



INSTITUTO TECNOLÓGICO DE CELAYA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

“OPTIMIZACIÓN DE LAS VARIABLES DE
DISEÑO DE SECUENCIAS DE DESTILACIÓN
CON ACOPLAMIENTO TÉRMICO”

POR
M.C. NELLY RAMÍREZ CORONA

TESIS PRESENTADA AL DEPARTAMENTO DE
INGENIERÍA QUÍMICA COMO REQUISITO
PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS EN
INGENIERÍA QUÍMICA

CELAYA, GTO., JUNIO 2006

OPTIMIZACIÓN DE LAS VARIABLES DE DISEÑO DE SECUENCIAS DE DESTILACIÓN CON ACOPLAMIENTO TÉRMICO.

Por: Nelly Ramírez Corona

RESUMEN

Debido a que el número extra de grados de libertad presente en los sistemas de destilación con acoplamiento térmico complica la determinación de sus variables de diseño, optimización y control, es evidente que la adecuada elección de valores iniciales y/o límites para el conjunto de variables a determinar resulta de gran importancia. En base a lo anterior, en el presente trabajo se analiza el comportamiento de las variables asociadas a los flujos de interconexión de tres secuencias de destilación con acoplamiento térmico (secuencia térmicamente acoplada directa, secuencia térmicamente acoplada indirecta y secuencia con acoplamiento térmico total Petlyuk/Kaibel), tanto en condiciones de operación como en condiciones límite (reflujo mínimo, utilizando extensiones del método de Underwood). Se presenta también la formulación y solución al problema de optimización del diseño preliminar de dichas secuencias, mediante técnicas de programación matemática, determinando el valor óptimo para todo el conjunto de variables. Se encontró que a pesar de que los diseños óptimos implican reflujos de operación muy cercanos a R_{min} , en ningún caso se generaron estructuras con requerimientos excesivos de etapas, como sucede en el caso de columnas convencionales. Una vez planteados los aspectos a considerar para el cálculo y elección de valores óptimos y límites, se valida la factibilidad del uso de éstos para inicializar y limitar la búsqueda de condiciones de operación. Finalmente, como consecuencia del análisis de los resultados obtenidos, se plantea la posibilidad de utilizar estos valores límites también como restricciones para las optimizaciones matemáticas de modelos de etapa de equilibrio, así como en la definición de fronteras para la selección de estructuras óptimas-controlables.

Dirigido por: Ph.D. Arturo Jiménez Gutiérrez

*Una casa será fuerte e indestructible cuando esté sostenida por estas cuatro columnas:
padre valiente, madre prudente, hijo obediente, hermano complaciente.*

Confucio

A ustedes, porque son lo más importante en mi vida.

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Arturo Jiménez, por la confianza depositada en mi; espero no haberlo defraudado, o por lo menos no totalmente. 1000 gracias por todo.

Al Dr. Vicente Rico Ramírez, por el apoyo brindado durante la realización de esta tesis, por las críticas siempre constructivas, y sobre todo por el ejemplo de ética y profesionalismo que eres para todos los que hemos pasado por aquí.

A los Doctores Cristina Coronado Velasco, Fernando Tiscareño Lechuga, y Salvador Hernández Castro, por ser parte del comité revisor del presente trabajo, por su valioso tiempo y sus aún más valiosos comentarios. Por todo el apoyo recibido, gracias.

A la gente del posgrado: a Ramiro Rico por estar en la terna de mis profes favoritos, a Alex Estrada por las bromas, al Dr. Iglesias por las charlas existenciales en la jardinera, al Dr. Alvarado (aunque todavía no supero el trauma del espacio n-dimensional), al Dr. Richart, al Dr. Escamilla, al Dr. Alatorre, a la Dra. Gloria, al Dr. Pedro; a Claudia, Irma, July, Judith y Félix, por toda la ayuda y la sonrisa siempre sincera; a mis compañeros y amigos, a los nuevos y a los no tan nuevos... prefiero no escribir nombres por que si lo hago seguramente omitiré alguno por falta de espacio o de memoria. Ya los extraño. A todos ustedes gracias.

A mi familia de Celaya: Abel, Jair, Ulises y Florianne, Lores, Laurita y Luis Miguel (+ L.Eduardo), Gaby y German, Grisell, Julio Cesar. LQM.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la BECA otorgada para la realización de mis estudios de Doctorado, así como el financiamiento al proyecto SEP 43898-Y.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN	1
--------------	---

CAPÍTULO 2

ANTECEDENTES	5
--------------	---

2.1 ACOPLAMIENTO TÉRMICO.....	5
-------------------------------	---

2.2 ANÁLISIS DE GRADOS DE LIBERTAD.....	8
---	---

2.3 DISEÑO DE SECUENCIAS NO CONVENCIONALES.....	9
---	---

2.3.1 Extensiones de la Ecuación de Underwood.....	10
--	----

2.3.2 Diseños por Métodos Cortos. Secuencias con Acoplamiento Térmico.....	12
---	----

2.3.3 Diseños por Analogía de Secciones.....	13
--	----

2.4 ETAPA DE OPTIMIZACIÓN.....	14
--------------------------------	----

2.5 CONDICIONES DE OPERACIÓN. CONTROL DE SECUENCIAS DE DESTILACIÓN ACOPLADAS TÉRMICAMENTE.....	17
--	----

2.6 ANÁLISIS DE LA BIBLIOGRAFÍA.....	19
--------------------------------------	----

CAPÍTULO 3

METODOLOGÍA	21
-------------	----

3.1 CASOS DE ESTUDIO.....	21
---------------------------	----

3.2 METODOLOGÍA DE DISEÑO.....	25
--------------------------------	----

3.2.1 Secuencia Térmicamente Acoplada Indirecta (STAI).....	25
--	----

3.2.2	<i>Secuencia Térmicamente Acoplada Directa (STAD)</i>	28
3.2.3	<i>Secuencia Petlyuk (Kaibel)</i>	29
3.3	OPTIMIZACIÓN DE LOS DISEÑOS PRELIMINARES.....	32
3.3.1	<i>Modelos para las Columnas con Acoplamiento Térmico</i>	32
3.3.2	<i>Optimización en el Ambiente GAMS</i>	38
3.4	CONDICIONES DE MÍNIMA ENERGÍA PARA LA SECUENCIA PETLYUK.....	38
3.5	INTRODUCCIÓN DE LÍMITES FACTIBLES A LAS VARIABLES DE DISEÑO Y OPERACIÓN.....	43
CAPÍTULO 4		
	RESULTADOS: SECUENCIAS STAD y STAI	46
4.1	COMPARACIÓN DE DISEÑOS.....	46
4.2	OPTIMIZACIÓN DE LAS ESTRUCTURAS PRELIMINARES.....	50
4.2.1	<i>Problemas de Convergencia. Restricciones de flujo</i>	59
4.3	FLUJOS DE INTERCONEXIÓN ÓPTIMOS.....	61
4.4	CONCLUSIONES PRELIMINARES.....	68
CAPÍTULO 5		
	RESULTADOS: SECUENCIA Petlyuk/Kaibel	69
5.1	DISEÑO.....	69
5.2	OPTIMIZACIÓN DE LAS ESTRUCTURAS PRELIMINARES.....	73
5.2.1	<i>Secuencia Petlyuk, Columnas Independientes</i>	73
5.2.2	<i>Columna de Pared Divisora (Kaibel)</i>	76
5.2.3	<i>Reflujo de Diseño Óptimo</i>	82

5.3 REGIONES DE MÍNIMO CONSUMO DE ENERGÍA.....	85
5.3.1 Cálculo de la región constante de V_{min}	85
5.3.2 Diseño en la región constante de V_{min}	92
5.4 LÍMITES FACTIBLES PARA LOS FLUJOS DE INTERCONEXIÓN.....	93
5.5 CONCLUSIONES PRELIMINARES.....	110
CAPÍTULO 6	
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	112
6.1 CONCLUSIONES.....	112
6.2 RECOMENDACIONES PARA TRABAJO FUTURO.....	114
REFERENCIAS	116
APÉNDICE A	120
APÉNDICE B	128
APÉNDICE C	135

LISTA DE TABLAS

Tabla 2.1	Grados de libertad de las secuencias térmicamente acopladas (Chávez-Contreras, 1985).....	9
Tabla 3.1	Mezclas estudiadas.....	21
Tabla 3.2	Alimentaciones analizadas.....	22
Tabla 3.3	Especificaciones de diseño.....	22
Tabla 3.4	Banco de mezclas de Gutiérrez-Salado (2006). ESI>1	23
Tabla 3.5	Banco de mezclas de Gutiérrez-Salado (2006). ESI=1	23
Tabla 3.6	Banco de mezclas de Gutiérrez-Salado (2006). ESI<1	24
Tabla 4.1	Diseño de la STAD. Metodología de Hernández y Jiménez (1996)	47
Tabla 4.2	Diseño de la STAD. Extensión de la Metodología propuesta por Glinos y Malone (1985).....	47
Tabla 4.3	Diseño de la STAI. Metodología de Hernández y Jiménez (1996)	48
Tabla 4.4	Diseño de la STAI. Metodología propuesta por Glinos y Malone (1985).....	48
Tabla 4.5	Condiciones térmicas de las pseudos-corrientes de alimentación...	49
Tabla 4.6	Condiciones térmicas de las pseudos-corrientes de alimentación ajustadas.....	50
Tabla 4.7	Diseño y costos de la STAD. Mezcla M1.....	52
Tabla 4.8	Diseño y costos de la STAD. Mezcla M2.....	54
Tabla 4.9	Diseño y costos de la STAD. Mezcla M3.....	55
Tabla 4.10	Diseño y costos de la STAI. Mezcla M1.....	56
Tabla 4.11	Diseño y costos de la STAI. Mezcla M2.....	57
Tabla 4.12	Diseño y costos de la STAI. Mezcla M3.....	57
Tabla 4.13	Relaciones de reflujo de las secuencias optimizadas.....	58

Tabla 4.14	Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAD. ESI>1	64
Tabla 4.15	Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAD. ESI=1	65
Tabla 4.16	Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAD. ESI<1	65
Tabla 4.17	Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAI. ESI>1	66
Tabla 4.18	Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAI. ES=1	66
Tabla 4.19	Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAI. ESI<1	67
Tabla 5.1	Diseño de las secuencias Petlyuk y Kaibel, Mezcla M1.....	71
Tabla 5.2	Diseño de las secuencias Petlyuk y Kaibel, Mezcla M2.....	72
Tabla 5.3	Diseño de las secuencias Petlyuk y Kaibel, Mezcla M3.....	72
Tabla 5.4	Optimización del diseño de la secuencia Petlyuk, Mezcla M1.....	74
Tabla 5.5	Optimización del diseño de la secuencia Petlyuk, Mezcla M2.....	74
Tabla 5.6	Optimización del diseño de la secuencia Petlyuk, Mezcla M3.....	75
Tabla 5.7	Optimización del diseño de la secuencia Kaibel, Mezcla M1.....	76
Tabla 5.8	Optimización del diseño de la secuencia Kaibel, Mezcla M2.....	77
Tabla 5.9	Optimización del diseño de la secuencia Kaibel. Mezcla M3.....	77
Tabla 5.10	R/Rmin de los arreglos optimizados de la secuencia Petlyuk.....	83
Tabla 5.11	R/Rmin de los arreglos optimizados de la secuencia Kaibel.....	83
Tabla 5.12	Distribuciones del componente intermedio en el prefraccionador que limitan la región constante de Vmin. Mezclas con ESI>1	90
Tabla 5.13	Distribuciones del componente intermedio en el prefraccionador que limitan la región constante de Vmin. Mezclas con ESI=1	90

Tabla 5.14	Distribuciones del componente intermedio en el prefraccionador que limitan la región constante de V_{min} . Mezclas con $ESI < 1$	91
Tabla 5.15	Estructura inicial de la secuencia Petlyuk.....	94
Tabla 5.16	Composiciones del destilado neto del prefraccionador. $FLI=45.34$ $kmol/hr$	98

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Acoplamiento térmico.....	6
Figura 2.2	Secuencias de destilación térmicamente acopladas.....	7
Figura 2.3	Curvas de optimización. Metodología de Hernández y Jiménez (1996,1999).....	15
Figura 3.1	Método de diseño para la STAI. Glinos y Malone (1985).....	26
Figura 3.2	Método de diseño para la STAD.....	28
Figura 3.3	Método de diseño para la secuencia Petlyuk/Kaibel.....	29
Figura 3.4	Arreglo equivalente a la secuencia Petlyuk.....	39
Figura 3.5	Requerimiento de vapor mínimo del prefraccionador como función de la recuperación del componente intermedio en el destilado del mismo.....	39
Figura 3.6	Requerimiento de vapor mínimo de la secuencia Petlyuk, como función de la recuperación del componente intermedio en el destilado del prefraccionador.....	40
Figura 3.7	Diagrama de flujo para la optimización de flujos de interconexión, STAD y STAI.....	44
Figura 3.8	Diagrama de flujo para la optimización de los flujos de interconexión de la secuencia Petlyuk.....	45
Figura 4.1	Secuencia Equivalente para el diseño de la STAI. Glinos y Malone (1985).....	59
Figura 4.2	Optimización de la STAD.....	62
Figura 4.3	Optimización de la STAI.....	63
Figura 5.1	Costos anuales para las secuencias con acoplamiento térmico total. Mezcla M1.....	79
Figura 5.2	Costos anuales para las secuencias con acoplamiento térmico total. Mezcla M2.....	80

Figura 5.3	Costos anuales para las secuencias con acoplamiento térmico total. Mezcla M3.....	81
Figura 5.4	Reflujos de operación de la secuencia Kaibel. Mezcla 1, alimentación 40/20/40.....	84
Figura 5.5	Mínimo consumo de vapor para la secuencia Petlyuk. Mezcla M1.....	87
Figura 5.6	Mínimo consumo de vapor para la secuencia Petlyuk. Mezcla M2.....	88
Figura 5.7	Mínimo consumo de vapor para la secuencia Petlyuk. Mezcla M3.....	89
Figura 5.8	Optimización de la secuencia Petlyuk. Superficie de respuesta....	95
Figura 5.9	Datos de la optimización de la secuencia Petlyuk.....	96
Figura 5.10	Arreglo de 3 columnas desacopladas.....	97
Figura 5.11	Flujos mínimos de vapor para la secuencia Petlyuk. M1-F2.....	100
Figura 5.12	Eliminación de datos de acuerdo a límites de flujo.....	101
Figura 5.13	Curvas de optimización en función de la distribución de B en el prefraccionador.....	102
Figura 5.14	Límites para la optimización de flujos de interconexión. Mezcla M1.....	103
Figura 5.15	Límites para la optimización de flujos de interconexión. Mezcla M2.....	104
Figura 5.16	Límites para la optimización de flujos de interconexión. Mezcla M3.....	105
Figura 5.17	Límites para la optimización de flujos de interconexión. Mezclas con $ESI > 1$	106
Figura 5.18	Límites para la optimización de flujos de interconexión. Mezclas con $ESI = 1$	107
Figura 5.19	Límites para la optimización de flujos de interconexión. Mezclas con $ESI < 1$	108

