas para síntesis? Una buena respuesta es sencilla de explicar. Sin embargo, el criterio de la relación de vapor mínimo total, el cual puede ser derivado a partir de un análisis de las ecuaciones de costo, es mucho más simple y más rápido de evaluar que cualquiera de las ecuaciones termodinámicas, y los resultados de las secuencias de columnas serán óptimas o casi óptimas, así como las estimaciones de costo y tamaño de equipo. Malone (1985). Además, las funciones objetivo de carácter económico son generalmente más atractivas y convincentes para los Ingenieros de procesos. Sin embargo, puede resultar que algunos de los procesos alternativos tienen un funcionamiento económico comparable al basado en la relación de vapor mínimo total o costo anualizado. En este caso, las funciones termodinámicas pueden ser empleadas para fomentar una mejor elección.

De otra manera, una debilidad del análisis económico puede suceder cuando se intenta una integración de calor extensiva de la secuencia de separación. Entonces, un algoritmo que realice la síntesis de integración de calor simultáneamente puede ser aplicado (técnica de ramificación y acotamiento por Andrecovich & Westerberg, o

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

programación dinámica por Rathore). Sin embargo, a causa del esfuerzo computacional y gastos que estos métodos requieren, esto no es muy apropiado para los cálculos, en particular cuando el número de estructuras posibles es grande. (como en los casos donde las columnas complejas son consideradas). En resumen hay una fuerte evidencia de que una secuencia simple no integrada llega a ser óptima o casi óptima después de que ha sido integrada dentro del sistema de destilación (Stephanopoulos, 1982).

En tales casos, las funciones objetivos termodinámicas pueden tener una ventaja, ya que las secuencias pueden ser elegidas minimizando una cantidad termodinámica, evitando un complicado procedimiento de integración de calor. Por definición W_h es la diferencia entre las cantidades de trabajo que pueden haber sido obtenidas mediante el suministro de dos máquinas de calor reversible con cantidades de calor Q_h y Q_c . Por lo tanto, cuando se evalúa W_h , una suposición implícita es que el calor rechazado por los condensadores se usará para recobrar todo su contenido energético.

Por supuesto, esto no ocurre en una secuencia sin integración, donde el calor rechazado por los condensadores es generalmente degradado a la temperatura ambiente sin producir algún trabajo. Por otra parte, el calor rechazado por los condensadores de la columna de una extensa estructura de integración de calor es generalmente usado para llevarlo a los rehedidores de columnas adyacentes en caso de integración de calor dentro del sistema de destilación, o para el precalentamiento y ebullición de corrientes de proceso en caso de integración con los procesos conocidos. Por lo tanto, la elección de

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

secuencias por criterios termodinámicos no necesariamente exhibe el menor costo posible, pero generalmente tiene el mayor potencial para la integración de calor.

Otra importante cuestión es que la cantidad termodinámica debe ser elegida como una función objetivo. Por ejemplo, Gomez-Munoz y Seader (1985) maximizaron la eficiencia dada por la ecuación (2.42), mientras que Petluyk (1985) minimizó el trabajo neto ec. (2.38). En realidad, lo segundo parece ser la mejor elección. Cuando tratamos con un número de soluciones posibles, tiene más sentido hacer las selecciones basadas en consumos como valores absolutos (Por ejemplo, de energía, trabajo o dinero), que sobre la razón de esos consumos a sus límites inferiores para todas las alternativas. Por ejemplo, si se tienen dos alternativas costando 20 y 30 unidades respectivamente, pero el límite inferior (Por ejemplo, reversibilidad) para el primero es de 10 y para el segundo es 25, se deberá seleccionar el primero (ya que $20 < 30$), aunque la segunda tiene una mayor eficiencia ($25/30 > 10/20$).

Sin embargo, cuando las presiones de operación en las columnas de las varias alternativas son casi las mismas y la caída de presión a través de la torre es insignificativa, las dos funciones objetivos (η y W) esperan dar casi resultados idénticos (para todas las alternativas). Esto es porque la energía es una función de estado, dependiendo sólo del estado inicial y final de las corrientes. La definición convencional de los problemas de síntesis (Nath y Motard, 1981) considera la condición de alimentación a ser conocida e idéntica para todas las alternativas, y por lo tanto el estado inicial de las corrientes es la misma para todos los diseños. También, la pureza de

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

los productos se suponen conocidos, y propician que todas las columnas operen casi a la misma presión y tienen casi la misma caída de presión, el estado final de las corrientes (productos) también es lo mismo para todas las alternativas de diseño. Un ejemplo de esta situación es la destilación de una mezcla de especies que todas ebullicen a menos de 10°F sobre la temperatura del agua de enfriamiento. Entonces todas las columnas operan casi a la presión atmosférica y la variación de presión en la corriente de producto depende sólo de la magnitud de la caída de presión de la torre.

Bajo esta suposición, la energía incrementada de los productos sobre la alimentación es casi la misma para todas las alternativas de diseño y la evaluación de $\Delta(E)_{\text{corrientes}}$ en la ec. (2.42) es innecesaria. Pero cuando las columnas de una secuencia operan en un amplio intervalo de presiones, la energía difiere entre sistemas. Esto puede fácilmente ser evaluado usando los métodos de Linhoff y Carpenter (1981), los cuales evitan el cálculo de valores absolutos para la entalpía y entropía.

En resumen, los sistemas de destilación óptimos deben ser sintetizados con criterios derivados de consideraciones económicas (operabilidad, control y seguridad). Sin embargo, un análisis termodinámico puede ser útil cuando se lleva a cabo una integración de calor extensiva de columnas del sistema de destilación o con el resto de los procesos, y/o para discriminar entre las alternativas que tienen un funcionamiento económico comparable. En este caso, la minimización del consumo neto de trabajo es más conveniente, mientras que la selección de estructuras es también establecida para exhibir la

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

alta eficiencia termodinámica.

- EVALUACION DEL CONSUMO DE TRABAJO NETO EN UNA COLUMNA DE DESTILACION

Para una columna con un condensador y un rehervidor simple, la ec. 2.38 se reduce:

$$W_h = Q_R \frac{T_R - T_o}{T_R} - Q_C \frac{T_C - T_o}{T_C} \quad (\text{EC. 2.43})$$

Q_R y Q_C son la carga del rehervidor y condensador, mientras que T_R y T_C son las temperaturas medias de calentamiento y enfriamiento del rehervidor y condensador respectivamente. Sumando y restando las cantidades $Q_R(T_V - T_o)/T_V$ y $Q_C(T_D - T_o)/T_D$ en el lado derecho de la ec. 2.43 queda:

$$W_h = T_o \left\{ Q_R \left(\frac{1}{T_V} - \frac{1}{T_R} \right) + Q_C \left(\frac{1}{T_C} - \frac{1}{T_D} \right) + \left(\frac{Q_R - Q_C}{T_o} + \frac{Q_C}{T_D} - \frac{Q_R}{T_V} \right) \right\} \quad (\text{EC. 2.44})$$

Donde T_D y T_V son las temperaturas de destilado y fondos de la columna respectivamente. El primer término en la ec. 2.44 representa la pérdida de energía (trabajo) en el rehervidor de la columna, donde el calor se degrada desde la temperatura T_R (vapor) a la temperatura T_V (Smith y Van Ness, 1975); el segundo término es la pérdida de energía (trabajo) en el condensador de la columna, el tercero es el consumo de trabajo neto (energía) en la columna misma. por lo tanto se tiene:

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

$$W_h = W_{h,reb} + W_{h,cond} + W_{h,col} \quad (\text{EC.2.45})$$

Los dos primeros términos generalmente cuentan más en el consumo de trabajo, a causa de la gran diferencia de temperatura que existe en las columnas auxiliares. La integración de calor da como resultado una reducción del consumo total de trabajo neto por la reducción de estos dos primeros términos (aplicando pequeños ΔT_e entre el rehedor/condensador), mientras que el tercer término es casi invariable. Para separaciones isoentalpicas (comúnmente para mezclas relativamente ideales) ΔH (productos-alimentación) es próximo a cero. entonces $Q_m \approx Q_c \approx Q$ y las ecuaciones (2.44) o (2.45) se reducen a:

$$W_{h,col} = Q T_o \left(\frac{1}{T_D} - \frac{1}{T_W} \right) \quad (\text{EC. 2.46})$$

La ecuación 2.46 solo es correcta para separaciones nítidas de mezclas binarias; de otra manera, el calor no es transferido hacia y desde la columna a las temperaturas constantes T_W y T_D , sino sobre un intervalo de temperaturas correspondiente al rango de ebullición de los productos. Para casos más generales, T_D y T_W tienden a ser remplazados por la media logarítmica de temperatura del punto de burbuja y rocío de los productos (ver la ec. 2.38). Sin embargo, la ec. 2.46 es suficientemente precisa para cálculos de síntesis.

SINTEISIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

- EXPRESIONES CORTAS PARA EL CONSUMO DEL TRABAJO NETO

Si se supone que el vapor en la columna de destilación es un gas ideal (para presiones bajas o medias), que el volumen molar del líquido es insignificante comparado con el volumen molar del gas, y que el calor promedio de vaporización del componente i , ΔH_i , no es sensible a la temperatura en el intervalo de operación de la columna, entonces una ecuación similar a la relación de Clausius-Claperon (realmente válida solo para sustancias puras) puede ser escrita para el componente i de la mezcla:

$$\ln \left\{ \frac{P_{L,i}}{P_{L,r}} \right\} = - \frac{\Delta H_i}{R} \left(\frac{1}{T_s} - \frac{1}{T_r} \right) \quad (\text{EC. 2.47})$$

Donde $P_{L,i}$ es la presión de vapor del componente i puro a T_s . También, si la volatilidad relativa del componente i , α_i , es definida con respecto al componente r , entonces $\alpha_i = K_i/K_r$, donde $K_i = y_i/x_i$. Combinando estas relaciones se obtiene que $y_i = K_r \alpha_i x_i$ y sumando todas las y_i se llega a $K_r = 1/(\sum \alpha_i x_i)$. Por lo tanto, $K_i = \alpha_i K_r = \alpha_i / (\sum \alpha_i x_i)$. Suponiendo ahora una mezcla de líquido ideal y fugacidades no sensibles a la presión, la ley de Raoult es válida, la cual es $K_i = P_i/P_T$ donde P_T es la presión total. Combinando las dos últimas ecuaciones para K_i , se obtiene:

$$P_i = \frac{\alpha_i P_T}{\sum (\alpha_i x_i)} \quad (\text{EC. 2.48})$$

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

Escribiendo la ec. 2.48 para las condiciones en el destilado y fondos y substituyendo en la ec. (2.47), se obtiene:

$$\ln \left(\frac{O_D}{O_V} \right) - \ln \left(\frac{\alpha_{i,D}}{\alpha_{i,V}} \right) - \ln \left(\frac{P_{T,D}}{P_{T,V}} \right) = \frac{\Delta H_i}{R} \left(\frac{1}{T_D} - \frac{1}{T_V} \right) \quad (\text{EC. 2.49})$$

con

$$\alpha_k = \sum \alpha_{i,k} x_{i,k}, \quad i = 1, N. \quad (\text{EC. 2.50})$$

La ecuación 2.49 es válida para cualquier componente i y puede ser usada para obtener estimaciones aproximadas de $1/T_D - 1/T_V$ en forma directa, ya que los datos requeridos están frecuentemente disponibles en la etapa preeliminar de diseño.

Como una simplificación adicional, cuando la volatilidad relativa del componente C , α_C , es aproximadamente la misma en los domos y fondos de la columna, la ec. 2.49 se reduce:

$$\ln \left(\frac{O_D P_{T,V}}{O_V P_{T,D}} \right) = \frac{\Delta H_C}{R} \left(\frac{1}{T_D} - \frac{1}{T_V} \right) \quad (\text{EC.2.51})$$

Finalmente, suponiendo que ΔH_C es aproximadamente igual al calor de vaporización de la mezcla en el rehevador de la columna (una suposición realizada cuando consideramos sobreflujo molar constante en la torre), se puede escribir $Q_m = \Delta H_C V_m$. En este caso, las ecs. 2.46 y 2.51 dan una expresión simple para el consumo de trabajo neto en una columna de destilación:

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

$$W_{h, \text{col}} = T_o Q \left(\frac{1}{T_D} - \frac{1}{T_V} \right) = R V_m T_o \ln \left(\frac{\sigma_D P_{T, V}}{\sigma_V P_{T, D}} \right) \quad (\text{EC. 2.52})$$

Donde V_m es el flujo de vapor molar generado en el rehervidor. La ec. 2.52 produce $W_{h, \text{col}}$ directamente, y se evitan los cálculos iterativos del punto de burbuja para T_D y T_V . Para columnas con pocos platos (separaciones distribuidas o grandes α), la caída de presión es insignificante y la ec. 2.52 puede ser además simplificada suprimiendo los términos de presión. Glinos (1985) propone una ecuación similar para síntesis de secuencias de destilación con integración de calor, pero sin considerar la dependencia de la presión.

TABLA 2.3 CARACTERISTICAS DE LA ALIMENTACION PARA EL EJEMPLO DEL ALCOHOL

COMPOSICION	FRACCION MOL EN LA ALIMENTACION	Tb(°C)
A ETANOL	0.25	78.5
B i-PROPANOL	0.15	82.4
C n-PROPANOL	0.35	97.4
D i-BUTANOL	0.10	108.0
E n-BUTANOL	0.15	117.9

Para ilustrar el funcionamiento de las ecuaciones anteriores, se considera una mezcla de cinco-componentes presentados en la tabla 2.3. Las volatilidades relativas son calculadas como relaciones de presión obtenidas desde la base de datos DIPPR. El método fué verificado para

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

varias tareas de separación, calculando primero $(1/T_b - 1/T_w)$ exactamente a través de las evaluaciones de punto de burbuja y obteniendo estimaciones de la ec. 2.51, es decir, $1/T_b - 1/T_w = R \ln(\alpha_b/\alpha_w)/\Delta H_c$. Se considera una separación nítida y una presión uniforme de 1 bar en toda la columna. Además, ΔH_c fue tomado como el calor de vaporización del n-propanol (10 Kcal-mol^{-1}). Los resultados son presentados en la tabla 2.4, donde se estima un promedio de 5.6% de error, esta exactitud deberá ser suficiente para los cálculos. Se observa que el promedio de error no debe incrementarse cuando el valor promedio de las volatilidades en los domos y fondos es usado en la ec. 2.51.

TABLA 2.4. COMPARACION ENTRE EL METODO CORTO Y EXACTO DE LA DIFERENCIA DE TEMPERATURAS DEL DESTILADO Y DE FONDOS

SEPARACION	$\left[\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_w} \right] \times 10^4 \text{ (K}^{-1}\text{)}$		
	ECUACION (2.51)	MET. EXACTO	ERROR (%)
A/B	0.341	0.312	+9.3
B/C	1.200	1.139	+5.3
C/D	0.815	0.751	+8.5
D/E	0.618	0.665	-7.1
A/BC	1.123	1.045	+7.5
AB/C	1.417	1.339	+5.8
B/CD	1.357	1.284	+5.7
BC/D	1.233	1.158	+6.4
C/DE	1.167	1.131	+3.2
CD/E	1.276	1.271	+0.4
A/BCDE	1.547	1.452	+6.5
ABCD/E	2.125	2.088	+1.8
PROMEDIO			5.6

INVESTIGACION DEL CONSUMO DE TRABAJO NETO

Para una mezcla binaria ideal y una separación perfecta, la mínima relación de reflujo aproximada es $R_m = 1/x_F(\alpha - 1)$, donde x_F es la fracción mol del componente ligero en la alimentación. Para una alimentación de líquido saturado, $V_m = (r R_m + 1) D$ y $D \approx F x_F$. También, $o_D \approx \alpha$ y $o_W = 1$. De la ec. 2.52 se obtiene:

$$W_n^* = \frac{W_{n,col}}{RFTo} = \left(\frac{r}{\alpha - 1} + x_F \right) \ln \left\{ \alpha \left(1 + \frac{\Delta P}{F_T} \right) \right\} \quad (\text{EC. 2.53})$$

Una suposición común (King, 1980; Gomez-Muñoz y Seader, 1985) es que la caída de presión a través de la torre es insignificante. Esta suposición no es realista en algunos casos y puede tener un gran impacto en la conducta funcional de W_n para bajas volatilidades. Sin embargo, si se supone por un momento que $\Delta P \approx 0$. Entonces, W_n^{00} es una función lineal creciente de x_F con pendiente $\ln \alpha$, con el superíndice 0 indica que $\Delta P = 0$, una gráfica es presentada en la fig. 2.26 para condiciones de reflujo mínimo ($r=1$). Se observa que W_n^{00} llega a ser más sensible a la composición de la alimentación conforme la dificultad de separación disminuye alcanzando sus valores más bajos para grandes α y bajos x_F . W_n^{00} también es graficado como una función de la volatilidad en la fig.2.27. De estas gráficas vemos que W_n presenta una fuerte dependencia en la volatilidad relativa si α es menor (<2) y x_F es alto o bajo. Para separaciones fáciles (es decir, $\alpha > 3$) y para alimentaciones balanceadas ($x_F = 0.4 - 0.5$), W_n^{00} llega a ser casi independiente de α . Por lo tanto, se concluye que la

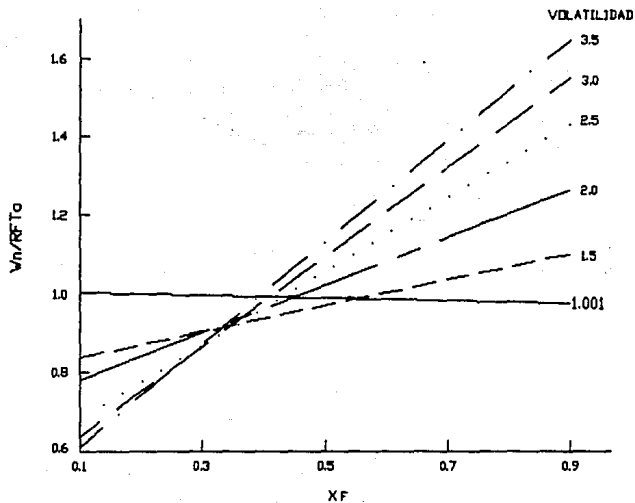


FIG. 2.26 CONSUMO DE TRABAJO MINIMO VS COMPOSICION DE LA ALIMENTACION PARA UNA MEZCLA BINARIA ($R/R_n = 1, \Delta P = 0$)

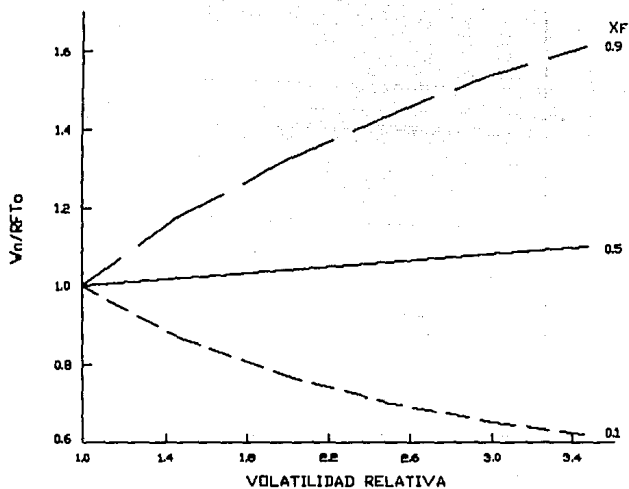


FIG. 2.27 CONSUMO DE TRABAJO MINIMO VS VOLATILIDAD RELATIVA PARA UNA MEZCLA BINARIA ($R/R_n=1, \Delta P=0$)

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

volatilidad relativa debe ser tomada en cuenta para estimar el consumo de trabajo neto cuando se trata con separaciones difíciles, o alimentaciones no balanceadas. King (1980) y Gomez-muñoz & Seader (1985) concluyeron que W_n tiende a ser independiente de α para la destilación de mezclas de ebullición cercanas. Glinos no está de acuerdo con este argumento, como se explicó anteriormente, cuando $\alpha \rightarrow 1$, W_n^0 se aproxima a r pero con pendiente $dW_n^0 / d\alpha = (x_F - r/2)$. En otras palabras, aunque $W_n^0 \rightarrow R \text{ ToF}$ para $\alpha \rightarrow 1$, W_n^0 puede ser fuertemente dependiente de α para α cercano a la unidad.

Ahora se considera el efecto de la caída de presión en W_n . El valor de ΔP es relacionado con la volatilidad como sigue; ΔP es aproximadamente proporcional al número de platos en la columna, N , el cual en turno es inversamente proporcional a $\ln \alpha$ a través de la ecuación de Fenske para N_{\min} . Por ejemplo, si suponemos una caída de presión de 0.25 psi por plato, el 99 % de pureza para ambos productos, $N \approx 4 N_{\min}$, y que la presión en los domos de la columna sea 20 psia, entonces $\Delta P/P_T \approx K/\ln \alpha$, con $K = 0.5$.

El coeficiente K puede variar aproximadamente entre 0.01 (presión alta, baja pureza en la destilación) y 1.5 (presión atm., alta pureza en la destilación), el interés es explorar el comportamiento cuantitativo de la ecuación 2.53 y no obtener resultados numéricos precisos.

La dependencia de W_n^* con la volatilidad y la composición de la alimentación es presentada en las fig. 2.28-2.30. Una comparación de las fig. 2.26 y 2.27 muestran una fuerte influencia de ΔP en W_n^* . Los resultados mencionados anteriormente para el caso $\Delta P \approx 0$, sin embargo,

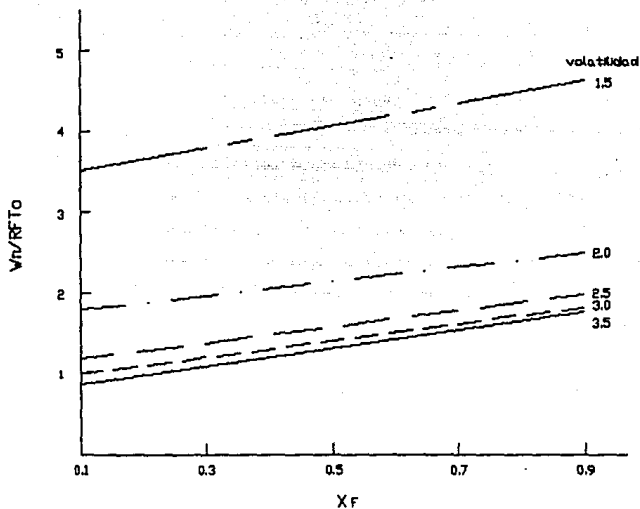


FIG. 2.28 CONSUMO DE TRABAJO MINIMO VS COMPOSICION DE LA ALIMENTACION PARA UNA MEZCLA BINARIA ($R/R_m=1$, $\Delta P=0.25$ PSI POR PLATO, 99% DE PUREZA POR PRODUCTO, 20 PSIA DE PRESION EN LOS DOMOS)

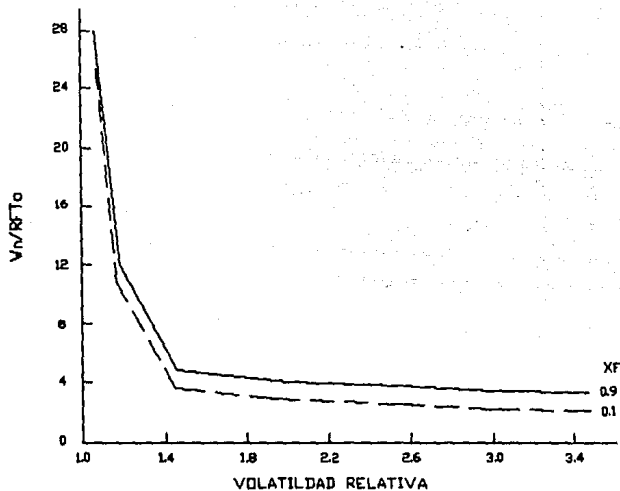


FIG. 2.29 CONSUMO DE TRABAJO MINIMO VS VOLATILIDAD RELATIVA PARA UNA MEZCLA BINARIA ($R/R_m=1, \Delta P=0.25$ PSI POR PLATO, 99% DE PUREZA POR PRODUCTO, 20 PSIA DE PRESION EN DOMOS)

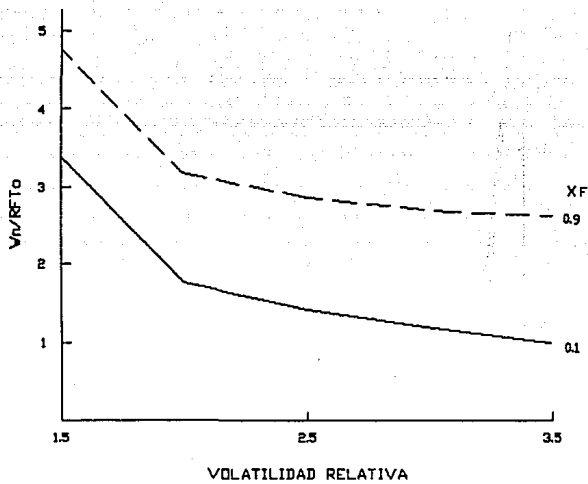


FIG. 2.30 PORCION AMPLIFICADA DE LA FIG. 2.29

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

son cualitativamente correctos y opuestos a las conclusiones derivadas por King (1980) y Gomez-Muñoz & Seader (1985), ya que la dependencia de W^* con α es igualmente muy fuerte para valores pequeños de α (fig.2.29). Además, W^* no debe aproximarse a la unidad, sino hacerse infinito, cuando la volatilidad se acerca a la unidad.

Estos resultados pueden ser resumidos como sigue: (a) para separaciones difíciles ($\alpha < 1.5$), W^* es fuertemente dependiente de α , (b) Para fáciles separaciones ($\alpha > 3.0$), W^* no es sensible con α , (c) Para una composición en la alimentación dada, un límite inferior en W^* es alcanzado cuando α se incrementa; y (d) W^* es una función de α incrementándose monótonamente.

Otra importante y muy útil propiedad del consumo de trabajo neto con el efecto de la caída de presión, es la débil dependencia de la temperatura y presión. En todos los ejemplos numéricos, W^{*0} fue aproximadamente constante, aún para una variación de 100° F en temperatura. Esto es debido a la débil dependencia implícita de W^* con T a través de la volatilidad, especialmente para ebullición cercanas. Para un incremento en la temperatura, las volatilidades disminuyen y así lo hace el factor σ_D/σ_V . Por otro lado, la razón de vapor se incrementa (separaciones más difíciles). Por lo tanto, de la ec. 2.52 se puede ver que los cambios debidos al incremento de T tienden a cancelarse, con W^* permaneciendo aproximadamente constante.

Para obtener una medida de la sensibilidad de W^{*0} con T , se evaluó su derivada con respecto a T , a $T = T_D$. Usando la analogía de la ecuación de Clausius-Clapeyron para una mezcla binaria A-B se establece la dependencia de α con T :

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

$$\alpha = \omega \exp \left\{ \frac{\Delta H_b - \Delta H_a}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \quad (\text{EC. 2.54})$$

Substituyendo en la ec. 2.53 y diferenciando se obtiene:

$$\left(\frac{dw_n^{*0}}{dT} \right)_{T=TD} = (C_a - x_F)(\Delta H_b - \Delta H_a) R^{-1} T_0^{-2} \quad (\text{EC. 2.55})$$

Con $C_a = (\omega \ln \omega - \omega + 1)/(\omega - 1)^2$. C_a varía entre 0.1 (para $\alpha = 24$) y 0.5 (para $\alpha = 1.05$). La ec. 2.55 presenta que w_h es casi constante con respecto a T cuando $\Delta H_a \approx \Delta H_b$ o para altas temperaturas T_0 . Además la pendiente puede ser positiva o negativa, dependiendo del valor de α y x_F . Por ejemplo, en el caso de benceno-tolueno, la pendiente calculada de la ec. 2.55 es -0.0005 (presión atmosférica, $x_F = 0.736$). En el caso extremo de Tolueno-Difenil, donde $\alpha = 102.7$ a 231°F , $\Delta H_a = 7930$, $\Delta H_b = 10,900 \text{ cal mol}^{-1}$ y $x_F = 0.958$, la pendiente es -0.0094 .

El análisis anterior fue realizado para una mezcla binaria, pero los resultados son cualitativamente correctos para mezclas multicomponentes, ya que la aproximación de la ec. 2.52 no es restringida a binarias. Además, el consumo de trabajo neto de una destilación multicomponente es mayor que el de una destilación binaria a causa de la presencia de componentes no claves.

- INTEGRACION DE CALOR DE TRENES DE DESTILACION

La aproximación $w_h^{*0} \approx \text{cte}$ con respecto a la temperatura y presión

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

es útil para la síntesis de secuencias acopladas térmicamente y columnas multiefecto. Ya que W^*_{ko} es constante para una cierta tarea de separación, éste no cambiará si la destilación multiefecto es aplicada, y es independiente del número de efectos usados. Para ilustrar estos puntos, se presenta un ejemplo de una destilación binaria de doble efecto de una mezcla benzeno-tolueno llevada a cabo por Marquez (1982). Todos los datos requeridos, así como los flujos de vapor calculados, cargas de calor, temperatura y el consumo de trabajo neto en todas las partes del equipo son dadas en la tabla 2.4 para una

TABLA 2.5 EJEMPLO DE DESTILACION DE DOBLE Y SIMPLE EFECTO

	UNA COLUMNA DE DESTILACION CONVENCIONAL	DESTILACION DE DOBLE EFECTO	
		1ª COLUMNA	2ª COLUMNA
F (mol h ⁻¹)	360	181.8	178.2
X _s	0.736	0.736	0.736
X _b	0.9997	0.9997	0.999
X _v	0.0134	0.0134	0.013
P (psia)	14.7	62.4	14.7
α _{mean}	2.5	2.1	2.5
T _d (°F)	177	276	177
T _w (°F)	231	339	231
T _{teq} (°F)	267	366	—
T _c (°F)	90	—	90
ΔH _b (BTU mol ⁻¹)	13.219	13.219	13.219
ΔH _v (BTU mol ⁻¹)	14.272	14.272	14.272
V (mol h ⁻¹)	553.04	331	273
Q _m (BTU h ⁻¹)	7 892.987	9 144.065	—
	(CONSUMO DE TRABAJO NETO) To	(BTU h ⁻¹ R ⁻¹)	
(Wn/To) _{cond}	1603.8	366.7	842.0
(Wn/To) _{reb}	565.6	169.5	366.7*
(Wn/To) _{colum}	968.3	508.4	444.0
(Wn/To) _{total}	3137.7		2330.6

*INDICA UN RESEVIVOR-CONDENSADOR COMUN

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

columna convencional simple, y para dos columnas de una estructura de doble efecto realizando exactamente la misma separación. Una fuerza motriz de 45°F fue considerada en el rehervidor-condensador de la estructura de la integración calor, y W_h/T_o fue calculado usando las ec. 2.45 Y 2.46. Se observa que la destilación de doble efecto propicia una disminución de $W_{h,total}$ en un 26 %, mientras que $W_{h,col}$ permanece casi constante (968.3 BTU h⁻¹ °R⁻¹ para el efecto simple y 444.0 + 508.4 = 952.4 Btu h⁻¹ °R⁻¹ para el doble efecto, encontrando una disminución de 1.6 %). Se observa también que la disminución del 26 % en $W_{h,total}$ podría ser substancialmente mayor si se usa una diferencia de temperatura menor de 45°F en el rehervidor-condensador.