NOMENCLATURA

α_{ij}	Volatilidad relativa del componente i respecto al componente j
A	Componente clave ligero en una mezcla ternaria ABC
B	Componente intermedio en una mezcla ternaria ABC
C	Componente clave pesado en una mezcla ternaria ABC
ESI	Índice de facilidad de separación, $\frac{\alpha_{AB}}{\alpha_{BC}}$
θ	Raíz de la ecuación de Underwood
lk	Clave ligero
hk	Clave pesado
x_i	Fracción mol del componente i en una corriente líquida
y_i	Fracción mol del componente i en una corriente en fase vapor
z_i	Fracción mol del componente i en la alimentación
R	Relación de reflujo
F	Corriente de alimentación
D	Corriente de destilado
W	Corriente de fondos
P	Corriente de producto lateral
L	Flujo de líquido
V	Flujo de vapor
q	Condición térmica
FV	Flujo de vapor de interconexión, STAD
FL	Flujo de líquido de interconexión, STAI
FL1	Flujo de líquido de interconexión superior, Petlyuk
FV2	Flujo de vapor de interconexión inferior, Petlyuk
Pt	Presión de diseño
A_{ji}	Coefficiente j de la ecuación de Antoine para el componente i
cp_{ki}	Coefficiente k para el cálculo de la capacidad calorífica, componente i
h_{vi}	Calor latente de vaporización del componente i
$red_{i,t}$	Recuperación del componente i en el destilado de la columna t
$reb_{i,t}$	Recuperación del componente i en el fondo de la columna t
Tref	Temperatura de referencia para el cálculo de la entalpía
Twat	Temperatura del agua de enfriamiento
Tvap	Temperatura del vapor de calentamiento
UR	Coefficiente global de transferencia del reboiler
UC	Coefficiente global de transferencia del condensador
m	Corriente de proceso
T_m	Temperatura de la corriente de proceso m
pv_i	Presión de vapor del componente i

H_m	Entalpía de la corriente de proceso m
Q_{reb_l}	Carga térmica del ebullidor l
Q_{cond_n}	Carga térmica del condensador n
N_t	Número de etapas totales de la columna t
$N_{r,t}$	Número de etapas en la sección de rectificación de la columna t
$N_{a,t}$	Número de etapas en la sección de agotamiento de la columna t
R_t	Reflujo de operación de la columna principal
D_c	Diámetro de la columna
H_c	Altura de la columna
C_{col}	Costo de la columna instalada
C_{cap}	Costo de capital
C_{op}	Costo de operación
C_{tot}	Costo total de la separación
$\phi_B^{D'}$	Recuperación de B en el destilado del prefraccionador, secuencia Petlyuk
F_b	Flujo del componente intermedio en el destilado del prefraccionador, secuencia Petlyuk
SP	Separación preferida
SB	Separación con columnas balanceadas

Subíndices y Superíndices

min	Mínimo
max	Máximo
sup	Superior
I,II,III	Secciones en el arreglo de la secuencia de destilación
ref	Reflujo
agot	Agotamiento
rect	Rectificación
opt	Optimizado
minpet	Mínimo en el arreglo Petlyuk
minkbl	Mínimo en el arreglo Kaibel
diseño	Diseño
pref	Separación preferida
bal	Columnas balanceadas

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

La etapa de reacción es prácticamente el corazón de todas las industrias químicas, no obstante, la etapa de separación usualmente es preponderante en cuestión de costos. King (1988) menciona que entre el 50 y 90% del capital invertido en procesos petroquímicos a gran escala, en los cuales intervienen reacciones químicas, corresponde a equipos de separación, y que con frecuencia la separación puede ser la principal función de un proceso completo.

Existen diversos procesos de separación, cada uno de ellos útil para diferentes propósitos dependiendo de las características de las especies a purificar, por lo cual la elección de un proceso particular dependerá de una serie de consideraciones que van desde los agentes de separación disponibles (o factibles de usarse) hasta el grado de pureza deseado. En el caso de la purificación de mezclas líquidas, la destilación, cuyo principio de separación es la diferencia de volatilidades relativas, es la operación unitaria más utilizada. Una de las principales desventajas de este proceso son los grandes requerimientos energéticos, originados por la necesidad de evaporar y condensar continuamente corrientes de reflujo.

Debido a que la demanda industrial de energía ha crecido de manera notable durante las últimas décadas, la sustentabilidad de los procesos y la reducción de costos, sobretodo de aquellos relacionados al consumo de servicios, han generado toda una área de oportunidades para la investigación en ingeniería química.

En el caso particular de la destilación, la integración de energía y el acoplamiento térmico han constituido las alternativas más prometedoras en cuanto a ahorros de energía se refiere. La idea de aprovechar la energía inherente de las corrientes de producto se ha convertido en un tema de notable interés para varios investigadores [Fidkowski y Krolikowski (1986, 1987, 1990), Glinos y col. (1986), Triantafyllou y Smith (1992), Agrawal y Fidkowski (1998, 1999, 2000), Castro y Jiménez (2002), Alstad y col. (2004)] cuyos estudios han coincidido en que los esquemas de destilación térmicamente acoplados pueden presentar ahorros de energía significativos comparados con las secuencias de destilación convencionales. Sin embargo, a pesar de las apreciables ventajas económicas que representa el uso de este tipo de secuencias, su implementación industrial se ha visto restringida debido a que el número extra de grados de libertad presentes en estos sistemas complica la determinación de sus variables de diseño, optimización y operación.

En el caso del diseño, la mayoría de los estudios realizados se pueden clasificar en dos líneas: los basados en extensiones de la ecuación de Underwood para sistemas complejos, y los basados en analogía de secciones de secuencias de columnas convencionales. Las extensiones del método de Underwood han mostrado ser bastante útiles para cálculos preliminares, sobre todo para mezclas relativamente ideales; por otro lado, debido a su simplicidad, los diseños por analogía de secciones resultan prácticos y fácilmente aplicables a casi cualquier tipo de secuencia.

De manera adicional, cada problema de diseño conduce a un problema de optimización. Cuando la función objetivo de la optimización es minimizar la carga térmica del arreglo, el problema se reduce básicamente a la selección de los mejores flujos de interconexión. Sin embargo, ésta búsqueda aparentemente trivial puede volverse un problema mayor si se desconoce el rango de valores en que debe realizarse dicha búsqueda, especialmente si se considera que los flujos de interconexión son alimentaciones, corrientes de producto y/o corrientes de reflujo para ciertas secciones del sistema y, por lo tanto, la elección de dichos flujos debería ser más adecuada.

La introducción de técnicas matemáticas de optimización para el diseño de este tipo de secuencias permite optimizar todas las variables del sistema de manera simultánea, pero la solución de este tipo de modelos puede resultar bastante sensible a la elección de valores iniciales y límites para el conjunto de variables a determinar.

Finalmente, en el área de control, esfuerzos recientes han contribuido a la comprensión de las propiedades dinámicas de este tipo de arreglos, mostrando que son menos complejas de lo que se pensaba y que en muchos casos existe cierta relación entre la “optimalidad” de las estructuras y sus propiedades de control. En estos casos la decisión entre óptimo y controlable dependerá del diseñador, ya que no existe ningún método que establezca límites para ello.

En base a lo anterior, en el presente trabajo se analiza el comportamiento de las variables asociadas a los flujos de interconexión de secuencias de destilación con acoplamiento térmico, tanto en condiciones de operación como en condiciones límite (número infinito de etapas), y se optimizan los diseños preliminares de dichas secuencias mediante técnicas de programación matemática, determinando el valor óptimo para todo el conjunto de variables; una vez planteados los aspectos a considerar para el cálculo y elección de valores óptimos y límites, se valida la factibilidad del uso de estos valores para inicializar y limitar la búsqueda de condiciones de operación.

La definición de estos valores iniciales y límites proporciona elementos para reducir el tiempo de búsqueda de condiciones óptimas de diseño y operación; se considera que es posible utilizarlos también como restricciones para las optimizaciones matemáticas de modelos completos de etapa de equilibrio; finalmente, si estos límites de optimización fueran límites factibles de operación, podrían ser también una herramienta para el diseño y la selección de estructuras óptimas y controlables.

En el Capítulo 2 del trabajo se lleva a cabo una revisión bibliográfica de los estudios realizados hasta el momento en el área. Se presenta el análisis de los mismos y en base a ello se plantean las áreas de oportunidad en las cuales se basó el desarrollo de la tesis presentada. Los casos de estudio analizados se detallan en el Capítulo 3. Dentro del mismo capítulo se explican las metodologías de diseño utilizadas, se plantean los modelos a resolver en la etapa de optimización y se definen algunas otras herramientas utilizadas.

Los resultados de la tesis y el análisis de los mismos se presentan en 2 partes: el Capítulo 4 aborda los correspondientes a las secuencias térmicamente acopladas directa e indirecta (STAD y STAI), mientras que el Capítulo 5 se enfoca a los resultados de la secuencia Petlyuk; en ambos capítulos, para realizar una interpretación de resultados más ágil, solamente se muestran resultados representativos y la totalidad de los resultados se muestra en los apéndices. En el Capítulo 6 se plantean las conclusiones del trabajo así como una serie de observaciones y recomendaciones para trabajos futuros.

Finalmente, se presenta la sección de apéndices dividida de la siguiente manera: en el Apéndice A se muestran las curvas de optimización de las secuencias STAD y STAI y la localización de los valores mínimos de los flujos de interconexión para las mezclas analizadas; en el Apéndice B se presentan los diseños preliminares obtenidos para la secuencia Petlyuk en la etapa de optimización; y en el Apéndice C se reportan los requerimientos mínimos de vapor de la secuencia Petlyuk como función de la distribución del componente intermedio en el prefraccionador para diferentes mezclas y alimentaciones.

CAPÍTULO 2

ANTECEDENTES

Una de las características más importantes de la destilación es su alto consumo energético; a pesar de ser un tópico ampliamente estudiado en ingeniería química, la desventaja económica y termodinámica que presenta este proceso ha dado lugar a que más investigaciones se sigan realizando, la mayoría de ellas orientadas a buscar alternativas que disminuyan dichos requerimientos o mejoren sus eficiencias térmicas.

2.1 ACOPLAMIENTO TÉRMICO

El acoplamiento térmico de secuencias de destilación constituye una de las alternativas más atractivas en cuanto a consumo de energía se refiere. Se dice que es posible acoplar térmicamente arreglos de dos o más columnas cuando se encuentran relacionadas entre sí por alguna corriente de proceso; este acoplamiento se lleva a cabo modificando la estructura de la secuencia de manera que la transferencia de calor se dé por contacto directo entre corrientes laterales (líquido y vapor) que conectan entre sí a dichas columnas, eliminando de esta manera al menos un intercambiador de calor (ebullidor y/o un condensador). En la Figura 2.1 se puede observar el procedimiento.

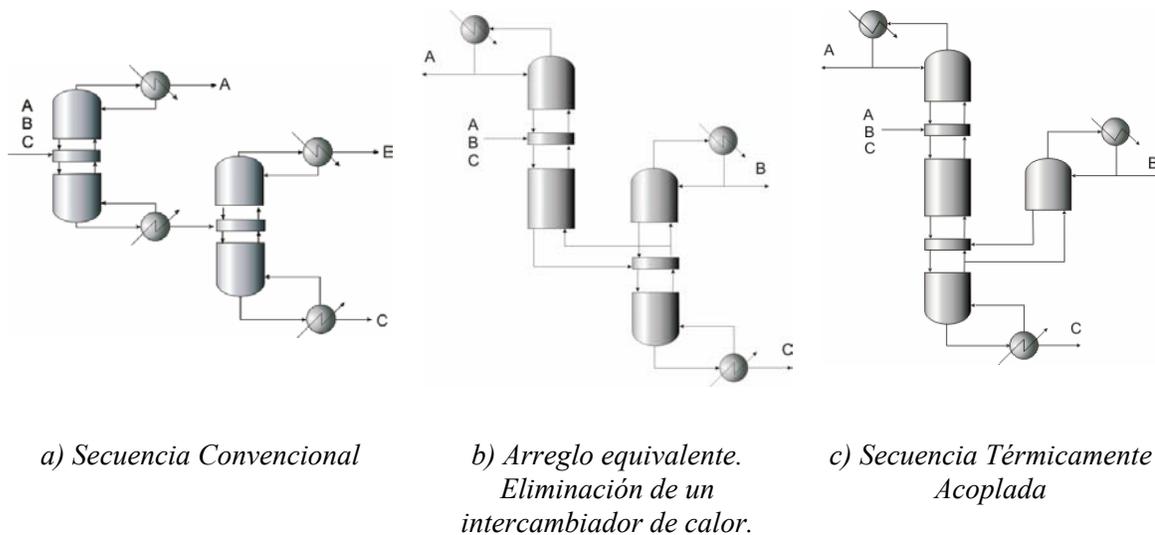
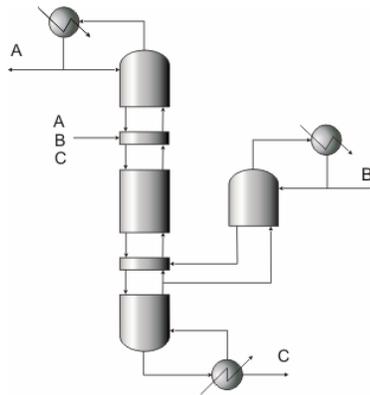
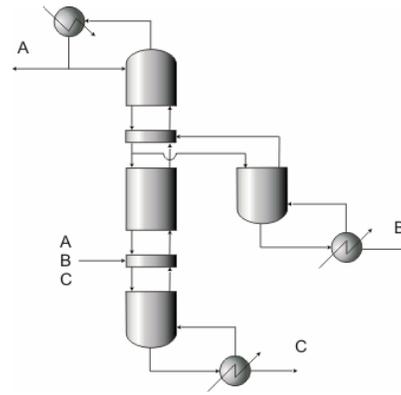


Figura 2.1 Acoplamiento térmico.

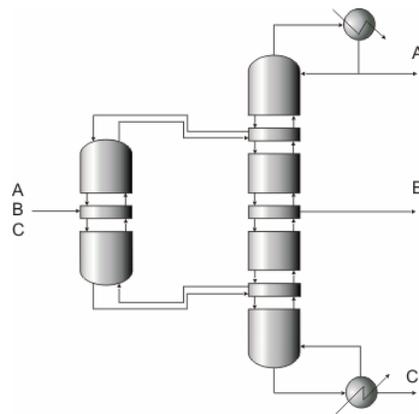
La Secuencia Térmicamente Acoplada Directa (o arreglo con rectificador lateral, STAD), Secuencia Térmicamente Acoplada indirecta (o con agotador lateral, STAI) y la secuencia con Acoplamiento Térmico Total (Petlyuk, o su equivalente con pared divisoria Kaibel) son las secuencias con acoplamiento térmico más estudiadas hasta el momento. Un número apreciable de estudios teóricos [Fidkowski y Krolikowski (1986, 1987, 1990), Glinos y Malone (1985a, 1985b), Triantafyllou y Smith (1992), Agrawal y col. (1998, 1999, 2000), Alstad y col. (2004)] han mostrado que este tipo de arreglos (Figura 2.2) pueden proveer ahorros energéticos significativos respecto a secuencias de destilación convencionales, dependiendo de las características de las mezclas a separar.



a) *Secuencia de Destilación Térmicamente Acoplada Directa (STAD)*



b) *Secuencia de Destilación Térmicamente Acoplada Indirecta (STAI)*



c) *Secuencia de Destilación con Acoplamiento Térmico Total Petlyuk*

Figura 2.2 Secuencias de destilación térmicamente acopladas.

A pesar de las apreciables ventajas económicas que parecen presentar este tipo de estructuras, su implementación industrial no ha tenido la aceptación esperada, debido a que la complejidad estructural de estos sistemas ha dado lugar a incertidumbres respecto a la factibilidad de los mismos.

Los estudios a nivel académico de estos sistemas constituyen una gran parte de la investigación reportada hasta el momento, la otra parte corresponde a industrias, generadoras de su propia tecnología, que están considerando la implementación de este tipo de arreglos. En este sentido, el trabajo del grupo de investigación dirigido por Rakesh Agrawal, *Air Products and Chemical Inc.*, puede ser referenciado (1998, 1999, 2000). Aparentemente dicha compañía había considerado el uso de la secuencia Petlyuk para separaciones criogénicas, pero resultó ser termodinámicamente no factible, por lo que a pesar de tener el sistema estudiado y simulado no fue posible instalarlo (Deborah Hairstone, 1999). Por otro lado, se tiene noticia de que existen alrededor de 50 columnas comerciales de pared divisora (Kaibel) en el mundo, la mayoría de ellas instaladas por BASF AG, cuyo desarrollo tecnológico es altamente confidencial (Adrian y col., 2004).

2.2 ANALISIS DE GRADOS DE LIBERTAD

Antes de resolver un problema de diseño y/o optimización es necesario conocer el número de grados de libertad del sistema sobre el cual se va a trabajar. En 1985, Chávez-Contreras presenta un análisis de grados de libertad detallado para sistemas con acoplamiento térmico. Dicho autor, determina el número de grados de libertad mostrado en la Tabla 1, donde M es el número de etapas totales en la columna principal del arreglo, N el número de etapas totales en la segunda columna (prefraccionador, rectificador o agotador lateral) y C el número de componentes.

Tabla3.1 Grados de libertad de las secuencias térmicamente acopladas (*Chávez-Contreras, 1985*).

Secuencia	Grados de Libertad
STAD	$2(N+M)+C+13$
STAI	$2(N+M)+C+10$
Petlyuk	$2(N+M) + C+14$

Considerando que: todas las etapas (excepto los condensadores y ebulliciones) y los divisores de flujo son adiabáticas, la presión de operación está definida y las caídas de presión son despreciables, la configuración del sistema es conocida (número de etapas, localización de etapas de alimentación, interconexión, y salidas laterales), la alimentación está totalmente especificada, y todas las corrientes de producto son líquidos saturados, el número de grados de libertad que quedan por especificar son 4 para la STAD, 4 para la STAI y 5 para la Petlyuk. La existencia de este conjunto de grados de libertad sugiere que para la solución de estos sistemas es factible optimizar el arreglo.

2.3 DISEÑO DE SECUENCIAS NO CONVENCIONALES

Se dice que una columna de destilación es convencional cuando el arreglo consiste básicamente de una torre con una corriente de alimentación y dos corrientes de producto: destilado y fondos. Por lo tanto, entenderemos por no convencional todos los sistemas que presentan múltiples alimentaciones o salidas laterales, y/o intercambiadores de calor intermedios; resulta evidente que las secuencias con acoplamiento térmico se ubican en esta categoría.

La etapa de diseño de este tipo de secuencias, debido a su complejidad estructural, constituye el primer problema a resolver; hasta el momento se han propuesto dos maneras de atacarlo, mediante adaptaciones de métodos cortos existentes para columnas convencionales, básicamente extensiones de la ecuación de Underwood (1948), o bien por analogía de secciones con respecto a columnas convencionales.

2.3.1 Extensiones de la Ecuación de Underwood

Desde su introducción en 1948, la ecuación de Underwood (Seader y Henley 1999) para el cálculo del reflujo mínimo es quizá el método más utilizado para aproximaciones iniciales de condiciones límite de operación. Dicha ecuación fue derivada para columnas convencionales bajo dos suposiciones; flujo molar constante y volatilidades relativas constantes. En la mayoría de los casos estas dos suposiciones no son ciertas; no obstante, los resultados obtenidos parecen ser suficientemente buenos, reportándose errores entre el valor calculado y el valor real de aproximadamente el 5%.

Tal éxito ha tenido el desarrollo de Underwood que durante varios años se han presentado extensiones de su ecuación aplicables a columnas no convencionales. Barnés y col. (1972) extienden la ecuación de reflujo mínimo a columnas con múltiples alimentaciones, manteniendo la simplicidad del método original

Posteriormente, Glinos y Malone (1985) presentan una metodología para calcular el flujo mínimo de vapor (y un diseño posterior con métodos cortos) de una columna de destilación con salida lateral. Un aspecto importante de su desarrollo es que determinan la existencia de composiciones límite en la corriente lateral, lo cual restringe el flujo de la misma.

Uno de los primeros desarrollos para columnas con acoplamiento térmico es presentado por los autores antes mencionados (Glinos y Malone, 1985b); ellos presentan un procedimiento para calcular el flujo mínimo de vapor de una columna con agotador lateral (STAI) a partir de la ecuación de Underwood. La principal aportación de su desarrollo es la definición de una pseudo-corriente de alimentación y su condición térmica, por medio de la cual pueden representarse los flujos de interconexión entre las columnas.

En 1987, Nikolaides y Malone presentan un método de diseño para la separación de mezclas multicomponentes por medio de columnas con múltiples alimentaciones y salidas laterales. Desarrollan expresiones para la selección de la alimentación limitante (aquella que determina el flujo mínimo de vapor) y para la determinación de composiciones factibles para las salidas laterales.

Fidkowski y Krolikowski (1987), con la finalidad de comparar los consumos mínimos de energía de diferentes secuencias de destilación con acoplamiento térmico, realizan cálculos de los requerimientos energéticos de dichos arreglos para mezclas ideales utilizando el método clásico de Underwood (1948). Consideran que el flujo mínimo de vapor del arreglo es igual a la suma de los flujos de vapor mínimo de los reboilers.

Christiansen y Skogestad (1997) mostraron que para la columna Petlyuk existe una región de mínimo consumo de energía para arreglos de número infinito de etapas, la cual permanece casi constante y que es función de la distribución del componente intermedio en el prefraccionador; dicha región de mínima energía está delimitada por dos valores de la distribución de B en el prefraccionador: la *separación preferida* (cuando el consumo de vapor del prefraccionador es mínimo) y la separación necesaria para que las columnas que conforman la columna principal de la secuencia se encuentren *balanceadas* (flujos mínimo de vapor de cada columna se igualan en la etapa de extracción).

En el 2001, Fidkowski y Agrawal extienden la metodología propuesta por Fidkowski y Krolikowski (1987) para el cálculo de flujo mínimo de vapor de secuencias con acoplamiento térmico total para casos de mezclas multicomponentes.

2.3.2 Diseños por Métodos Cortos. Secuencias con Acoplamiento Térmico

A pesar de que los modelos rigurosos para la simulación de columnas de destilación son relativamente fáciles de resolver, las aproximaciones por métodos cortos siguen siendo una herramienta muy valiosa, especialmente para la aproximación de valores iniciales; esto no es diferente para los arreglos con acoplamiento térmico.

En 1992, Triantafyllou y Smith presentan un método de diseño para la secuencia Petlyuk y su equivalente con pared divisora utilizando métodos cortos (Fenske-Underwood-Gilliland, FUG) a partir de una secuencia de tres columnas desacopladas. En este arreglo la primera columna corresponde al prefraccionador y las otras dos forman la columna principal; cada una de ellas se diseña como columna con una alimentación y una salida lateral. Introducen el concepto de remezclado como una explicación de la ineficiencia energética de las secuencias de destilación convencionales (y por lo tanto, como razón del ahorro de energía del acoplamiento térmico).

Posteriormente, basados en un arreglo desacoplado de tres columnas, Castro y Jiménez (2002) proponen un método de diseño para la secuencia Petlyuk, también basado en métodos cortos, cuya principal simplificación consiste en la definición de pseudo-corrientes de alimentación para las columnas del arreglo desacoplado que constituyen la columna principal de la secuencia, y en la redefinición del reflujo mínimo de la misma. La definición de las pseudo-corrientes se realizó de manera similar a la propuesta por Glinos y Malone (1985) para la columna con agotador lateral.

Muralikrishna y col. (2002) presentan el desarrollo de una metodología de diseño similar a la propuesta por Castro y Jiménez (2002) en cuanto a la definición de las condiciones térmicas de las alimentaciones a la columna principal, no así en la igualación de flujos internos. Definen una región de confianza para el diseño de la secuencia en base a las recuperaciones de los componentes clave en el prefraccionador.

2.3.3 Diseños por Analogía de Secciones

Obtener la configuración inicial de secuencias complejas a partir de secuencias convencionales de estructura conocida, llevando a cabo un análisis para determinar la analogía entre secciones y flujos de interconexión entre los arreglos, ha sido considerada una buena opción para aproximar diseños preliminares de manera rápida y sencilla.

Hernández y Jiménez (1996, 1999) proponen un modelo para el diseño de secuencias con acoplamiento térmico a partir de diseños conocidos de secuencias convencionales. Presentan la analogía de secciones correspondiente a la STAD, STAI y Petlyuk, logrando con ello definir la estructura de platos y etapas de alimentación, interconexión y/o salidas laterales. Debido a que en esta metodología los flujos de interconexión son desconocidos, estos pueden ser empleados como variables de optimización.

Con el objetivo de disminuir las complicaciones estructurales de las secuencias con acoplamiento térmico, particularmente aquellas asociadas a las corrientes de reciclo, algunos investigadores han propuesto el desarrollo de nuevas secuencias que mantienen el acoplamiento térmico (por lo menos de manera parcial, para mantener las ventajas económicas del mismo) pero modifican la estructura de manera que resulte más operable. Agrawal y col. (1998, 1999, 2000, 2001) han presentado algunos de los estudios más representativos en este sentido. Para la gran mayoría de las secuencias desarrolladas han propuesto tomar como base una estructura más simple conocida y diseñar por analogía.

2.4 ETAPA DE OPTIMIZACIÓN

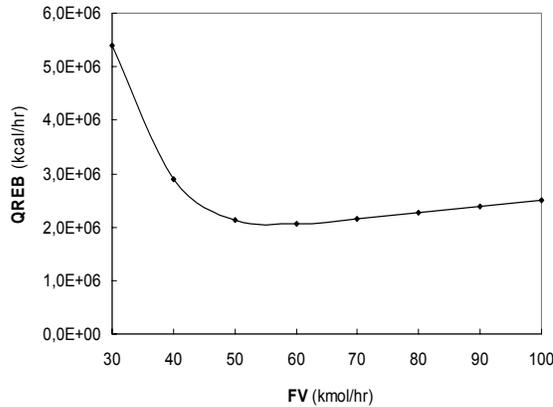
Cada problema de diseño de este tipo de secuencias lleva consigo un problema de optimización asociado. En algunos casos la selección de la estructura óptima se ha llevado a cabo mediante el cálculo de los requerimientos de flujo de vapor a condiciones de reflujo mínimo; para otros casos se ha basado en la selección adecuada de los flujos de interconexión para condiciones de operación reales; y recientemente la introducción de técnicas matemáticas de optimización ha cobrado fuerza en la búsqueda de estructuras óptimas que consideren la solución simultánea de un modelo completo.

En 1986, Fidkowski y Krolikowski presentan un trabajo de optimización para sistemas con acoplamiento térmico, en donde la función objetivo es minimizar la cantidad de vapor que se debe producir en el ebullidor. Sus diseños se basan en métodos cortos y todos sus estudios son para condiciones de operación a reflujo mínimo. Para el caso de la secuencia Petlyuk encuentran que se obtiene un consumo mínimo de vapor cuando el prefraccionador presenta también un mínimo en su requerimiento de vapor (*separación preferida*).

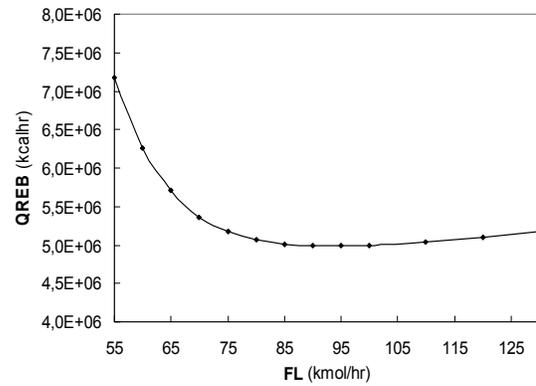
Posteriormente, Nikolaidis y Malone (1987) presentan la solución analítica para la minimización de los flujos internos en SDTA con prefraccionador para columnas con número infinito de etapas. Además de los flujos mínimos determinados, encuentran condiciones en las cuales los arreglos óptimos se dan cuando la columna Petlyuk es reducida a secuencias con agotador o rectificador lateral. Su función objetivo es la minimización de la suma de los flujos de vapor de las secciones de agotamiento de las columnas que conforman la columna principal.

El diseño por analogía de secciones propuesto por Hernández y Jiménez (1996) requiere de un trabajo posterior de optimización, basado en la búsqueda de la mejor combinación de flujos de interconexión. Para la optimización de las secuencias STAD y

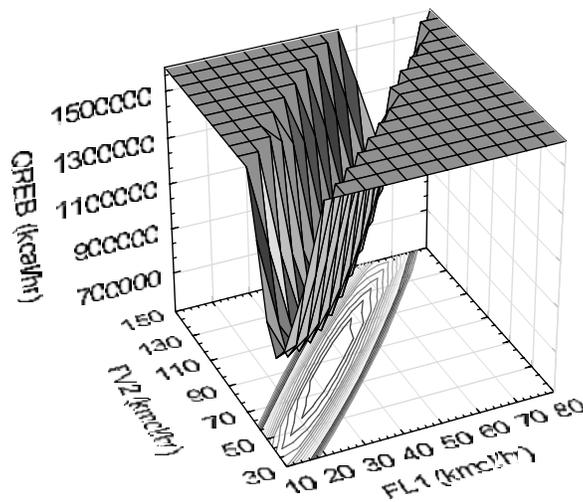
STAI la búsqueda consiste en variar el valor de uno de los dos flujos de interconexión hasta encontrar el valor que minimiza la carga térmica; en el caso de la secuencia Petlyuk la búsqueda se realiza con un doble ciclo, debido a que son 2 flujos de interconexión los que deben determinarse. En la Figura 3.4 se muestran las curvas de optimización características de esta búsqueda.



a) Curva de optimización. STAD



b) Curva de optimización. STAI



c) Superficie de respuesta. Secuencia Petlyuk

Figura 2.3 Curvas de optimización. Metodología de Hernández y Jiménez (1996,1999).

Por el lado de las optimizaciones matemáticas Dünnebier y Pantelides (1999) presentan un modelo riguroso empleando técnicas matemáticas de optimización para el diseño de SDTA y secuencias convencionales. Para los dos casos de estudio presentados encuentran posibles ahorros de aproximadamente el 30%, tanto para costos de operación como de capital. Hacen mención de la sensibilidad de este tipo de soluciones al conjunto de valores iniciales elegidos.