Esta idea puede ser extendida a una secuencia de columnas, simplemente diciendo que el total de trabajo neto consumido en las torres de un tron de destilación es constante, el efecto de la caída de presión es despreciable, así :

$$W_{n,seq}^P = \sum_{i=1}^{n-1} (W_{h,col})_i = T_o \Sigma Q \Delta \left(\frac{1}{T} \right)_i = cte. \quad (EC. 2.56)$$

donde n-1 es el número de separaciones requeridas para separar una mezcla en n componente, Q es el calor suministrado hacia el rehervidor de la columna i y $\Delta(1/T)_i$ es el inverso del intervalo de temperatura sobre el cual el calor es degradado. Se puede observar que el calor a proporcionar disminuye si $\Delta(1/T)$ se incrementa. Esta es la idea de la destilación multiefecto. Las columnas son separadas en dos o más efectos, el calor requerido Q/P se reduce dramáticamente, donde p es el número de efectos.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

Además, en una secuencia de destilación, el intervalo de temperatura sobre el cual el calor es degradado puede ser incrementado por presión cambiando algunas columnas de modo que sus condensadores puedan combinarse con los rehedidores de otras columnas. Sin embargo, la integración de calor es limitada por varios factores, todos los rehedidores deben operar a temperaturas menores que aquellas del servicio de calentamiento más caliente y todos los condensadores a temperaturas mayores que aquellas del servicio de enfriamiento mas fría. También, las temperaturas de domos y fondos no deben exceder las temperaturas críticas de los productos, mientras que la presión de operación máxima y mínima permisible especificada por la Ingeniería formula un límite adicional en la integración de calor.

- LIMITES EN EL USO DE SERVICIOS.

Un límite inferior en el uso de servicios fué calculado por Andrecovich & Westerberg (1985) basado en la suposición de que el producto QAT para una cierta tarea de separación es constante. Glinos, (1985) argumenta que hay casos donde QAT puede variar significativamente con la temperatura y presión, y sugiere que el producto $QA(1/T)$ dado por la ec. 2.52, varía menos. Westerberg & Andrecovich (1985) proponen un método que explica la variación de QAT con T, pero su desarrollo es algo complejo por métodos cortos. En una secuencia de integración de calor, las fuerzas motrices de temperatura en los rehedidores y condensadores comunes se mantienen relativamente pequeñas. Por lo tanto, la contribución de los primeros dos términos

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

en el lado derecho de la ecuación 2.44 para el consumo total de trabajo neto se reduce significativamente. Si el calor adicionado/removido se lleva a cabo reversiblemente en todos los intercambiadores ($\Delta T \approx 0$), entonces la ec. 2.44 se reduce a la ec. 2.52 ya que el trabajo es consumido sólo en las columnas mismas. Además se supone que el límite impuesto por los niveles de servicios disponibles es lo primero a ser alcanzado, con T_{col4} y T_{col1} , siendo las temperaturas de los servicios de enfriamiento más fría y de calentamiento más caliente, respectivamente. Q_{min} es la cantidad de calor suministrado a un solo rehedidor de la secuencia de integración de calor a T_{col1} y removido desde el condensador a T_{col4} . Entonces, aplicando la ec. 2.56 dos veces, una vez para la secuencia no integrada y la otra para la secuencia de integración extensiva, se obtienen:

$$Q_{min} \geq Q_{min}^* = \frac{EQI \Delta(1/T)I}{\Delta(1/T)_{AVAIL.}} \quad (EC. 2.57)$$

donde $\Delta(1/T)_{av} = 1/T_{col4} - 1/T_{col1}$. Q_{min}^* es un límite inferior para el uso del servicio mínimo, Q_{min} , el cual puede ser alcanzado sólo asintóticamente, debido a la consideración de fuerzas motrices de temperatura infinitesimal en todos los intercambiadores. Un límite seguro para el uso de servicio mínimo puede ser encontrado si los ΔT s en todos los intercambiadores son tomados en cuenta.

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

- UN CRITERIO DE SELECCION PARA ALTERNATIVAS DE SECUENCIAS SIMPLES

Ya que el numerador de la ec. 2.57 es aproximadamente constante para un conjunto dado de tareas de separacion, el limite inferior, calculado para Q_{min} es aproximadamente independiente de temperaturas, presiones, número de columnas usadas y de la elección de la fuerza motriz para el intercambio de calor. Así, sin embargo aún cuando Q_{min}^* no pueda ser alcanzado, éste es útil para comparar alternativas de secuencias de columnas. Los cálculos son fáciles si se usa la ec. 2.52 con $F_{TD} = F_{TW}$ y los únicos datos necesarios son composiciones y volatilidades relativas. Además, las temperaturas T_{colD} y T_{colT} son comunes para todas las soluciones alternativas. Esto es, el consumo de trabajo neto en una secuencia de columnas es una medida del requerimiento de calor mínimo posible de esta secuencia después de la integración de calor, el cual proporciona una interpretación práctica de $W_{n,seq}^0$. Por lo tanto, se propone el siguiente criterio para ser usado cuando se considere la integración de calor en un tren de separación.

" De todas las alternativas de secuencias de destilación sin integración, elegir aquella que tenga el mínimo consumo de trabajo neto total".

Donde el consumo de trabajo neto, $W_{n,seq}^0$, es dado por la ecuación 2.52 y el efecto de presión es despreciable.

Este criterio expresa el efecto combinado del consumo de vapor de la secuencia no integrada y del potencial que esta secuencia tiene

SINTEISIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

para la integración de calor. Se observa que cuando $W_{\text{cold}}/T_0 = Q(1/T_0 - 1/T_W)$ es pequeño para una columna en particular, entonces al menos uno de los siguientes enunciados es verdadero.

- (a) V es pequeño, lo cual indica un diámetro de columna pequeño, y bajos costos de capital y servicios.
- (b) ΔT es pequeño, lo cual sugiere que la separación puede ser realizada con destilación multiefecto a un bajo costo de cambio de presión.
- (c) T_0 es grande, lo cual sugiere que el calor removido del condensador de esta columna puede ser usado en otra parte.

Aunque la discusión anterior supone únicamente integración de calor dentro del sistema de destilación, el concepto de consumo de trabajo neto se extiende a la integración con los demás procesos; por ejemplo, las altas temperaturas en los condensadores implican que el calor rechazado de las torres es potencialmente útil para el precalentamiento o ebullición de otras corrientes de proceso.

- SINTEISIS DE SECUENCIAS PARA MEZCLAS TERNARIAS

El criterio del consumo de trabajo neto mínimo, se puede utilizar para evaluar las regiones óptimas de las alternativas de secuencias directas e indirectas para el fraccionamiento de una mezcla ternaria, A-B-C, a su temperatura de burbuja. Considerando las volatilidades relativas constantes, la separación nítida y las condiciones de reflujo mínimo. La diferencia $\Delta W_{n, \text{seq}}^{*o}$ es calculada como:

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

$$\Delta W_{n,seq}^{*o} = \Delta W_{n,DIR}^{*o} - \Delta W_{n,IND}^{*o} \quad (EC. 2.58)$$

Usando las ecs. 2.52 y 2.56 con $\Delta P \approx 0$. La secuencia directa se prefiere cuando $\Delta W_{n,seq}^{*o} < 0$ y la indirecta se elige en el caso opuesto. En la fig. 2.31, las líneas de separación en las que $\Delta W_{n,seq}^{*o} = 0$, son dibujadas en el plano de composición, para varios valores de α , mientras α se mantiene constante con un valor de 4.0 (los resultados obtenidos para otros valores de α presentan una conducta similar). El flujo de vapor mínimo, usado en la ec. 2.52 fué evaluado empleando las ecs. de Underwood's, y la ec. $\Delta W_{n,seq}^{*o} = 0$ fué resuelta exactamente, usando un algoritmo iterativo. Esta ecuación es muy sensitiva para valores de x_B cercanos a cero, y fueron los casos en donde la convergencia no fué encontrada (Para $\alpha = 2.1$, $x_B = 0.02$).

Estos resultados concuerdan con aquellos de Gomez-Muñoz & Seader (1985) y Tedder & Rudd (1978), los cuales presentan muchas de las líneas, siendo estas rectas y paralelas a la línea $x_A = x_C$. La discrepancia puede ser debido a la diferencia en las aproximaciones; las líneas en la fig. 2.31 son basadas en la ec. 2.52, la cual es aproximada, pero basada en una solución exacta de la ec. 2.58. Así, fué posible localizar exactamente los puntos donde $\Delta W_{n,seq}^{*o} = 0$ para todas las composiciones. Por otra parte, Gomez-Muñoz & Seader (1985) evaluaron las pérdidas de trabajo ($\Delta(E)_{irr}$ en la ec. 2.41) con procedimientos más detallados que requieren el cálculo iterativo del punto de burbuja y el uso de programas de cómputo para evaluar las entalpías y entropías, pero localizaron solo las líneas de separación aproximadamente, mediante la realización de varios casos de estudio

 SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

(examinaron 5 mezclas de alimentación y 7 puntos de composición para cada una). Además, ellos no predicen el límite de las curvas para cantidades pequeñas de A, B o C en la alimentación.

La fig. 2.31 presenta que las heurísticas desarrolladas para secuencias sin integración de calor, "remover primero el componente más abundante" y "realizar las separaciones fáciles primero", proporcionan la tendencia correcta. La secuencia directa es óptima en muchas de las composiciones, excepto para $\alpha_A \ll \alpha_B$. Por ejemplo, cuando ambas separaciones son de dificultad equivalente ($\alpha_A \approx \alpha_B$), la secuencia directa deberá ser preferida para $x_A > 0.12$. Para $\alpha_B \leq 1.5$, la secuencia directa es elegida para casi cualquier composición en la alimentación, mientras que la indirecta es mejor para $\alpha_B \approx 3.5$. Por lo tanto, este trabajo está de acuerdo con los resultados de Sophos, (1981) quien argumentó que las heurísticas usadas comúnmente son también buenas para elegir la mejor opción entre las secuencias para la integración de calor aunque las secuencias no integradas pueden no ser óptimas, como argumenta Malone (1985). Además, la heurística "Favorecer separaciones equimolares" es a menudo incorrecta, en particular cuando esta favorece a la secuencia indirecta ($x_A + x_B \approx x_C$) como se presenta en la fig. 2.31.

Los resultados no están de acuerdo con las conclusiones de Gomez-Munoz & Seader (1985) o Tedder & Rudd (1978) en donde las composiciones de la alimentación son más importantes que las volatilidades relativas. Especialmente para α entre 2 y 3, la fig. 2.31 muestra que la secuencia óptima es muy sensible a las volatilidades relativas. Esto confirma que las heurísticas no pueden

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

ser usadas con seguridad para síntesis ya que ellas toman en cuenta el efecto de las volatilidades o composiciones, pero no ambos. Las secuencias de columnas deben ser basadas en criterios cuantitativos que consideren los efectos combinados de composición y volatilidad, tal como el presentado en este trabajo.

Es también interesante comparar las regiones óptimas descritas en la fig. 2.31 con las correspondientes regiones óptimas obtenidas del criterio del flujo de vapor total mínimo, presentado en la fig. 2.32. En tal caso, las líneas de separación son obtenidas de la ecuación $V_{DIR} = V_{IND}$, donde V es el vapor total generado por los rehedidores de una secuencia. Las curvas tienen forma similar en ambos casos y el efecto de las composiciones de la alimentación es también similar, pero existe una fuerte discrepancia en la posición de las líneas de separación acorde a α .

Actualmente, el ordenamiento de las líneas es invertido, la región óptima de la secuencia directa es mayor para α aproximándose a ∞ . De hecho, Glinos y Malone probaron que la heurística "realizar la separación más fácil primero" es incorrecta en varios casos como puntualizan Malone, (1985) y Glinos & Malone (1988). Esta incompatibilidad de los dos análisis, vapor mínimo y trabajo neto, es obviamente debida al término logarítmico de la ec. 2.52. Puesto que el flujo de vapor total es bajo ciertas suposiciones, proporcional al costo total anualizado de una secuencia de columnas (Malone, 1985); éste es preferido como un criterio de síntesis. Sin embargo, como se discutió al principio, un procedimiento de síntesis que minimice el consumo total de trabajo neto puede ser ventajoso en casos donde se

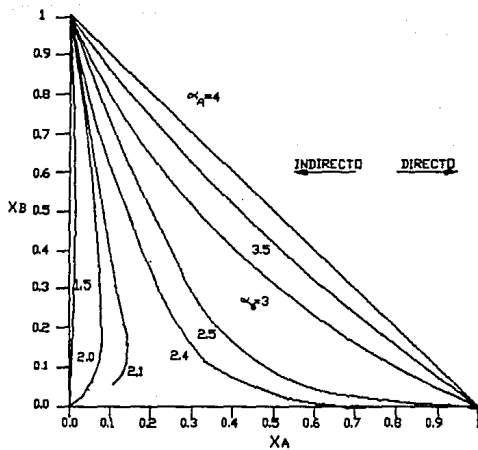


FIG. 2.31 REGIONES OPTIMAS PARA LAS SECUENCIAS DIRECTAS E INDIRECTAS EN EL PLANO DE COMPOSICION DE ALIMENTACION, CON α_b COMO PARAMETRO ($\alpha_A = 4$): CRITERIO DEL CONSUMO DE TRABAJO MINIMO

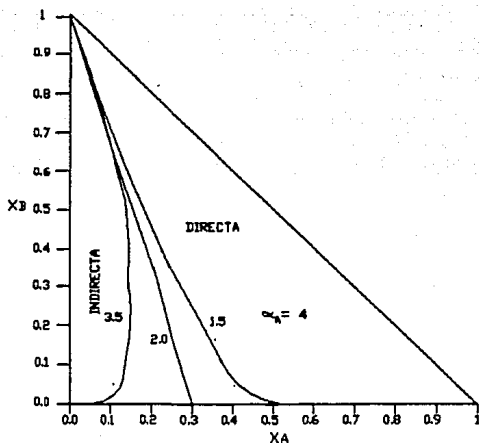


FIG. 2.32 REGIONES OPTIMAS PARA LAS SECUENCIAS DIRECTAS E INDIRECTAS EN EL PLANO DE COMPOSICION DE LA ALIMENTACION, CON α_A COMO PARAMETRO ($\alpha_A = 4$): CRITERIO DEL FLUJO DE VAPOR MINIMO

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

intente la integración de calor subsecuente de las columnas de destilación. Alternativamente el criterio del consumo de trabajo neto puede ser aplicado para encontrar si alguna de las secuencias exhiben el mínimo o casi el mínimo costo total para integrarse térmicamente.

- CONSUMO DE TRABAJO NETO EN COLUMNAS COMPLEJAS

La ecuación 2.52 puede ser aplicada directamente para evaluar el consumo de trabajo neto en torres complejas (corrientes laterales, secciones laterales, columnas Petlyuk, prefractionadores, etc.). Si más de un condensador o rehervidor está presente, deberán ser añadidos más términos para tomar en cuenta las unidades adicionales, así que cada término se refiere a un flux de calor simple, Q , y la temperatura a la cual Q entra y sale de la columna, $T_{i,in}$ y $T_{i,out}$. Así, suponiendo que $\Delta P=0$:

$$\begin{aligned} W_{h,col} &= T_o \sum \left\{ Q \left(\frac{1}{T_{i,out}} - \frac{1}{T_{i,in}} \right) \right\} = \\ &= T_o R \sum \left\{ V_i \ln \left(\frac{\sigma_{i,out}}{\sigma_{i,in}} \right) \right\} \quad (\text{EC.2.59}) \end{aligned}$$

donde V_i corresponde al vapor generado por Q_i . Por ejemplo, para una columna con un agotador lateral, donde las condiciones del producto intermedio son denotadas con un subíndice S, la ecuación 2.59 deberá ser escrita como $W_{h,col} = RT_o \{ V_w \ln(\sigma_w/\sigma_w) + V_s \ln(\sigma_w/\sigma_s) \}$, donde V_w y V_s son los vapores generados en el fondo y el rehervidor lateral, respectivamente.

Ecuaciones simples para predecir el flujo de vapor mínimo para

SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION

columnas complejas pueden ser encontrados en Glinos & Malone (1985) o Glinos & Malone (1988). Por lo tanto el procedimiento de síntesis para secuencias con columnas complejas es análogo al tratamiento presentado para columnas simples.

CAPITULO III

METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

3. METODOS ALGORITMICOS

La idea principal en esta aproximación es formular la síntesis de una secuencia como una optimización del problema. Esta requiere una representación explícita e implícita y un conjunto específico de secuencias entre las cuales la solución óptima puede ser seleccionada. La ventaja de esta aproximación es que provee un cuadro más

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

sistemático para mejorar una variedad de problemas de síntesis de procesos, y describe más rigurosamente características tales como interacciones y costos de capital. Además esta aproximación tiene una importante propiedad capaz de generar automáticamente estructuras de secuencias. La desventaja, sin embargo es que el tiempo computacional puede ser bastante grande cuando los problemas no son propiamente formulados, y por lo tanto, la optimización de la solución puede únicamente ser garantizada con respecto a las alternativas que se consideraron en la representación del problema.

Esto muestra que la distinción entre las categorías no es tan clara. Por ejemplo, ambos métodos, termodinámicos y algorítmicos hacen uso de heurísticas en una manera u otra.

Recientemente ha existido considerable escepticismo sobre la utilidad de los métodos algorítmicos que son basados en la optimización.

Los Principales argumentos contra el uso de estos métodos para la síntesis de procesos pueden ser listados como sigue:

1. Desplazan a los Ingenieros de diseño en las decisiones que se hagan del proceso.
2. Proporcionan muy poco del por qué en la toma de decisiones.
3. Son computacionalmente caros.
4. No garantizan optimización verdadera ya que las alternativas que son potencialmente mejores podrían no ser incluidas en la representación del problema.

En particular el principal problema parecería ser de cómo los

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

métodos algorítmicos serían adecuados en relación a las otras aproximaciones en síntesis de procesos.

Aunque no hay duda del considerable progreso que se ha llevado a cabo en síntesis de procesos con métodos heurísticos y termodinámicos, particularmente con redes de intercambio de calor, es además cierto que estos métodos poseen un número de importantes limitaciones. Por ejemplo no proporcionan un cuadro común para sintetizar una variedad de modelos o sistemas de procesamiento completo.

Además los objetivos heurísticos y termodinámicos tienden a conducir todas las decisiones de síntesis al Ingeniero lo cual puede tornarse tedioso cuando los sistemas son muy grandes. Finalmente estos métodos pueden además fallar, ya que ellos tienden a hacer muchas restricciones o son sujetos a la interpretación particular y habilidad del Ingeniero de diseño en su aplicación.

Ya que ni los métodos heurísticos, termodinámicos y algorítmicos ofrecen una manera simple de atacar problemas de síntesis de procesos una estrategia más viable, podría combinar las diferentes aproximaciones. Por ejemplo, la heurística puede ser utilizada en la selección preliminar para descartar alternativas que no son prometedoras, o puede ser utilizada para generar magníficos estimados iniciales.

La técnica de objetivos termodinámicos sería usada para desarrollar límites o representaciones que eliminan considerables alternativas que no son energéticamente eficientes.

Los métodos algorítmicos pueden ser usados para generar automáticamente secuencias integradas en las que las interacciones y

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

puntos del modelado son tomados totalmente en cuenta.

En esta forma, combinando propiamente las aproximaciones dentro de un ambiente computacional interactivo el Ingeniero de diseño podría quedar completamente al mando de las decisiones del proceso.

Cuando las soluciones no son satisfactorias desde un punto de vista práctico él tiene la capacidad de imponer restricciones adicionales en el método algorítmico o hacer modificaciones a la estructura de las secuencia.

3.1 ALGORITMO MILP PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION SIN INTEGRACION DE CALOR.

Habiéndose mostrado la derivación de una superestructura para el problema de separación basado en destilación (2.1.2), el cual involucra diferentes alimentaciones y productos multicomponentes que tiene incluidas muchas configuraciones de interés, se propone una formulación MILP que puede encontrar la secuencia de columnas de destilación de costo total óptimo, así como la distribución de by-pass. Para formular matemáticamente el problema de separación basado en destilación con diferentes corrientes de alimentación multicomponente en corrientes de productos multicomponentes, se definen los siguientes índices y conjuntos de índices.

Índices

k corriente de alimentación

i componente

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

j	columna de destilación
l	corriente de superestructura
n	entrada a la columna de destilación
d	corriente de destilado de la columna de destilación
b	corriente de fondos de la columna de destilación
s, s ^o	separador, separador inicial
m, m ^f	mezclador, mezclador inicial
conjunto de índices	
FS	corrientes de alimentación
I	componentes
J	columnas de destilación
L _k	corrientes en superestructura de la corriente de alimentación k
N _j	entrada a la columna de destilación j
D _j	destilado de la columna j
B _j	fondos de la columna j
D _j ⁱ	componente i en el destilado de la columna j
B _j ⁱ	componente i en los fondos de la columna j
S _k	separadores en la superestructura de la alimentación k
M _k	mezcladores en la superestructura de la corriente alimentación k
S _k ⁱⁿ	corriente de entrada a S _k
M _k ⁱⁿ	corriente de entrada a M _k
S _k ^{out}	corriente de salida de S _k
M _k ^{out}	corriente de salida de M _k
a	tiempo de pago
C _{cu}	costo del servicio de calentamiento

 METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

C_{HU} costo del servicio de enfriamiento

f, F flujos

K coeficiente de carga de calor

Q_c carga de calor del condensador

Q_R carga de calor del rehervidor.

U límite superior

y variables enteras

Z composiciones constantes

α costo fijo asociado con la columna de destilación

β pendiente de la línea relacionando el costo de la columna y el flujo

γ coeficiente del costo del intercambiador de calor.

La formulación matemática del problema de separación basado en la destilación involucra diferentes alimentaciones y productos multicomponentes teniendo la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \text{Min } & \frac{1}{\alpha} \sum_{j \in J} \left[\alpha_j \gamma_j + \sum \beta_j^k F_j^k \right] + \frac{1}{\alpha} \sum_{k \in K} \sum_{j \in J} \gamma_j^k (Q_{c_j}^k + Q_{R_j}^k) + b' \\ & \left[C_{HU} \sum_{k \in K} \sum_{j \in J} Q_{R_j}^k + C_{CU} \sum_{k \in K} \sum_{j \in J} Q_{c_j}^k \right] \end{aligned} \quad (\text{EC.3.1})$$

sujeto a

(a) Balance de masa para los separadores

$$\sum_{l \in S_k} \text{in}_l^k f_l^k - \sum_{l \in S_k} \text{out}_l^k f_l^k = 0; \quad k \in FS, 1 \leq L_k \quad (\text{EC.3.2})$$

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

(b) Balance de masa para cada componente en mezcladores antes de las separaciones.

$$\sum_{l \in L_k^{in}} r_l^k z_{li}^k - \sum_{l \in L_k^{out}} r_l^k z_{li}^k = 0; \quad (\text{EC.3.3})$$

$$k \in \text{FS}, \quad i \in I, \quad l \in L_k$$

(c) Restricciones de separación para cada componente y cada separación j .

$$r_n^k z_{n,l}^k - r_d^k z_{d,l}^k = 0; \quad i \in D_j^i, \quad n \in N_j, \quad d \in D_j, \quad k \in \text{FS} \quad (\text{EC.3.4})$$

$$r_n^k z_{n,l}^k - r_b^k z_{b,l}^k = 0; \quad i \in B_j^i, \quad n \in N_j, \quad b \in B_j, \quad k \in \text{FS} \quad (\text{EC.3.5})$$

(d) balances de masa para cada componente en los mezcladores finales.

$$\sum_{l \in M^{in}(m^f)} r_l^k z_{li}^k = C_{li}^f, \quad m^f \in M_k^f, \quad k \in \text{FS}, \quad i \in I \quad (\text{EC.3.6})$$

(e) Especificaciones para flujos

$$r_l^k = F_{k,total}, \quad l \in S_k^{in} (S^0), \quad k \in \text{FS} \quad (\text{EC.3.7})$$

$$r_n^k = F_j^k, \quad n = j, \quad k \in \text{FS} \quad (\text{EC.3.8})$$

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

(f) Restricciones de carga de calor

$$Q_{c,j}^k = K_j^k F_j^k, \quad j \in J, \quad k \in FS \quad (EC.3.9)$$

$$Q_{c,j}^k = Q_m^k, \quad j \in J, \quad k \in FS \quad (EC.3.10)$$

(g) Restricciones lógicas

$$F_j^k - U y_j^k \leq 0; \quad j \in J, \quad k \in FS \quad (EC.3.11)$$

(h) Restricciones no negativas

$$r_i^k \geq 0, \quad r_n^k \geq 0, \quad r_d^k \geq 0, \quad F_j^k \geq 0, \quad j \in J, \quad k \in FS \quad (EC.3.12)$$

$$Q_{c,j}^k \geq 0, \quad Q_m^k \geq 0; \quad j \in J, \quad k \in FS \quad (EC.3.13)$$

(i) Restricciones 0-1.

$$y_j^k = 0-1; \quad j \in J, \quad k \in FS \quad (EC.3.14)$$

La función objetivo representa el costo total anual mínimo que involucra el costo de inversión para las columnas de destilación y los intercambiadores de calor así como los costos de operación. El costo de inversión de una columna de destilación es una función del flujo de alimentación a la columnas, la relación de reflujo, el número de platos, la temperatura de la columna, la presión de columna y las propiedades físicas de los componentes de la alimentación. Habiendo considerado que la presión y la temperatura de cada columna son

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

fijadas, la relación de reflujo mínimo R_{\min} y el mínimo número de platos pueden entonces ser calculados.

El reflujo de operación es elegido como 1.2 R_{\min} . Entonces el número de platos para un producto puro especificado puede determinarse. Así la única variable restante es el flujo de la alimentación a la columna de destilación. Si todas las otras variables permanecen inalterables el costo de una columna de destilación aumenta con un aumento en el flujo. Este incremento refleja el factor de la regla de los seis décimos para escalar costos de equipo. En este trabajo una aproximación lineal de la regla de los seis décimos es utilizada (es decir, $\text{cost} = \alpha_j^k + \beta_j^k * F_j^k$, Andreovich & Westerberg, 1985), donde α_j^k es un cargo fijo y β_j^k es la pendiente de la línea que relaciona el costo con el flujo de alimentación F_j^k . Los coeficientes α_j^k y β_j^k son determinados por la realización de simulaciones de cada columna al 20 y al 80% de los flujos de alimentación total. Puede observarse que una función de costo predice el costo correcto a flujos altos y medios lo que es aplicable para columnas de destilación.

El 20 y el 80% fueron seleccionados sobre los fundamentos de que proporcionan una mejor aproximación para el intervalo de flujos medios y altos según los resultados obtenidos por las simulaciones de varias columnas consideradas en los ejemplos 1 y 2 del capítulo IV. Se observa que una aproximación lineal de los costos no-lineales basados en la regla de los seis décimos puede ser derivada, esto proporciona muy buenos valores de costo para el intervalo total. Las expresiones de costo de cargo fijo lineal que son utilizadas en este trabajo potencialmente proporcionan un método menos exacto del costo de la

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

columna en caso de mezclar alimentaciones a diferentes composiciones. Los coeficientes γ_j^k para el costo de los intercambiadores de calor se calculan considerando una expresión lineal de costo vs Área y usando una media logarítmica de diferencia de temperaturas igual a $2\Delta t_{\min}$.

La restricción (a) se establece para balances de masa de los divisores de la superestructura, donde F_l^k es el flujo total de la corriente l de la superestructura que corresponde a la corriente de alimentación k. La restricción (b) representa los balances de masa aplicados a cada componente i en los mezcladores colocados antes de una columna de destilación. Se observa que Z_{il}^k , que es la composición del componente i en la corriente l de la superestructura de la corriente de alimentación k, no es una variable sino una constante conocida que puede ser calculada antes. Las restricciones (c) son las restricciones de separación de cada componente y cada columna de destilación donde F_n^k , F_d^k y F_b^k corresponden a flujos de entrada, destilado y fondos de cada columna de destilación de la corriente de alimentación k. Las restricciones (d) representan balances de masa para cada componente en los mezcladores finales donde C_{if} es la cantidad deseada de componente i en los productos finales f. Se observa que Z_{il}^k se puede evaluar a priori, las restricciones (b) a (d) son restricciones lineales. Las restricciones (e) corresponden a especificaciones para los flujos de los divisores iniciales así como para los flujos de entrada de cada columna de destilación. Las restricciones (f) son las restricciones de las cargas de calor que asocian las cargas de calor del condensador y rehevador con los flujos de entrada de la columna de destilación. K_f^k son constantes

METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

Calculadas de las simulaciones para cada columna de destilación, se asume que las cargas de calor de los condensadores y rehervidores son iguales para cada columna de destilación. Esta consideración es verificada mediante la simulación y puede ser justificada considerando un balance de energía alrededor de la columna en la cual la alimentación, las corrientes de domos y fondos son líquidos saturados y los efectos de calor sensible son ignorados, ya que el calor latente es mucho mayor que el calor sensible.

Para relacionar el flujo asignado para una columna de destilación con la existencia de aquella columna de destilación, las variables enteras Y_j^* son introducidas para cada columna de destilación j de la corriente de alimentación de la superestructura k .

Las restricciones (g) son introducidas de manera de asegurar que siempre que la columna j no exista (es decir, $Y_j^* = 0$). Entonces el correspondiente flujo de entrada se hace cero, mientras que cuando existe la columna j (es decir, $Y_j^* = 1$) entonces el flujo de entrada de la columna j toma valores positivos (es decir, $F_j^k \leq U$). Se observa que las restricciones lógicas similares a (g) no necesitan ser adicionadas para los requerimientos de calor de los rehervidores y condensadores sobre los fundamentos de que son funciones lineales de los flujos. Finalmente, las restricciones no negativas (h) y las restricciones 0-1 (i), son incluidas para los flujos, cargas de calor y variables enteras, respectivamente.

La formulación matemática anterior corresponde a un problema MILP el cual puede ser resuelto con técnicas de ramificación y acotamiento. La importancia de esta formulación es que proporciona la configuración

METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

óptima de las columnas de destilación que pueden separar diferentes corrientes de alimentación multicomponente en diferentes productos multicomponentes especificados. La solución de la formulación MILP determinará el costo anual total mínimo de la configuración de destilación que utiliza óptimamente los grados de libertad a través de las disponibilidades de by-pass de manera de reducir la carga de separación de cada columna de destilación.

La efectividad de la estrategia de síntesis se basa en la formulación MILP, ésta será ilustrada con dos ejemplos en el capítulo IV.

3.2 ALGORITMO MINLP PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION SIN INTEGRACION DE CALOR.

Habiendo obtenido en el punto 2.1.4 la derivación de una superestructura para el problema de separación P2, éste tiene incluidas todas las alternativas de interés, una formulación por programación no lineal se presenta para la secuencia óptima de separación.