Amminudin y col. (2001) presentan la optimización de un diseño preliminar para la secuencia Petlyuk mediante técnicas de programación no lineal (NLP). Resuelven el diseño de la secuencia usando un modelo semi-riguroso de composición de etapa de equilibrio desarrollado originalmente para destilación azeotrópica.

En 2001, Caballero y Grossmann utilizan un modelo de programación disyuntiva generalizada para desarrollar una superestructura que toma en cuenta todas las posibles estructuras térmicamente acopladas, y encuentran que el número mínimo de secciones de las columnas varía con el número de intercambiadores de calor utilizados. Para el desarrollo de éste modelo utilizan una modificación a la ecuación de Underwood.

Alstad y col. (2004) muestran que es posible obtener arreglos óptimos de la secuencia Petlyuk cuando alguno de los productos se encuentra sobre-purificando y que se pueden encontrar ahorros adicionales si una fracción de la alimentación total no se procesa y se mezcla con la corriente sobre-purificada. Obtienen expresiones analíticas para los ahorros potenciales de energía

En 2005, Grossmann y col. presentan una revisión de las recientes investigaciones enfocadas a la solución óptima de modelos de etapa de equilibrio para columnas de destilación. Analizan los problemas que se han presentado para las diferentes representaciones y modelos; mencionan que cuando el modelo es MINLP una de las principales dificultades para su convergencia se presenta cuando los flujos de las corrientes asociadas a las etapas inexistentes deben tomar valores de cero. De acuerdo a la revisión

presentada, una manera de resolver los problemas de convergencia de los modelos MINLP es introduciendo técnicas de GDP, en donde una etapa “no seleccionada” es considerada como una etapa de proceso en la cual no existe transferencia de masa. Concluyen haciendo hincapié en que para lograr la convergencia de los modelos, debido a la complejidad de los mismos, es indispensable contar con un buen conjunto de valores iniciales y fronteras, para lo cual sugieren la introducción de una fase de pre-procesamiento en la cual se generen los valores iniciales a partir de condiciones de reflujo mínimo y/o minimización de la generación de entropía.

2.5 CONDICIONES DE OPERACIÓN: CONTROL DE SECUENCIAS DE DESTILACIÓN ACOPLADAS TERMICAMENTE

La incertidumbre respecto al buen conocimiento de la dinámica y sistemas de control adecuados para este tipo de estructuras ha sido uno de los principales obstáculos para su implementación industrial. Si no es posible garantizar que se puede mantener al sistema bajo control, cumpliendo con todas las restricciones de pureza, operación, seguridad y economía planteadas, no importará que tan impresionantes sean los resultados de las etapas de diseño y optimización.

En los trabajos presentados por Hernández y Jiménez (1996, 1999) para el diseño de SDTA se usa un modelo dinámico; a pesar de no presentar un estudio formal, dejan ver que las columnas diseñadas no parecen tan difíciles de controlar. Posteriormente, Jiménez y col. (2001) realizan un estudio de las propiedades de control de estas secuencias mediante técnicas de descomposición de valores singulares (SVD) y presentan un panorama promisorio sobre la dinámica de estos arreglos.

Halvorsen y Skogestad (1999) mencionan que para alcanzar las reducciones potenciales de energía de la columna Petlyuk es necesario optimizar el control de la misma, debido a que la operación del sistema es muy sensible a ciertas perturbaciones. Muestran que es posible relacionar algunos parámetros óptimos de la operación y los controladores a partir de resultados del estado estable y/o cálculos a condiciones de operación límite.

Mutalib y Smith (1998) llevan a cabo un análisis de grados de libertad de la secuencia Petlyuk para determinar el número de lazos de control requeridos. Mencionan que es impráctico manipular el flujo de vapor de interconexión y que manipular el líquido de interconexión es posible, pero los beneficios son pocos comparados con la dificultad de implementar ese lazo de control. Seleccionan dos esquemas de control, el primero involucra al reflujo, la corriente lateral y el flujo de vapor del reboiler; el segundo utiliza el flujo de destilado en lugar del reflujo. De acuerdo a sus resultados, es posible alcanzar un control estable.

Serra y col. (2000, 2001) analizan la influencia del diseño y las condiciones de operación de la columna de pared divisora (Kaibel) sobre la controlabilidad del sistema. Comparan diferentes estructuras con diseños óptimos y no-óptimos (diferente número de etapas y localización de interconexiones), así como condiciones de operación con diferentes “grados de optimalidad” (flujos de interconexión diferentes). Sus resultados indican que usar diseños y condiciones de operación no-óptimas mejora la controlabilidad del sistema.

Segovia-Hernández y col. (2002) presentan un análisis dinámico de 3 arreglos con acoplamiento térmico utilizando controladores PI (Proporcional-Integral) para cada lazo de control, optimizando los valores de la ganancia y la constante de tiempo bajo el criterio de minimizar el ISE (integral del error al cuadrado). Encuentran que el mejor comportamiento para el control del componente ligero y/o pesado lo presenta la STAD y para el intermedio la secuencia Petlyuk.

2.6 ANALISIS DE LA BIBLIOGRAFÍA

De acuerdo a la revisión realizada, y en base a las deficiencias detectadas en los estudios efectuados hasta el momento, se plantean a continuación algunas áreas de oportunidad encontradas.

La aplicación de la ecuación de Underwood para el diseño y optimización de estas secuencias es una de las mejores y más sencillas herramientas utilizadas hasta el momento, pero su aplicación queda restringida a mezclas relativamente ideales y separaciones perfectas. Probablemente en alguna etapa de diseño este método deje de ser suficiente, aunque no deja de ser útil en la aproximación de parámetros iniciales para la solución de modelos rigurosos.

Existe un gran número de investigadores que, por simplicidad, aproximan las estructuras iniciales de secuencias con acoplamiento térmico utilizando heurísticas existentes para columnas de destilación convencionales. Sin embargo, debido a la manera en que estas son acopladas, debería tomarse en cuenta que las secciones del arreglo no son independientes y que generalizar el uso de algunos parámetros no siempre resultará adecuado.

La optimización de los flujos de interconexión es una buena alternativa para encontrar condiciones óptimas de operación para secuencias cuyo diseño estructural se encuentra fijo. Una desventaja de este procedimiento es que no existen límites establecidos para los valores de las variables de optimización, lo cual puede dar lugar a búsquedas ineficientes. Por otro lado, los flujos de interconexión son alimentaciones, corrientes de producto y/o corrientes de reflujo para ciertas secciones del sistema, por lo cual, para un número de platos fijos, la elección de dichos flujos no puede ser del todo arbitraria.

La optimización por medio de técnicas matemáticas considera tanto los costos asociados a servicios como los de inversión, pero la convergencia del modelo depende de las simplificaciones del mismo y de la selección de condiciones iniciales y límites adecuados. Cuando se utilizan métodos cortos, los flujos de interconexión quedan restringidos a un espacio de búsqueda muy pequeño, debido a que dentro de las simplificaciones del modelo la separación de los componentes claves es perfecta. Por otro lado, si se trata de resolver un modelo riguroso en el cual cada etapa pueda ser una etapa de alimentación y/o extracción lateral, será necesario acotar el valor de los flujos de interconexión de alguna manera.

En cuanto a los estudios de control, se ha establecido mediante simulaciones que su dinámica no es tan compleja como se pudiera creer, y que operar estos sistemas en condiciones “no óptimas” mejora sus propiedades de control. Sin embargo, la decisión dependerá del diseñador, ya que no hay ninguna manera de establecer límites de “Optimalidad vs. Controlabilidad”.

En base a esto se puede observar que el establecer valores óptimos y/o límite para algunas variables de diseño de estos sistemas, en especial para los flujos de interconexión, lograría hacer más eficiente la búsqueda de condiciones óptimas de operación; contando con la ventaja adicional de utilizar estos valores como restricciones y valores iniciales para las optimizaciones matemáticas de modelos completos. En el presente trabajo se plantea el análisis de algunas variables de diseño y la determinación de sus valores óptimos; en base a los resultados obtenidos se propone el planteamiento de límites factibles para reflujos y flujos de interconexión de secuencias con acoplamiento térmico, mostrándose su aplicación para el caso de la búsqueda de condiciones óptimas de operación para estructuras fijas.

CAPÍTULO 3

METODOLOGÍA

En el presente capítulo se describen los casos de estudio analizados, la metodología de diseño utilizada, los modelos matemáticos resueltos y la descripción detallada de algunos conceptos empleados en el desarrollo de la presente tesis.

3.1 CASOS DE ESTUDIO

Para la solución del problema de diseño, optimización y planteamiento de valores límite, se estudiaron tres mezclas ternarias ideales con diferentes índices de facilidad de separación ESI, (Tedder y Rudd, 1978) descritas en la Tabla 3.1. Se analizaron tres alimentaciones con diferentes concentraciones, Tabla 3.2, con un flujo de alimentación de 100 kmol/hr, y condición térmica de líquido saturado.

Tabla 3.1 Mezclas estudiadas.

Mezcla	Componentes A / B / C	ESI	PRESIÓN (atm)
M1	n-pentano / n-hexano /n-heptano	1.04	2
M2	n-butano / i-pentano / n-pentano	1.86	4.7
M3	i-pentano /n-pentano / n-hexano	0.47	2

Tabla 3.2 Alimentaciones analizadas.

Alimentación	Composición (%mol)
F1	40 / 20 / 40
F2	33 / 33 / 34
F3	15 / 70 / 15

Las especificaciones de producto se obtuvieron del balance de materia correspondiente a recuperaciones del 98% de los componentes clave en una secuencia convencional directa (Tabla 3.3).

Tabla 3.3 Especificaciones de diseño.

Purezas	ALIMENTACIONES		
	F1	F2	F3
XA _D	0.99	0.98	0.91
XB _S	0.92	0.96	0.99
XC _B	0.99	0.98	0.91

Con la finalidad de validar la factibilidad del uso de los valores óptimos y límites propuestos en la presente tesis, para mezclas diferentes a los casos de estudio analizados, se utilizó el banco de mezclas reportadas por Gutiérrez-Salado (2006). Dichas mezclas se muestran clasificadas de acuerdo a su índice de facilidad de separación en las siguientes Tablas: ESI>1 Tabla 3.4, ESI=1 Tabla 3.5, ESI< 1 Tabla 3.6.

Tabla 3.4 Banco de mezclas de Gutiérrez-Salado (2006). *ESI*>1.

MEZCLA	Volatilidad Relativa		ESI	Presión (atm)
2-2dimetilpropano; 2-3dimetilbutano; 1-1dimetilciclopentano	3.45	2.03	1.70	4.4
Isobutano; n-pentano; 2-3dimetilbutano	2.97	1.75	1.70	7.4
2,2-dimetil-butano; 3-metil-hexeno; trans-2-hepteno	2.71	1.51	1.80	2.0
3-metil-pentano; 3-metil-hexano; n-heptano	2.24	1.23	1.83	2.0
n-hexano; 3-etil-pentano; n-heptano	2.00	1.18	1.69	2.0

Tabla 3.5 Banco de mezclas de Gutiérrez-Salado (2006). *ESI*=1.

MEZCLA	Volatilidad Relativa		ESI	Presión (atm)
n-pentano; 3metil-pentano; 2,3-dimetil-pentano	2.13	2.15	0.99	2.7
2,3-dimetil-butano; 2,2-dimetil-pentano; n-heptano	1.83	1.77	1.04	2.0
n-hexano; 3-metil-hexeno; trans-2-hepteno	1.53	1.51	1.01	2.0
3-metil-trans-2-penteno; 2,2-dimetil-pentano; 3,3-dimetil-pentano	1.26	1.23	1.02	2.0
2,4-dimetil-pentano; 1,1-dimetil-ciclopentano; 3-etil-pentano	1.20	1.19	1.00	2.0

Tabla 3.6 Banco de mezclas de Gutiérrez-Salado (2006). *ESI*<1.

MEZCLA	Volatilidad Relativa		ESI	Presión (atm)
2-metil-1-buteno; 4-metil-1-penteno; n-heptano	1.89	3.92	0.48	2.7
n-pentano; 4-m-1-penteno; trans-3-hepteno	1.64	3.43	0.48	2.7
n-pentano; 2,2-dimetil-butano; 1,1-dimetil-ciclopentano	1.46	2.95	0.50	2.7
2,2-dimetil-butano; 2-metil-pentano; 3-etil-pentano	1.37	2.67	0.51	2.0
3-metil-pentano; n-hexano; n-heptano	1.19	2.45	0.48	2.0

3.2 METODOLOGÍA DE DISEÑO

Debido a que dentro de las variables de interés para el presente trabajo se encuentran los flujos de interconexión, se eligió trabajar con metodologías que permitieran conocer el valor de éstos desde la etapa de diseño (la analogía de secciones sólo permite conocer la estructura de etapas, no así los valores de los flujos). Para el diseño preliminar de las secuencias se utilizaron métodos cortos.

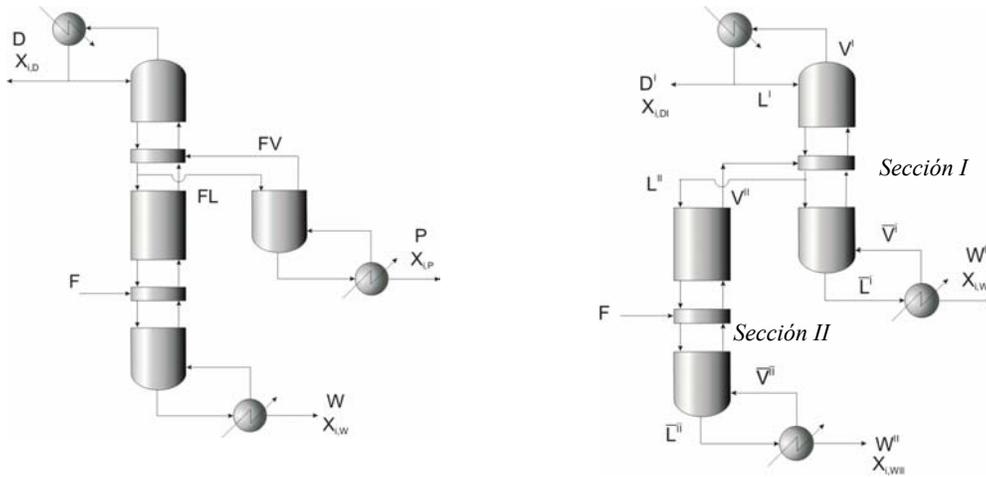
3.2.1 *Secuencia Térmicamente Acoplada Indirecta (STAI)*

Para el cálculo del reflujo mínimo de la STAI se utilizó la extensión de la ecuación de Underwood presentada por Glinos y Malone (1985). Para comenzar el cálculo es necesario separar el arreglo con agotador lateral (Figura 3.1 a) en un arreglo equivalente de dos columnas simples (Figura 3.1 b). Considerando una alimentación ternaria ABC, el algoritmo de solución es el siguiente:

La alimentación se encuentra totalmente especificada, por lo tanto, es posible resolver la ecuación de Underwood para la *sección II*:

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i x_{i,F}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \quad (3.1)$$

$$\alpha_{lk} < \theta < 1 \quad \text{donde } B \text{ es el clave ligero } (lk) \quad (3.2)$$



a) Secuencia con agotador lateral. STAI

b) Arreglo equivalente

Figura 3.1. Método de diseño para la STAI. Glinos y Malone (1985).

Los flujos y las composiciones de las corrientes son desconocidos, pero es posible conocer el flujo neto del destilado de la *Sección II* por balance de materia ($D^{II} = V^{II} - L^{II} = W^I + D^I$), así como sus composiciones ($x_{i,D^{II}}$). Con la raíz obtenida de la Ecuación (3.1), el reflujo mínimo de la *Sección II* queda definido como:

$$R_{\min}^{II} + 1 = \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i x_{i,D^{II}}}{\alpha_i - \theta} \tag{3.3}$$

O bien:

$$V_{\min}^{II} = \frac{\alpha_A (D^I x_{A,D^I} + W^I x_{A,W^I})}{\alpha_A - \theta} + \frac{\alpha_B (D^I x_{B,D^I} + W^I x_{B,W^I})}{\alpha_B - \theta} + \frac{\alpha_C (D^I x_{C,D^I} + W^I x_{C,W^I})}{\alpha_C - \theta} \tag{3.4}$$

Se puede observar que el flujo D^{II} es la alimentación neta de la *Sección I*, sus composiciones son conocidas, así que lo único que queda por definir es la condición térmica de la misma; en base a un desarrollo simple Glinos y Malone lograron establecer que la condición térmica de dicha pseudo-corriente de alimentación está dada por:

$$q = -\frac{L^{II}}{V^{II} - L^{II}} \quad (3.5)$$

La condición térmica de esta pseudo-alimentación será siempre negativa (debido a que es igual al negativo del reflujo de la *Sección II*, el cual siempre es positivo) y por lo tanto será un vapor sobrecalentado. Con este último dato es posible resolver la Ecuación (3.1) para la *Sección I*, en donde:

$$\alpha_{lk} < \theta < \alpha_{hk} \quad \begin{array}{l} \text{A es el clave ligero (lk)} \\ \text{B es el clave pesado (hk)} \end{array} \quad (3.6)$$

Y el flujo mínimo de vapor para la *sección I* queda definido como:

$$V_{\min}^I = \frac{\alpha_A (D^I x_{A,D^I})}{\alpha_A - \theta} + \frac{\alpha_B (D^I x_{B,D^I})}{\alpha_B - \theta} + \frac{\alpha_C (D^I x_{C,D^I})}{\alpha_C - \theta} \quad (3.7)$$

Una vez que se tienen los datos de reflujo mínimo es posible completar el diseño por métodos cortos introduciendo las ecuaciones y correlaciones de Fenske, Gilliland y Kirkbride (Seader y Henley, 1998).

3.2.2 Secuencia Térmicamente Acoplada Directa (STAD)

Para el diseño de la STAD se extendió el procedimiento propuesto por Glinos y Malone (1985) para la STAI. Como el desarrollo es básicamente el mismo, a continuación se reporta sólo el diagrama equivalente con el cual se trabajó y la condición térmica determinada para la pseudo-alimentación.

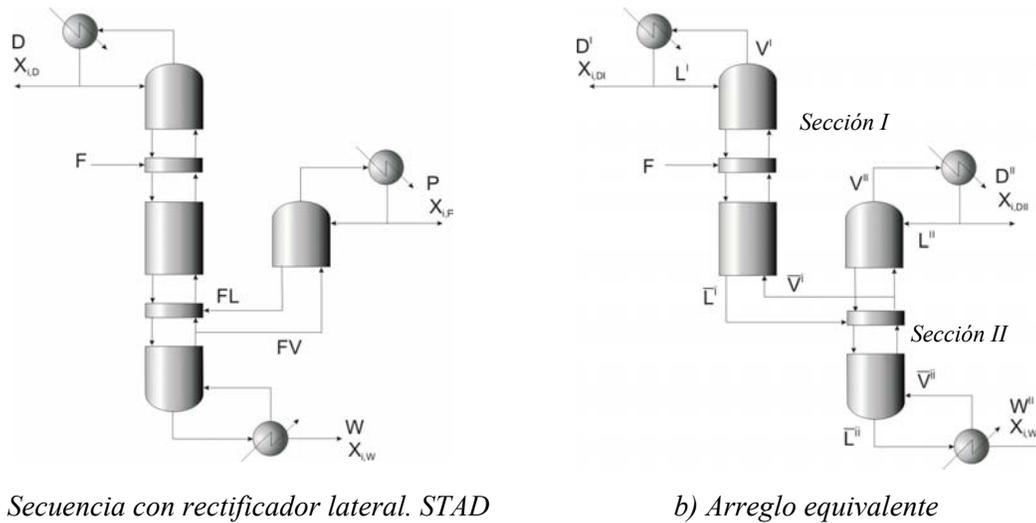


Figura 3.2 Método de diseño para la STAD.

El procedimiento es:

- Determinar el flujo mínimo de vapor para la *Sección I*
- Calcular la condición térmica de la pseudo-corriente ($W^I = \bar{L}^I - \bar{V}^I = D^{II} + W^{II}$)
- Resolver la ecuación de Underwood para la *Sección II*

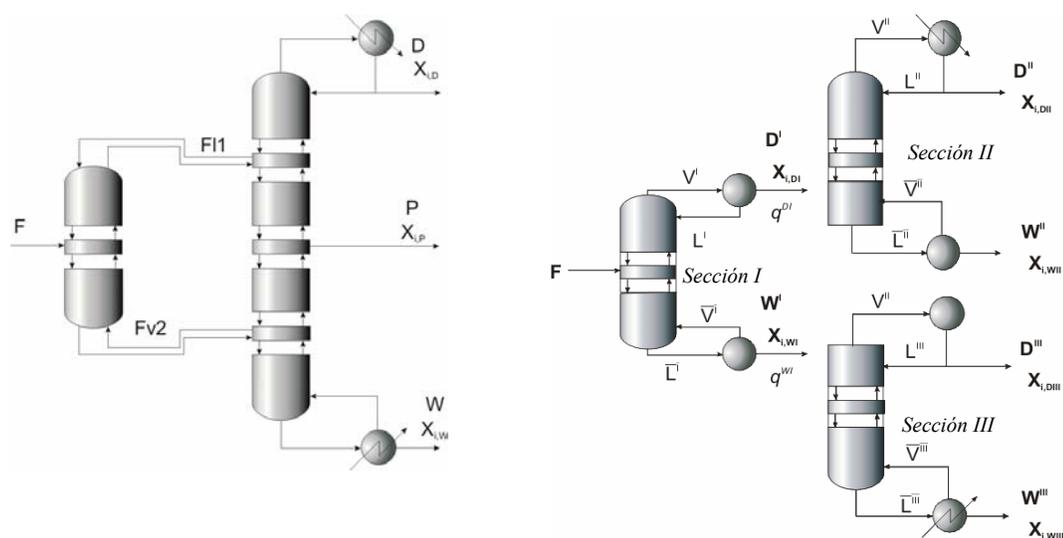
La condición térmica en este caso queda definida como:

$$q = \frac{\bar{L}^{II}}{\bar{L}^{II} - \bar{V}^{II}} \quad (3.8)$$

la cual es siempre positiva y mayor a 1, por lo tanto representa a un líquido subenfriado.

3.2.3 Diseño de la Secuencia Petlyuk (Kaibel)

Castro y Jiménez (2002) presentan una metodología para llevar a cabo el diseño de la secuencia Petlyuk, en donde el primer paso consiste en separar la estructura térmicamente acoplada en una secuencia de tres columnas desacopladas (Figura 3.3). La *Sección I* representa el prefraccionador y las *Secciones II* y *III* representan la columna principal.



a) Secuencia Petlyuk (Kaibel)

b) Arreglo equivalente

Figura 3.3 Método de diseño para la secuencia Petlyuk/Kaibel

Para diseñar el prefraccionador, es necesario estimar el reflujo mínimo de la *Sección I*

($R_{\min}^I = \frac{L_{\min}^I}{D^I}$) para lo cual se requiere encontrar las raíces que satisfacen a la ecuación de

Underwood (3.9). El valor óptimo del reflujo mínimo y la recuperación del componente intermedio se pueden estimar resolviendo simultáneamente las ecuaciones obtenidas de la Ecuación 3.10.

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i x_{i,F}}{\alpha_i - \theta^I} = 1 - q^I \quad \alpha_{hk} < \theta_2^I < \alpha_{mk} < \theta_1^I < \alpha_{lk} \quad (3.9)$$

$$L_{\min}^{I \text{ sup}} = \max_j \left[\sum_{i=1}^3 \frac{D^I x_{i,D^I} \theta_j^I}{\alpha_i - \theta_j^I} \right] \quad (3.10)$$

Conociendo todas las recuperaciones en el domo y considerando flujos molares constantes, se pueden estimar las composiciones de las corrientes de destilado (D^I , x_{i,D^I}) y fondos (W^I , x_{i,W^I}) de esta columna; estas corrientes no existen como tal en la secuencia, pero constituyen la alimentación neta que reciben las *Secciones II y III*.

En el caso de la columna principal (*Secciones II y III*) la *Sección II* tiene una alimentación de vapor y una salida lateral de líquido; en la *Sección III* se alimenta un líquido y se extrae una corriente lateral de vapor. En ambos casos es posible reemplazar esas corrientes por pseudo-alimentaciones con una condición térmica definida por la combinación de ambas corrientes. La condición térmica para la alimentación de la sección II está dada por $q^{D^I} = -R^I$, y está definida como $q^{B^I} = \frac{\bar{L}^I}{L^I - V^I}$ para la alimentación de la sección III.

Una vez determinadas las condiciones térmicas de ambas corrientes es posible encontrar las raíces de la ecuación de Underwood para ambas secciones, una raíz por sección ya que en principio ambas columnas son binarias.

De esta manera el reflujo mínimo de la *Sección II* queda definido por:

$$R_{\min}^{II} + 1 = \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i x_{i,D^{II}}}{\alpha_i - \theta^{II}} \quad \text{donde } R_{\min}^{II} = \frac{L_{\min}^{II}}{D^{II}} \quad (3.11)$$

Y el reflujo mínimo de la *Sección III* se calcula mediante:

$$R_{\min}^{III} + 1 = \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i x_{i,D^{III}}}{\alpha_i - \theta^{III}} \quad \text{donde } R_{\min}^{III} = \frac{L_{\min}^{III}}{D^{III}} \quad (3.12)$$

Debido a las múltiples alimentaciones y salidas laterales del sistema se puede presentar más de un punto de pliegue, por lo cual es necesario elegir adecuadamente el reflujo del sistema en base a la sección que limita la operación. Esto se hace comparando los reflujos mínimos calculados para las secciones II y III en el domo de la sección principal de la columna Petlyuk, y eligiendo el mayor de ellos:

$$R_{\min}^{Petlyuk} = \max \left\{ \begin{array}{l} \frac{L_{\min}^{II}}{D} \\ \frac{L_{\min}^{III} + P - D^I q^{D^I}}{D} \end{array} \right\} \quad (3.13)$$

Entonces, una vez establecida la relación de reflujo a la que se diseñará la columna Petlyuk (R_{ref}), se calculan las siguientes relaciones:

$$R^{Petlyuk} = R_{ref} R_{\min}^{Petlyuk} \quad (3.14)$$

$$L^{II} = R^{Petlyuk} D \quad \text{y} \quad L^{III} = L^{II} + D^I q^{D^I} - P \quad (3.15)$$

De esta manera cada una de las secciones va a tener un reflujo de operación de acuerdo con las siguientes expresiones:

$$R^{II} = R^{Petlyuk} \quad \text{y} \quad R^{III} = \frac{L^{II} + D^I q^{D^I} - P}{D^{III}} \quad (3.16)$$

Con los datos de reflujo mínimo y de operación, el diseño puede completarse por métodos cortos introduciendo las ecuaciones y correlaciones de Fenske, Gilliland y Kirkbride (Seader y Henley, 1998). Los flujos internos se calculan por medio de balances de materia considerando flujos molares constantes.

Para el caso de la secuencia Petlyuk, debido a que la columna principal y el prefraccionador pueden ser construidos de manera independiente, el diseño puede considerarse terminado. Si quiere utilizarse el modelo de forma general para que sea aplicable a la columna de pared divisora es necesario que el número de etapas de la sección I coincida con el número de etapas que suman la parte de la zona de agotamiento de la sección II y la parte de rectificación de la sección III, lo cual se logra ajustando la relación de reflujo especificada en el prefraccionador.

3.3 OPTIMIZACIÓN DE LOS DISEÑOS PRELIMINARES

3.3.1 Modelos para las Columnas con Acoplamiento Térmico

Para la optimización de las Secuencias Térmicamente Acopladas el modelo a resolver incluye las ecuaciones descritas en la metodología de diseño, los balances de materia, balances de energía, relaciones termodinámicas, correlaciones de costos y restricciones físicas del sistema.

Los parámetros del modelo se describen a continuación:

F	<i>Flujo de alimentación</i>
q	<i>Condición térmica de la alimentación</i>
Pt	<i>Presión de diseño</i>
z _i	<i>Fracción del componente i en la alimentación</i>
A _{ji}	<i>Coefficiente j de la ecuación de Antoine para el componente i</i>
cp _{ki}	<i>Coefficiente k para el cálculo de la capacidad calorífica, componente i</i>
h _{v_i}	<i>Calor latente de vaporización del componente i</i>
red _{i,t}	<i>Recuperación del componente i en el destilado de la columna t</i>
reb _{i,t}	<i>Recuperación del componente i en el fondo de la columna t</i>
Tref	<i>Temperatura de referencia para el cálculo de la entalpía</i>
Twat	<i>Temperatura del agua de enfriamiento</i>
Tvap	<i>Temperatura del vapor de calentamiento</i>
UR	<i>Coefficiente global de transferencia del reboiler</i>
UC	<i>Coefficiente global de transferencia del condensador</i>

La definición de conjuntos:

$$COL = \{t | t \text{ es una columna en el arreglo} \}$$

$$C = \{i | i \text{ es un componente de la mezcla} \}$$

$$UR = \{r | r \text{ es una raíz de la ecuación de Underwood} \}$$

$$UAR_t = \{r \in UR | r \text{ es una raíz activa de la ecuación de Underwood en la columna } t \}$$

$$hk_t = \{i \in C | i \text{ es el componente clave pesado en la columna } t \}$$

$$lk_t = \{i \in C | i \text{ es el componente clave ligero en la columna } t \}$$

$$m \in \{F, D, P, W\} \{m \text{ es una corriente de procesos} \}$$

$$COND = \{n | n \text{ es un condensador en la columna } t \}$$

$$REB = \{l | l \text{ es un reboiler en la columna } t \}$$

Todos los diseños están basados en métodos cortos, por lo tanto:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i \in \{1 \dots C\}} \frac{\alpha_{i,t} x_{i,t}^F}{\alpha_{i,t} - \theta_{t,r}} &= 1 - q_t & \forall r \in UR \\
 \sum_{i \in \{1 \dots C\}} \frac{\alpha_{i,t} x_{i,t}^D}{\alpha_{i,t} - \theta_{t,r}} &= 1 + R_{\min,t} & \forall r \in UAR_t \\
 N_{\min,t} &= \frac{\log \frac{x_{lk,t}^D x_{hk,t}^W}{x_{lk,t}^W x_{hk,t}^D}}{\log \alpha_t} & \forall t \in COL \\
 \frac{N_t - N_{\min,t}}{N_t + 1} &= 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54.4 X_t}{11 + 117.2 X_t} \right) \left(\frac{X_t - 1}{X_t^{0.5}} \right) \right], & X_t = \frac{R_t - R_{\min,t}}{R_t + 1} \\
 \frac{N_{rect,t}}{N_{agot,t}} &= \left[\left(\frac{z_{hk,t}}{z_{lk,t}} \right) \left(\frac{x_{lk,t}^W}{x_{hk,t}^D} \right)^2 \left(\frac{W_t}{D_t} \right) \right]^{0.206}
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