Para derivar la formulación matemática del problema de NLP, los siguientes índices serán definidos para caracterizar la topología de la superestructura. Primero todas las corrientes de alimentación serán denotadas por el índice común:

$$FS = \{k\}$$

$$EC.(3.15)$$

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

Los componentes serán denotados por el conjunto de índices $I=\{i\}$ y las tareas de separación por el índice $J=\{j\}$.

La superestructura para cada corriente de alimentación $k \in FS$ involucra un conjunto de corrientes l que serán denotadas por el conjunto de índices $N_k = \{l\}$. Cada una de estas corrientes l , tendrá asociadas como variables los flujos F_l^k y las composiciones de cada componente i , $X_{l,i}^k$.

La superestructura de cada corriente de alimentación k involucra divisores y mezcladores que son denotados por el conjunto de índices $S_k=\{s\}$ y $M_k=\{m\}$, respectivamente. La división $S^0 \in S_k$ representará el punto de división inicial en la superestructura de la corriente de alimentación k . Los mezcladores $m^f \in M_k$ se colocan para el mezclado final antes de cada producto.

La relación de los conjuntos de divisores y mezcladores con las corrientes internas de entrada y salida en la superestructura de la corriente de alimentación k es dada por:

$$\left. \begin{array}{l} \text{in} \\ S_k^{\text{in}}(s) = \{l/l \in N_k \text{ es una entrada al divisor } s\} \\ \text{out} \\ S_k^{\text{out}}(s) = \{l/l \in N_k \text{ es una salida del divisor } s\} \end{array} \right\} s \in S_k$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{in} \\ M_k^{\text{in}}(m) = \{l/m \in N_k \text{ es una entrada al mezclador } m\} \\ \text{out} \\ M_k^{\text{out}}(m) = \{l/m \in N_k \text{ es una salida del mezclador } m\} \end{array} \right\} m \in M_k$$

(EC.3.16)

Las corrientes de entrada y salida de las unidades de separación son dadas por:

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

$$\begin{aligned}
 SU_j &= \{n/n \in N_k \text{ es la entrada al separador } j\} \\
 SU_j^{top} &= \{p/p \in N_k \text{ es el producto de domos del separador } j\} \\
 SU_j^{bot} &= \{q/q \in N_k \text{ es el producto de fondos del separador } j\}
 \end{aligned}$$

(EC.3.17)

Además los componentes de las corrientes de domos y fondos en cada unidad de separación están dados por:

$$\begin{aligned}
 T_j &= \{i/i \text{ componente perteneciendo a domos de la separación } j\} \\
 B_j &= \{i/i \text{ componente perteneciendo a los fondos de la separación } j\}
 \end{aligned}$$

(EC.3.18)

Habiendo definido el conjunto de índices y variables que describen la superestructura completa para el problema de separación P2 (punto, 2.1.3) se procede a realizar lo siguiente:

Balances de masa para las divisiones:

$$\sum_{l \in S_k^{in}(s)} \dot{F}_l^k - \sum_{l \in S_k^{out}(s)} \dot{F}_l^k = 0 \quad s \in S_k, k \in FS$$

(EC.3.19)

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

Balances de masa para cada componente en mezcladores antes de las separaciones:

$$\sum_{l \in M_k^{in}(e)} f_l^k X_{li}^k - \sum_{l \in M_k^{out}(m)} f_l^k X_{li}^k = 0 \quad (\text{EC.3.20})$$

$$m \in M_k, k \in FS, i \in I$$

Restricciones de separación para cada componente y separador j

$$f_n^k X_{n,i}^k - f_p^k X_{p,i}^k = 0 \quad i \in T_j, n \in SU_j, p \in SU_j^{\text{top}}$$

$$f_n^k X_{n,i}^k - f_q^k X_{q,i}^k = 0 \quad i \in B_j, n \in SU_j, q \in SU_j^{\text{bot}}$$

(EC.3.21)

Donde f_n^k es el flujo de la corriente de entrada, f_p^k es el flujo de los productos de domos, y f_q^k es el flujo de los productos de fondos en el separador j.

Balance de masa para cada componente en mezcladores finales.

$$\sum_{l \in M_k^{in}(m^f)} f_l^k X_{li}^k = C_{if} \quad m^f \in M_k, k \in FS, i \in I$$

(EC.3.22)

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

Donde Q_i es la cantidad deseada de componente i en el producto final f .

Especificaciones para flujos

$$f_l^k = F_k \quad l \in S_k^{in}(s^0) \quad k \in FS \quad (EC.3.23)$$

Igualdad de composiciones para entradas y salidas de divisiones.

$$X_{li}^k = X_{pi}^k \quad l \in S_k^{in}(s), \quad p \in S_k^{out}(s),$$

$$s \in S_k, \quad i \in T_j, \quad k \in FS$$

$$X_{li}^k = X_{qi}^k \quad l \in S_k^{in}(s), \quad q \in S_k^{out}(s),$$

$$s \in S_k, \quad i \in B_j, \quad k \in FS$$

(EC.3.24)

Restricciones no negativas.

$$f_l^k \geq 0, \quad f_n^k \geq 0, \quad f_p^k \geq 0, \quad f_q^k \geq 0, \quad 1 \geq X_{li}^k \geq 0$$

(EC.3.25)

En esta forma, la función objetivo en la ecuación 2.2 sujeta a restricciones, ecuaciones 3.19 a 3.25, define el problema de

METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

programación no lineal en el que las variables a ser optimizadas son los flujos F_i^k y las composiciones X_{ij}^k . La solución numérica a el NPL puede ser obtenida con algoritmos estandar.

Dos muy buenos candidatos de algoritmos estandar de programación no lineal son VMCON, el cual es una implementación del algoritmo Wilson-HanPowell, y MINOS/AUGMENTED, los cuales fueron desarrollados por Murtagh y Saunders (1981) y emplean un algoritmo lagrangiano aumentado. Los resultados de estos trabajos emplearon MINOS/AUGMENTED. La solución óptima de este problema NLP provee automáticamente la secuencia de separación que puede transformar las corrientes de alimentación multicomponente en productos multicomponentes deseados.

Una importante cuestión que surge sobre la validez de la formulación NLP propuesta es si una configuración de separación puede obtenerse de la superestructura total.

Claramente, si muchas de las corrientes postuladas no son eliminadas (es decir, sus flujos se ajustan a cero); las configuraciones de separación pueden ser complicadas y de valor práctico cuestionable. Interesa bastante, sin embargo, las corrientes recicladas que son dirigidas hacia los mezcladores anteriores a la entrada de cada tarea de separación, tenderán a tomar valores de cero para los flujos cuando los balances de masa en los mezcladores finales anteriores a cada producto sean satisfechos. Como se observa, un aumento de la razón de flujo de una corriente reciclada trae un aumento de la función objetivo. Sin embargo debido a la minimización de la función objetivo, el flujo de estas corrientes recicladas tomará valores de cero. Esta prueba implica que se esperan estructuras de

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

secuencias de separación simple usando este método, el cuál es muy útil desde el punto de vista práctico.

Otro comentario sobre la formulación NLP es que debido a la bilinealidades de composiciones y flujos presentes en las ecuaciones 3.20, 3.21 y 3.22, el problema es en general no convexo. Esto puede implicar que una solución óptima no pueda ser garantizada. De esta manera, la solución obtenida puede ser sólo considerada como mínimo local para la función objetivo en cuestión. Recientes trabajos sobre secuencias de destilación general (FLOUDAS & ANASTASIADIS) han mostrado un procedimiento muy eficiente de inicialización para el problema de programación no lineal. Esta metodología de inicialización consiste en resolver un problema de programación lineal que corresponda a una superestructura seleccionada de secuencias de destilación y proporcione muy buenos puntos iniciales para el algoritmo de programación no lineal.

3.3 ALGORITMO MILP PARA LA SÍNTESIS DE SECUENCIAS DE DESTILACION CON INTEGRACION DE CALOR.

El enfoque adoptado aquí ayuda fuertemente en la generación de una buena superestructura. La superestructura ideal para un problema deberá contener todas las secuencias de destilación factibles, todas las estructuras de integración de calor factibles dentro de la superestructura y todas las condiciones de operación para cada columna en la superestructura. Para las separaciones nítidas, el número de secuencias de destilación factibles es finito y todas estas pueden

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

fácilmente ser incluidas en la superestructura. Similarmente, todas las conexiones de integración de calor factible dentro de la superestructura pueden ser tomadas en cuenta para la correcta formulación de los modelos. El número de tales conexiones, sin embargo, depende de las condiciones de operación de las columnas en la superestructura. Ya que la superestructura es finita, no es posible incluir todas las condiciones de operación factible para cada una de las columnas. Una forma de manejar este problema es emplear el concepto de destilación multiefecto discutido posteriormente.

Las cuatro etapas principales en el desarrollo apropiado de los modelos MILP para secuencias de destilación con integración de calor son:

- (1) Generar una superestructura de columnas
- (2) Desarrollar la función objetivo MILP.
- (3) Escribir las restricciones para el programa. Esto define las rutas permisibles para los flujos masicos y de calor dentro de la superestructura.
- (4) Resolver el modelo derivado (equivalente a optimizar la superestructura) usando un apropiado paquete de solución MILP. Los resultados de la secuencia óptima serán dados, entre otros, las columnas presentes, sus presiones y temperaturas, flujos de alimentación y los costos de esta secuencia óptima.

Una discusión de cada una de las etapas se dará a continuación.

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

3.3.1 GENERACION DE LA SUPERESTRUCTURA.

Un método conveniente para generar una superestructura es el método de condensador-rehervidor aplicado inicialmente por Andrecovich y Westerberg (1985) para columnas simples. La temperatura del servicio de calentamiento más caliente y del servicio de enfriamiento más fría se utilizan como límites del problema, con la condición opcional de que la presión de alguna columna generada no deberá ser menor a cierto valor (es decir, presión atmosférica) o arriba de un cierto valor de seguridad. El objetivo es generar tantas columnas como sea posible, dentro de estos límites, para cada tarea de destilación. El número de columnas para cada una de las tareas constituye el número de efectos para esa tarea en particular. La primera columna o efecto de cada tarea esta determinada por el cálculo de la presión de operación (mínima) para esta tarea usando como límite inferior de temperatura, la temperatura del condensador(es), y la composición del destilado (y productos laterales, para columnas complejas con un condensador lateral). En todos los casos de transferencia de calor a ser considerados, una temperatura mínima de acercamiento, Δt_{min} es establecida y todos los productos se suponen líquidos saturados. Para columnas complejas, las columnas laterales se suponen que operan a la misma presión, como la parte principal de la estructura. Por lo tanto, para la primera columna, la presión de operación mínima para una columna compleja con un condensador lateral se ajusta al mayor de los dos valores obtenidos y la temperatura del condensador apropiada es recalculada. Las temperaturas de los rehervidores de todas las

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

columnas creadas hasta ahora son calculadas usando las presiones y composiciones de los fondos y de los productos laterales apropiados, y el mínimo valor es determinado. Las oportunidades para la integración de calor son hasta entonces establecidas para asegurar que el segundo conjunto de efectos (o columnas) creadas para cada tarea sean diseñadas de tal forma que los condensadores de todas las columnas puedan intercambiar calor con el rehervidor de la temperatura mínima. Las temperaturas de los rehervidores de todas las columnas del segundo conjunto son calculadas, la mínima de todas las temperaturas de los rehervidores en la superestructura es determinada, y el procedimiento es repetido. El proceso se termina cuando no más columnas puedan ser adicionadas a la superestructura, esto es, cuando el límite superior de temperatura es violado por adicionar más columnas a alguna tarea. Al final del procedimiento de generación de la superestructura, las presiones de todas las columnas deberán ser determinadas así como las temperaturas de los rehervidores, y condensadores, así como sus homólogos laterales. Cada columna en la superestructura se resuelve para ciertos parámetros requeridos por la fase de optimización. Estos parámetros incluyen número de platos, relaciones de reflujo, costos de columnas como una función lineal del flujo de alimentación, cargas de calor de los condensadores y rehervidores como funciones directas de las relaciones de flujo de alimentación. Debido al gran número de columnas involucradas, los métodos cortos serán necesarios.

Un camino para reducir el número de columnas generadas y evitar la situación en donde las temperaturas de las columnas para la misma tarea de separación difieren por tan solo 1 o 2 grados, es especificar

METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

que la temperatura del reboiler a ser seleccionado para iniciar una nueva iteración (o nuevo conjunto de efectos) difiera de la iteración previa por un valor tomado arbitrariamente, $RDIFF, RDIFF$ pudiendo ser ésto igual a 5, 10 o 20 grados.

3.3.2 LA FUNCION OBJETIVO DEL MILP.

El costo total de la secuencia es usado para comparar secuencias alternas. El costo total es determinado por el costo de operación y de equipo. Los costos de equipo (EC) considerados aquí son los costos de las columnas de destilación y de los intercambiadores de calor usados como condensadores y rehervidores. Los costos de operación (OC) considerados son los costos de los servicios de calentamiento y de enfriamiento necesarios para el proceso. El número y condiciones de operación (y por lo tanto costos) de las columnas e intercambiadores de calor así como la cantidad de servicios requeridos para cada una de ellas dependerán de la secuencia de destilación en particular y de la red de intercambio de calor asociada.

El costo total anualizado de una secuencia y por lo tanto, la función objetivo, puede ser escrita como:

$$TC = \frac{1}{x} EC + \beta * OC \quad (EC.3.26)$$

Los costos de una columna de destilación como una función del flujo de alimentación es no lineal, pero ya que un paquete de solución MILP no puede manejar funciones no lineales, una aproximación lineal

MÉTODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

es necesaria. Una función lineal apropiada es:

$$\text{Costo de columna} = FC + V * F \quad (\text{EC.3.27})$$

donde FC es un cargo fijo para una columna y V es la pendiente de la línea que relaciona el costo de la columna y el flujo de alimentación. Expandiendo los términos en la ecuación (3.26) produce:

$$\begin{aligned} TC = & \frac{1}{\alpha} \sum_{i \in Z} (FC_i + V * F_i) + \frac{1}{\alpha} \sum CHX \\ & + \beta \sum_{i \in HU} C_{HU,i} Q_{HU} + \beta \sum_{i \in CU} C_{CU,i} Q_{CU} \end{aligned} \quad (\text{EC.3.28})$$

donde Z es el conjunto de todas las columnas, HU y CU son los conjuntos de todos los servicios de calentamiento y enfriamiento respectivamente. Los términos CHX, Q_{HU} y Q_{CU} pueden ser además expandidos dependiendo del tipo de integración de calor formulado. Esto se discutirá posteriormente.

3.3.3 RESTRICCIONES DEL BALANCE DE MASA.

Las restricciones de balance de masa relacionan flujo de masa que entra y sale de las columnas en la superestructura, describiendo las rutas permisibles por las cuales el material puede fluir de una columna a otra. Las interconexiones entre las columnas de destilación también son descritas por las restricciones de balance de masa. Dependiendo del tipo, cada columna separa la alimentación en dos o

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

tres corrientes de productos. Por lo tanto, para cada producto intermedio de dos o más componentes, los balances de masa en toda la superestructura requerirán que la cantidad total del producto intermedio producido por todas las columnas en la superestructura debe ser igual a la cantidad total de este producto intermedio alimentado a todas las columnas las cuales posteriormente separan al producto. Esto es:

$$\sum_{i \in P_{sm}} \gamma_i F_i - \sum_{j \in F_{sm}} F_j = 0 \quad m \in IP \quad (\text{EC.3.29})$$

donde

P_{sm} = conjunto de todas las columnas que producen un producto intermedio m como uno de estos productos.

F_{sm} = conjunto de todas las columnas teniendo m productos intermedios como alimentación.

F = flujo total para una columna.

IP = conjunto de todos los productos intermedios.

γ = Fracciones de separaciones relevantes.

Esta restricción se plantea para cada producto intermedio. Para completar la formulación se necesita una expresión para la alimentación al sistema de destilación. Esta es:

$$\sum_{k \in S_p} F_k = F_{tot} \quad (\text{EC.3.30})$$

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

La ecuación 3.30 asegura que la alimentación total al sistema, F_{TOT} , es igual a la suma de las alimentaciones a todas las columnas las cuales procesan alguna porción de la corriente de alimentación.

3.3.4 RESTRICCIONES DE INTEGRACION DE CALOR

Los subproblemas de integración de calor de las síntesis de secuencias de destilación con integración de energía son muy similares a los problemas de síntesis de redes de intercambio de calor. Las corrientes calientes son las corrientes de los condensadores y de los servicios de calentamiento, mientras que las corrientes frías son las corrientes de los rehedidores y servicios de enfriamiento. En la estructura no se permiten calentadores o enfriadores intermedios y tampoco intercambio de calor entre las corrientes de alimentación interconectadas. En las estrategias de síntesis presentadas en esta sección, es necesario que la cantidad de calor asociada con cada condensador o rehedidor (carga de calor) sea expresada como una función lineal de una variable continua (el flujo de alimentación en este caso). La relación final llega a ser:

$$Q_{Cj} = K_{Cj} F_k, \quad j \in \text{COND}; \quad k \in Z \quad (\text{EC.3.31})$$

$$Q_{Ri} = K_{Ri} F_k, \quad i \in \text{REB}; \quad k \in Z \quad (\text{EC.3.32})$$

donde

Q_{Cj} = carga de calor del condensador j .

Q_{Ri} = carga de calor del rehedidor i .

METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

K_{kj} = constante que relaciona la carga de calor del condensador j y el flujo de alimentación a la columna F_k .

K_{ki} = constante que relaciona la carga de calor del rehedvidor i y el flujo de alimentación a la columna F_k .

COND= conjunto de todos los condensadores en la superestructura.

REB = conjunto de todos los rehedvidores en la superestructura.

Z = conjunto de todas las columnas en la superestructura.

Un importante punto a observar de las ecs. 3.31 y 3.32 es que aún para columnas simples, la carga de calor del rehedvidor no se supone igual a la del condensador para una columna en particular.

El posible intercambio de calor factible dentro de la superestructura puede ser descrito usando dos de los modelos que son ampliamente usados en el campo de investigación de operaciones: El modelo de transporte y el de transbordo.

1. LA FORMULACION DEL MODELO DE TRANSPORTE.

El problema de transporte o distribución es un problema de redes de dos niveles (capacidad) en el cual todos los nodos en un nivel son productores (origen) mientras que los nodos en el otro nivel son consumidores (destinatarios). Así, el modelo transporte busca determinar la red óptima (generalmente el arreglo de mínimo costo) para transportar una mercancía del origen directamente a destinatarios. Una analogía puede ser representada con los problemas de síntesis de redes de intercambio de calor donde el calor como un

MÉTODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

bien o servicio será transportado desde fuentes calientes (corrientes de condensadores y servicios de calentamiento) a fuentes frías (corrientes de rehervidores y servicios de enfriamiento), de tal manera que toda transferencia considerada es termodinámicamente factible. Una transferencia es termodinámicamente factible si no viola la segunda ley de la termodinámica, la cual simplemente establece que el calor puede solo fluir de la temperatura mayor a la menor. En resumen, desde un punto de vista práctico una temperatura mínima de acercamiento para alguna de las dos corrientes que intercambian calor tiene que ser especificada.

- LA MATRIZ DE CORRIENTES Y EL BALANCE DE CALOR.

Todas las corrientes calientes y frías que satisfacen las dos restricciones termodinámicas pueden ser expresadas utilizando la matriz de corrientes bidimensional originalmente desarrollada por Pho & Lapidus (1973). Todos los condensadores y servicios de calentamiento son listados en la parte de arriba de la matriz mientras los rehervidores y servicios de enfriamiento son listados al costado de ésta. Cada fila de la matriz es asociada a un rehervidor o servicio de enfriamiento mientras que cada columna es asociada con un solo condensador o servicio de calentamiento.

Después de la generación de la matriz de corrientes, el próximo paso en la formulación del modelo es escribir los balances de calor para cada condensador y rehervidor. El calor de un condensador puede ser transferido al rehervidor de alguna otra columna con la cual

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

existe una combinación o algún servicio de enfriamiento factible. Similarmente, el calor debe ser suministrado al rehedvidor desde una corriente del condensador o servicio de calentamiento factible. Una consecuencia de la primera ley de la termodinámica (restricción del balance de calor) es que para cada condensador o rehedvidor, la cantidad de calor transferido debe ser igual a la cantidad de calor que esta disponible. Este criterio puede ser escrito como:

$$\sum_{i \in F_{Mj}} q(ij) = Q_{ej}, \quad j \in \text{COND} \quad (\text{EC.3.33})$$

$$\sum_{i \in F_{Mi}} q(ij) = Q_{ei}, \quad j \in \text{REB} \quad (\text{EC.3.34})$$

donde

$q(ij)$ = Cantidad de calor transferido desde el condensador o servicio de calentamiento j al rehedvidor o servicio de enfriamiento i .

F_{Mj} = Conjunto de combinaciones factibles entre los rehedvidor o servicios de enfriamiento y el condensador o servicio de calentamiento j .

F_{Mi} = Conjunto de combinaciones factibles entre los condensadores o servicios de calentamiento y el rehedvidor o servicio de enfriamiento i .

Q_{ej} y Q_{ei} son definidas por las ecs. 3.31 y 3.32.

La cantidad de servicios de enfriamiento i requeridos para el problema puede ser calculado de:

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

$$Q_c(i) = \sum_{j \in FM_i} q(ij), \quad i \in CU \quad (EC.3.35)$$

y la cantidad de servicios de calentamiento j de:

$$Q_m(j) = \sum_{i \in FM_j} q(ij), \quad j \in HU \quad (EC.3.36)$$

Donde:

$Q_c(i)$ = Flujo de calor en el receptor frío i desde un condensador de una columna

$Q_m(j)$ = Flujo de calor desde la fuente de calor j en un rehedidor de una columna

Estas expresiones para $Q_c(i)$ y $Q_m(j)$ pueden ser substituidas en la función objetivo ec.3.28.

- COSTOS DE INTERCAMBIADORES DE CALOR EN EL MODELO DE TRANSPORTE

El término del costo del intercambiador de calor, CHX, en la función objetivo ec. 3.28 puede ser expandido para relacionar el costo del intercambiador de calor para cada combinación factible en las ecs. 3.33 y 3.34 con la cantidad de calor intercambiado en esa combinación. La relación actual es no lineal (Regla del factor de los seis décimos) sin embargo, una aproximación lineal, como fue hecho para los costos de las columnas ec. 3.27, conduce a un gran incremento en el número de variables enteras y restricciones del MILP resultante. A causa de esto, y del hecho de que los costos de los intercambiadores de calor son de menor orden comparados con otros, como los costos de las

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

columnas y servicios, se decidió usar una expresión simple. Consecuentemente, los costos de los intercambiadores de calor se suponen directamente proporcionales a la cantidad de calor transferido (o área) esto es:

$$\text{Costo} = C_{hx,ij} * q(ij) \quad (\text{EC.3.37})$$

donde:

$$C_{hx,ij} = \frac{C_{hx,ref}}{A_{ref} U \Delta T_{lm}} = \frac{C_{hx,ref}}{Q_{ref}} \quad (\text{EC.3.38})$$

$C_{hx,ref}$ = Costo del intercambiador de calor a una área de referencia, A_{ref} .

U = Coeficiente de transferencia de calor total para la combinación ij .

ΔT_{lm} = Es la media logarítmica para la combinación ij .

$C_{hx,ij}$ = Costo del intercambiador de calor por unidad de calor transferido desde una fuente j a un receptor i

La cantidad de referencia de calor transferido, Q_{ref} fue seleccionada para ser la máxima cantidad de calor que pueda ser transferida para esta combinación (Q_{max}).

Todos los costos de los intercambiadores de calor pueden ahora ser incluidos en la formulación, añadiendo los siguientes términos a la función objetivo:

$$CHX = \frac{1}{\alpha} \sum_{j \in NS} \sum_{i \in RM} C_{hx,ij} q(ij) \quad (\text{EC.3.39})$$

6

$$CHX = \frac{1}{\alpha} \sum_{i \in CS} \sum_{j \in FI} C_{HX,ij} q(i,j) \quad (EC.3.40)$$

Donde:

CS = Conjunto de índices de calores receptores.

HS = Conjunto de índices de calores fuentes.

La inclusión de los costos de los intercambiadores de calor en la función objetivo completa la formulación del modelo de transporte. La principal ventaja de esta formulación es que define explícitamente los resultados de la red de intercambio de calor. Sin embargo, una desventaja es que relaciona un gran número de variables y restricciones comparado con el modelo de transbordo.

2. FORMULACION DEL MODELO DE TRANSBORDO

El problema de transbordo (Garfinkel & Nemhauser; 1972; Papoulias & Grossman, 1983b) es un problema de red de tres niveles, en el cual una etapa intermedia o nivel es creado entre el productor (o fuente) y el consumidor (o destino). Así, el modelo de transbordo busca la red óptima para enviar un bien o servicio del nodo fuente al intermedio (por ejemplo, almacén) y posteriormente al consumidor.

Otra vez, una analogía puede fácilmente ser representada entre el modelo de transbordo y la síntesis de redes de intercambio de calor. El calor puede ser visto como un bien o servicio que es enviado desde las fuentes (corrientes de calor y servicios de calentamiento) al destino (corrientes frías y servicios de enfriamiento) a través de

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

intervalos de temperatura que actúan como los nodos intermedios. Los intervalos de temperatura toman en cuenta las restricciones termodinámicas, y en particular la segunda ley de la termodinámica que requiere que los flujos de calor sólo sean de la temperatura más caliente a la más fría. Las restricciones termodinámicas son consideradas en el modelo de redes mediante la división del intervalo de temperatura total en subintervalos.

- DESARROLLO DE LOS INTERVALOS DE TEMPERATURA

Varios investigadores (Linnhoff & Flower, 1978; Grimes, 1980; Cerda, 1983; Andrecovich & Westerberg, 1985) han propuesto métodos para dividir el intervalo de temperatura total. Sin embargo, en este trabajo, las siguientes reglas, que son una variación de las propuestas por Papoulias & Grossman (1985), y que a la vez son el resultado de los trabajos de Grimes (1980), serán utilizadas:

Regla 1: Reducir la temperatura de cada servicio de calentamiento y de cada condensador por la temperatura mínima de acercamiento especificada para el problema, ΔT_{MIN} .

Regla 2: Colocar las temperaturas reducidas de todos los condensadores y servicios de calentamiento así como las temperaturas de los rehervidores y servicios de enfriamiento en una lista y arreglarlas en orden decreciente. Esta lista define los intervalos de temperatura. A cada condensador, rehervidor o servicio, se le asigna un intervalo de acuerdo a su temperatura. Los condensadores, rehervidores y servicios

METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

son colocados en el intervalo justamente a las temperaturas a las cuales ellos aparecen. Las corrientes o servicios correspondientes a las temperaturas más calientes en la lista son colocadas en el primer intervalo.

Regla 3. Los intervalos de temperatura M son numerados en orden creciente, $M = 1, 2, \dots, NI$, comenzando con el par de mayor temperatura en la lista.

Un límite superior en el número de intervalos es:

$$NI \leq NCS + NRS + NHU + NCU - 1 \quad (\text{EC.3.41})$$

Donde:

NCU = Número de servicios de enfriamiento.

NCS = Número de condensadores en la superestructura.

NHU = Número de todos los servicios de calentamiento

NI = Número de intervalos de temperatura

NRS = Número rehervidores en la superestructura.

El número actual de intervalos es menor que el máximo ya que muchas de las temperaturas se repiten.

Las reglas aseguran que siempre es termodinámicamente factible que las corrientes calientes en un intervalo de transfieran calor a las corrientes frías en el mismo intervalo. En este sentido se puede considerar que el calor fluye de la corriente caliente al intervalo correspondiente, a la corriente fría en el mismo intervalo con el sobrante dirigiéndose al próximo intervalo de menor temperatura.

Un balance de energía alrededor de cada intervalo puede ser

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

escrito como:

$$Q_{m-1,m} + \sum_{j \in NS_m} Q_H(j) - \sum_{i \in CS_m} Q_C(i) - Q_{m,m+1} = 0$$

$$m = 1, 2, \dots, NI \quad (\text{EC.3.42})$$

Los términos $Q_{m-1,m}$ y $Q_{m,m+1}$ son los residuales representando el flujo de calor al intervalo m desde el intervalo $m-1$ y al intervalo $m+1$ desde el intervalo m . Estos flujos residuales son necesarios para un balance de energía total del problema. La presencia de algún punto de Pinch tendrá lugar entre los intervalos de temperatura que no tengan flujo de calor residual, esto es, donde la carga de calor residual $Q_{m,m+1}$ sea igual a cero.

- COSTOS DE INTERCAMBIADORES DE CALOR EN EL MODELO DE TRANSBORDO.

Los costos de los intercambiadores de calor pueden también ser incluidos en la función objetivo usando la formulación del modelo de transbordo. Sin embargo, es necesario calcular primero la cantidad total de calor transferido para todo el sistema. El calor total transferido es la suma del calor de los servicios de calentamiento, el calor para los servicios de enfriamiento y el calor intercambiado, esto es:

$$Q_{tot} = \sum_{j \in HU} Q_H(j) + \sum_{i \in CU} Q_C(i)$$

$$+ 0.5 \left[\sum_{j \in COND} Q_C(j) + \sum_{i \in EVAP} Q_H(i) \right]$$

$$- \sum_{j \in HU} Q_H(j) - \sum_{i \in CU} Q_C(i) \quad]$$

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

$$= 0.5 \left[\sum_{j \in \text{COND}} Q_j + \sum_{i \in \text{REB}} Q_i \right. \\ \left. + \sum_{j \in \text{MU}} Q_{M(j)} + \sum_{i \in \text{ECU}} Q_{E(i)} \right] \quad (\text{EC.3.43})$$

Suponiendo otra vez que el costo de un intercambiador es directamente proporcional a la cantidad de calor transferido, el costo total de los intercambiadores para todo el sistema está dado por:

$$\text{CHX} = \text{CMx,sys} * Q_{\text{tot}} \quad (\text{EC.3.44})$$

donde:

$$\text{CMx,sys} = \frac{\text{CMx,ref}}{\text{Aref} \text{Uref} \Delta T_{\text{lm,ref}}} = \frac{\text{CMx,ref}}{\text{Qref}} \quad (\text{EC.3.45})$$

El cálculo ordenado de A_{ref} , el valor de referencia del coeficiente de transferencia U_{ref} , la media logarítmica de la diferencia de temperaturas ΔT_{lm} y el calor transferido Q_{ref} , deben ser seleccionados para caracterizar el intercambio de calor total en el sistema. Una buena elección para el U_{ref} , es el promedio aritmético de un coeficiente de transferencia de calor de un condensador y rebovador los cuales son característicos del sistema. Un límite superior en los costos de los intercambiadores de calor puede ser obtenido utilizando ΔT_{min} como $\Delta T_{\text{lm,ref}}$ pero un valor mayor será más realista. En este trabajo, se empleó un valor de $2\Delta T_{\text{min}}$.

La formulación de transbordo tiene dos ventajas sobre la formulación de transporte discutida anteriormente. Primero, ésta determina explícitamente el valor mínimo de cada servicio requerido. El valor de cada servicio requerido es la cantidad mínima la cual

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

permite a todos los balances de energía ser satisfechos como lo requiere la ec. 3.42. La segunda y la más importante ventaja (al menos desde un punto de vista computacional) es que se requieren pocas variables y restricciones. Sin embargo, la desventaja es que no define explícitamente la red de intercambio de calor. Generalmente, una red de intercambio de calor puede ser construida por inspección pero el procedimiento puede volverse tedioso para casos con muchos intervalos de temperatura.

3.3.5 RESTRICCIONES DE INTEGRIDAD

Las restricciones de integridad son necesarias para asegurar la consistencia entre las variables continuas y las enteras. Esto es debido a que ni el balance de materia o las restricciones de integración de calor consideran el hecho de que solo unas cuantas columnas de la superestructura forman cada una de las alternativas de la secuencia de destilación. Las variables enteras y las restricciones pueden ser añadidas para tomar en cuenta esto. Una variable binaria (igual a 0 o 1) es asignada a cada columna en la superestructura. Al final de la fase de optimización, el valor de esta variable para cada columna determinará si está o no presente en la solución. Un valor de 1 indica que la columna está en la solución óptima mientras que un valor de 0 indica lo contrario.

Para asegurar que el costo apropiado de la secuencia óptima es calculado, estas variables binarias deben ser incluidas en la función objetivo. Regresando a la ec. 3.27 la cual relaciona el costo de la

METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

columna con el flujo de alimentación, esto es:

$$\text{Costo de columna} = FC + V * F \quad (\text{EC.3.27})$$

El cargo fijo en cada columna (FC) debe ser multiplicado por la variable binaria para esa columna de modo que el cargo fijo sea únicamente incluido en el valor de la función objetivo si esta columna está presente en una solución en particular.

Similarmente, para relacionar los valores de las variables continuas con los valores de las variables binarias correspondientes, el flujo de alimentación y la carga de calor asociada con alguna columna que no esta presente en una solución en particular deberá ser cero. Esto puede ser llevado acabo añadiendo las siguientes restricciones para cada columna en la superestructura:

$$F_k - U_k y_k \leq 0 \quad (\text{EC.3.46})$$

donde U_k es un límite superior para el gasto de alimentación a la columna k. Si la variable binaria "y" es igual a uno, esta restricción se convierte en:

$$F_k \leq U_k \quad (\text{EC.3.47})$$

Si la variable es igual a cero, el flujo de alimentación será cero y la carga de calor también será cero ya que la carga es proporcional al flujo de alimentación. Un buen valor para U_k sería el máximo flujo de

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

alimentación posible para la columna k para el problema en particular.

3.3.6 FORMULACION COMPLETA DEL MILP

Después de escribir todas las restricciones del modelo, el programa mixto entero lineal (MILP) puede ahora ser formulado. Dos versiones de la formulación son posibles: una basada en el modelo de transporte del subproblema de integración de calor y el otro es basado en el modelo de transbordo. Estas dos versiones serán presentadas a continuación.

- FORMULACION MILP CON EL MODELO DE TRANSPORTE PARA LA INTEGRACION DE CALOR.

$$\begin{aligned}
 \text{MIN } & \frac{1}{\alpha} \sum_{k \in K} (F_{0k} + V_k F_k) \\
 & + \frac{1}{\alpha} \sum_{j \in J} \sum_{i \in I} D_{w,ij} q(ij) \\
 & + \beta \sum_{l \in L} C_{cu,l} \sum_{j \in J} q(ij) \\
 & + \beta \sum_{j \in J} D_{nu,j} \sum_{i \in I} q(ij)
 \end{aligned} \tag{EC.3.48}$$

De modo que:

$$\sum_{k \in K} F_k = F_{\text{tot}} \tag{EC.3.49}$$

$$\sum_{l \in L} \gamma_l F_l - \sum_{j \in J} F_j = 0 \quad m = 1, 2, \dots, \text{NIP} \tag{EC.3.50}$$

METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

$$Q_{kj} = K_{kj} F_k, \quad j = 1, 2, \dots, NCS, \quad k \in Z \quad (\text{EC.3.51})$$

$$Q_{ri} = K_{ri} F_k, \quad i = 1, 2, \dots, NRS, \quad k \in Z \quad (\text{EC.3.52})$$

$$\sum_{j \in M_j} q(ij) = Q_{kj}, \quad j = 1, 2, \dots, NCS \quad (\text{EC.3.53})$$

$$\sum_{j \in M_i} q(ij) = Q_{ri}, \quad i = 1, 2, \dots, NRS \quad (\text{EC.3.54})$$

$$F_k - U_k y_k \leq 0 \quad k = 1, 2, \dots, NCOLS \quad (\text{EC.3.55})$$

$$y_k = 0 \text{ ó } 1 \quad (\text{EC.3.56})$$

$$F_k \geq 0, \quad q(ij) \geq 0 \quad \text{para todo } i, j, k \quad (\text{EC.3.57})$$

Las variables de decisión en la formulación son las variables binarias, y_k , el flujo para cada columna, F_k , y la cantidad de calor transferido entre cada corriente caliente y fría, $q(ij)$. Si se ignoran las restricciones no-negativas, ec. 3.57, y se substituyen las restricciones de igualdad, ecs. 3.51 y 3.52 en 3.53 y 3.54 respectivamente, el tamaño del modelo MILP es como sigue:

- (a) Número de variables binarias = NCOLS
- (b) Número de variables continuas = NCOLS + θ (NCS + NHU)(NRS + NCU)
- (c) Número de restricciones = 1 + NIP + NCS + NRS + NCOLS

Donde:

NIP = Número de productos intermedios

Esto excluye las restricciones enteras 0-1 ec.3.56 ya que estas son generalmente introducidas en paquetes de solución como límites.

La solución de este modelo define explícitamente la red de

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

intercambio de calor y algunas divisiones de alimentaciones o corrientes de productos proporcionando además el costo de la secuencia óptima.

- FORMULACION MILP CON EL MODELO DE TRANSBORDO PARA LA INTEGRACION DE CALOR.

$$\begin{aligned}
 \text{MIN } & \frac{1}{\alpha} \sum_{k \in K} (FC_k y_k + V_k F_k) \\
 & + \frac{C_{\text{tr}, \text{ave}}}{2\alpha} \left[\sum_{j \in \text{COND}} Q_j + \sum_{i \in \text{NRS}} Q_i \right. \\
 & \left. - \sum_{j \in \text{NU}} Q_{\text{tr}}(j) - \sum_{i \in \text{CU}} Q_{\text{tr}}(i) \right] \\
 & + \beta \sum_{i \in \text{CU}} C_{\text{tr}, i} Q_{\text{tr}}(i) \\
 & + \beta \sum_{j \in \text{NU}} C_{\text{tr}, j} Q_{\text{tr}}(j) \quad (\text{EC.3.58})
 \end{aligned}$$

tal que

$$\sum_{k \in K} F_k = F_{\text{FV}} \quad (\text{EC.3.59})$$

$$\sum_{l \in \text{FAM}} y_l F_l - \sum_{j \in \text{FAM}} F_j = 0 \quad m = 1, 2, \dots, \text{NIP} \quad (\text{EC.3.60})$$

$$Q_j = K_j F_k, \quad j = 1, 2, \dots, \text{NCS}, \quad k \in Z \quad (\text{EC.3.61})$$

$$Q_i = K_i F_k, \quad i = 1, 2, \dots, \text{NRS}, \quad k \in Z \quad (\text{EC.3.62})$$

$$Q_{m-1, m} + \sum_{j \in \text{FAM}} Q_{\text{tr}}(j) - \sum_{i \in \text{FAM}} Q_{\text{tr}}(i) - Q_{m, m+1} = 0 \quad (\text{EC.3.63})$$

$$F_k - U_k y_k \leq 0 \quad k = 1, 2, \dots, \text{NCOLS} \quad (\text{EC.3.64})$$

$$y_k = 0 \text{ ó } 1 \quad k = 1, 2, \dots, \text{NCOLS} \quad (\text{EC.3.65})$$

$$Q_{0,1} = Q_{\text{N}, \text{N}+1} = 0 \quad (\text{EC.3.66})$$

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

$$F_k \geq 0, \quad Q_{k,m} \geq 0 \text{ para todo } k, m \quad (\text{EC.3.67})$$

$$Q_c(i) \geq 0, \quad Q_m(j) \geq 0, \quad i \in CU, \quad j \in HU \quad (\text{EC.3.68})$$

Donde:

α es el tiempo de pago, en años, para el capital invertido

β es una constante para convertir los costos de operación anual a costos anualizados para un proceso.

γ_i es la fracción de alimentación a la columna

Las variables de decisión en esta formulación son las variables binarias, y_k , los flujos para cada columna, F_k , la cantidad de cada servicio requerido, $Q_c(i)$ y $Q_m(j)$, y el calor residual transferido entre intervalos, $Q_{k,m}$ y $Q_{k-1,m}$. Nuevamente si se ignora las restricciones no negativas, ecs. 3.67 y 3.68, y se substituyen las restricciones de igualdad ecs. 3.61 y 3.62 apropiadamente en la ec. 3.63, el tamaño del modelo MILP resultante es como sigue:

(a) Número de variables enteras = NCOLS.

(b) Número de variables continuas = NCOLS + NCU + NHU + NI - 1.

(c) Número de restricciones = 1 + NIP + NI + NCOLS

Otra vez, estas excluyen las restricciones enteras 0-1 ec. 3.65 y las dos restricciones en la ec. 3.66 ya que estas son generalmente introducidas como límites o variables fijas.

La solución de este modelo proporciona los costos de la secuencia óptima y la cantidad mínima de cada servicio requerido pero no define

MÉTODOS ALGORÍTMICOS PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS

explícitamente la red de intercambio de calor. Sin embargo, esta puede ser fácilmente deducida de la solución.

CAPITULO IV

APLICACIONES

4. PROGRAMACION MIXTA ENTERA (MIP)

La programación mixta entera opera con técnicas de optimización en las que una función es optimizada sujeta a restricciones de igualdad y desigualdad, y donde dos tipos de variables pueden ser especificadas: variables continuas las cuales toman cualquier valor real dentro de límites dados y variables binarias las cuales sólo pueden tomar valores de 0 y 1. La única característica es precisamente la capacidad de manejar el último tipo de variables las que en problemas de aplicación pueden ser asociadas a decisiones discretas en problemas combinatorios.

En el contexto de síntesis de procesos la aplicación de MIP requiere que una superestructura sea postulada, la cual posee muchas

A P L I C A C I O N E S

secuencias alternativas que serán analizadas.

Esta superestructura puede ser derivada para clases especiales de problemas (redes de recuperación de calor, sistemas de servicios) o podría ser especificada por el Ingeniero de diseño con el uso de métodos heurísticos y termodinámicos. En la aproximación de parámetro estructural sugerido por Umeda, sólo se usan variables continuas para modelar la superestructura como problema de programación IM continua. En la aproximación MIP, sin embargo, las variables continuas "X" son asociadas a flujos, tamaños de equipos, presión y temperatura, mientras que las variables binarias 0-1 "Y" son asociadas a la existencia de unidades que son postuladas por la secuencia en la superestructura. Esto entonces produce un problema de la forma:

$$\min C = f(x,y) \quad (\text{EC.4.1})$$

s. t.

$$h(x,y) = 0$$

$$g(x,y) \leq 0$$

$$x \in R^n, Y \in \{0,1\}^m$$

Donde la función objetivo $c = f(x,y)$ representará en general una medida económica deseada, mientras que las restricciones de igualdad y desigualdad $h(x,y)$, $g(x,y)$, pueden ser derivadas de la superestructura para representar balances de masa y calor, restricciones físicas, ecuaciones de diseño, especificaciones de diseño o condiciones lógicas

APLICACIONES

que podrían ser satisfechas en las secuencias (selección de sólo una unidad entre diferentes candidatas).

La idea básica entonces de esta formulación es extraer de la superestructura la configuración de la secuencia con menor costo para resolver el problema, ec. 4.1.

Las tres características más representativas que acompañan a la formulación "mixta entera" en la ec. 4.1 para la síntesis de procesos son las siguientes:

1. Optimización estructural y de parámetros pueden ejecutarse simultáneamente. Esto es un punto muy importante en síntesis de procesos, ya que las decisiones discretas que están involucradas en la selección de una secuencia, implican llevar a cabo otras decisiones tales como: selección de flujo, tamaños de equipo, o niveles de presión y temperatura, las cuales en algunos casos pueden tener un efecto muy importante en la estructura.
2. Restricciones discretas y lógicas pueden ser manejadas explícitamente con las variables binarias. Esta característica es muy fuerte porque permite al diseñador especificar restricciones estructurales o condiciones que producirán configuraciones de secuencias realistas.
3. La representación matemática proporciona un cuadro sistemático general ya que se puede formular una variedad de diferentes problemas de síntesis con la misma herramienta matemática. La importancia de esta característica descansa en el hecho de que los sistemas de procesamiento completo fig 4.1, pueden ser sintetizados simplemente

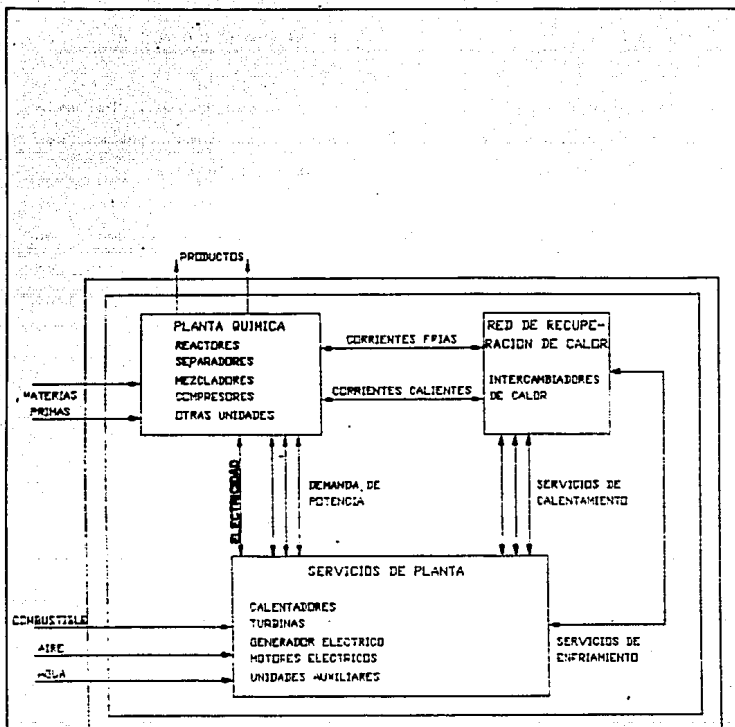


FIG. 4.1 SISTEMA DE PROCESAMIENTO COMPLETO

A P L I C A C I O N E S

interconectando los modelos para los diferentes componentes. De esta forma las interacciones de los diferentes subsistemas pueden ser tomados explícitamente en cuenta para la optimización total.

Con respecto a las características citadas anteriormente, es importante puntualizar por qué MIP para los problemas de síntesis es más adecuado que las formulaciones basadas en optimización de variables continuas, como en la optimización de parámetros estructurales de Umeda. Cuando la superestructura es formulada como un programa no lineal involucrando variables continuas esto producirá optimización no convexa la cual puede tener soluciones locales múltiples. La no convexidad en el programa no lineal continuo surge principalmente debido a las funciones de costo cóncavas no lineales que son usadas para reflejar economías de escala por costos de inversión. En el caso MIP la fuente de esta no convexidad puede ser explícitamente identificada a través del uso de funciones de costo fijo que son expresadas en términos (0-1) de variables binarias. Las ventajas de introducir estas variables binarias es que ellas pueden ser asociadas a un problema combinatorio que es bien definido y el cual puede ser resuelto con diferentes técnicas que eviten la exhaustiva enumeración de todas las posibles alternativas de asignación (0-1). Por tanto si las funciones son convexas en las variables continuas (es decir funciones lineales), entonces las técnicas de optimización "mixta entera" determinarán la solución óptima global. En la programación no lineal continua el mismo resultado puede ser sólo alcanzado a través del uso de técnicas de

A P L I C A C I O N E S

optimización global las cuales son ineficientes y en muchos casos no rigurosas. Puede notarse que si las funciones lineales de costo de inversión son usadas en la formulación de la programación no lineal para reducir la no convexidad, entonces el problema que aparece es aquél en que las soluciones tendrán también muchas de las unidades postuladas en la superestructura.

Aunque desde un punto de vista conceptual la programación (MI) es la herramienta natural para métodos algorítmicos en síntesis de procesos. Es bien conocido que las técnicas correspondientes pueden ser algunas veces ineficientes cuando el tamaño del problema es muy grande particularmente en lo concerniente al número de valores binarios.

Por lo tanto para hacer esta aproximación útil es esencial vencer los siguientes dos problemas:

1. Encontrar una eficiente representación para la superestructura la cual conduzca a problemas de tamaño razonable.
2. Usar o desarrollar técnicas de optimización eficiente que aprovechen la estructura de los problemas.

El primer aspecto es claramente dependiente del problema y donde los métodos heurísticos y termodinámicos pueden jugar un papel muy útil para limitar el tamaño de la optimización del problema.

Para el segundo aspecto se tienen que realizar algoritmos eficientes para resolver el problema en la forma general de la ec. 4.1, éstos, solo disponibles para dos importantes casos. El primer caso donde el problema de la ec. 4.1 es reformulado a la forma de un

problema MILP, y el segundo caso es cuando el problema de la ec. 4.1, es formulado como un programa no lineal "mixto entero" (MINLP) en el que las variables binarias son lineales y separables de las variables continuas las cuales aparecen en forma no lineal.

4.1 EJEMPLOS DE APLICACION PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS MEDIANTE MILP.

EJEMPLO 1.

Este problema consiste de dos corrientes de alimentación multicomponente que serán separadas a través de columnas de destilación en tres corrientes de productos multicomponentes. Los datos para este problema son mostrados en la tabla 4.1. La primera corriente de alimentación involucra tres componentes (es decir, Isobutano, n-butano, Isopentano) mientras que la segunda corriente involucra cuatro componentes (es decir, Propano, Isobutano, n-butano e Isopentano). Todas las corrientes de producto contienen los cuatro componentes con cantidades especificadas de cada uno de éstos. El objetivo en este ejemplo es identificar la configuración óptima de las columnas de destilación (que tienen ventajas potenciales por by-pass, mezclado y división de corrientes y pueden separar las dos corrientes multicomponentes en las tres corrientes multicomponentes de productos especificados.

En el primer paso de la estrategia de síntesis se desarrolla una

superestructura para cada corriente de alimentación multicomponente en la figs.4.2 y 4.3. La superestructura de la corriente de alimentación de 3 componentes consiste de cuatro distintas columnas de destilación (ver fig. 4.2) mientras la superestructura de la corriente de alimentación de 4 componentes involucra 10 columnas de destilación distintas (ver fig. 4.3).

Se observa sin embargo que sólo 10 variables enteras necesitan ser asignadas y no 14, de esta manera se denota la existencia o no existencia de las columnas de destilación en la superestructura total. Esto es verdad porque los tres componentes de la primera corriente de alimentación son (a) los mismos que los tres últimos componentes de la segunda alimentación y (b) tienen la misma composición de flujo. Por ejemplo la columna de destilación realizando la tarea de separación B/CD en la superestructura de la primera corriente de alimentación tiene asignada la misma variable entera que la columna de destilación que realiza la misma tarea en la superestructura de la segunda corriente de alimentación.

Como se observa el flujo total de esta columna esta siendo la suma de los flujos de entrada a esta tarea de separación de ambas superestructuras, lo cual equivale a tener un mezclador antes de esta tarea de separación.

En el segundo paso se ejecutan simulaciones para cada columna de destilación usando el sistema PROCESS (ciencias de simulación, 1985).

Teniendo establecidas las condiciones de alimentación para cada columna y considerando alta recuperación de los componentes claves

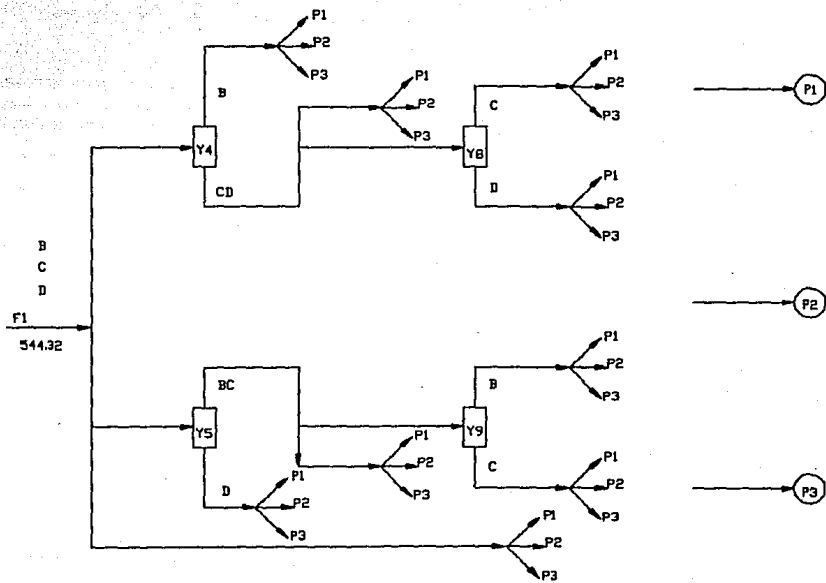


FIG. 4.2 SUPERESTRUCTURA DE LA CORRIENTE DE ALIMENTACION #1 PARA EL EJEMPLO 1

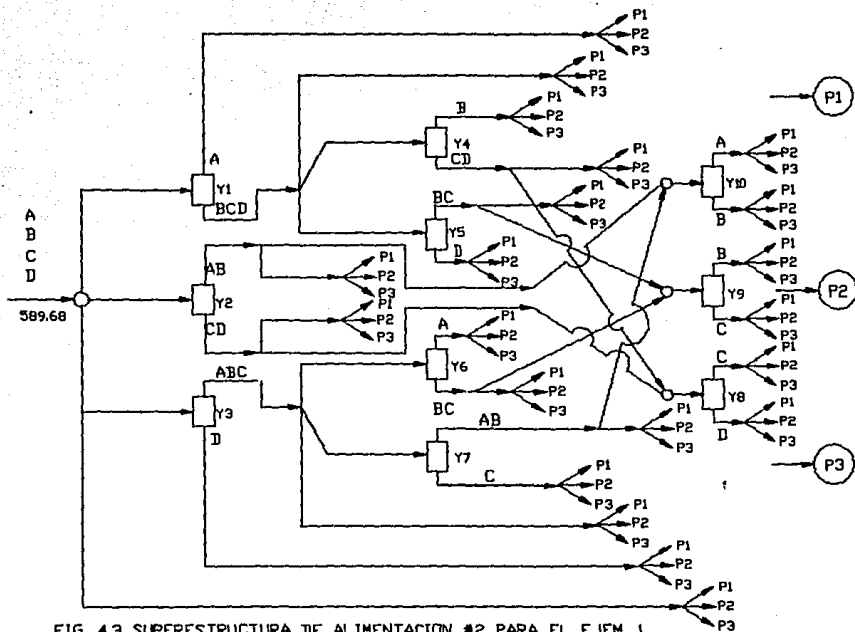


FIG. 4.3 SUPERESTRUCTURA DE ALIMENTACION #2 PARA EL EJEM. 1

APLICACIONES

ligeros y pesados, las simulaciones se llevan a cabo a 20 y 80 % del flujo de alimentación máximo de cada columna. Usando estos datos los coeficientes K_j que relacionan las cargas de calor con los flujos de alimentación pueden ser determinados, usando además la información propuesta por las simulaciones, el costo de cada columna fue obtenido para 20 y 80% del flujo de la alimentación usando el método de Guthrie (1969). Los coeficientes α_j^k y β_j^k fueron determinados para cada columna. Habiendo derivado la superestructura completa y calculado los coeficientes de costo requeridos y las constantes para las columnas de destilación, se aplican los balances de masa por componente y total en los divisores, mezcladores y columnas de destilación y se plantean las restricciones de calor necesario y lógicas para la superestructura completa. El resultado MILP involucra 10 variables enteras, 127 variables continuas y 65 restricciones.

Los resultados del problema MILP proporcionan la configuración de las columnas de destilación mostradas en la fig. 4.4. La configuración arroja un costo anual total mínimo de 1,176,700/año.

Se observa que las corrientes de by-pass total son activadas en ambas superestructuras de las corrientes de alimentación y que el by-pass de la primera corriente de alimentación contiene un divisor. Además de incluir divisores en la corriente de fondos de la columna BC/D, la corriente de destilado de la columna AB/CD y la corriente de fondos de la columna A/B.

La configuración óptima mostrada en la fig.4.4, no puede ser realizada con reglas heurísticas. Además sólo tres columnas de

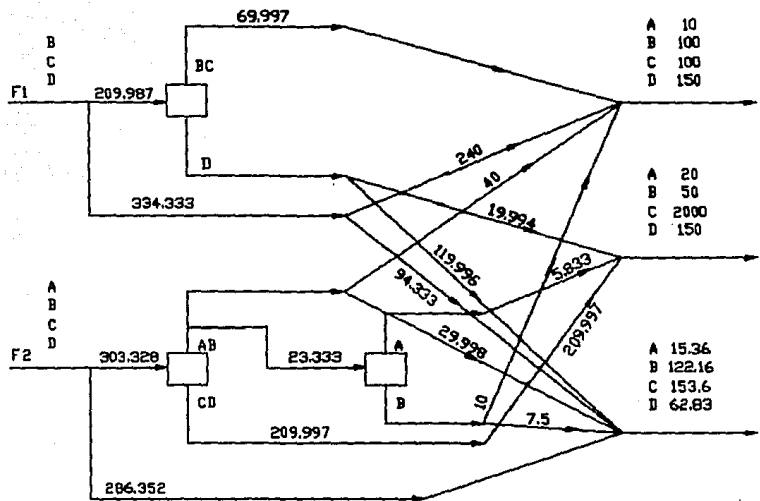


FIG. 4.4 CONFIGURACION OPTIMA PARA EL EJEMPLO 1

A P L I C A C I O N E S

destilación distintas se requieren, una para la corriente de alimentación de tres componentes y dos para las corrientes de alimentación de 4 componentes. Esto es muy importante porque si se fuera a separar cada alimentación en productos de componentes puros y después mezclar estos componentes de manera de obtener los productos multicomponente requeridos, entonces dos columnas deben ser requeridas para la primera alimentación y tres columnas para la segunda alimentación. Por lo tanto como puede observarse en este problema la distribución óptima de by-pass, división y mezclado se alcanza automáticamente vía la formulación MILP que puede reducir el número de columnas de destilación necesarias y así el costo total de la configuración de destilación.

A P L I C A C I O N E S

TABLA 4.1
DATOS DEL EJEMPLO N 1

COMPONENTE	FLUJO DE ALIMENTACION			
CORRIENTE DE ALIMENTACION I				
B: Isobutano				136.08
C: n-Butano				226.80
D: Isopentano				181.44
FLUJO DE ALIMENTACION TOTAL = 544.32 Kg mol/h				
CORRIENTE DE ALIMENTACION II				
A: Propano				45.36
B: Isobutano				136.08
C: n-Butano				226.80
D: Isopentano				181.44
FLUJO DE ALIMENTACION TOTAL = 589.68 Kg mol/h				
<u>PRODUCTOS DESEADOS</u>				
	A	B	C	D
PRODUCTO 1	10	100	100	150
PRODUCTO 2	20	50	200	150
PRODUCTO 3	15.36	122.16	153.6	62.88
<hr/>				
SERVICIOS	TEMPERATURA (K)			COSTO (\$10 ³ kJ)
AGUA DE ENFRIAMIENTO (20 K)	305			0.159
VAPOR 4243-kPa	527			5.333
$\Delta T_{min} = 10 \text{ K}$				
$\alpha = 2.5$				
$b' = 0.52$				

A P L I C A C I O N E S

EJEMPLO 2.

Este problema involucra una corriente de alimentación multicomponente a ser separada mediante columnas de destilación en dos corrientes de productos multicomponentes.

Los datos del problema son mostrados en la tabla 4.2. La corriente de alimentación consiste de cinco componentes (es decir, Propano, Isobutano, n-butano, Isopentano y n-pentano) y los dos productos involucran los 5 componentes en proporciones especificadas.

TABLA 4.2.
DATOS PARA EL EJEMPLO # 2

COMPONENTE	FLUJO DE ALIMENTACION				
A: Propano	45.36				
B: Isobutano	136.08				
C: n-Butano	226.80				
D: Isopentano	181.44				
E: n-Pentano	317.52				
FLUJO DE ALIMENTACION TOTAL = 907.20 Kg mol/h					
<u>PRODUCTOS DESEADOS</u>					
	A	B	C	D	E
PRODUCTO 1	20	100	100	150	100
PRODUCTO 2	25.36	36.08	126.8	31.44	217.52
<u>SERVICIOS</u>					
	TEMPERATURA (K)			COSTO ($\times 10^6$ kJ)	
AGUA DE ENFRIAMIENTO (20 K)	305			0.159	
VAPOR 4243-kPa	527			5.333	
$\Delta T_{min} = 10$ K					
$\alpha = 2.5$					
$b' = 0.52$					

A P L I C A C I O N E S

En el primer paso una superestructura de la corriente de alimentación de 5 componentes es desarrollada de acuerdo a lo visto anteriormente. Esta superestructura involucra 20 distintas columnas de destilación, un divisor inicial que admita by-pass total, 26 divisores intermedios, seis mezcladores anteriores a las columnas de destilación que contienen 3 componentes, 4 mezcladores anteriores a las columnas de destilación con dos componentes, y dos mezcladores anteriores al final de los productos multicomponentes deseados.

En el segundo paso, los cálculos de simulación son realizados para cada una de las distintas columnas de destilación a 20 y 80% del flujo total de cada tarea para identificar los modelos de costos de cargo fijo para cada una de las 20 distintas columnas de destilación. Entonces, formulando la superestructura como un problema MILP aplicando balances de masa y energía y restricciones lógicas, da como resultado un problema matemático que involucra 20 variables enteras, 203 variables continuas y 129 restricciones.