Para la normalización de las fracciones mol en cada corriente de producto:

$$\sum_{i \in \{1 \dots C\}} x_{i,t}^m = \sum_{i \in \{1 \dots C\}} y_{i,t}^m = 1 \quad \forall t \in COL \tag{3.18}$$

En el caso de las relaciones termodinámicas, las presiones de vapor se calcularon mediante la ecuación de Antoine y el equilibrio de acuerdo a la ley de Raoult.

$$\left. \begin{aligned} \ln pv_{i,t}^m &= A_{1i,t}^m - \frac{A_{2i,t}^m}{A_{3i,t}^m + T_{m,t}} \\ y_{i,t}^m P &= x_{i,t}^m pv_{i,t}^m \end{aligned} \right\} \quad \forall i \in C, \forall m \in \{F, D, P, W\}, \forall t \in COL \quad (3.19)$$

Balances de masa para cada columna:

$$\sum_{i \in \{1 \dots C\}} Fz_{i,t} = \sum_{i \in \{1 \dots C\}} Dx_{i,t}^D + \sum_{i \in \{1 \dots C\}} Px_{i,t}^P + \sum_{i \in \{1 \dots C\}} Wx_{i,t}^W \quad \forall t \in COL \quad (3.20)$$

Cálculo de la entalpía de las corrientes de proceso:

$$H_m = \sum_{i \in \{1 \dots C\}} x_{i,t}^m \int_{T_{ref}}^{T_{m,t}} cpdT \quad \forall m \in \{F, D, P, W\}, \forall t \in COL \quad (3.21)$$

Balance de energía de los intercambiadores de calor:

$$\begin{aligned} Q_{cond_{n,t}} &= [D_t(R_t + 1)] \sum_{i \in \{1 \dots C\}} hv_i x_{i,t}^D \quad \forall n \in COND \\ \sum_{l \in REB} Q_{reb_{l,t}} &= D_t H_{D,t} + P_t H_{P,t} + W_t H_{W,t} + \sum_{n \in COND} Q_{cond_{n,t}} - F_t H_{F,t} \end{aligned} \quad \forall t \in COL \quad (3.22)$$

Para asegurar la factibilidad de los valores de diseño, tanto en reflujo como en número de etapas:

$$\begin{aligned} R_t &\geq R_{\min,t} \\ N_t &\geq N_{\min,t} \end{aligned} \quad \forall t \in COL \quad (3.23)$$

Ecuaciones que acoplan al arreglo; para la STAI el flujo de líquido de interconexión está dado por:

$$FL = (D_I R_I) - (D_{II} R_{II}) \quad (3.24)$$

Para la STAD el flujo de vapor de interconexión está dado por:

$$FV = D_{II} (R_{II} + 1) \quad (3.25)$$

Para la secuencia Petlyuk se deben determinar dos flujos de interconexión, uno de líquido y otro de vapor:

$$\begin{aligned} FL1 &= D_I R_I \\ FV2 &= D_I R_I + q_I F - W_I \end{aligned} \quad (3.26)$$

En el caso específico de la columna de pared divisora, la restricción adicional de la igualdad de etapas entre secciones:

$$N_I = N_{\text{agot,II}} + N_{\text{rect,III}} \quad (3.27)$$

Las correlaciones de costos se tomaron de Jiménez (2003); la función objetivo es la minimización del costo total de la separación:

$$C_{tot} = C_{cap} + C_{op}$$

$$C_{cap} = f(N_t, R_t)$$

$$C_{op} = f(Q_{reb_l}, Q_{cond_n}) \quad (3.28)$$

donde:

$X_{m,i}$	Fracción del componente i en la corriente de proceso m
D	destilado
W	corriente de fondos
P	corriente lateral
FL	Flujo de líquido de interconexión, STAI
FV	Flujo de vapor de interconexión, STAD
$FL1$	Flujo de líquido superior de interconexión, secuencia Petlyuk
$FV2$	Flujo de vapor de interconexión, secuencia Petlyuk
T_m	Temperatura de la corriente de proceso m
p_{v_i}	Presión de vapor del componente i
H_m	Entalpía de la corriente de proceso m
Q_{reb_l}	Carga térmica del ebullidor l
Q_{cond_n}	Carga térmica del condensador n
N_t	Número de etapas totales de la columna t
$N_{rect,t}$	Número de etapas en la sección de rectificación de la columna t
$N_{agot,t}$	Número de etapas en la sección de agotamiento de la columna t
R_t	Reflujo de operación de la columna principal
C_{cap}	Costo de capital
C_{op}	Costo de operación
C_{tot}	Costo total de la separación

3.3.2 Optimización en el Ambiente GAMS

Las variables de diseño y operación se optimizaron simultáneamente para cada secuencia utilizando programación matemática, teniendo como función objetivo la minimización del costo anual de la secuencia. Los modelos descritos anteriormente se codificaron dentro del Sistema General de Modelación Algebraica (GAMS) (Brooke y col., 1998).

Para las tres secuencias optimizadas los modelos fueron no lineales (NLP) y para la solución de los mismos se eligió el uso del resolvidor CONOPT2. En el caso particular de la secuencia Petlyuk/Kaibel, la re-definición de la relación de reflujo mínimo dio lugar a que el modelo incluyera funciones cuyas derivadas son discontinuas (DNLP), pero fue posible resolverlo utilizando el mismo resolvidor que para el modelo NLP; sin embargo, hay que mencionar que GAMS no cuenta con resolvidores diseñados específicamente para la solución de problemas DNLP y que la manera más confiable de resolver este tipo de modelos es reformulándolos de DNLP a NLP.

3.4 CONDICIONES DE MÍNIMA ENERGÍA PARA LA SECUENCIA PETLYUK

Christiansen y Skogestad (1997) mostraron que, para la secuencia Petlyuk, existe una región en la cual el requerimiento de vapor mínimo permanece constante, y que dicha región se encuentra delimitada por dos recuperaciones bien definidas del componente intermedio en el destilado neto del prefraccionador ($\phi_B^{D'}$).

La secuencia Petlyuk puede representarse a partir de un arreglo de 3 columnas desacopladas, tal como se explicó en la descripción del método de diseño, en donde la primera columna corresponde al prefraccionador y las otras dos a la estructura de la columna principal (Figura 3.4). Considerando la separación de una mezcla ternaria ABC, la función de la columna prefraccionadora es la separación de los componentes clave A y C,

por lo tanto, el componente B se encontrará distribuido en las corrientes de producto; debido al tipo de separación que se lleva a cabo en esta columna, para la ecuación de Underwood existen dos raíces activas y, por lo tanto, la solución óptima corresponderá a la solución simultánea de las dos ecuaciones generadas, tal como se muestra de manera gráfica en la Figura 3.5.

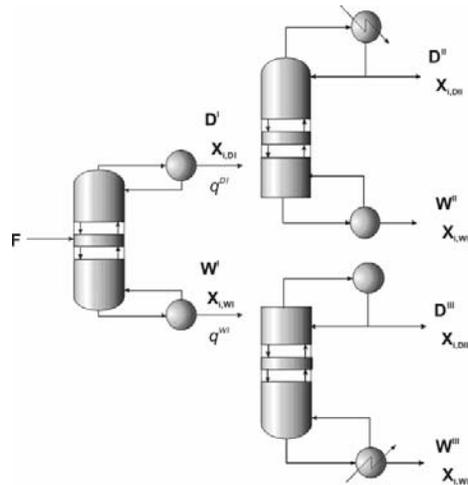


Figura 3.4 Arreglo equivalente a la secuencia Petlyuk.

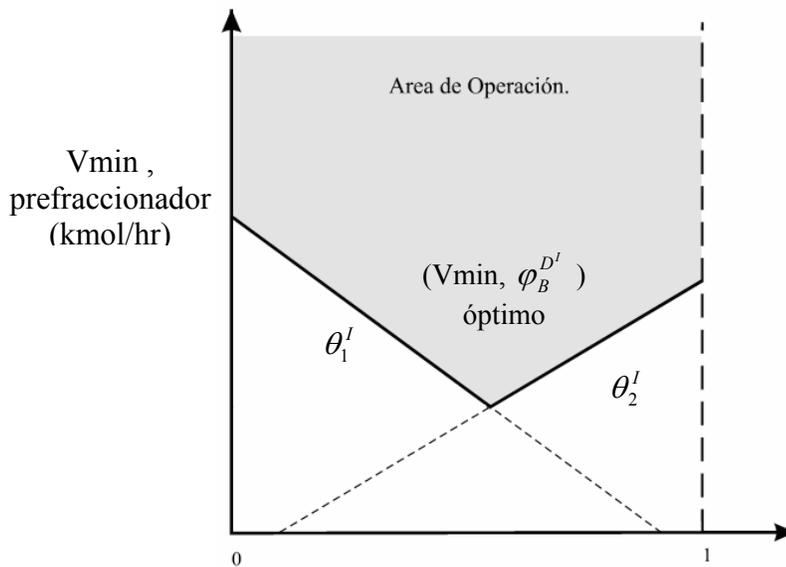


Figura 3.5 Requerimiento de vapor mínimo del prefraccionador como función de la recuperación del componente intermedio en el destilado del mismo.

Esta solución corresponde a lo que se denomina *la separación preferida*, que no es otra cosa que la solución óptima del prefraccionador; una vez que se tiene definida la distribución del componente intermedio y el V_{\min} del prefraccionador, se procede al cálculo de los requerimientos de vapor de las dos columnas restantes, cada una de las cuales es evidentemente binaria y, por lo tanto, sólo existirá una solución. Sin embargo, mediante simulaciones de columnas con número infinito de etapas, Christiansen y Skogestad encontraron que efectivamente esta solución corresponde a un mínimo para el requerimiento de vapor de la secuencia completa, pero que tal valor mínimo no es único debido a que existe toda una región en la cual el requerimiento de vapor permanece casi constante, tal como se muestra en la Figura 3.6; de acuerdo a sus simulaciones, uno de los límites de esta región corresponde a *la separación preferida* $(\varphi_B^{D^I})^{pref}$, mientras que el otro valor límite corresponde a lo que ellos denominan condición de *columnas balanceadas* $(\varphi_B^{D^I})^{bal}$.

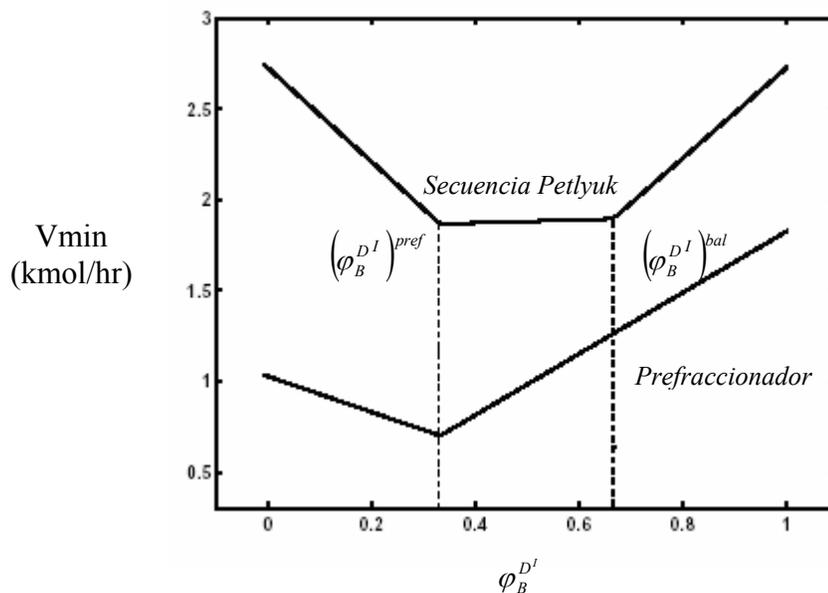


Figura 3.6 Requerimiento de vapor mínimo de la secuencia Petlyuk, como función de la recuperación del componente intermedio en el destilado del prefraccionador.

La condición de *columnas balanceadas* se puede explicar de la siguiente manera: una vez fijada la recuperación del componente intermedio en el prefraccionador, y por lo tanto el requerimiento mínimo de vapor del mismo, se procede a resolver las dos columnas restantes que, como se explicó anteriormente, son básicamente binarias; la segunda columna lleva a cabo la separación A/B mientras que la tercera columna separa B/C. Cada columna presentará un requerimiento de vapor diferente, que será función de las volatilidades relativas (α_i), la composición de la alimentación neta (D^I, W^I), y la condición térmica de la misma (q^{D^I}, q^{W^I}):

$$\left[V_{\min, principal} = \max(V_{\min}^{II}, V_{\min}^{III}) = f(\alpha_i, D^I, W^I, q^{D^I}, q^{W^I}) \right] \quad (3.29)$$

En el arreglo Petlyuk las columnas 2 y 3 se unen en la etapa de extracción lateral por lo cual es necesario igualar los flujos de vapor en dicha etapa; ésto puede lograrse manipulando el reflujo de operación de la columna con menor requerimiento mínimo de vapor, o redefiniendo el reflujo mínimo en función de la sección con mayor requerimiento de V_{\min} , tal como lo proponen Castro y Jiménez (2002). Sin embargo, existe un valor para la distribución de B en el prefraccionador para el cual los requerimientos de vapor en las dos columnas se igualan de manera natural en la etapa de extracción de la columna principal de la secuencia Petlyuk, dando lugar al concepto de *columnas balanceadas*.

Para la predicción de estas dos distribuciones de B, *separación preferida* $(\varphi_B^{D'})^{pref}$ y *columnas balanceadas* $(\varphi_B^{D'})^{bal}$, Christiansen y Skogestad (1997) desarrollan expresiones analíticas; considerando que la corriente de alimentación al prefraccionador es un líquido saturado. La expresión para el cálculo de la recuperación de B correspondiente a la separación preferida es la siguiente:

$$(\varphi_B^{D'})^{pref} = \frac{\varphi_A^{D'}(\alpha_{BC} - 1) + \alpha_{BC}\varphi_C^{D'}(\alpha_{AB} - 1)}{\alpha_{AC} - 1} \quad (3.30)$$

donde:

φ_A^D recuperación de A en el destilado del prefraccionador
 φ_C^D recuperación de C en el destilado del prefraccionador

La cual puede reducirse a la ecuación (3.28) cuando la separación entre A y C es perfecta:

$$(\varphi_B^{D'})^{pref} = \frac{\alpha_{BC} - 1}{\alpha_{AC} - 1} \quad (3.31)$$

Para el desarrollo de la ecuación que predice la distribución correspondiente a la condición de *columnas balanceadas* es necesario determinar las condiciones térmicas de las alimentaciones netas a las columnas 2 y 3; Christiansen y Skogestad manejan la suposición de que la alimentación a la columna 2 es siempre un vapor saturado, y la alimentación a la columna 3 es siempre un líquido saturado. La expresión analítica obtenida por ellos para el caso en el cual la separación entre A y C es perfecta es:

$$(\varphi_B^{D'})^{bal} = \frac{(1 - z_A)(\alpha_{AB} - 1) + z_B(\alpha_{AB} - 1)(\alpha_{BC} - 1) - z_A(\alpha_{BC} - 1)}{z_B(\alpha_{BC} - 1) + z_B(\alpha_{AB} - 1) + z_B(\alpha_{AB} - 1)(\alpha_{BC} - 1)} \quad (3.32)$$

En el caso del presente trabajo, para determinar las regiones de mínimo requerimiento de vapor para las mezclas analizadas, se calcularon los consumos de vapor de la secuencia Petlyuk/Kaibel para todas las posibles distribuciones del componente intermedio en el prefraccionador mediante la extensión de la ecuación de Underwood del método de diseño propuesto por Castro y Jiménez (2002), en el cual no se supone una condición térmica única, debido a que son calculadas para cada valor de B en el prefraccionador. Una vez obtenidos los datos se determinó el valor de las dos distribuciones del componente intermedio que limitan la región constante de V_{min} .