La solución del problema MILP proporciona la configuración presentada en la figura 4.5. Esta configuración tiene un costo mínimo total de \$2,879,700/año. Se observa que existe un separador inicial con la corriente de by-pass total activada la que posteriormente es dividida en dos corrientes que son direccionadas a los dos productos deseados. El by-pass total corresponde a un porcentaje significativo de la alimentación, esto implica que activando la corriente de by-pass, la carga de separación en el resto del sistema se reduce y hay una posibilidad para la existencia de soluciones cercanamente

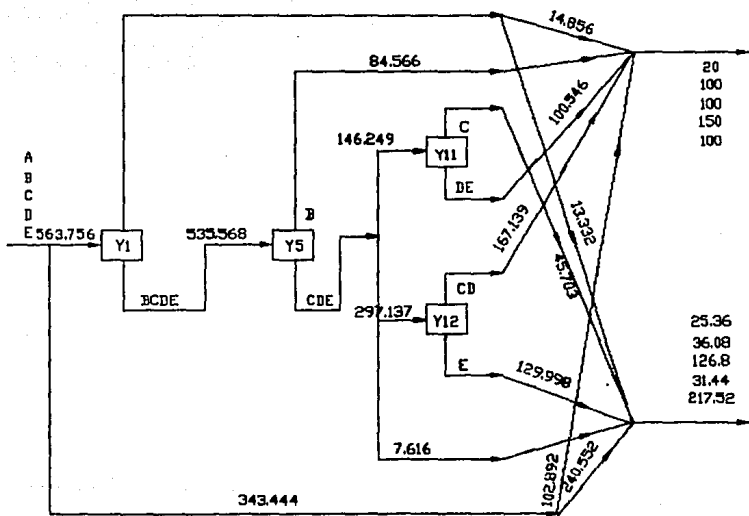


FIG. 4.5 CONFIGURACION OPTIMA PARA EL EJEMPLO #2

óptimas. Un separador intermedio existe después de la columna de destilación B/CDE la cual involucra dos corrientes dirigidas a las columnas C/DE y CD/E y una corriente de by-pass que es direccionada al segundo producto. Las características interesantes de esta secuencia óptima es que esta contiene cuatro columnas de destilación que ejecutan las tareas de separación A/BCD, B/CDE, C/DE y CD/E las cuales no corresponden a una secuencia de columnas de destilación para el problema convencional. Por lo tanto esto implica que el asignamiento óptimo de corrientes de by-pass aparte de reducir los costos de cada columna puede claramente llevar a configuraciones que no involucren secuencias completas de columnas de destilación.

4.2 EJEMPLOS DE APLICACION PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS MEDIANTE MINLP.

La efectividad de la síntesis propuesta es ilustrada con los siguientes 4 ejemplos:

EJEMPLO 3

Este problema tomado de Mahalec & Motard (1977a) es pequeño y se eligió para ilustrar el método de síntesis. Este consiste de dos corrientes de alimentación multicomponente que van a ser separadas en tres productos multicomponentes. Los datos son mostrados en la tabla 4.3. La primera corriente de alimentación involucra dos componentes, A y B, mientras la segunda corriente de alimentación involucra tres componentes A, B, y C. El primer producto contiene dos componentes A y

 APLICACIONES

C, el segundo producto contiene tres componentes A, B, y C, el tercer producto contiene dos componentes, A y B, para este problema todas las dificultades de separación D_j son iguales a 1 y la constante "b" es además igual a uno.

TABLA 4.3
DATOS PARA EL EJEMPLO N 3

	ESPECIES			cantidad
	A	B	C	
	M	M	M	
CORRIENTE 1	0.168	0.832	--	12
CORRIENTE 2	0.885	0.885	0.294	12
PRODUCTO 1	0.500	----	0.05	2
PRODUCTO 2	0.417	0.417	0.107	12
PRODUCTO 3	0.091	0.091	----	11

$$D_j = 1; j \in J; b=1$$

Ya que existen dos tareas de separación para las corrientes de alimentación de tres componentes y una tarea de separación para la corriente de alimentación de dos componentes, las superestructuras para cada corriente de alimentación multicomponente son desarrolladas de acuerdo al procedimiento descrito en secciones previas y se muestra en la fig. 4.6. Habiendo derivado la superestructura completa para este proceso de separación, se aplican balances de masa para cada componente en los divisores, mezcladores y tareas de separación. El problema de programación no lineal resultante involucra 45 variables, 13 restricciones no lineales y 19 restricciones lineales. El tiempo CPU (IBM 3081), para la formulación del modelo y su solución es

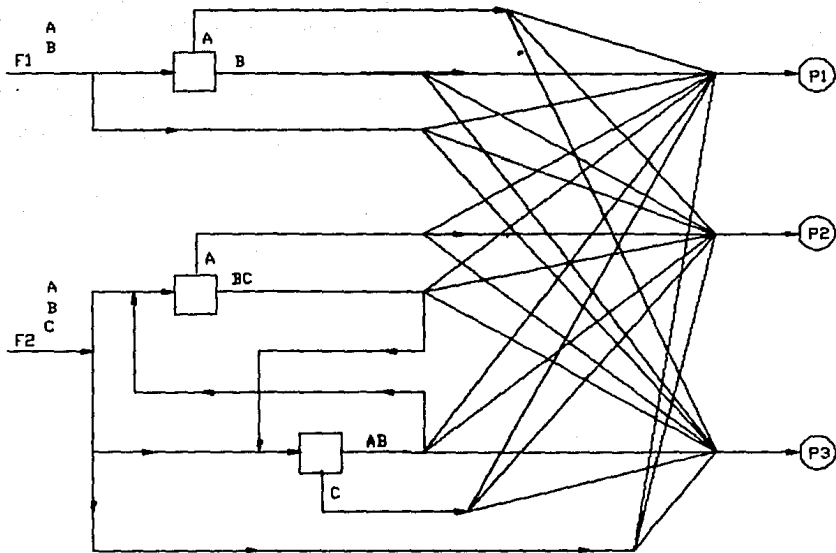


FIG. 4.6 SUPERESTRUCTURA DEL PROCESO DE SEPARACION PARA EL EJEMPLO 3

A P L I C A C I O N E S

mediante MINOS/AUGMENTED (Mortagh & Saunders, 1981) y fué de 1.98 seg.

Los resultados del problema de optimización proporcionan la secuencia de separación mostrada en la fig. 4.7. Esta secuencia contiene la carga másica de separación total mínima de 10.333, ya que en la función objetivo hay una minimización de la carga másica de separación total. Se observa que hay un divisor en la primera corriente de alimentación lo que implica una corriente by-pass para la única tarea de separación. Además, hay un divisor inicial en la segunda corriente de alimentación que divide la corriente de alimentación en una corriente dirigida a un separador y una corriente de by-pass. Es muy sorprendente que esta solución óptima no utilice la otra tarea de separación propuesta en la superestructura. Esta es una característica importante debido a que no todas las tareas de separación consideradas son requeridas para ser usadas y esto lleva a considerables ahorros económicos.

Puede además observarse que la secuencia de separación óptima determinada por este método es mejor que la secuencia de Mahalec & Motard (1977a), fig. 4.8, hallada empleando su método.

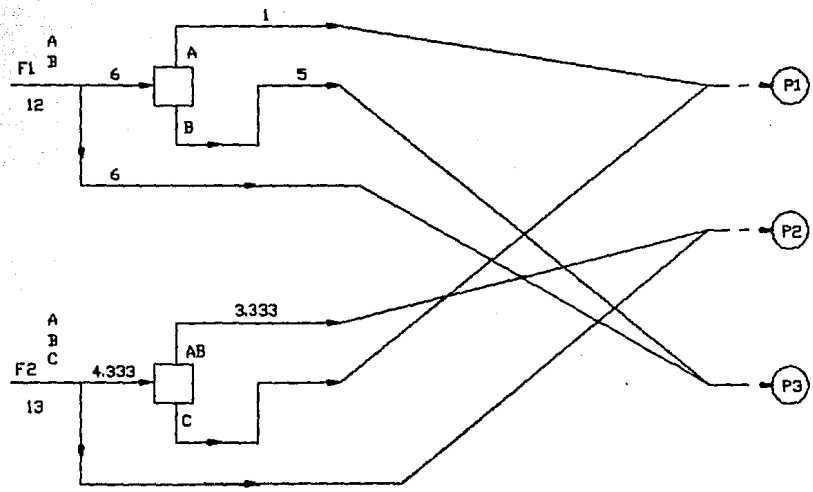


FIG. 4.7 SECUENCIA OPTIMA DE SEPARACION PARA EL EJEMPLO 3

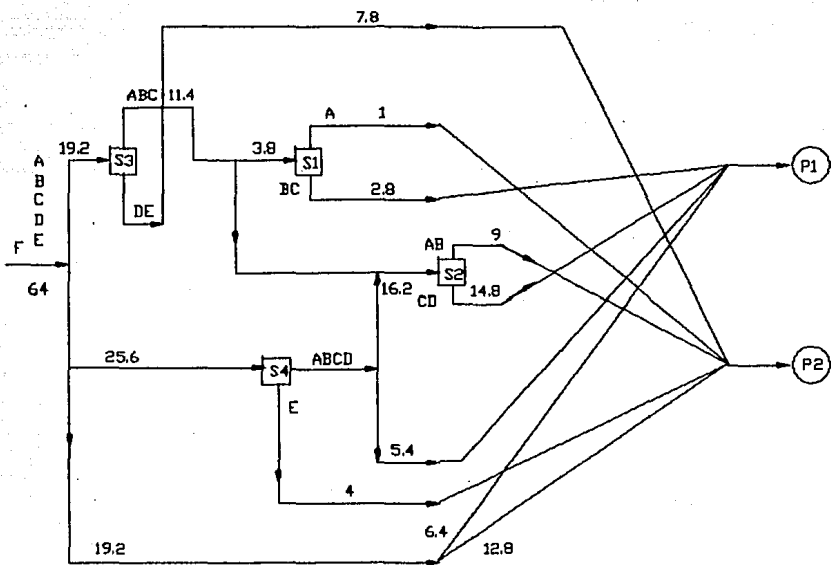


FIG. 4.8 SECUENCIA OPTIMA DE SEPARACION PARA EL EJEMPLO 6.

A P L I C A C I O N E S

TABLA 4.4
DATOS PARA EL EJEMPLO # 4

	ESPECIES				cantidad
	A	B	C	D	
	N	N	N	N	
CORRIENTE DE ALIMENTACION	15	20	10	15	60
PRODUCTO 1	5	10	4	10	29
PRODUCTO 2	10	10	6	5	31

DIFICULTAD DE SEPARACIÓN, D_j

	D_j
21	2.5
22	3.0
23	1.5

$b = 0.6$

EJEMPLO 4

Este problema consiste de una corriente de alimentación con 4 componentes que hay que separar en dos productos de 4 componentes, los datos del problema y la dificultad de las separaciones D_j se muestran en la tabla 4.4, para este problema el exponente b fue considerado con el valor de 0.6.

El primer paso, la superestructura para la corriente de alimentación simple es desarrollada usando el método descrito previamente. Esta superestructura contiene tres tareas de separación, puesto que la corriente de alimentación involucra cuatro componentes y cada tarea de separación corresponde a un punto de rompimiento de

A P L I C A C I O N E S

estos componentes. Esto se muestra en la fig. 4.9, formulando esta superestructura como un problema de programación no lineal, se obtienen 33 variables, 16 restricciones no lineales y 6 restricciones lineales. El tiempo CPU para formular y resolver el problema fué de 1.25 seg.

Los resultados del problema de optimización dan la estructura mostrada en la fig. 4.10. Esta secuencia de separación contiene una función objetivo mínima de 18.578. Se observa que en la secuencia de separación óptima mostrada en la fig. 4.10, existen tres tareas de separación que se llevan a cabo en secuencias de series de S3-S1-S2, lo que es además la secuencia de la menor a la mayor dificultad de separación, con corriente de by-pass en la salida de la tarea de separación S3.

Además hay un divisor inicial que separa la corriente de alimentación en una corriente que es direccionada a la separación S3 y en un by-pass completo. Hay además un divisor en la salida de la separación S3 que divide la corriente de salida en una corriente dirigida a la separación S1 y en una corriente al mezclador anterior al producto P2.

EJEMPLO 5

Este ejemplo es una versión modificada del ejemplo 4, sus datos son proporcionados en la tabla 4.3. La constante b toma el valor de 0.6.

Derivando y formulando la superestructura de este proceso de

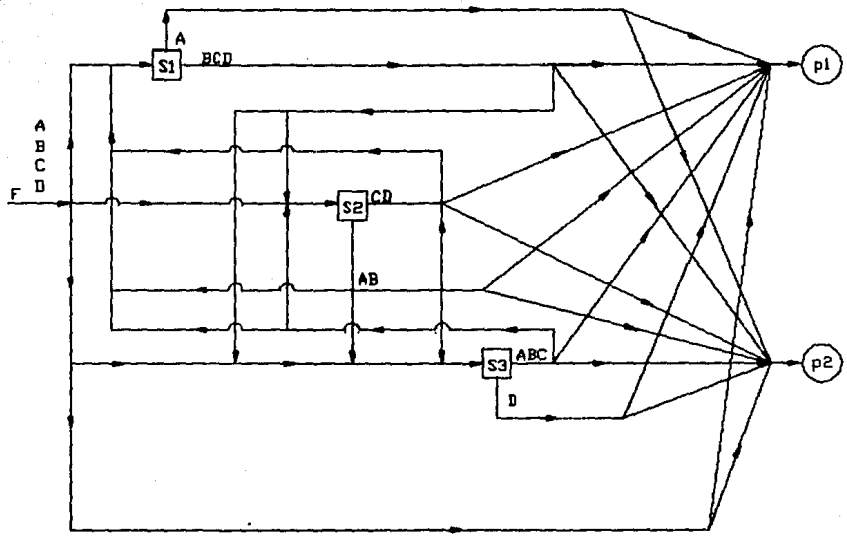


FIG. 4.9 SUPERESTRUCTURA DEL PROCESO DE SEPARACION PARA EL EJEMPLO 4

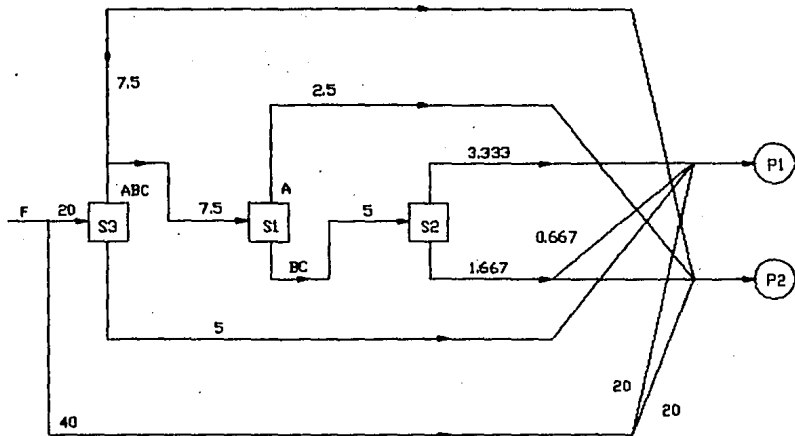


FIG. 4.10 SECUENCIA OPTIMA DE SEPARACION PARA EL EJEMPLO 4

A P L I C A C I O N E S

separación como un problema de programación no lineal se tiene un problema del mismo tamaño que el ejemplo 4. La solución de este problema NLP proporciona la secuencia mostrada en la fig. 4.11. Esta secuencia tiene una función objetivo mínima de 13.686. Se observa que hay un divisor inicial que separa la corriente de alimentación en una corriente dirigida a la tarea de separación S2 y una corriente de by-pass total. La característica impresionante de esta solución es que ésta no involucra la tarea de separación S1, aunque esta tarea se halla incluido en la superestructura mostrada en la fig. 4.9. Por lo tanto, como se observa en este ejemplo, usando el método de síntesis de secuencias de separación óptimas propuesto, puede identificarse que no es necesario utilizar todas las tareas de separación. Esta es una característica importante que lleva a considerables ahorros económicos.

TABLA 4.5
DATOS PARA EL EJEMPLO # 5

	ESPECIES				cantidad
	A M	B M	C M	D M	
CORRIENTE DE ALIMENTACION	15	20	10	15	60
PRODUCTO 1	7.5	10	4	10	31.5
PRODUCTO 2	7.5	10	6	5	28.5

DIFICULTAD DE SEPARACIÓN, D_j

D_j

s1 2.5
s2 3.0
s3 1.2
b = 0.6

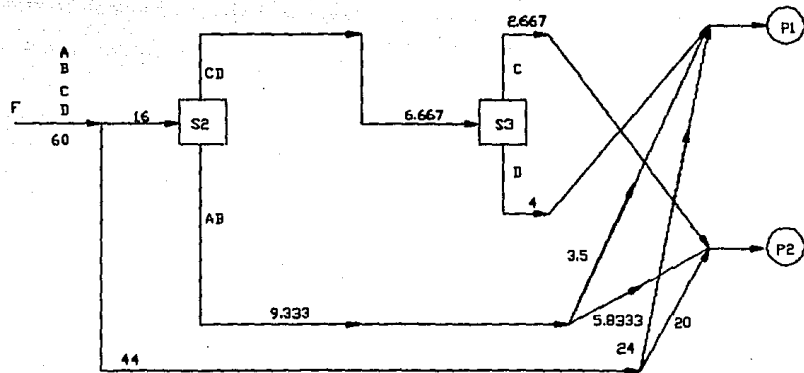


FIG. 4.11 SECUENCIA DE SEPARACION OPTIMA PARA EL EJEMPLO 5

A P L I C A C I O N E S

EJEMPLO 6

Este problema tomado de Muraki y Hayakawa (1984), consiste de una corriente de alimentación simple de 5 componentes que ha de separarse en dos corrientes de productos de 5 componentes. Los datos del problema y las dificultades de separación se muestran en la tabla 4.6. El exponente b toma el valor de 0.6.

Derivando la superestructura para este proceso de separación tal como se menciona anteriormente y formulándolo como un problema de programación no lineal con 69 variables, 25 restricciones no lineales y 22 restricciones lineales. El tiempo total CPU (IBM 3081) para formular y resolver el problema fué de 3.8 seg.

La solución de este problema NLP resulta de la configuración mostrada en la fig. 4.8. Esta secuencia contiene una función objetivo de 34.562, que es significativamente mejor que la secuencia de Muraki y Hayakawa (1984), se observa que hay un divisor inicial de la corriente de alimentación que la separa en un by-pass y en otras dos corrientes que son dirigidas a las tareas de separación S3 y S4. Además hay un divisor en la corriente superior de la tarea de separación S4 que la divide en una corriente canalizada a la tarea de separación S2. Además, en el divisor de la corriente superior de S3, una corriente es dirigida a la tarea de separación S1 y otra a la tarea de separación S2. En este ejemplo se utilizan todas las tareas de separación en la solución óptima, la que es significativamente diferente de la de Muraki y Hayakawa (1984). Esta solución es derivada vía un método algorítmico en el que las composiciones y los flujos de las diferentes corrientes son determinados automáticamente.

 APLICACIONES

 TABLA 4.6
 DATOS PARA EL EJEMPLO 6

	ESPECIES					cantidad
	A	B	C	D	E	
	N	N	N	N	N	
CORRIENTE DE ALIMENTACION	10	8	10	10	10	64
PRODUCTO 1	2	2.4	1.0	8	1	29.5
PRODUCTO 2	8	5.0	4	8	9	24.0

 DIFICULTAD DE SEPARACIÓN, D_j

	D_j
a1	1.2
a2	2.0
a3	2.5
a4	1.5
b=0.0	

4.3 EJEMPLOS DE APLICACION USANDO EL CRITERIO DE CONSUMO DE TRABAJO NETO.

Un problema ampliamente estudiado en la literatura (Heaven 1969; Rathore, 1974, Morari & Faith, 1980; Meszaros & Fonyo, 1986; Kattan & Douglas, 1986) es la síntesis de secuencias con integración de calor para separar una mezcla de hidrocarburos ligeros de 5 componentes. Los datos de alimentación son presentados en la tabla 4.7. Nikolaides (1987) evaluó el consumo anual total (TAC) para las 14 alternativas de secuencias simples así como, el consumo total del trabajo neto de cada uno. En la tabla 4.8, su primer columna muestra las 14 secuencias en

TABLA 4.7
CARACTERISTICAS DE LA ALIMENTACION PARA EL EJEMPLO DEL HIDROCARBURO

COMPONENTE	FRACCION MOL
A PROPANO	0.05
B i-BUTANO	0.15
C n-BUTANO	0.25
D i-PENTANO	0.20
E n-PENTANO	0.35

orden creciente de TAC; en la tercera columna el consumo total de trabajo neto de cada secuencia y en la cuarta columna, las cinco secuencias teniendo el TAC menor después de la integración de calor, encontrados por Kattan & Douglas (1986). Se observa que todos los estudios citados anteriormente encuentran que las 5 secuencias fueron óptimas después de la integración. También el conjunto de las cinco secuencias óptimas encontradas por Kattan y Douglas (1986) son exactamente las mismas que las precedidas por el criterio W_h .

A P L I C A C I O N E S

TABLA 4.8
COMPARACION DEL COSTO Y CONSUMO DEL TRABAJO NETO PARA LAS SECUENCIAS

SECUENCIA	COSTO ANUAL (10 ³ \$/yr ⁻¹)	W _g , TOTAL (10 ³ BTU h ⁻¹)	GRADO DESPUES DE LA INTEGRACION
1.ABC/DE-AB/C-A/B-D/E	2.655	5.91	3
2.A/BCDE-BCD/E-BC/D-B/C	2.850	11.35	
3.A/BCDE-BCD/E-B/CD-C/D	2.916	11.57	
4.A/BCDE-BC/DE-B/C-D/E	3.047	7.17	2
5.ABC/DE-A/BC-B/C-D/E	3.088	7.44	1
6.AB/CDE-C/DE-D/E-A/B	3.180	7.42	5
7.A/BCDE-B/CDE-C/DE-D/E	3.263	8.12	4
8.AB/CDE-A/B-CD/E-C/D	3.446	10.33	
9.A/BCDE-B/CDE-CD/E-C/D	3.523	11.15	
10.ABCD/E-ABC/D-AB/C-A/B	3.697	11.20	
11.ABCD/E-AB/CD-A/B-C/D	3.884	11.83	
12.ABCD/E-A/BCD-B/CD-C/D	3.892	10.61	
13.ABCD/E-ABD/D-A/BC-B/C	4.129	11.04	
14.ABCD/E-A/BCD-BC/D-B/C	4.301	10.26	

4.4 EJEMPLOS DE APLICACION DE SINTESIS DE SECUENCIAS CON INTEGRACION DE CALOR.

EJEMPLO 7

El procedimiento de síntesis es ilustrado mediante la presentación de un ejemplo: este ejemplo referido como problema de Rathore, fué seleccionado porque es frecuentemente reportado en la literatura. Este fué primeramente discutido por Heaven (1969), y últimamente empleado por más de 10 investigadores. La corriente de alimentación contiene 908 Kg-mol/Hr de 5 componentes de alcanos ligeros disponibles como líquidos saturados a presión atmosférica.

APLICACIONES

La composición de la alimentación y volatilidad relativa de componentes adyacentes son listados en la tabla 4.9. El problema es desarrollar un proceso para separar cada componente en 98% de productos puros.

Para simplificar los cálculos las siguientes consideraciones fueron empleadas:

1. La temperatura mínima de acercamiento ΔT_{\min} se mantiene constante a 11°K .
2. La alimentación a la columna y corrientes de productos son líquidos saturados.
3. No es permitida la recompresión de vapor, inter-rehervidor e intercondensadores.
4. Cada columna de destilación opera con 98% de recuperación de los componentes claves.
5. Los coeficientes de transferencia de calor se mantienen constantes en $568 \text{ W/m}^2 \text{ }^{\circ}\text{K}$ en todos los intercambiadores.
6. Los costos de servicio de calentamiento y enfriamiento son representados por funciones continuas.
7. El costo de cambiar la temperatura y presión de las corrientes intermedias es despreciable comparado al resto el costo de la secuencia.
8. Sólomente se emplean condensadores y rehervidores totales.
9. No se permite la integración de calor de las corrientes de alimentación de columnas.

A P L I C A C I O N E S

Estas consideraciones fueron escogidas debido a que ellas son empleados por otros investigadores de este problema; el uso de consideraciones consistentes permite una comparación directa de los resultados presentados aquí con los de otros. La relajación de algunas de las consideraciones formarán la base de futuros trabajos.

TABLA 4.9
DATOS PARA EL EJEMPLO 7

INDICE DEL COMPONENTE	NOMBRE DEL COMPONENTE	FRACCION MOL	VOLILIDAD RELATIVA
A	PROPANO	0.05	2.971
B	l-BUTANO	0.15	1.503
C	n-BUTANO	0.25	2.925
D	l-PENTANO	0.20	1.402
E	n-PENTANO	0.35	

* LAS VOLATILIDADES RELATIVAS DE COMPONENTES ADYACENTES (K_i/K_{i+1}) FUERON CALCULADAS EN LA TEMPERATURA DEL PUNTO DE BURBUJA DE LA MEZCLA Y 101.4 kPa.

De la ec. 2.29, catorce diferentes configuraciones usando separaciones simples pueden ser usadas para separar los 5 componentes de la alimentación en 5 productos, estos se muestran en la fig. 4.12a-c. Sólomente las primeras 6 secuencias en la fig.4.12 fueron halladas mediante heurísticas. Las heurísticas fueron aplicadas de una manera conservadora para evitar la eliminación de cualquier secuencia potencialmente óptima.

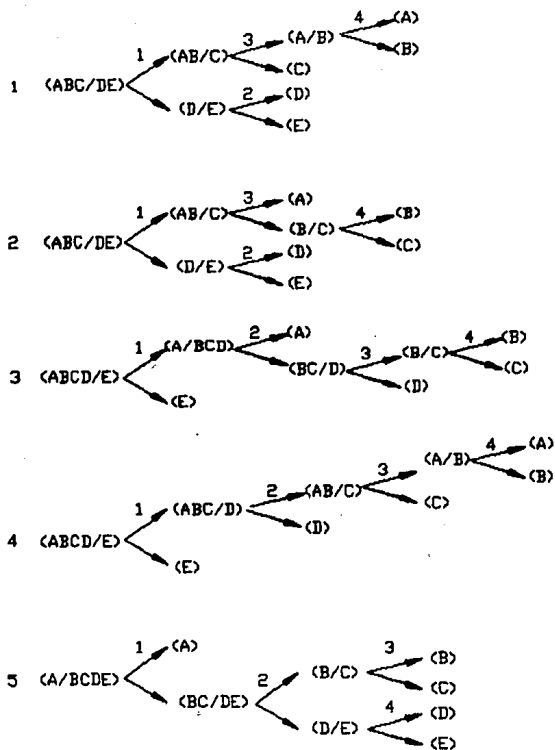


FIG. 4.12 a SECUENCIAS POSIBLES

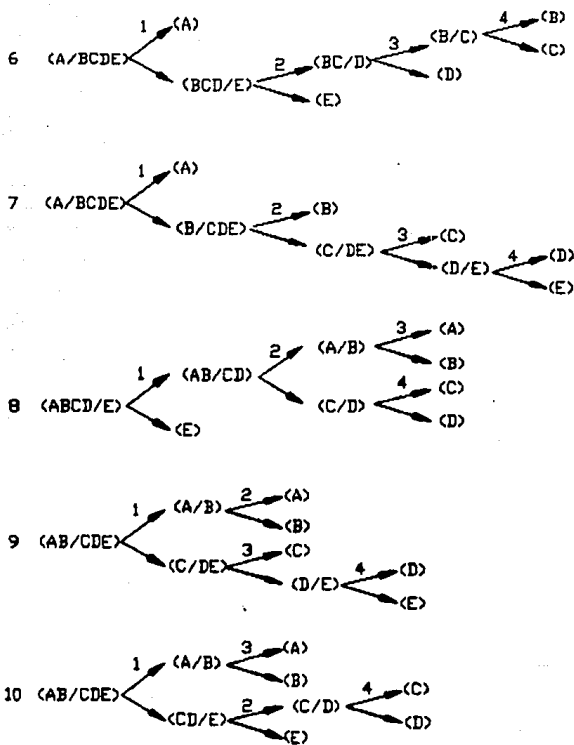


FIG 4.12 b SECUENCIAS POSIBLES

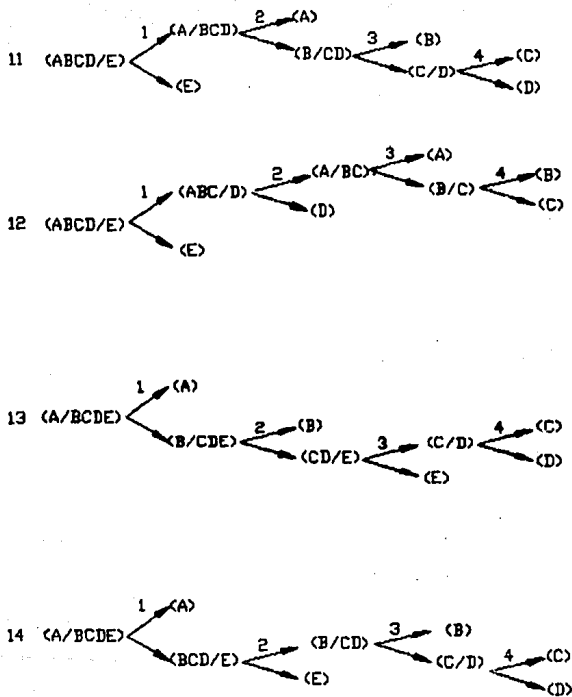


FIG. 4.12 c SECUENCIAS POSIBLES

A P L I C A C I O N E S

La optimización de las variables de operación para obtener la mejor estructura integrada fue realizada en todas las secuencias de la fig 4.12. La optimización fue realizada en dos etapas. Primero, la relación de reflujo (R/R_{\min}) se mantuvo constante en 1.2, mientras que las presiones de operación de las columnas variaron entre 27.6 y 2760 KPa. Posteriormente se fijó la presión en su valor óptimo obtenido y la relación R/R_{\min} fue variada entre 1.0 y 1.2. El valor inicial y el límite superior de R/R_{\min} están basados en heurísticas, el límite inferior se basa en el hecho de que las columnas de destilación no pueden ser operadas por debajo del reflujo mínimo permitido. El rango para las presiones fue determinado como se mencionó previamente.

Este método de optimización en dos etapas se empleó debido a la naturaleza del problema. Resultados similares fueron obtenidos cuando las 8 variables (4 presiones y 4 valores de relación de reflujo) fueron optimizados simultáneamente aunque el tiempo de computación aumenta significativamente y la optimización no siempre converge.

Las secuencias óptimas y casi óptimas fueron generadas usando el procedimiento descrito anteriormente. Los diagramas esquemáticos de estas secuencias están dados en las figs. 4.13, 4.14 y 4.15. Los costos y las variables de operación de las columnas se presentan en la tabla 4.10. Esta tabla además muestra las condiciones de operación óptimas y los costos de estas secuencias sin integración de calor.

Considerando los factores presentados en el paso 4 del procedimiento de síntesis, la secuencia # 2 fue seleccionada como la completamente óptima porque tiene los mínimos requerimientos de

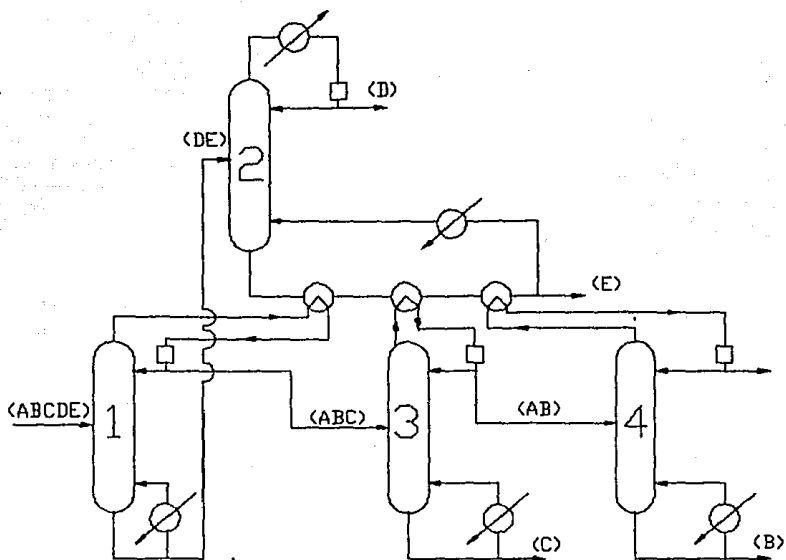


FIG. 4.13 DIAGRAMA DE FLUJO DE LA SECUENCIA #1

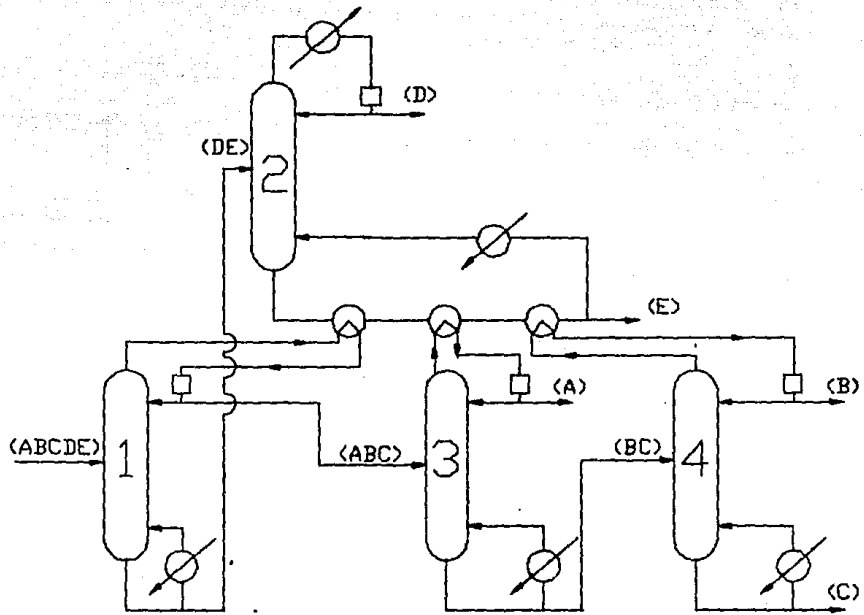


FIG. 4.14 DIAGRAMA DE FLUJO DE LA SECUENCIA #2

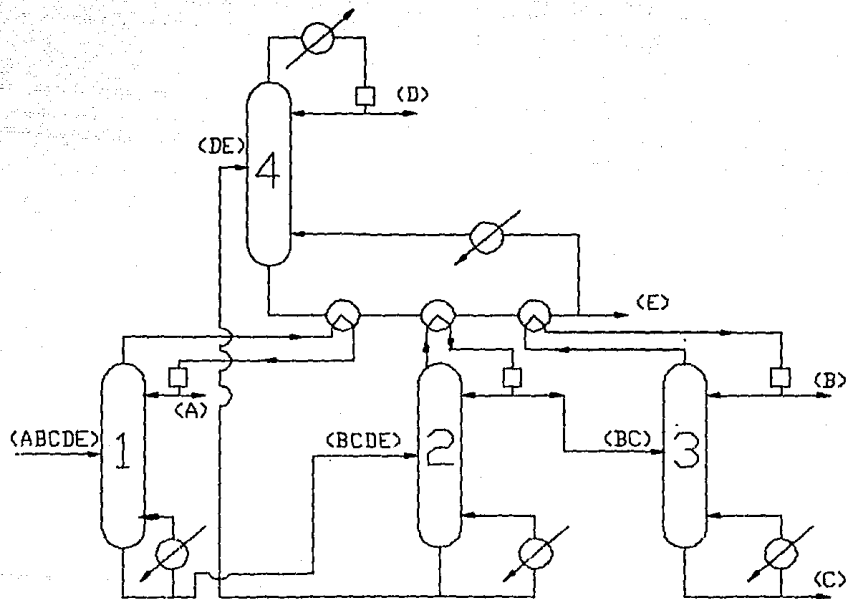


FIG. 4.15 DIAGRAMA DE FLUJO DE LA SECUENCIA #5

calentamiento y enfriamiento, esto favorece separaciones más directas que la secuencia # 1 y además tiene el costo de riesgo menor de las tres mejores estructuras.

La fig. 4.16 muestra la diferencia entre el costo hipotético óptimo (HVC) y el costo actual (AVC) el cual fué determinado después que la integración de calor actual fué llevada a cabo.

Es evidente la posibilidad de distinguir entre el mejor conjunto de secuencias sobre la base de los costos de riesgo hipotéticos cuando una distribución nítida existe entre las diferentes configuraciones. Esto es, no es necesario calcular el AVC para todas las secuencias consideradas en la optimización del HVC. La fig 4.16 muestra que tres de las secuencias óptimas están entre las secuencias predecidas por las heurísticas confirmando así la exactitud de éstas en la elección de las secuencias iniciales.

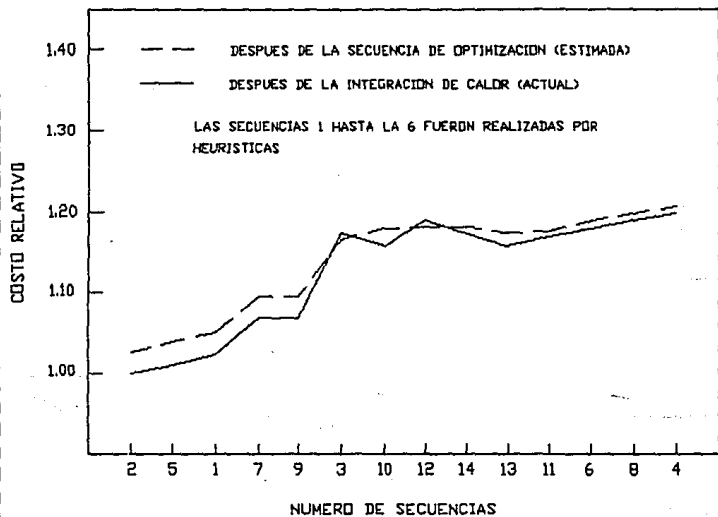


FIG. 4.16 COSTO RELATIVO

TABLA 4.10
 RESULTADOS PARA LAS SECUENCIAS OPTIMAS
 CON Y SIN INTEGRACION DE CALOR
 SECUENCIA # 1

COSTOS	\$2,549,475		\$2,854,249	
	CON INTEGRACION		SIN INTEGRACION	
SEPARACION	P(kPa)	R/RMIN	P(kPa)	R/RMIN
ABC/DE	1089	1.057	634	1.039
D/E	214	1.050	221	1.034
AB/C	1441	1.067	841	1.042
A/B	2689	1.091	1682	1.065

SECUENCIA # 2

COSTOS	\$2,516,861		\$2,855,500	
	CON INTEGRACION		SIN INTEGRACION	
SEPARACION	P(kPa)	R/RMIN	P(kPa)	R/RMIN
ABC/DE	1083	1.074	634	1.039
D/E	214	1.056	221	1.034
A/BC	2372	1.163	1613	1.045
B/C	1076	1.091	717	1.051

SECUENCIA # 5

COSTOS POR RIESGOS	\$2,539,089		\$2,888,273	
	CON INTEGRACION		SIN INTEGRACION	
SEPARACION	P(kPa)	R/RMIN	P(kPa)	R/RMIN
A/BCDE	2482	1.034	1014	1.030
BC/DE	903	1.065	593	1.039
B/C	1089	1.187	717	1.051
D/E	221	1.052	221	1.034

TABLA 4.11
 RESULTADOS PARA LAS SECUENCIAS OPTIMAS
 REPORTADAS EN LA LITERATURA
 RATHORE (1974)

COSTOS POR RIESGOS	= \$2,875,121	
SEPARACION	P(kPa)	R/RMIN
ABC/DE	758	1.038
D/E	496	1.043
A/BC	1551	1.050
B/C	807	1.112

SOPHOS (1978)

COSTOS POR RIESGOS		=	\$2,744,676
SEPARACION	P (kPa)		R/RMIN
ABC/DE	565		1.060
D/E	800		1.035
A/BC	1427		1.074
B/C	855		1.185

MORARI & FAITH(1980)

COSTOS POR RIESGOS		=	\$2,545,132
SEPARACION	P (kPa)		R/RMIN
ABC/DE	1083		1.074
D/E	214		1.056
A/BC	1696		1.050
B/C	1083		1.091

Para mostrar la importancia de la optimización de las variables de estado y la integración de calor, el costo por riesgo actual de las

14 secuencias fué evaluado a presión (P) y relación de reflujo (R/R_{\min}) constantes, 690 KPa (Rathore, 1974) y 1.2 (King, 1971) respectivamente.

Posteriormente las variables de operación P y R/R_{\min} fueron variadas para minimizar AVC. Estos datos junto con los resultados obtenidos para las secuencias cuando se consideró integración de calor, estan graficados en la fig. 4.17. Esta gráfica muestra que la optimización de variables de estado y la integración de calor juegan un importante papel en la síntesis de secuencias de destilación. La fig. 4.17 además confirma el argumento de que las mejores secuencias con integración de calor estan generalmente entre las mejores secuencias no integradas. Una observación interesante es que la integración de calor no siempre representa ahorros significativos; esto es verdad para algunas de las secuencias sub-óptimas. Por ejemplo, la versión integrada de las secuencias # 3, # 10, # 12, etc. son peores que las versiones no integradas de las secuencias # 2, # 5 y # 1.

COMPARACION CON TRABAJOS PREVIOS

Como se ha mencionado anteriormente diversos investigadores han estudiado este ejemplo. Los resultados descritos aquí son comparados con aquellos de Rathore (1974-b), Sophos (1978), y Morari & Faith (1980). Estos estudios fueron escogidos porque todos ellos involucran integración de calor y usan las mismas consideraciones que las descritas anteriormente. El óptimo reportado por estos investigadores

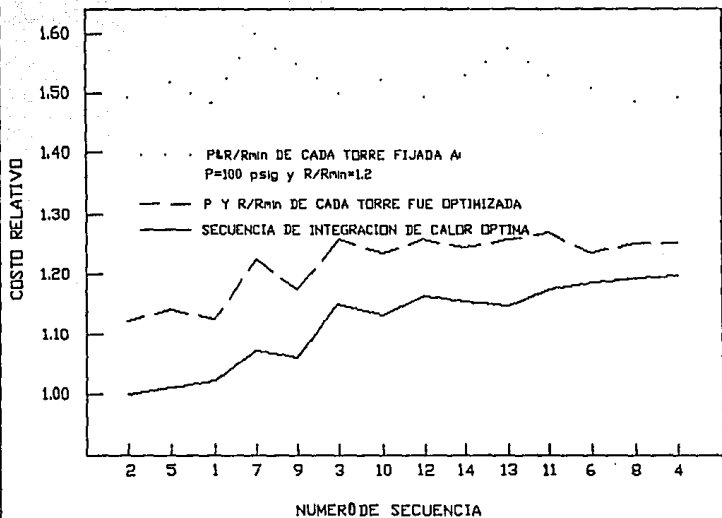


FIG. 4.17 COSTO RELATIVO DE SECUENCIAS INTEGRADAS VS NO INTEGRADAS

fué calculado usando las mismas correlaciones de costo, modelos de diseño y modelos termodinámicos para poder comparar sobre las mismas bases. Las variables de operación de estas configuraciones fueron optimizadas sin hacer cambios estructurales a la secuencia para evitar cualquier desviación que pudiera ser generada cuando se usan costos diferentes y cálculos de diseño. Estas secuencias estan representadas en las figs. 4.18, 4.19 y 4.20, los costos y las variables de operación se dan en la tabla 4.11.

La secuencia # 2, que es la óptima generada por Kattan, es significativamente más barata que la de Rathore y Sophos y ligeramente más barata que la de Morari & Faith. Otra importante comparación es el hecho que el arreglo de la columnas en la secuencia # 2 es el mismo

que el reportado en las secuencias anteriores (Rathore, Sophos y Morari). La principal diferencia entre las secuencias de Morari & Faith y la # 2, es que en la última una corriente fué combinada con tres columnas al mismo tiempo. Esto no fué posible para Morari & Faith debido a que ellos permitieron un máximo de tres columnas intercambiando calor simultáneamente.

El método sugerido por Kattan es más simple que otros métodos, los cuales generalmente requieren que el usuario tenga mayores conocimientos de optimización no lineal y técnicas de descomposición de problemas grandes.

Aunque la secuencia # 2 fué encontrada por todos los investigadores para ser la mejor secuencia tanto integrada como no integrada, la secuencia óptima fué cambiada.

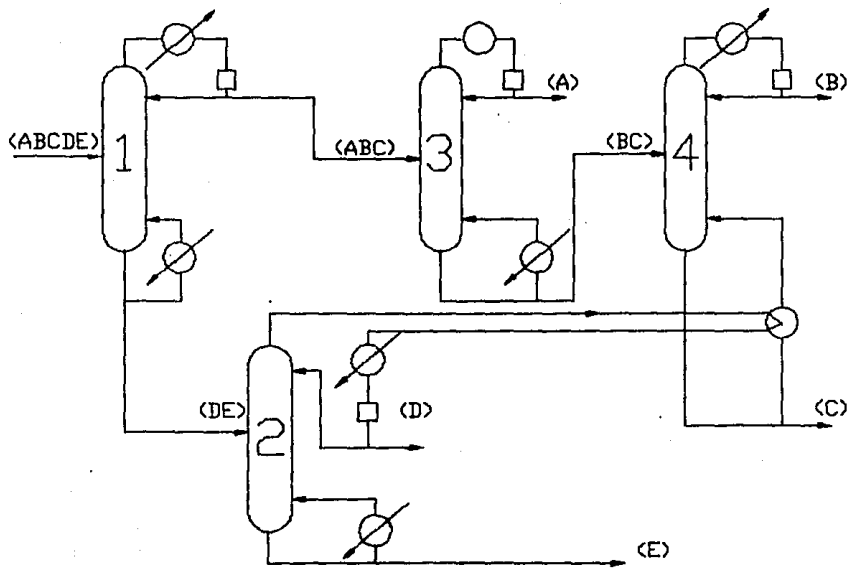


FIG. 4.18 DIAGRAMA DE FLUJO DE RATHORE

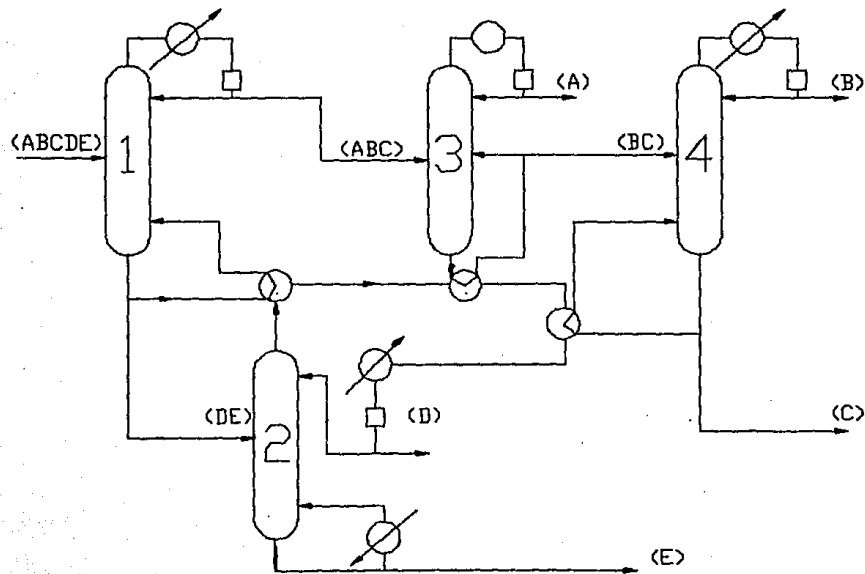


FIG. 4.19 DIAGRAMA DE FLUJID DE SOPHOS

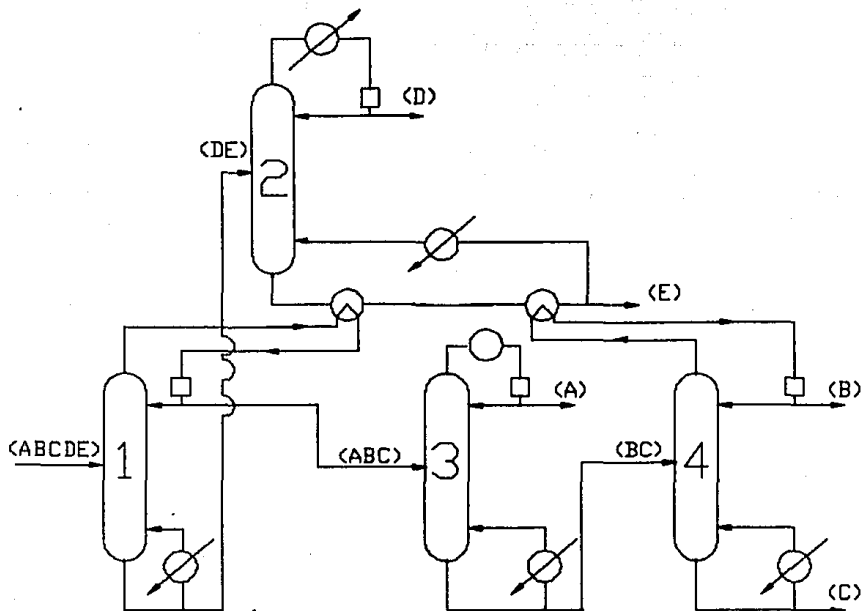


FIG. 4.20 DIAGRAMA DE FLUJO DE MORARI Y FAITH

En realidad la secuencia óptima tiende a convertirse más compleja con el tiempo. En otras palabras cada nuevo investigador que ataca el problema y encuentra un nuevo óptimo está haciendo más compleja la secuencia. Esto no es sorprendente, ya que es una gran ventaja de la implementación de las técnicas de síntesis de procesos, dando secuencias más complejas. Un alto grado de complejidad generalmente resulta por reciclar calor o corrientes de material, resultando menos control. Esto tiene mucha importancia, ya que una planta que no puede ser adecuadamente controlada podría no ser construida.

4.5 EJEMPLOS DE APLICACION DE SECUENCIAS DE DESTILACION CON INTEGRACION DE CALOR USANDO MILP.

Para ilustrar algunos aspectos del método MILP, a continuación se presentan dos ejemplos (uno de tres componentes y el otro de cinco). Cabe señalar que estos ejemplos fueron tomados de Andrecovich & Westerberg (1985) donde los costos de servicios y otros calculos de costos fueron realizados usando las ecuaciones presentadas por Kattan & Douglas (1986).

EJEMPLO 8 Y 9

Los datos necesarios para estos problemas se dan en las tablas 4.12 y 4.13

TABLA 4.12

DATOS PARA EL EJEMPLO B

	COMPONENTE	x
A	BENCENO	0.6
B	TOLUENO	0.3
C	CICLOHEPTANO	0.1

FLUJO = 250 Kg/mol hr⁻¹
 $\Delta T_{MIN} = 10 \text{ K}$

PRODUCTOS DESEADOS: BENCENO PURO
 TOLUENO PURO
 CICLOHEPTANO PURO

SE ESPECIFICA QUE LA RECUPERACION DE TODAS LAS COLUMNAS SERA DE 98%.

SERVICIOS	TEMP. (K)	COSTO (\$/10 ⁶ kJ)
1. AGUA DE ENFRIAMIENTO (CW) (20 K)	305	0.666
2. VAPOR DE 101.4 kPa (H1)	373	3.351
3. VAPOR DE 446.4 kPa (H2)	421	5.862
4. VAPOR DE 1.138 MPa (H3)	459	7.849
5. VAPOR DE 4.243 MPa (H4)	527	11.405

TABLA 4.13

DATOS PARA EL EJEMPLO 9

	COMPONENTE	x																		
A	PROPANO	0.05																		
B	ISOBUTANO	0.15																		
C	n-BUTANO	0.25																		
D	ISOPENTANO	0.20																		
E	n-PENTANO	0.35																		
<p>FLUJO = 907.2 Kg mol hr⁻¹</p> <p>$\Delta T_{MIN} = 10$ K</p> <p>PRODUCTOS DESEADOS: PROPANO PURO ISOBUTANO PURO n-BUTANO PURO ISOPENTANO PURO n-PENTANO PURO</p> <p>SE ESPECIFICA QUE LA RECUPERACION DE TODAS LAS COLUMNAS SERA DE 98%.</p>																				
<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th style="text-align: left;">SERVICIOS</th> <th style="text-align: center;">TEMP. (K)</th> <th style="text-align: center;">COSTO (\$/10⁶ kJ)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1. AGUA DE ENFRIAMIENTO (CW) (20 K)</td> <td style="text-align: center;">305</td> <td style="text-align: center;">0.666</td> </tr> <tr> <td>2. VAPOR DE 172.0 kPa (H1)</td> <td style="text-align: center;">389</td> <td style="text-align: center;">4.188</td> </tr> <tr> <td>3. VAPOR DE 414.0 kPa (H2)</td> <td style="text-align: center;">418</td> <td style="text-align: center;">5.705</td> </tr> <tr> <td>4. VAPOR DE 1.138 MPa (H3)</td> <td style="text-align: center;">459</td> <td style="text-align: center;">7.849</td> </tr> <tr> <td>5. VAPOR DE 2.862 MPa (H4)</td> <td style="text-align: center;">504</td> <td style="text-align: center;">10.202</td> </tr> </tbody> </table>			SERVICIOS	TEMP. (K)	COSTO (\$/10 ⁶ kJ)	1. AGUA DE ENFRIAMIENTO (CW) (20 K)	305	0.666	2. VAPOR DE 172.0 kPa (H1)	389	4.188	3. VAPOR DE 414.0 kPa (H2)	418	5.705	4. VAPOR DE 1.138 MPa (H3)	459	7.849	5. VAPOR DE 2.862 MPa (H4)	504	10.202
SERVICIOS	TEMP. (K)	COSTO (\$/10 ⁶ kJ)																		
1. AGUA DE ENFRIAMIENTO (CW) (20 K)	305	0.666																		
2. VAPOR DE 172.0 kPa (H1)	389	4.188																		
3. VAPOR DE 414.0 kPa (H2)	418	5.705																		
4. VAPOR DE 1.138 MPa (H3)	459	7.849																		
5. VAPOR DE 2.862 MPa (H4)	504	10.202																		

Cuatro tipos de columnas fueron considerados: una simple y tres complejas. Estas son ilustradas en las figuras 2.16-2.19. todos los modelos discutidos en esta seccion fueron resueltos con el paquete APEX-III.

(a) Efectos del RDIFF. RDIFF es la diferencia de temperaturas en el rehervidor impuesta arbitrariamente, usada para empezar cada iteración durante la generación de la superestructura. Un valor pequeño de RDIFF, es decir 5 K, dará más columnas y por lo tanto, más oportunidades para la integración de calor, generalmente conduce a secuencias más baratas. El ejemplo B fue resuelto con un RDIFF = 5 K y 20 K. Con RDIFF = 5 K produjo 80 columnas de todos los tipos que se han considerado en esta parte del trabajo, mientras que con RDIFF = 20 K se produjo 24 columnas. Las dos soluciones usando el modelo de transbordo se dan en la tabla 4.14. Las secuencias se presentan en las figuras 4.21 y 4.22. Para cada caso el modelo de transporte produce la misma secuencia óptima y cantidad de columnas pero a un costo ligeramente más alto. Las formulaciones del modelo de transporte y de transbordo usualmente producen la misma secuencia óptima. La diferencia en el costo de la secuencia óptima producida es debida principalmente a las diferentes formas en que son evaluados los costos de los intercambiadores de calor ya que el modelo de transbordo no define explícitamente las configuraciones de los intercambiadores de calor. En consecuencia, el costo de la secuencia óptima de acuerdo al modelo de transporte deberá ser más confiable.

(b) Efectos de la integración de calor. La integración de calor deberá conducir a menores costos totales. Esto llega a ser más notorio para problemas grandes (es decir, 5 componentes). Aún para una separación de tres componentes, el ahorro es significativo. La formulación del modelo de transporte para el ejemplo B fue resuelto con RDIFF = 5 para los casos de secuencias con y sin integración. Los resultados

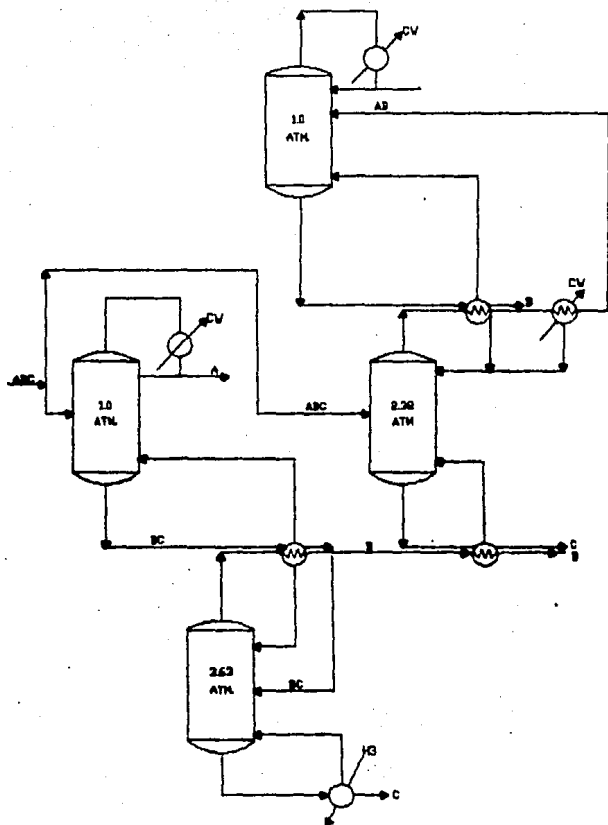


FIG. 4.22 EJEMPLO 8: SECUENCIA OPTIMA CON RDIFF=20
(MODELO DE TRANSBORDO)

obtenidos se reportan en la tabla 4.15.

La primera secuencia es idéntica a la fig. 4.21 mientras que la segunda es una columna Petlyuk. (fig. 2.19) con una presión de 1.0 Atm.

(c) Efectos de la adición columnas complejas: En muchos de los casos, debido a las bajas cargas de calor, las columnas complejas son más baratas que el arreglo equivalente de las columnas convencionales. Esto puede ser ilustrado resolviendo el ejemplo 9 con el modelo de transbordo y con $RDIFF = 20$, primero con columnas simples (tipo 2.16) y después con los cuatro tipos de columnas. Los resultados se presentan en la tabla 4.16.

Las secuencias se dan en las fig. 4.23 y 4.24.

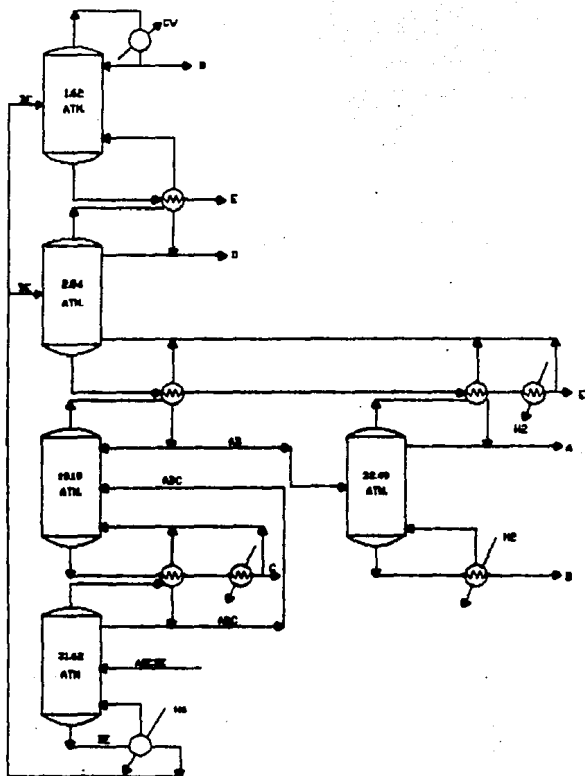


FIG. 423 EJEMPLO 9: SECUENCIA OPTIMA PARA COLUMNAS
SIMPLES. (MODELO DE TRANSBORDO CON RDIFF=20)

TABLA 4.14 EFECTOS DE RDIFF

RDIFF (K)	Nº DE COLUMNAS EN SS	COSTO DE LA SECUENCIA OPTIMA (\$)	SECUENCIA OPTIMA	TIPO DE COLUMNA *
5	80	1,228,634	A/BC	1
			B/C	1
			D/C	1
20	24	1,420,984	A/BC	1
			B/C	1
			AB/C	1
			A/C	1
PRESION EN LA COLUMNA (ATM)		FLUJO DE ALIMENTACION (Kgmol/hr)		
1.00		250.00		
2.17		52.65		
3.34		48.85		
1.00		175.50		
3.63		71.25		
2.38		74.50		
1.00		66.75		

TABLA 4.15 EFECTOS DE INTEGRACION DE CALOR

RDIFF (K)	No DE COLUMNAS EN SS	COSTO DE LA SECUENCIA OPTIMA (\$)	SECUENCIA OPTIMA	TIPO DE COLUMNA *
CON INTEGRACION DE CALOR	80	1,294,397	A/BC	1
			B/C	1
			B/C	1
SIN INTEGRACION DE CALOR	80	1,498,043	A/B/C	4
PRESION EN LA COLUMNA (ATM)		FLUJO DE ALIMENTACION (Kgmol/hr)		
1.00		250.00		
2.17		52.65		
3.34		48.85		
1.0		250.00		

SS = SUPERESTRUCTURA

* VER FIG. 2.16 Y 2.19

TABLA 4.16 EFECTOS DE AÑADIR COLUMNAS COMPLEJAS

RDIF (K)	No DE COLUMNAS EN SS	COSTO DE LA SECUENCIA OPTIMA (\$)	SECUENCIA OPTIMA	TIPO DE COLUMNA *
COLUMNAS SIMPLES SOLAMENTE	93	2,191,480	ABC/DE	1
			AB/C	1
			A/B	1
			D/E	1
			D/E	1
COLUMNAS SIMPLES Y COMPLEJAS	219	2,418,928	ABC/DE	4
			AB/C	1
			AB/C	1
			A/B	1
PRESION EN LA COLUMNA (ATM)		FLUJO DE ALIMENTACION (Kgmol/hr)		
31.62		907.20		
19.19		407.33		
32.69		183.47		
1.62		251.40		
2.84		248.47		
31.74		907.20		
7.52		187.89		
19.19		217.11		
20.45		182.12		

SS = SUPERESTRUCTURA

* VER FIG. 2.16 Y 2.19

4.6 APLICACION DE MILP EN SISTEMAS DE SERVICIOS

El orden para ilustrar la aplicación de MILP en síntesis de procesos empezará primero con el problema de síntesis de sistemas de servicios.

La síntesis del problema consiste en diseñar un sistema para abastecer demandas de electricidad, potencia para distintos procesos motrices, agua de enfriamiento y vapor de alta, media y baja presión.