3.5 INTRODUCCIÓN DE LÍMITES FACTIBLES A LAS VARIABLES DE DISEÑO Y OPERACIÓN

En base a los resultados obtenidos, se propuso la introducción de límites factibles de algunas variables de diseño y operación. El análisis y la metodología propuesta se explican de manera detallada en la sección de resultados. Para el caso de los flujos de interconexión, los límites determinados se validaron utilizando estructuras optimizadas de acuerdo a los diagramas mostrados en las Figuras 3.4 y 3.5 (Hernández y Jiménez 1996).

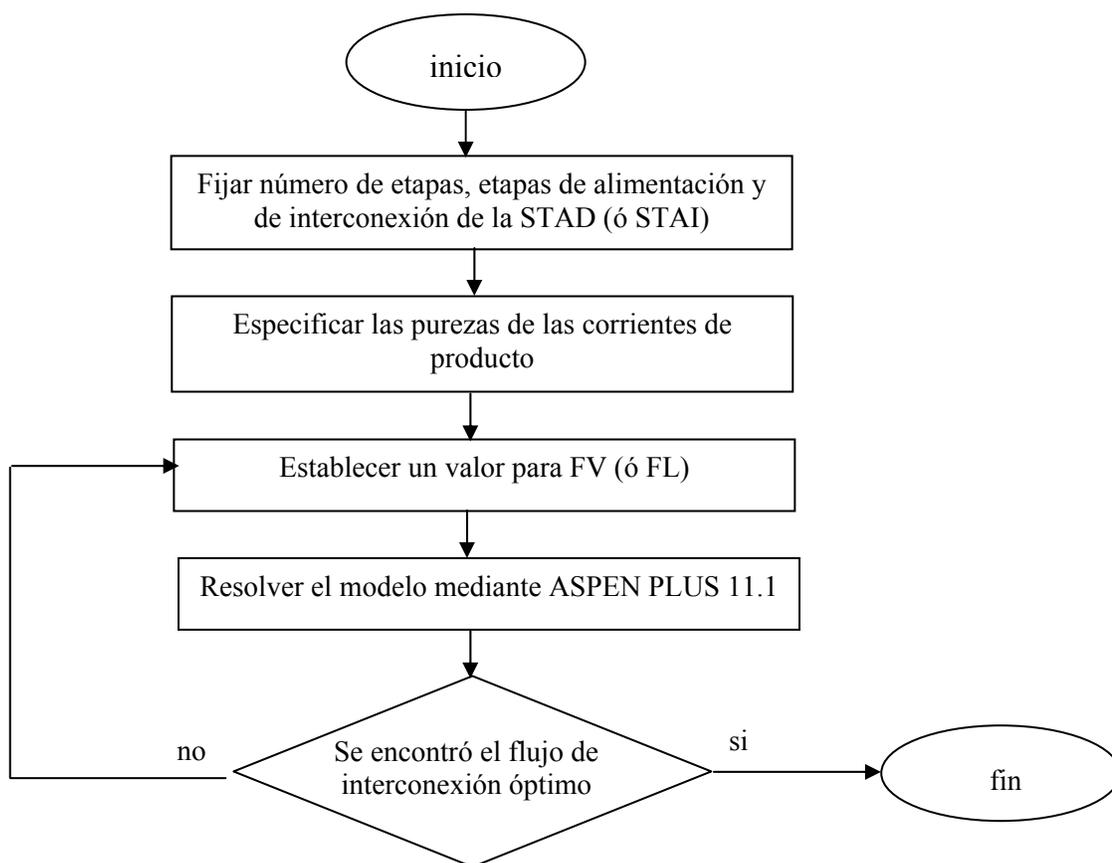


Figura 3.7 Diagrama de flujo para la optimización de flujos de interconexión, STAD y STAI.

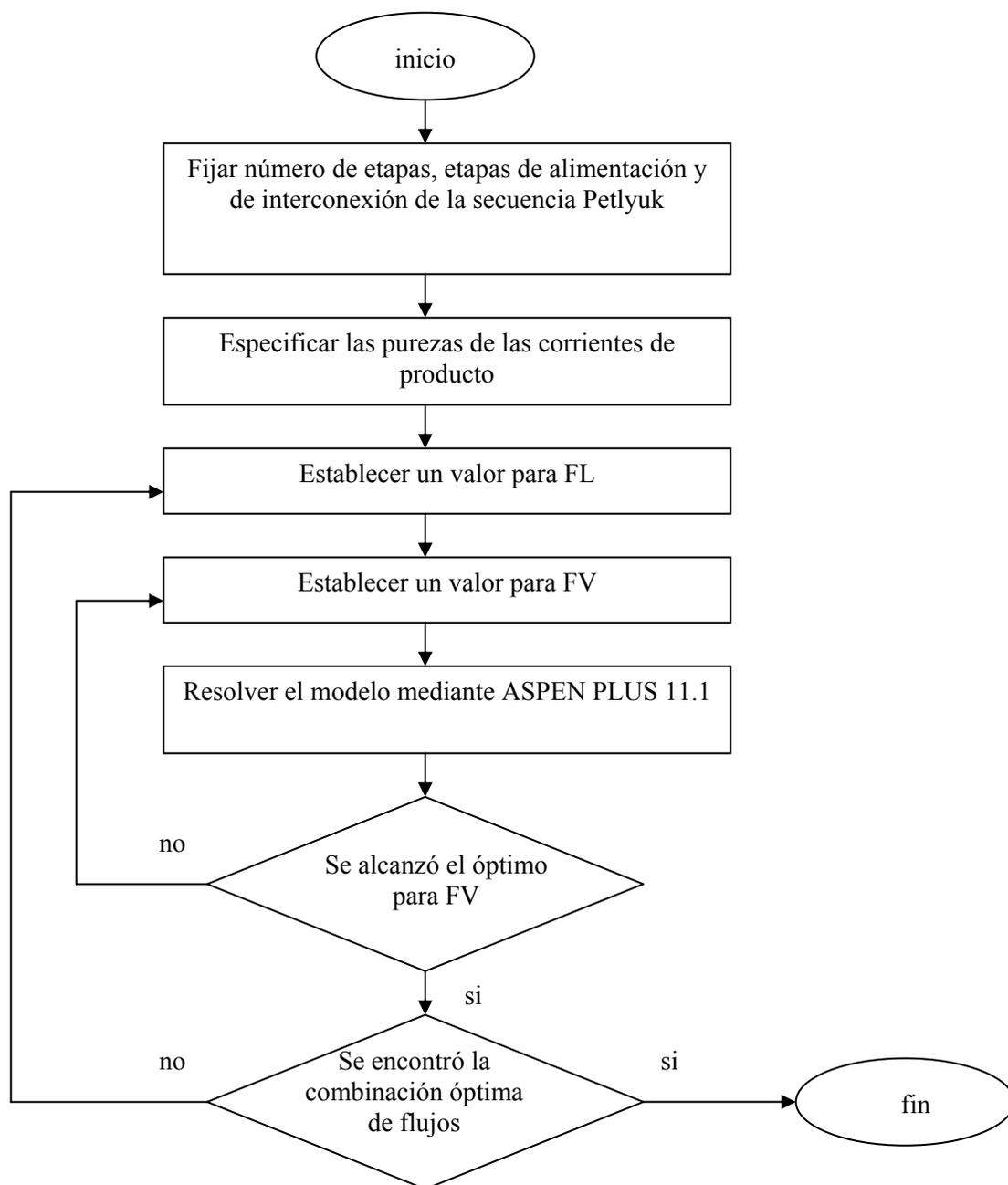


Figura 3.8 Diagrama de flujo para la optimización de los flujos de interconexión de la secuencia Petlyuk.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS: SECUENCIAS STAD Y STAI

En el presente capítulo se muestran los resultados obtenidos para las secuencias STAD y STAI. En la primera parte se presentan los resultados de la etapa de diseño y optimización, así como la solución a los problemas de convergencia encontrados; posteriormente, en base a los resultados discutidos, se define un límite inferior para la búsqueda de condiciones óptimas de operación.

4.1 COMPARACIÓN DE DISEÑOS

La Tabla 4.1 se muestra una comparación entre los diseños obtenidos para la STAD mediante la metodología propuesta por Hernández y Jiménez (1996), la cual fue utilizada en un trabajo previo (Ramírez-Corona, 2002) respecto a los diseños obtenidos al utilizar la metodología planteada en el presente trabajo (Tabla 4.2). Con esto se pretende mostrar algunos resultados que parecieron interesantes de discutir y que serán útiles para analizar resultados posteriores.

En ambos casos la razón de reflujo de diseño se fijó como 1.3 veces su valor mínimo. En general se puede apreciar que los diseños son bastante similares pero es necesario destacar que los diseños obtenidos mediante la metodología de Hernández y Jiménez (1996) han sido sujetos a un procedimiento de optimización de flujos de interconexión, mientras que en los diseños obtenidos mediante el método de Glinos y

Malone (1985) los flujos de interconexión fueron variables calculadas dentro del modelo, que en ningún momento fueron optimizadas. Los diseños fueron validados mediante el simulador de procesos Aspen Plus 11.1® utilizando la correlación de Chao-Seader para el cálculo de las propiedades termodinámicas.

Tabla 4.1 Metodología de Hernández y Jiménez (1996).

Variable	STAD		
	Columna Principal	M1-F1	M2-F2
Número de etapas	28	56	68
Etapas de alimentación	10	11	32
Etapas de interconexión	18	21	60
Relación de Reflujo	2	4.6	30.6
Flujo de vapor de interconexión (kmol/hr)	58	375	108
Flujo de Destilado (kmol/hr)	39.60	33	16.10
Rectificador Lateral			
Número de etapas	10	40	10
Flujo de Destilado (kmol/hr)	20.807	33.03	67.80
Qreb (kcal/hr)	1 167 534	2 871 892	3 495 716

Tabla 4.2 Extensión de la metodología propuesta por Glinos y Malone (1985).

Variable	STAD		
	Columna Principal	M1-F1	M2-F2
Número de etapas	31	59	69
Etapas de alimentación	11	11	22
Etapas de interconexión	20	23	62
Relación de Reflujo	2.3	7.8	28.5
Flujo de vapor de interconexión (kmol/hr)	51.86	350.39	114.76
Flujo de Destilado (kmol/hr)	39.60	33	16.10
Rectificador Lateral			
Número de etapas	9	36	13
Flujo de Destilado (kmol/hr)	20.807	33.03	67.80
Qreb (kcal/hr)	1 189 486	3 234 663	3 347 167

La diferencia del número de etapas totales entre ambos diseños no parece ser significativa, pero resulta interesante que las cargas térmicas sean bastante similares y que en algunos casos los diseños “no optimizados” presenten ligeras mejoras respecto a los diseños cuyos flujos fueron optimizados. Resultados similares se observan para la Secuencia Térmicamente Acoplada Indirecta, Tablas 4.3 y 4.4

Tabla 4.3 Metodología de Hernández y Jiménez (1996).

Variable	STAI			
	Columna Principal	M1-F2	M2-F3	M3-F2
Número de etapas	31	85	51	
Etapas de interconexión	10	11	33	
Etapas de alimentación	21	50	43	
Relación de Reflujo	5.3	49.5	13	
Flujo de liq de interconexión (kmol/hr)	80	148	340	
Flujo de Destilado (kmol/hr)	33	16.10	33	
Agotador Lateral				
Número de etapas	7	10	28	
Flujo de Fondos (kmol/hr)	33.03	67.80	33.03	
Qreb (kcal/hr)		1 277 150	3 939 493	2 607 833

Tabla 4.4 Metodología propuesta por Glinos y Malone (1985).

Variable	STAI			
	Columna Principal	M1-F2	M2-F3	M3-F2
Número de etapas	30	81	50	
Etapas de interconexión	9	8	32	
Etapas de alimentación	20	56	42	
Relación de Reflujo	5.6	50.8	12.8	
Flujo de liq de interconexión (kmol/hr)	89.04	166.3	331.03	
Flujo de Destilado (kmol/hr)	33	16.10	33	
Agotador Lateral				
Número de etapas	9	14	32	
Flujo de Fondos (kmol/hr)	33.03	67.80	33.03	
Qreb (kcal/hr)		1 332 139	4 040 020	2 570 902

La explicación de la cercanía de estos valores podría estar en la definición de la condición térmica de la alimentación a la segunda columna del arreglo. En uno de los diseños se ha considerado que todos los productos del arreglo desacoplado son líquidos saturados (Hernández y Jiménez, 1996), incluso la de la corriente que interconectará al arreglo acoplado; en el caso de la metodología basada en el desarrollo de Glinos y Malone (1895) la condición térmica de la corriente que interconecta a ambas columnas se define por la mezcla de una corriente de líquido y una de vapor que se alimentan/extraen en la misma etapa. Anteriormente se mencionó que el acoplamiento térmico se lleva a cabo modificando la estructura de la secuencia de manera que la transferencia de calor se dé por contacto directo entre corrientes laterales (de líquido y vapor) que conectan entre sí a dichas columnas; de acuerdo a esto se puede decir que la definición de la condición térmica de la alimentación neta que conecta a ambas columnas podría considerarse como una medida de dicha transferencia de calor y, por lo tanto, el hecho de incluirla desde la etapa de diseño nos ayuda a obtener una mejor aproximación del número y distribución de etapas así como del valor del flujo de interconexión .

En la Tabla 4.5 se muestran las condiciones térmicas de las pseudos-corrientes de alimentación calculadas para los diseños de las Secuencias Térmicamente Acopladas a partir de la metodología utilizada en el presente trabajo. Es evidente que en ninguno de los casos la condición térmica es cercana a líquido saturado.

Tabla 4.5 Condiciones térmicas de pseudos-corrientes de alimentación.