El objetivo en el diseño es determinar la configuración y las condiciones de operación y los servicios de una planta que satisfacen el conjunto de demandas al mínimo costo de inversión y operación.

En la formulación del problema de síntesis de sistemas de servicios muchas configuraciones alternativas pueden ser consideradas sistemáticamente incluyéndolas en una superestructura tal como la que se presenta en forma simplificada en la fig. 4.25. En esta superestructura hay tres cabezales de vapor de alta, media y baja presión respectivamente. En cada nivel de presión discreta la presión de vapor y temperatura pueden ser consideradas, pero sólo un estado de operación debe seleccionarse en cualquier nivel respectivamente. El vapor puede ser generado con calentador de flama o de desecho a las presiones y temperaturas de acuerdo a las condiciones en los cabezales de vapor.

El vapor disponible en cada cabezal puede ser usado para suministrar una demanda de vapor requerida en las turbinas de vapor de ese nivel o de otro modo ser transferido al cabezal que tenga un nivel de presión de vapor inferior, por medio de reductores.

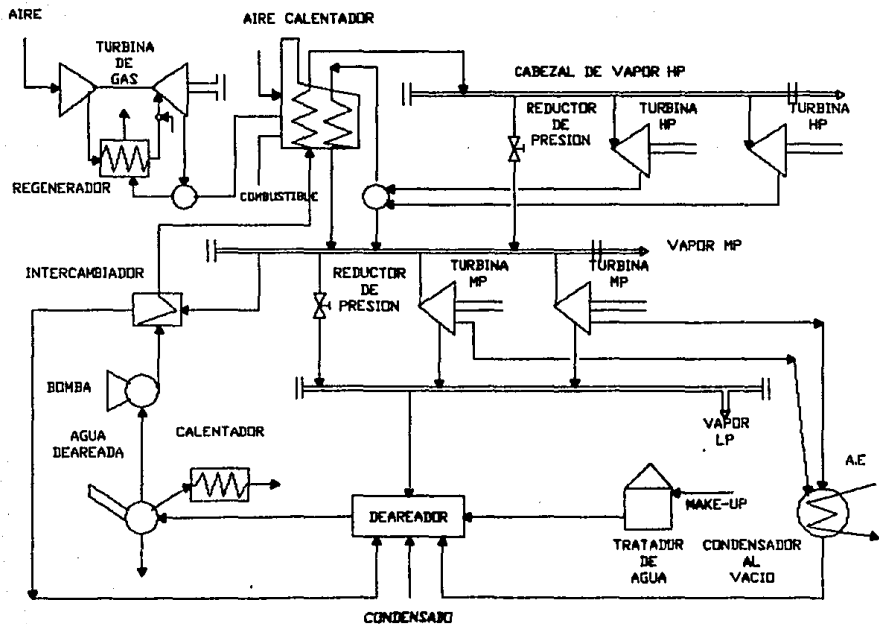


FIG. 4.25 SUPERESTRUCTURA PARA EL SISTEMA DE SERVICIOS

Hay tres tipos de dispositivos para suministrar potencia: turbina de vapor, turbina de gas y motores electricos.

Las turbinas de gas son del tipo ciclo abierto simple con aire como medio de trabajo. Los gases abandonando la sección de la turbina pueden ser usados en un regenerador o precalentador de aire comprimido antes de que éste entre a la cámara de combustion de la turbina de gas, o puede ser integrado con aire precalentado para combustion en calentadores o como medio de calentamiento en calentadores de desecho. La electricidad puede ser producida por una combinación de turbinas de vapor y gas conectadas con un cigüeñal en el generador eléctrico. Las demandas de potencia para accionadores puede por lo tanto ser satisfecha con turbinas de vapor, con turbinas de gas o motores eléctricos. Para completar la superestructura unidades auxiliares deben ser incluidas hay un condensador de vacío dependiente si hay condensación de vapores en las turbinas de vapor usadas. Hay además tratadores de agua para el make-up, y un deairador que trata el agua de retorno para los calentadores y los procesos que requieran agua tratada. El agua de retorno de los calentadores es llevada a la presión requerida por medio de una bomba, y puede ser precalentada mediante un contacto indirecto en calentadores que usan presión de vapor media.

La superestructura descrita anteriormente puede derivarse sistemáticamente, postulando la posible existencia de los diferentes tipos de unidades para satisfacer un conjunto dado en la demanda de servicio.

El problema de síntesis consiste en determinar la configuración de

lo servicios de la planta, los valores de presión de operación y temperatura de los tres niveles de vapor, el tipo y capacidad de los calentadores y todos los flujos de vapor. Además es necesario asignar motores eléctricos o turbinas para demandas de potencia y energía, así como el tipo de cada turbina usada en cada demanda. Papoulias y Grossmann tienen un modelo de MILP para la superestructura descrita anteriormente, usando como criterio de optimización el mínimo costo anual del sistema.

El modelo MILP es obtenido realizando balances de masa y energía en la superestructura para un conjunto discreto de condiciones de operación en cada cabezal de vapor. El costo de inversión de cada unidad potencial es modelado con una función costo de cargo fijo. Ver fig 4.26. Aprovechando las relaciones topológicas en la superestructura, se requieren variable binarias sólo para cada posible estado en los cabezales de vapor y para cada turbina potencial de gas y vapor respectivamente así como motores eléctricos.

Este modelo MILP ha sido aplicado a un problema "prueba" tomado de Nishio el cual consiste de sintetizar un sistema de servicios óptimo a una refinería de petróleo de 2×10^6 BPSD de capacidad.

El conjunto de las demandas en los servicios de la refinería incluye: electricidad, diez demandas de potencia externa para impulsores, tres demandas de potencia interna para el sistema de servicio y demandas para presión de vapor media, baja y agua para enfriamiento y tratada.

Tres condiciones de operación discreta fueron consideradas para cada uno: el cabezal de vapor de alta presión, el cabezal de media

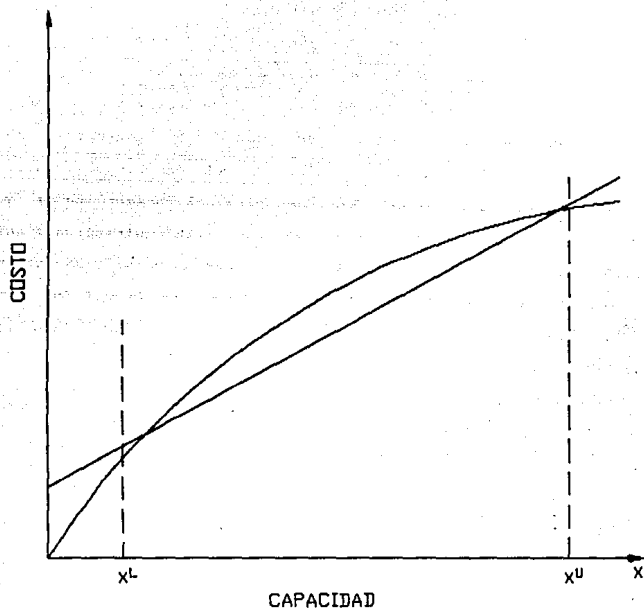


FIG. 4.26 APROXIMACION DE UNA FUNCION COSTO
CONCAVA CON UNA FUNCION COSTO DE
CARGO FIJO

presión (MP) y una para el cabezal de baja presión (LP).

Hubo dos partes estudiados en el ejemplo anterior. En el primer caso la electricidad fué producida usando sólo turbinas de vapor el cual es el mismo problema resuelto por NISHIO, quien empleo reglas heurísticas descartando el uso de turbinas de gas para la generación de la electricidad. En el segundo caso la posibilidad de producir electricidad con una turbina de gas fué incluido en la superestructura. El tamaño del problema fue 44 variable binarias, 253 variables continuas y 107 restricciones para el primer caso; y 45 variables binarias, 261 variables continuas y 115 restricciones en el segundo caso. La solución óptima para ambos casos fué obtenida aproximadamente en 90 seg. de tiempo CPU en un computador DS-20, usando el algoritmo de ramificación y acotamiento del paquete de cómputo LINDO.

La configuración óptima en el primer caso tuvo un costo anual de 26 M\$/año, esta configuración corresponde al ciclo de potencia de condensación Rankine.

En el segundo caso la configuración óptima tuvo un costo anual de 15.73 M\$/año la que corresponde a una reducción del 41 % en los costos de servicio de la planta, comparado con el caso anterior la configuración obtenida es una planta de servicios de ciclo binario. La razón para el mejoramiento en el segundo caso fué por incluir el gas en la configuración, el gas abandonando a la turbina, fué integrado con el calentador a alta presión reduciendo el consumo total de combustible en 37.4 %.

Como se observa en este ejemplo el problema MILP puede determinar

con un esfuerzo computacional razonable, las soluciones de costo mínimo para sistemas de servicios.

Se observa que la aproximación propuesta optimiza simultáneamente la estructura y las condiciones de operación de sistemas de servicios arbitrarios. Lo que es un importante mejoramiento sobre métodos previos reportados en la literatura. Otra importante característica de los métodos anteriores es que debido a su representación matemática pueden fácilmente sumarse a modelos de síntesis MILP para sistemas de procesamiento completo.

4.6.1 REDES DE RECUPERACION DE CALOR

Las redes de recuperación de calor es uno de los componentes cruciales en un sistema de procesamiento total. La síntesis del problema consiste de integrar en una red de intercambiadores de calor a contracorriente, un conjunto de corrientes de proceso calientes y frías, dado los flujos de calor y las temperaturas de entrada y objetivo. Un conjunto de servicios (por ejemplo combustible, vapor, agua de enfriamiento) es considerado para proporcionar el calentamiento y enfriamiento auxiliar que sea requerido.

El objetivo en este problema de síntesis es desarrollar una red que satisfaga las especificaciones de las corrientes al costo total anual mínimo.

Debido al gran número de posibles redes, sus respectivas configuraciones y a la no linealidad involucrada en la función de costo de inversión de los intercambiadores de calor la principal

aproximación que a aparecido en los últimos años desarrolla los siguientes objetivos los cuales simplifican y reducen el tamaño del problema de síntesis.

1. CONSUMO DE SERVICIOS MINIMOS

Este es el objetivo más importante para una eficiente red de intercambio de calor, puesto que corresponde a la máxima integración de calor que puede ser atendida en una red factible, para una mínima temperatura de acercamiento fijada. Como se muestra en la fig. 4.27, la máxima integración de calor es limitada por el punto de pinch. Ya que el costo de servicio es comúnmente el costo dominante, este paso permite la eliminación de muchas configuraciones de redes las cuales son ineficientes y costosas.

La predicción de los servicios mínimos puede ser formada primeramente para desarrollar la actual estructura de la red de recuperación de calor como lo a mostrado Hohmann & Linnhoff y Flower.

Este objetivo de diseño puede ser referido como la predicción de costos de servicios mínimos, cuando una variedad de servicios de enfriamiento y calentamiento son empleados.

2. MINIMO NUMERO DE UNIDADES

Otro importante objetivo es determinar el mínimo número de intercambiadores de calor que se requiere en la red. Este objetivo

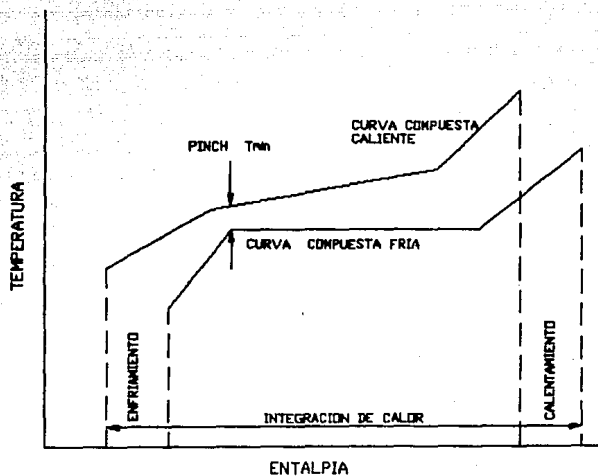


FIG. 4.27 CORRIENTES CALIENTES Y FRIAS PARA
MAXIMA INTEGRACION DE ENERGIA

intenta minimizar indirectamente el costo de inversión de la red ya que el costo de cada intercambiador es considerado como una función cóncava del área. Como es mencionado por Hohmann, el número mínimo de unidades es generalmente menor que el número total de corrientes de proceso y servicios necesarios.

Los dos objetivos de diseño han sido usados en métodos previos para la síntesis de redes eficientes de intercambiadores de calor: Linnhoff & Hindmars en el método Pinch de diseño, Cerda & Westerberg en una formulación LP y MILP que es basada en el problema transporte Papoulias & Grossmann han usado una aproximación similar como los autores anteriores, pero ellos usan formulaciones basadas en el método de transbordo el cual reduce considerablemente el tamaño del problema.

La idea básica en el modelo del transbordo para problemas de recuperación de calor es como sigue: como se muestra en la fig. 4.28, el calor puede referirse como un servicio que se transborda de las corrientes calientes a las corrientes frías a través de intervalos de temperaturas de acuerdo con restricciones termodinámicas en la transferencia de calor. En particular la segunda ley de la termodinámica requiere que los flujos de calor vayan de altas a bajas temperaturas y por tanto esas restricciones termodinámicas son tomadas en el modelo de la red. Esto puede ser actualmente hecho dividiendo los rangos de temperatura de entrada en intervalos de temperatura de acuerdo a las reglas propuestas por Linnhoff & Flower, Grimes o Cerda. Estos dividieron procedimientos para garantizar la transferencia factible de calor en cada intervalo de la red, dada una temperatura mínima de acercamiento. En esta forma como se muestra en la fig. 4.28,

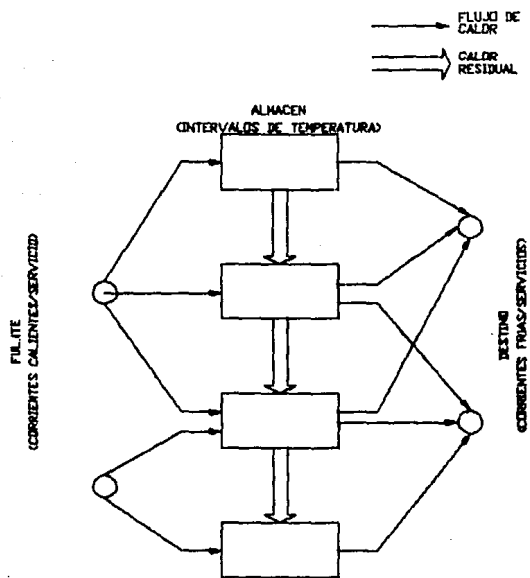


FIG. 4.28 MODELO DE TRANSBORDO EN LA RED DE RECUPERACION DE CALOR

puede considerarse que los flujos de calor de corrientes calientes se dirigen al mismo intervalo que las corrientes frías, pasando el calor restante al próximo intervalo de temperatura y así sucesivamente.

Por lo tanto el modelo de transbordo para redes de recuperación de calor tiene a las corrientes calientes y servicios de calentamiento como fuentes, los intervalos de temperatura como nodos intermedios y las corrientes frías y los servicios de enfriamiento como destinos.

Esta representación puede en realidad referirse como una superestructura compacta que encaja muchas configuraciones de redes.

Usando la representación de la fig. 4.28, y ejecutando los balances de materia y energía apropiados en cada nodo intermedio, Papoulias & Grossmann han desarrollado formulaciones LP para predecir el mínimo costo de servicios para el caso de combinaciones permitidas y prohibidas.

En el caso anterior el número de hileras en el LP es sólo igual al número de intervalos de temperatura, mientras el número de variables es uno menos que el número de servicios más el número de intervalos. Esto implica por ejemplo que para un problema que involucre 20 corrientes de proceso y 4 corrientes de servicios el tamaño del LP es de sólo 26 variables y 23 hileras. La localización del punto de Pinch se puede predecir con estos modelos LP ya que en la solución óptima son asociados con calores residuales iguales a cero.

Es además importante puntualizar que la formulación LP puede ser extendida fácilmente cuando los flujos son variables continuas y las temperaturas son variables discretas. Esta característica es particularmente útil por que incluye la red de recuperación de calor

en un sistema de proceso total como se muestra posteriormente.

La versión MILP del modelo de transbordo se usa para determinar las combinaciones y cargas de calor que tienden a parecer en la red para alcanzar el mínimo costo de servicios prefijado con el mínimo número de unidades. Los intervalos de temperatura son divididos en subredes de acuerdo a la localización del punto de Pinch prefijado por la solución LP. Las variables binarias se asignan a combinaciones potenciales de corrientes frías y calientes en cada subred y se usan en la función objetivo para minimizar el número de unidades.

Factores ponderados pueden ser asociados a los binarios y así reflejar niveles discretos de prioridad en las combinaciones.

Estas prioridades pueden ser asignadas sobre las bases de localización de corrientes en la planta, propósitos de control y seguridad o sobre las bases de materiales de construcción.

Aunque la formulación de transbordo MILP no da directamente la configuración de la red de intercambio de calor, su solución contiene información para derivar la estructura de la red.

Es interesante observar que recientemente Floudas ha dicho que es siempre posible con esta información derivar una configuración de red factible en la que cada intercambiador corresponde exactamente a una combinación predecida por el modelo de transbordo MILP.

Este resultado aplica en casos en donde el fraccionamiento o no fraccionamiento en subredes es llevado a cabo, cuando se formula el modelo.

Para problemas pequeños la configuración de las red se puede derivar manualmente de la información obtenida en la solución del

modelo de transbordo MILP. Sin embargo, si el número de corrientes es grande y si diferentes puntos de pinch están presentes en la red, la derivación de la configuración puede ser confusa. Por esta razón Floudas ha acoplado modelos de transbordo con un procedimiento de programación no lineal para generar automáticamente estructuras de redes las cuales permiten división de corrientes y by-pass.

4.7 SISTEMAS DE PROCESO COMPLETO

Para determinar el diseño óptimo de un sistema de proceso completo, es necesario coordinar las actividades de síntesis para los tres componentes básicos del sistema: procesos químicos, redes de recuperación de calor y sistemas de servicios (ver fig. 4.29). Esta coordinación capacita la evaluación de diferentes configuraciones de la planta química, así como la red de recuperación de calor y los sistemas de servicios, tomando explícitamente en cuenta las interacciones. Esto puede ser completado si la síntesis de un sistema de proceso completo es formulada como una MILP en la que los componentes son sintetizados simultáneamente. El procedimiento seguido a continuación ha sido propuesto por Papoulias & Grossmann.

PASO 1. Se desarrolla una superestructura para la planta química la que contiene por ejemplo diferentes reactores o secuencias de separación que serán analizadas. Estas alternativas pueden ser postuladas basadas sobre escrutamientos preliminares por el Ingeniero de diseño. Las necesidades de enfriamiento y calentamiento en esta superestructura son tratadas como un conjunto de corrientes calientes

y frías para la formulación de la red de recuperación de calor en el PASO 2. El correspondiente MILP para la planta química puede derivarse usando el modelo propuesto por Papoulias & Grossmann.

PASO 2. Dadas todas las corrientes de proceso (frías y calientes), en la superestructura de la planta química, los intervalos de temperatura para la red de recuperación de calor son derivados de sus posibles conjuntos discretos de temperatura de entrada y salida. Con los intervalos de temperatura el modelo de transbordo para los mínimos costos de servicio es formulado. En este modelo los flujos de las corrientes de proceso aparecen como variables que dependen de la actual estructura de la planta química. Ya que el modelo de transbordo no define explícitamente la configuración con los intercambiadores de la red de recuperación de calor, su costo de inversión es estimado como una función lineal del calor total transferido en la red.

PASO 3. La superestructura de la planta química junto con el modelo de transbordo para la red de recuperación de calor requerirá diferentes demandas que vienen a ser satisfechas por el sistema de servicio por lo tanto, una superestructura de los sistemas de servicios y su formulación MILP pueden derivarse como se discutió anteriormente. En este caso, sin embargo, las demandas para el sistema de servicios no son parametros fijos, sino variables que dependen de la estructura de la planta química y la red de recuperación de calor.

PASO 4. Los modelos MILP de la planta química, el sistema de servicios y el modelo de transbordo LP para redes de recuperación de calor son combinados juntos de modo de definir un modelo MILP para el sistema de proceso completo. Este modelo MILP integrado para el sistema de

proceso total puede entonces ser resuelto con ramificación y acotamiento para producir la configuración óptima de la planta química y sistemas de servicio. En esta forma resolviendo simultáneamente el problema MILP resultante, el sistema de proceso completo puede ser sintetizado tomando explícitamente en cuenta las interacciones de los tres mayores componentes. En general éste producirá un resultado diferente que en el caso cuando la planta química es sintetizada primero, seguido por la red de recuperación de calor y por último por el sistema de servicios.

PASO 5. Habiendo resuelto el MILP del sistema de proceso completo, la solución del modelo de transbordo LP indicará el costo mínimo de servicios para la planta química. Además, puesto que la solución definirá la existencia del proceso y corrientes de servicio, la configuración actual de la red de recuperación de calor con el mínimo número de unidades puede ser derivada en este paso con el modelo de transbordo MILP.

La estrategia citada anteriormente, toma explícitamente en cuenta las interacciones entre los tres mayores componentes. El MILP en el paso 4 explica cambios en el flujo de la planta química para la síntesis de la red de recuperación de calor y además explica los cambios en demandas de la planta y la red de recuperación para la síntesis de los servicios de la planta. Se observa además que en esta estrategia las redes de recuperación de calor se mezclan con el modelo de transbordo LP. Esto implica que los requerimientos mínimos de servicios para la red se predicen explícitamente, el costo de inversión de la red no es tratado rigurosamente porque el modelo LP no

define explícitamente su configuración. Puesto que la contribución de inversión de la red al costo total no es dominante, la aproximación lineal del costo para el calor total transferido puede ser adecuada en muchos casos.

La eficiencia de esta síntesis es claramente dependiente del tamaño del modelo MILP resultante para un sistema de proceso completo. El modelo MILP para sistemas de servicios y el modelo de transbordo LP para redes de recuperación de calor producen problemas de razonable tamaño como se discutió anteriormente. Por tanto el modelo MILP para el sistema de proceso completo puede ser de razonable tamaño ya que sólo alternativas seleccionadas son incluidas en la superestructura de la planta química.

Para mostrar la aplicación de la estrategia de síntesis a los sistemas de proceso completos el siguiente ejemplo de Papoulias y Grossmann se considera:

Se desea manufacturar 1000 lb/d de producto D (líquido) usando un gas que contiene a los componentes químicos A, B, C. La reacción química básica para el proceso es $A + B = D + E$ la cual es exotérmica y produce el producto E, el componente C es conocido como el inerte. Para esta planta química, los pasos básicos del proceso primero involucran compresión de la alimentación, después un circuito de reciclo que contiene al reactor, tanque flash, absorbedor, purga y compresor; el paso final involucra una secuencia para obtener D como componente puro esencialmente se considerará que el diseñador, habiendo hecho una selección inicial se enfrenta con las siguientes opciones mayores de diseño: a). La reacción puede ser llevada a cabo

con dos diferentes tipos de reactor a presión alta o media (40 bares o 100 bares. El reactor más barato tiene una conversión por paso del 10% a 40 bares y 18% a 100 bares; el reactor más caro tiene conversiones del 16% y 25% a las dos presiones respectivamente.

b). Puesto que el solvente W debe ser adicionado en el absorbedor, los componentes para la destilación son D, E, W. Las secuencias directa e indirecta de destilación se consideran como candidatas para esta separación. En una u otra secuencia la primera columna puede operar a presión media o baja (20 bares o 6 bares).

c). Para evitar el exceso del inerte "C" en el reciclo, se debe seleccionar una purga, la cual en turno tendrá un mayor efecto sobre la conversión total del componente A en el proceso. La proporción de purga a ser aplicada es 0.5, 2, 5, y 10%.

Dadas estas opciones el objetivo en el diseño del problema es determinar la configuración de la planta química junto con su red de intercambiador de calor y sistemas de servicios para maximizar el beneficio anual.

La superestructura de la planta química se muestra en la fig. 4.29. Este ejemplo fue resuelto por Papoulias & Grossmann con la estrategia citada anteriormente y usando los métodos cortos de Westerberg para la planta química. Sus resultados serán comparados al caso cuando los tres componentes son sintetizados separadamente para ilustrar las ventajas con una síntesis integrada.

El modelo integrado MILP consistiendo de la planta química, red de recuperación de calor y sistemas de servicios involucra un total de 34 variables binarias, 269 variables continuas 198 filas. Es interesante

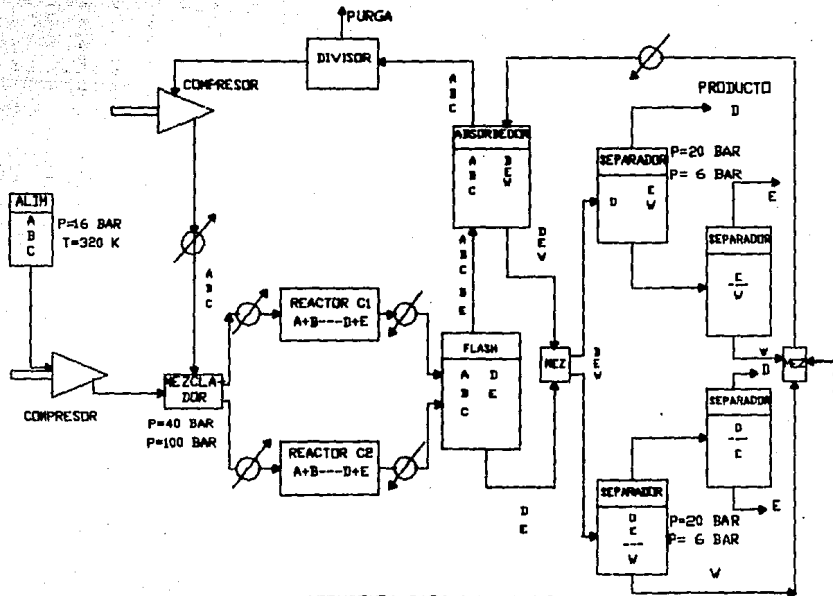


FIG 4.29 SUPERESTRUCTURA PARA UNA PLANTA QUIMICA

observar que en este MILP el modelo de transbordo para integración de calor sólo involucra 20 variables continuas y 14 filas. Las mayores contribuciones fueron aportadas de la planta química (14 binarias, 129 variables continuas y 105 filas) y de los sistemas de servicios (20 binarias, 120 variables continuas y 79 filas). El tamaño del último fue debido a la selección de tres estados de operación discretas para el vapor de alta y media presión.

La función objetivo en esta formulación MILP fue maximizar la ganancia anual del sistema completo. Esto llevó sólo tres minutos de tiempo CPU (DEC-20) para resolver el problema con el paquete de computación "LINDO".

La ganancia anual de la solución óptima fue de 9.695 M\$/año. La configuración óptima y condiciones de operación para la planta de proceso químico se muestra en la fig. 4.30. Se observa que la alimentación pasa a través de un compresor de dos etapas con enfriamiento interetapas y es comprimida a 100 bares. La alimentación comprimida es mezclada con el recirculamiento, y entonces entra al reactor más barato "C1" que tiene 28% de conversión por paso. El efluente del reactor es separado en una unidad flash en donde parte de los productos D y E son recobrados en los fondos, mientras el vapor va al absorbedor que utiliza solvente W para recobrar más de los productos remanentes D y E. La razón de purga óptima en el divisor es de 2% de la corriente de vapor saliendo del absorbedor, con la corriente restante que es recirculada al reactor después de ser recomprimida. La secuencia óptima de columnas de destilación necesarias para la purificación del producto es la secuencia directa a

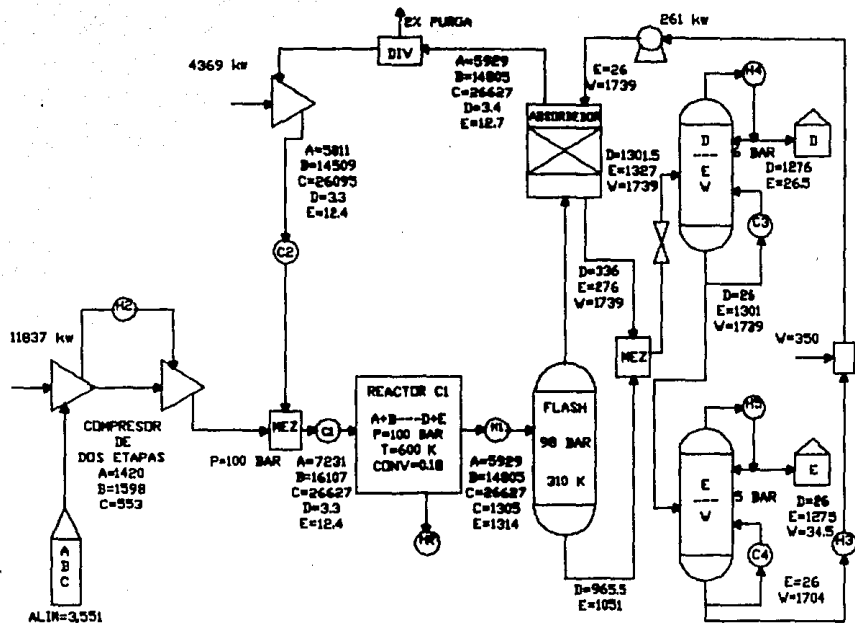


FIG. 4.30 CONFIGURACION OPTIMA DE UNA PLANTA QUIMICA

la presión más baja. La primera columna opera a 100 bares y separa el producto más volátil D de los componentes E y W, este último es reciclado al absorbedor.

La fig 4.31. muestra los flujos de calor en el modelo de transbordo, de las corrientes de proceso frías y calientes que son indicadas en la secuencia de la fig. 4.30 mediante círculos (H = caliente, C = frío).

Se observa en la fig. 4.31 que el punto de Pinch de la red de recuperación de calor es localizado a 381°K - 371°K , lo cual asegura que los servicios mínimos se empleen en la red de recuperación de calor. Es interesante notar que aunque hay sólo un punto de Pinch en la red, hay dos servicios de calentamiento seleccionados en la solución óptima (vapor de baja y media presión).

La configuración óptima y condiciones de operación para el sistema de servicios se muestra en la fig. 4.32. Se observa que este diseño representa un ciclo de potencia binario donde el ciclo primario es un generador de turbina de gas que conduce a los gases calientes al calentador de un ciclo secundario Rankine no condensante para ser usados como precalentamiento de aire.

Un calentador de presión media genera vapor a 17.2 bares y 600°K (presión discreta intermedia) y las turbinas son empleadas para satisfacer las demandas de potencias para la alimentación del compresor (11 837 kw), el compresor recirculado (4369 kw) y la bomba de agua de enfriamiento (1960 kw). la demandas de potencias para la bomba de agua de alimentación (269 kw) y bomba para reciclo de solvente (261 kw) son suministradas con motores eléctricos. Se observa

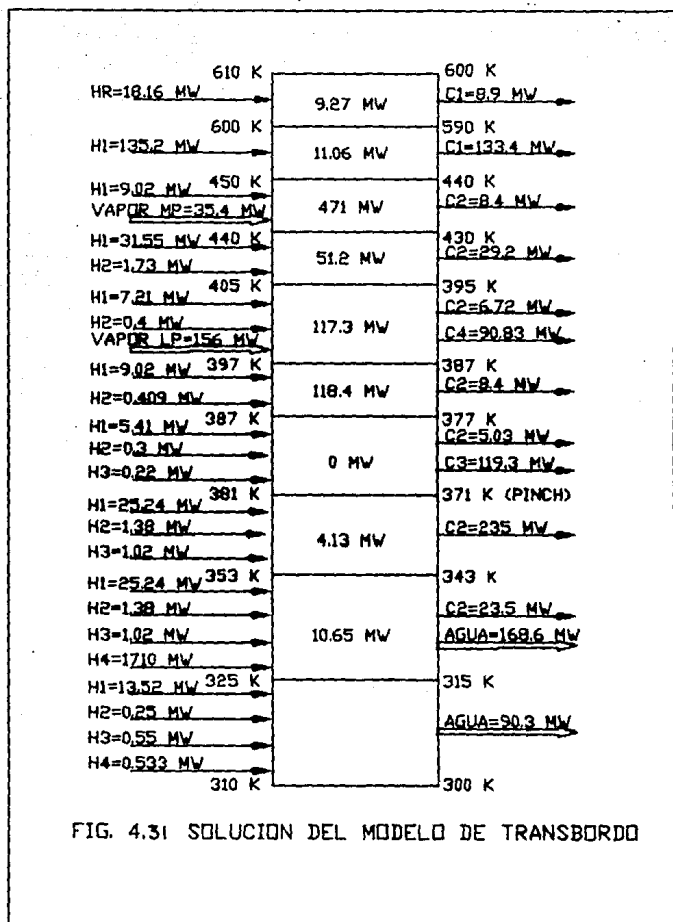


FIG. 4.31 SOLUCION DEL MODELO DE TRANSBORDO

que el vapor de media y alta es generado por la planta de servicios para los requerimientos de calentamiento en la red de recuperación de calor. Es interesante observar que aunque la red de recuperación de calor puede usar sólo vapor de baja es más eficiente para el sistema de servicios suministrar vapor de media y alta, ya que está mejor balanceado para satisfacer la demanda de potencia.

Finalmente, habiendo resuelto el modelo MILP integrado, el modelo de transbordo MILP se formula basado en la información contenida en la red de transbordo agrupada (flujos de corrientes de proceso y servicios), el modelo de transbordo MILP involucra 22 variables binarias, 80 variables continuas, 87 filas y fué resuelto con LINDO en 7 seg. La configuración de la red es mostrada en la fig. 4.33, y tiene las 15 unidades de "intercambiadores de calor" calculados por la solución de transbordo MILP. Se observa que en esta red de intercambio de calor el calentador de la primera columna de destilación (C3) es integrado con el efluente del reactor (H1). Además las corrientes H1 y C1 intercambian calor arriba y abajo del punto de Finch.

4.8 DESCOMPOSICION SECUENCIAL

Para comparar la solución integrada descrita anteriormente para el sistema de proceso completo, el problema fué resuelto por descomposición secuencial en la forma siguiente: primero el proceso químico no integrado fué optimizado separadamente mediante suministro de calor, enfriamiento y servicios de potencia a precios nominales. Con los flujos resultantes y las temperaturas de las corrientes frías y

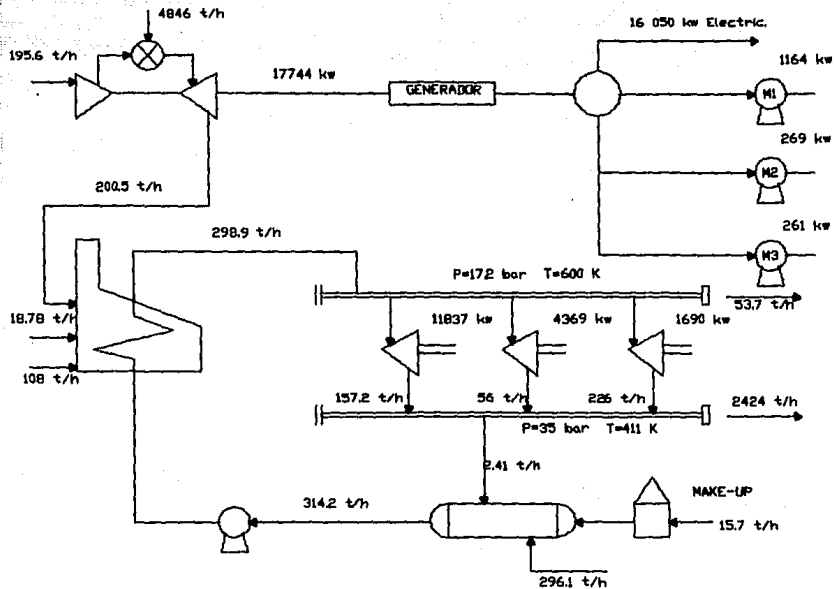


FIG. 4.32 CONFIGURACION OPTIMA DE UN SISTEMA DE SERVICIOS

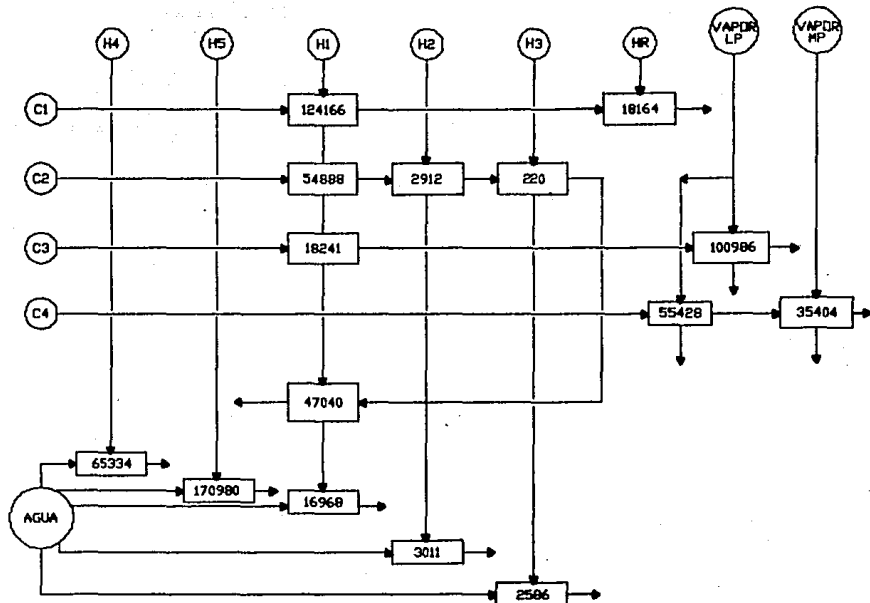


FIG. 4.33 RED DE RECUPERACION DE CALOR OPTIMA

calientes la red de recuperación de calor fue sintetizada con el modelo de transbordo. Finalmente, el sistema de servicios se sintetizó para las demandas de vapor y energía obtenidas en los pasos previos. Se observa que este esquema es intuitivamente la manera más obvia de descomponer el problema.

Inesperadamente una solución diferente se obtuvo mediante este esquema de descomposición. La ganancia anual obtenida fue 8.833 M\$/año, lo que representa una disminución de casi 9% (865×10^3 /año) en la ganancia con respecto a la solución integrada óptima. Es interesante observar que el proceso químico de la solución "descompuesta" no fue tan diferente. Este operando a 100 bares, tiene la misma secuencia pero se escoge al reactor más caro C2 (25% de conversión por paso) y la purga más grande (5%). Como resultado esta secuencia fue energéticamente más eficiente ya que el consumo en combustible (22.59 ton/hr) por requerimientos de servicios fue 4.4% más bajo. Sin embargo esta secuencia fue menos eficiente en la utilización de materias primas ya que tuvo una conversión total de 85.3%, lo cual es 4.5% menor al 89.8% de conversión de la secuencia mediante la solución MILP integrada. Ya que la conversión de materias primas es el punto decisivo en el costo, y no la energía, explica la solución óptima mostrada en la fig. 4.30.

Este ejemplo muestra claramente los peligros asociados con los esquemas de descomposición comunes para la síntesis de procesos. En particular en el problema anterior el esquema de descomposición da mucho más peso a los costos de servicios cuando se sintetiza la planta química, así como la integración de calor no se plantea antes de esta

etapa. Por lo tanto uno de los puntos importantes con el modelo MILP integrado es que toma en cuenta el trade-off económico entre capital, materias primas y energía en un sistema de proceso completo.

Es importante observar que si la planta química y la red de recuperación de calor son sintetizados simultáneamente con precios nominales para servicios y posteriormente se sintetiza el sistema de servicios en un segundo paso, Papoulias & Grossmann hayaron que en este ejemplo la solución es muy similar a la obtenida con el método integrado la diferencia principal fué en los sistemas de servicios los cuales fueron obligados a suministrar sólo vapor de baja presión para propósitos de calentamiento. Claramente una descomposición matemáticamente válida para el modelo MILP integrado se mantiene todavía como una cuestión de investigación abierta. Parece, sin embargo que gran cantidad de problemas MILP se pueden resolver con esfuerzo computacional razonable aunque ellos no sean descompuestos en subproblemas.

Del ejemplo anterior podemos decir que la aproximación MILP para sistemas de proceso completo es una herramienta sistemática y eficiente para seleccionar muchas alternativas de secuencias. Esto parecería particularmente relevante en la práctica, donde frecuentemente las alternativas que son potencialmente atractivas no pueden ser exploradas debido a las limitaciones de tiempo en un proyecto.

Se observa que el método de ramificación y acotamiento que utiliza enumeración de primera profundidad generará diferentes soluciones antes de encontrar la solución óptima. Por lo tanto, si estas

soluciones intermedias estan cerca de la óptima pueden ser consideradas para análisis más detallados. Otra manera de generar diferentes soluciones prometedoras a partir de la óptima , es resolver el MILP para encontrar soluciones cuya función objetivo caiga dentro de una tolerancia de la solución óptima.

4.9 OTRAS APLICACIONES CON MILP

En las secciones previas se han presentado diferentes aplicaciones de síntesis de proceso con técnicas MILP. Sin embargo es importante puntualizar que un número de otras aplicaciones ha sido recientemente reportado. Por ejemplo Andreovich & Westerberg han formulado la síntesis de secuencias de destilación con integración de calor como un método MILP. Estos autores proponen un procedimiento para generar una superestructura en la que variables binarias se asocian a cada columna potencial y donde la integración de calor es tratada a través de modelos de transporte o transbordo. Shelton & Grossmann desarrollaron un modelo de redes MILP para síntesis de sistemas de refrigeración en cascada que son integrados con redes de recuperación de calor.

Las variables binarias son asignadas a los compresores a niveles de temperatura potencial, mientras que la integración de calor es tratada mediante una versión modificada del modelo de transbordo.

Para ilustrar las ventajas de la síntesis simultanea con integración de calor, se considera el problema dado en la tabla 4.12, en la que una red de intercambio de calor y sistema de refrigeración debe ser diseñado dadas las corrientes frías y calientes de proceso.

Por simplicidad se considera una temperatura mínima de acercamiento de 10°K , así como un cambio de temperatura de 10°K para cada nivel de temperatura potencial en las etapas de refrigeración. Se seleccionó un refrigerante en este problema.

Dos métodos fueron considerados para la síntesis. En el primero una de las corrientes de proceso fue primeramente integrada para máxima recuperación de calor, y entonces el sistema de refrigeración se sintetizó basado en el resultado de las necesidades de enfriamiento de la corriente caliente. En el segundo caso la red de recuperación de calor fue sintetizada simultáneamente con el sistema de refrigeración usando el modelo MILP. La configuración óptima obtenida con el primer método se muestra en la fig. 4.34, y tiene un costo anual total de \$38 500/año (costos de compresión anualizados, electricidad, vapor y agua de enfriamiento). La configuración óptima obtenida con el segundo método se muestra en la fig. 4.35, tiene un costo anual de \$27 600/año. Así ahorros del orden del 28% son logrados mediante el método de síntesis simultánea.

Se observa que tres etapas son empleadas en la fig. 4.31, pero ahora la corriente C1 es dividida de modo de integrarla al sistema de refrigeración. Así tiene el efecto de eliminar el uso de agua de enfriamiento y disminuir la temperatura arriba de 300°K en las etapas posteriores, con lo cual los requerimientos totales de electricidad se reducen de 10.84 kw a sólo 6.43 kw. Los requerimientos de vapor son reducidos de 330 kw a 294 kw. Este ejemplo muestra la importancia de tener un cuadro matemático común para sintetizar sistemas simultáneamente con la red de recuperación de calor. Por lo tanto el

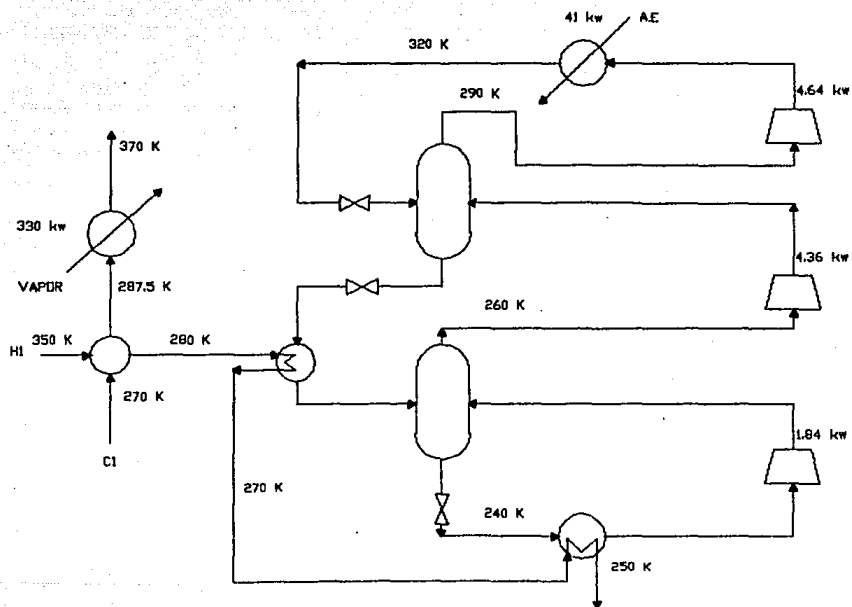


FIG. 4.34 CONFIGURACION OPTIMA CON SINTESIS SECUENCIAL

ejemplo muestra además las desventajas con los esquemas de descomposición secuencial

CAPITULO V

ANALISIS DE RESULTADOS

En este trabajo se han analizado diferentes métodos de síntesis que obtienen la secuencia de separación óptima en columnas de destilación tanto convencionales como no convencionales. Entre ellos destacan los métodos heurísticos, las estrategias evolutivas, los métodos termodinámicos y los algoritmos en sus formulaciones MILP y MINLP.

El desarrollo para síntesis de secuencias no convencionales ha sido a menor escala.

En lo referente a la utilización de métodos para la síntesis de procesos, el principal problema a que se enfrenta el Ingeniero, es la naturaleza combinatoria y la gran cantidad de secuencias que se generan de una separación en particular.

Por lo tanto para los métodos heurísticos, evolutivos y de objetivos termodinámicos se visualiza su gran utilidad en la descartación de secuencias no prometedoras, reduciendo el problema considerablemente.

De los resultados obtenidos, se argumenta que el enfoque termodinámico es efectivo en la búsqueda de secuencias óptimas y que es complementado con el criterio de relación de vapor mínima, que es también una medida de optimidad.

En este trabajo se planteó la idea de atacar los problemas de síntesis con una "combinación de métodos", debido principalmente a las ventajas que se obtienen en los resultados.

De esta forma la heurística se aplicó para descartar alternativas que no son prometedoras o para generar excelentes secuencias iniciales. La técnica de objetivos termodinámicos se empleó para desarrollar límites o representaciones que eliminaron aquellas alternativas que no son atractivas energéticamente, finalmente los métodos algorítmicos se utilizaron para generar secuencias automáticamente en las que las interacciones y puntos de modelado son completamente considerados.

De los resultados obtenidos en las metodologías de programación mixta entera, en sus formulaciones MILP y MINLP, han quedado establecidos los siguientes pasos cuando se emplean estas técnicas:

1. Desarrollo de una superestructura basada en destilación, la cual tiene incluidas todas las configuraciones potenciales, así como opciones de mezclado, división y recirculamiento.
2. Simulaciones en cada columna de destilación.

3. Formulación matemática de la superestructura como un problema de programación mixta entera.

La solución de esta formulación matemática, proporciona la secuencia de separación óptima que puede ejecutar la tarea deseada.

En lo tocante a las columnas complejas y debido a la escasa investigación que se ha hecho al respecto, se plantea el siguiente panorama general:

Este tipo de columnas traen inherentes ahorros de costos de operación y de capital.

Se recolectaron los mayores resultados para cada uno de los esquemas ternarios discutidos anteriormente con la esperanza de que estos formen las bases para un procedimiento esquemático para el diseño conceptual de secuencias de separación.

1. secuencias simples:

- Use la secuencia directa cuando:

$$X_A / (X_A + X_C) > \max(\mu, \lambda)$$

- Use la secuencia indirecta cuando:

$$X_A / (X_A + X_C) < \max(\mu, \lambda)$$

- Calcule el flujo de vapor si:

$$\max(\mu, \lambda) > X_A / (X_A + X_C) > \min(\mu, \lambda)$$

Donde:

$$\mu = \frac{\alpha_{AB} - 1}{\alpha_A - 1}$$

$$\lambda = \frac{\alpha_{AB} - 1}{\alpha_A - 1}$$

2. columnas con salidas laterales:

- (a) Considere el emplear siempre una columna con salida lateral cuando $X_c < 0.2$.
- (b) Considere el emplear salida lateral cuando la columna está en un reciclo y no se requiera gran pureza de la corriente lateral.
- (c) Considere una salida lateral arriba de la alimentación cuando el componente(s) intermedios son más difíciles para separar del componente más pesado que del clave ligero. De otro modo considere una salida lateral abajo de la alimentación.

COLUMNAS CON SECCIONES LATERALES

- (a) Considere usar una columna con sección lateral cuando menos del 30% de la alimentación es componente intermedio.
- (b) Si, en suma, X_A es cercano a μ , así dado por la ec.2.3, los ahorros son más significativos.
- (c) Los máximos ahorros posibles son 50% para una mezcla ternaria y son independientes de las volatilidades relativas.

COLUMNAS PETLYUK

- (a) Los máximos ahorros de vapor en la columna Petlyuk son 50%, y son aprovechados para $X_A = \mu$ y $X_B \rightarrow 0$.

- (b) Los ahorros de los flujos de vapor son más significativos para la columna Petlyuk que para cualquier otra clase de columna compleja.
- (c) Para bajos X_A , se debe considerar usar una columna Petlyuk cuando X_A es aproximado a μ dentro de 0.3. Sin embargo, una columna con sección lateral puede preferirse, en este caso los resultados aproximadamente son los mismos en ahorros de vapor pero se requieren pocos platos y por tanto bajos costos de capital.
- (d) Las torres Petlyuk pueden tener una ventaja significativa para valores de X_A moderados o grandes, especialmente cuando la separación A/B es más difícil o no tan fácil que la separación B/C; o cuantitativamente cuando X_A^* es menor que 0.5.
- (e) Las heurísticas sugieren el uso de columnas Petlyuk cuando gran parte de la alimentación es producto intermedio, no son correctas en todos los casos, debido a que la decisión depende de las volatilidades relativas.

COLUMNAS CON PREFRACCIONADOR

- (a) Los máximos ahorros en flujo de vapor en la secuencia del prefraccionador dependen de las volatilidades relativas y además de cual de las corrientes de producto del prefraccionador controla

la relación de vapor en la segunda columna. Los máximos ahorros son:

- (i) Si la alimentación superior controla, los ahorros máximos fraccionales son $(\alpha_A - \alpha_B)/(\alpha_A - 1)$, los cuales ocurren cuando $X_B \rightarrow 1$, si este punto es tal que la alimentación superior controle.
 - (ii) Si la alimentación inferior controla, entonces los ahorros máximos son encontrados para $X_c = 0$ y son iguales a $(\alpha_B - 1)/(\alpha_A - 1)$.
- (b) No se deben considerar columnas con prefraccionadores en alternativas de diseño, si se pueden usar torres Petlyuk en su lugar.

Los resultados anteriores son cualitativamente correctos para mezclas conteniendo más de 3 componentes cuando éstas son agrupadas en un sistema pseudoternario. Sin embargo, los métodos son más cuidadosamente extendidos cuando se trata de un gran número de componentes. Algunos progresos en esta área han sido realizados; ecuaciones de diseño para la evaluación del flujo de vapor mínimo están disponibles, o pueden ser derivadas siguiendo el razonamiento desarrollado para el caso ternario.

Los ahorros fraccionales máximos logrados en el flujo de vapor, son independientes del número de componentes en la alimentación y que siguen la fórmula $(S-1)/S$, donde S es el número de tareas de separación que una torre compleja ejecuta simultáneamente. Por lo

tanto los ahorros máximos se espera sean 50% para todos los esquemas complejos que ejecutan dos separaciones a la vez, mientras que ellos aumentan a 66.7% cuando tres separaciones son llevadas a la vez.

En lo tocante a los resultados obtenidos en el tratamiento de secuencias de destilación con integración de calor, empleando técnicas de programación lineal (MILP), se procedió de la siguiente forma:

1. Se genera la superestructura.
2. Se define una función objetivo y las restricciones del problema usando las formulaciones de transporte y transbordo, enseguida se optimiza el MILP resultante usando un "paquete" apropiado de solución.

Es importante que se comprenda, según los ejemplos presentados en este trabajo, que toda esta gama de técnicas que utiliza la síntesis de procesos, va enfocada al mejoramiento de los procesos existentes y a la búsqueda de las condiciones óptimas de operación en columnas para el ahorro de energía y por consiguiente económico, en la Industria Química de Proceso (CPI).

CAPITULO VI

CONCLUSIONES

La síntesis de procesos se ha desarrollado considerablemente en los últimos 10 años, en el transcurso de los cuales han aparecido cerca de 190 artículos. El área que más ha sido estudiada por los Ingenieros Químicos es la relacionada con las redes de intercambio de calor, con más de 39 artículos en relación a este tópico. Se tienen a la fecha artículos para la resolución de problemas industriales que muestran claramente ahorros en costos de operación y de capital.

La síntesis de sistemas de separación es una área que ha dado resultados muy significativos, pero aún hay mucho por hacer. Los trabajos iniciales se han concretado a los sistemas multicomponentes de conducta "bien conocida". heurísticas muy importantes han sido

desarrolladas, pero es necesaria la investigación para otros no tan ideales. En lo referente al trabajo computacional es indispensable un amplio impulso para analizar diversos casos especiales, también se requieren trabajos termodinámicos para desarrollar mejores heurísticas.

Es necesario direccionar la búsqueda en lo concerniente a la síntesis de secuencias con integración de calor. La investigación se ha limitado a la utilización de columnas de destilación convencionales, soslayando el desarrollo en el área de columnas complejas (torres con salidas laterales, rectificador lateral, secciones de agotamiento, prefraccionador, etc.).

En este trabajo se ha hecho una recopilación de los métodos empleados en la síntesis de procesos, remarcándose nuestro interés en la síntesis de columnas de destilación. Se han tratado aquí desde los métodos heurísticos hasta aquellos que emplean técnicas de programación mixta entera, tanto lineal como no lineal.

El problema de síntesis de secuencias de destilación trae consigo, el de involucrar en una superestructura, todas las configuraciones potencialmente factibles, para después resolverla como un problema de programación lineal o no lineal y obtener la secuencia de separación óptima.

En este trabajo se presentan los algoritmos para poder derivar una superestructura y resolverla mediante programación ya sea MILP o MINLP.

Se ha recalcado la importancia de los métodos algorítmicos en la síntesis de procesos y del acoplamiento conjunto con los métodos heurísticos y termodinámicos. Demostrándose así que la programación

mixta entera tanto lineal como no lineal, es la herramienta fundamental en estas técnicas de optimización.

El trabajo también analiza secuencias de separación con columnas complejas en donde es posible visualizar, los ahorros económicos en el empleo de éstas.

Los sistemas de columnas de destilación con integración de energía son problemas de gran tamaño y complejidad, especialmente para columnas no convencionales. Se proporciona aquí un método matemático rápido para resolver estos casos. El método MILP presentado puede simultáneamente manejar columnas simples y complejas. Una vez que los modelos han sido formulados, los problemas se resuelven con muy poco tiempo computacional.

Los modelos de programación mixta entera se pueden integrar de manera que sinteticen sistemas de proceso completo. El trabajo contempla algunas aplicaciones a este respecto.

Es importante mencionar que los métodos algorítmicos tratados en este trabajo no se limitan a mezclas de pocos componentes, pueden ser generalizados, siendo herramientas poderosas en optimización de procesos.

Se ha demostrado que con el empleo de estas técnicas, se obtienen las mejores secuencias de separación en donde la característica principal es un ahorro tanto energético como económico substancial.

BIBLIOGRAFIA

1. NISHIDA, N., G. STEPHANOPOULOS AND A. W. WESTERBERG, "JOURNAL REVIEW : PROCESS SYNTHESIS", AIChE J., 27, PAG. 321, (1981).
2. WESTERBERG, A. W., "A REVIEW OF PROCESS SYNTHESIS", AIChE J., 27, (1981).
3. GROSSMANN, I. E., "MIXED-INTEGER PROGRAMMING APPROACH FOR THE SYNTHESIS OF INTEGRATED PROCESS FLOWSHEETS", COMPUTER & CHEMICAL ENGINEERING, 9, PP. 463-482, (1985).
4. TAO, BERNARD, "LINEAR PROGRAMMING", CHEMICAL ENG., JULY, PP. 146-151, (1989).
5. ALLEN DEREK H., "HOW TO USE MIXED-INTEGER PROGRAMMING" CHEMICAL ENGINEERING, MARCH, PP. 114-120, (1976).

6. ANDRECOVICH M. J., AND WESTERBERG, A. W., "AN MILP FORMULATION FOR HEAT-INTEGRATED DISTILLATION SEQUENCE SYNTHESIS", AICHE JOURNAL, SEP, PP. 1461-1474, (1985).
7. KOCIS, GARY R., AND IGNACIO E. GROSSMANN, "GLOBAL OPTIMIZATION OF NON CONVEX MIXED-INTEGER NON LINEAR PROGRAMMING (MINLP) PROBLEMS IN PROCESS SYNTHESIS", AMERICAN CHEM. SOCIETY, (1988).
8. ENCYCLOPEDIA OF PHYSICAL SCIENCE AND TECHNOLOGY, "LINEAR PROGRAMMING", ACADEMIC PRESS, VOL 7, (1987).
9. LUEMBERGER DAVID G., "INTRODUCTION TO LINEAR AND NO LINEAR PROGRAMMING", ADDISON-WESLEY, PP. 11-63, (1980).
10. CERDA, J., W. WESTERBERG, D. MASON AND B. LINNHOFF, "MINIMUM UTILITY USAGE IN HEAT EXCHANGER NETWORK SYNTHESIS-A TRANSPORTATION PROBLEM", CHEM. ENG. SCI., 38, PP. 373, (1983).
11. GLINDS, K. AND MALONE, M. F. "NET WORK CONSUMPTION IN DISTILLATION-SHORT-CUT EVALUATION AND APPLICATIONS TO SYNTHESIS", COMPUTER & CHEM. ENG., 13, PP. 295-305, (1989).
12. MESZAROSS, I. AND FONYO, Z. "EXTENSIVE STATE OPTIMIZATION FOR HEAT-INTEGRATED DISTILLATION COLUMNS", COMPUTER & CHEM. ENG., 12, PP. 225-229, (1988).

13. PAULES, G.E. AND FLOUDAS, C.A. "SYNTHESIS OF FLEXIBLE DISTILLATION SEQUENCES FOR MULTIPERIOD OPERATION", COMPUT. CHEM. ENG., 12, PP. 267-280, (1988).
14. MESZAROS, I. AND FONYO, Z. "A NEW BOUNDING STRATEGY FOR SYNTHESIZING DISTILLATION SCHEMES WITH ENERGY INTEGRATION".
15. GLINDS, K. AND MALONE, M. F. "DESIGN OF SIDESTREAM DISTILLATION COLUMNS", IND. ENG. CHEM. PROCESS. DES. DEV., 24, PP. 822-828, (1985).
16. ISLA, MIGUEL A. AND CERDA, J. "SIMULTANEOUS SYNTHESIS OF DISTILLATION TRAINS AND HEAT EXCHANGER NETWORKS", CHEM. ENG. SCIENCE, 42, PP. 2455-2463, (1987).
17. KAKHU, A. I. AND FLOWER, J.R. "SYNTHESIZING HEAT-INTEGRATED DISTILLATION SEQUENCES USING MIXED INTEGER PROGRAMMING", CHEM. ENG. RES. DES., 66, PP. 241-254, (1988).
18. KATTAN, M.K. AND DOUGLAS, P. L. "A NEW APPROACH TO THERMAL INTEGRATION OF DISTILLATION SEQUENCES", CANADIAN JOURNAL, 64, PP. 162-170, (1986).
19. FLOUDAS, C.A. AND PAULES, G.E. "A MIXED-INTEGGER NONLINEAR

- PROGRAMMING FORMULATION FOR THE SYNTHESIS OF HEAT-INTEGRATED DISTILLATION SEQUENCES"., COMPUT. CHEM. ENG., PP. 531-546, (1986).
20. FLOUDAS, C.A. AND ANASTASIADIS, S. "SYNTHESIS OF DISTILLATION SEQUENCES WITH SEVERAL MULTICOMPONENT FEED AND PRODUCT STREAM"., COMP. ENG. SCIENCE, 43, PP. 2407-2419, (1988).
21. FLOUDAS C.A. "SEPARATION SYNTHESIS OF MULTICOMPONENT FEED STREAMS INTO MULTICOMPONENT PRODUCT STREAMS"., AIChE JOURNAL, 33, PP. 540-550, (1987).
22. GLINOS, K. AND MALONE, M. F. MINIMUM VAPOR FLOWS IN A DISTILLATION COLUMNS WITH A SIDESTREAM STRIPPER"., IND. CHEM. PROCESS., 24, PP. 1087-1090, (1985).
23. GLINOS, K. AND MALONE, M. F. "SHORT EVALUATIONS OF ΔT AND $Q/\Delta T$ FOR THE SYNTHESIS OF HEAT INTEGRATED DISTILLATION SEQUENCES"., AIChE JOURNAL, 31, PP. 1039-1040, (1985).
24. GLINOS, K. AND MALONE, M. F. "OPTIMALITY REGIONS FOR COMPLEX COLUMN ALTERNATIVES IN DISTILLATION SYSTEMS"., CHEM. ENG. RES. DES., 66, PP. 229-240, (1988).
25. FAIR, R.J. AND BARNICKI, S.D. "SEPARATION SYSTEM SYNTHESIS: A KNOWLEDGE APPROACH. 1. LIQUID MIXTURE SEPARATIONS"., IND. CHEM. RES., 29, PP. 421-432, (1990).