	Alimentación	q pseudo-alimentación STAD	q pseudo-alimentación STAI
MEZCLA M1	<i>F1</i>	2.44	-0.725
	<i>F2</i>	2.27	-0.79
	<i>F3</i>	1.95	-0.81
MEZCLA M2	<i>F1</i>	2.94	-4.19
	<i>F2</i>	2.70	-4.43
	<i>F3</i>	2.24	-4.48
MEZCLA M3	<i>F1</i>	5.46	-0.796
	<i>F2</i>	5.27	-0.77
	<i>F3</i>	5.01	-0.67

Las condiciones térmicas calculadas de acuerdo a lo propuesto por Glinos y Malone (1985) se determinan a condiciones de reflujo mínimo. Debido a que estas condiciones térmicas están definidas en función de corrientes de reflujo, es posible refinar este cálculo considerando las condiciones de operación reales. En la Tabla 4.6 se muestran los resultados de dicho ajuste. Las variaciones encontradas van de un 10 a un 20%; por lo tanto, debido a que estas variaciones pueden tener efectos significativos, y a que el valor del flujo de vapor mínimo de los arreglos depende de esta condición térmica, se decidió que en el modelo a optimizar esta variable estuviera en función del reflujo de diseño y no en función a las condiciones de reflujo mínimo.

Tabla 4.6 Condiciones térmicas de pseudos-corrientes de alimentación ajustadas.

	Alimentación	q pseudo-alimentación STAD		q pseudo-alimentación STAI	
		Etapas infinitas	Condiciones de operación	Etapas infinitas	Condiciones de operación
MEZCLA M1	<i>F1</i>	2.44	2.68	-0.725	-0.943
	<i>F2</i>	2.27	2.51	-0.79	-1.02
	<i>F3</i>	1.95	2.18	-0.81	-1.05
MEZCLA M2	<i>F1</i>	2.94	3.32	-4.19	-5.45
	<i>F2</i>	2.70	3.07	-4.43	-5.76
	<i>F3</i>	2.24	2.56	-4.48	-5.82
MEZCLA M3	<i>F1</i>	5.46	6.6	-0.796	-1.03
	<i>F2</i>	5.27	6.409	-0.77	-1.0
	<i>F3</i>	5.01	6.168	-0.67	-0.872

4.2 OPTIMIZACIÓN DE LAS ESTRUCTURAS PRELIMINARES

A continuación se mostrarán y discutirán los resultados de la etapa de optimización matemática de las estructuras preliminares, en donde todas las variables del modelo fueron resueltas de manera simultánea.

De acuerdo a King (1988), en el caso de secuencias convencionales, varios autores reportan diseños óptimos para valores de reflujo de 1.1 a 1.2 veces R_{min} , aunque recomiendan el uso de 1.2 o 1.3 veces R_{min} , lo cual incrementa el costo anual de operación entre un 2 a 6% del costo óptimo, pero asegura la factibilidad del diseño. En base a lo anterior y con la finalidad de determinar los incrementos en el costo anual de operación, la solución óptima de las secuencias con acoplamiento térmico obtenida se comparó con diseños cuyo reflujo se fijó en 1.3 veces el mínimo.

Se encontró que cuando la secuencia es optimizada se obtienen ahorros substanciales respecto a los costos de secuencias diseñadas siguiendo la heurística de $R=1.3$ veces R_{min} ; en todos los casos se incrementa el costo asociado a inversión y hay disminuciones en el costo de servicios. Los resultados para la STAD se muestran a partir de la Tabla 4.7 a la 4.9. Para el caso de la secuencia térmicamente acoplada indirecta (STAI) los resultados se pueden observar de la Tablas 4.10 a la 4.12. En cada tabla se describe la estructura y distribución de etapas del arreglo, el valor del flujo de interconexión, la razón de reflujo de operación, el flujo del destilado de la columna principal, el flujo de destilado o fondos (según sea el caso) del agotador/rectificador lateral, la carga térmica de los ebullidores, los costos asociados a servicios y el costo total del arreglo (los costos fijos pueden ser obtenidos por diferencia).

En el caso de la STAD, para la mezcla M1 (Tabla 4.7) se encontraron arreglos óptimos cuando el número de etapas se incrementa entre un 45 y un 51 % respecto al requerido para los arreglos no optimizados, y la disminución en los flujos internos es de aproximadamente el 9%. Se aprecia de manera general que la relación Costo Fijo/Costo Total es igual o menor a 0.2 para los arreglos no optimizados y tiende a 0.3 cuando los arreglos se optimizan y que, como consecuencia de la optimización de los diseños, se obtienen ahorros en el costo total de la secuencia que van de un 5.55% a un 8.07%, los cuales se incrementan de manera directa con la fracción mol del componente intermedio presente en la alimentación.

Tabla 4.7 Diseño y costos de la STAD. Mezcla M1.

	R=1.3 Rmin			Optimizado		
	M1-F1	M1-F2	M1-F3	M1-F1	M1-F2	M1-F3
Columna Principal						
Etapas Totales	30	29	25	46	43	39
Etapas de Alimentación	10	9	6	15	13	10
Etapas de Interconexión	20	19	18	29	28	28
FV (vap. interconexión, kmol/hr)	49.66	75.929	139.98	45.528	68.961	126.68
Relación de Reflujo	1.287	1.677	4.133	1.034	1.341	3.274
Destilado (kmol/hr)	39.60	33	16.10	39.60	33	16.10
Rectificador Lateral						
Etapas Totales	10	11	14	13	15	20
Destilado (kmol/hr)	20.807	33.03	67.80	20.807	33.03	67.80
Qreb (Carga Térmica, kcal/hr)	962300	1120700	1501600	871940	1004200	1323900
Costo de calentamiento (\$/yr)	35 092	40 867	54 757	31 796	36 617	48 278
Costo de enfriamiento (\$/yr)	2 145	2 544	3 521	1 930	2 267	3 098
Costo total (\$/yr)	47 027	54 140	70 832	44 416	50 619	65 114

Para la misma mezcla (M1, Tabla 4.7), además de las comparaciones del diseño óptimo vs. diseño con $R=1.3 R_{min}$, pueden observarse concordancias interesantes para las diferentes alimentaciones y condiciones de diseño; por ejemplo, en los diseños M1-F1 y M1-F2, cuando $R=1.3 R_{min}$, puede observarse que el número total de etapas de ambos arreglos es de 40 y, mediante un análisis rápido de los valores de FV (vapor de interconexión), flujo de destilado y relación de reflujo de ambas estructuras, puede estimarse que los flujos internos del arreglo para la separación de M1-F2 casi duplican los requeridos para la separación de M1-F1. Debido a que costo fijo de la columna depende directamente del número de etapas y su diámetro, y en este caso el número de etapas es el mismo, es de esperarse que el arreglo que separa M1-F2 presente un mayor costo que el arreglo que separa M1-F1 como consecuencia del mayor diámetro requerido; dicha diferencia en costos de inversión es de aproximadamente el 10%.

Por otro lado, considerando ahora los dos diseños para la separación de M1-F1 (diseño optimizado y diseño con $R=1.3 R_{min}$), en donde el diseño óptimo de la secuencia se consiguió con un arreglo en donde los flujos internos disminuyen aproximadamente en un 9% pero el número de etapas se incrementa en casi un 50% y, por lo tanto, ahora el mayor impacto en el costo fijo estará dado por la altura de la columna y no por el diámetro, se observó que curiosamente la diferencia en costos de inversión es también del 10%. De acuerdo a estos resultados, pareciera que ambas variables tienen el mismo peso en el costo fijo de la columna, pero al analizar lo que estaba sucediendo se encontró lo siguiente:

La ecuación mediante la cual se calcula el costo de la columna instalada es:

$$CCol = 4.34 \left[7620 D_c \left(\frac{H_c}{12.2} \right)^{0.68} \right] \quad (4.1)$$

La altura y el diámetro de la columna están dados en metros, y para el caso de esta mezcla M1, en donde la dificultad de la separación A/B es igual a la dificultad de la separación B/C, los diámetros no rebasan el metro de longitud, por lo tanto dicha variable toma valores iguales o menores a 1, mientras que la altura de la columna se encuentra en valores alrededor de 20 metros; debido a ello el término $\left(\frac{H_c}{12.2} \right)^{0.68}$ tendrá valores cercanos a 1 también, por lo cual los incrementos en el costo fijo debido a ambas variables tienden a ser similares.

En el caso de las mezclas M2 y M3 los ahorros encontrados en costos de servicios y costo total son mayores que en el caso de la mezcla M1; para la mezcla M2 (separación A/B más fácil que separación B/C), Tabla 4.8, los arreglos optimizados requieren entre un 51 y un 56% más etapas que los arreglos diseñados con $R=1.3 R_{min}$, y presentan un menor requerimiento de vapor de interconexión aproximadamente en un 17%. Como resultado de lo anterior, el incremento en costo fijo es de alrededor del 13% para cada caso, con reducciones en los costos de servicios que van de un 15 a un 17%, obteniéndose ahorros en costo total de entre un 9.7 y un 12.4%; al igual que en el caso de la mezcla M1 los ahorros se incrementan de manera directa con la fracción mol del componente intermedio presente en la alimentación. Para la mezcla M2 las diferencias en el costo fijo debido a la altura y diámetros de las columnas no son simétricas, como en el caso de la mezcla M1, debido a que los cambios en los flujos internos son mayores y el incremento en el número de etapas también, además de que la relación costo fijo/costo total para estos casos va de 0.17 a 0.25 aproximadamente.

Tabla 4.8 Diseño y costos de STAD. Mezcla M2.

	R=1.3 R _{min}			Optimizado		
	M2-F1	M2-F2	M2-F3	M2-F1	M2-F2	M2-F3
Columna Principal						
Etapas Totales	61	57	45	91	86	71
Etapas de Alimentación	11	10	7	15	14	10
Etapas de Interconexión	21	20	19	28	29	30
FV (vap. interconexión, kmol/hr)	273.86	347.50	517.93	228.15	287.61	426.38
Relación de Reflujo	1.997	2.505	5.616	1.62	2.009	5.286
Flujo de Destilado (kmol/hr)	39.60	33	16.10	39.60	33	16.10
Rectificador Lateral						
Etapas Totales	31	36	48	48	56	74
Flujo de Destilado (kmol/hr)	20.807	33.03	67.80	20.807	33.03	67.80
Q _{reb} (Carga Térmica, kcal/hr)	2271900	2689800	3641900	1922700	2248900	2999900
Costo de calentamiento (\$/yr)	82 846	98 085	132 800	70 113	82 006	109 390
Costo de enfriamiento (\$/yr)	5 354	6 354	8 642	4 523	5 304	7 114
Costo total (\$/yr)	109 840	128 390	170 010	99 109	114 430	148 890

En la optimización de los arreglos para la mezcla M3 (separación B/C más fácil que separación A/B), Tabla 4.9, se encontraron menores ahorros que para la mezcla M2, pero en todos los casos mayores a los encontrados para la mezcla M1. De manera similar a las mezclas anteriores, el incremento en número de etapas fue de alrededor del 50%, pero esta mezcla fue en la que se encontraron las menores reducciones en flujos de interconexión; cuando los arreglos son optimizados el flujo de interconexión se reduce entre un 2 y un 5 % respecto a los diseños con $R=1.3 R_{min}$. Se encontraron reducciones de un 16% para el costo asociado a servicios e incrementos del 12% para el costo fijo; al igual que en los casos anteriores, los ahorros se incrementan de manera directa con la presencia del componente intermedio en la corriente de alimentación.

Tabla 4.9 Diseño y costos de la STAD. Mezcla M3.

	R=1.3 R _{min}			Optimizado		
	M3-F1	M3-F2	M3-F3	M3-F1	M3-F2	M3-F3
Columna Principal						
Etapas Totales	77	73	66	111	109	103
Etapas de Alimentación	33	29	21	50	45	32
Etapas de Interconexión	64	62	59	98	96	94
FV (vap. interconexión, kmol/hr)	28.73	50.52	109.057	29.381	49.542	103.623
Relación de Reflujo	7.45	9.69	24.49	5.924	7.691	19.367
Flujo de Destilado (kmol/hr)	39.60	33	16.10	39.60	33	16.10
Rectificador Lateral						
Etapas Totales	10	11	13	11	13	17
Flujo de Destilado (kmol/hr)	20.807	33.03	67.80	20.807	33.03	67.80
Q _{reb} (Carga Térmica, kcal/hr)	2178500	2417100	3113500	1825100	2021100	2591100
Costo de calentamiento (\$/yr)	79 438	88 140	113 530	66 554	73 699	94 484
Costo de enfriamiento (\$/yr)	5 130	5 706	7 391	4 289	4 764	6 147
Costo total (\$/yr)	107 970	118 580	149 060	97 024	106 150	132 120

En el caso de la secuencia térmicamente acoplada indirecta (STAI), se encontraron tendencias similares a las encontradas para la STAD: la mezcla M1 (Tabla 4.10) es la que presenta los incrementos en costo fijo más simétricos; de las 3 mezclas, es la M2 (Tabla 4.11) en la que se encuentran los mayores ahorros en costos, seguida de la M3 (Tabla 4.12); es esta última mezcla (M3) en la que se encuentran las menores reducciones en los valores de los flujos de interconexión cuando el arreglo es optimizado. En todos los casos tanto los incrementos como los ahorros varían de manera directa con la concentración del componente intermedio en la alimentación.

Tabla 4.10 Diseño y costos de la STAI. Mezcla M1.

	R=1.3 R_{min}			Optimizado		
	M1-F1	M1-F2	M1-F3	M1-F1	M1-F2	M1-F3
Columna Principal						
Etapas Totales	32	30	27	43	41	39
Etapas de Interconexión	10	8	6	15	13	10
Etapas de Alimentación	21	20	21	29	28	29
FL (líq. Interconexión, kmol/hr)	67.97	95.084	167.058	42.997	60.968	111.07
Relación de Reflujo	2.951	4.699	15.516	2.118	3.356	11.10
Flujo de Destilado (kmol/hr)	39.60	33	16.10	39.60	33	16.10
Agotador Lateral						
Etapas Totales	7	8	10	11	13	17
Flujo de Fondos (kmol/hr)	20.807	33.03	67.80	20.807	33.03	67.80
Qreb (Carga Térmica, kcal/hr)	1024270	1210470	1671590	821210	937370	1231220
Costo de calentamiento (\$/año)	37 350	44 138	60 957	29 946	34 182	44 896
Costo de enfriamiento (\$/año)	2 292	2 758	3 925	1 809	2 108	2877
Costo total (\$/año)	52 034	60 396	80 953	44 694	50 372	64 506

Tabla 4.11 Diseño y costos de la STAI. Mezcla M2.

	R=1.3 Rmin			Optimizado		
	M2-F1	M2-F2	M2-F3	M2-F1	M2-F2	M2-F3
Columna Principal						
Etapas Totales	80	79	79	125	126	125
Etapas de Interconexión	11	9	7	17	16	11
Etapas de Alimentación	45	46	55	70	75	87
FL (líq. interconexión, kmol/hr)	130.416	173.51	285.025	40.43	62.194	122.023
Relación de Reflujo	10.772	15.87	47.087	6.929	10.261	30.727
Flujo de Destilado (kmol/hr)	39.60	33	16.10	39.60	33	16.10
Agotador Lateral						
Etapas Totales	8	9	12	13	15	20
Flujo de Fondos (kmol/hr)	20.807	33.03	67.80	20.807	33.03	67.80
Qreb (Carga Térmica, kcal/hr)	2513760	2998310	4178000	1699551	2007536	2759797
Costo de calentamiento (\$/año)	91 665	109 360	152 350	61 973	73 205	100640
Costo de enfriamiento (\$/año)	5 937	7 097	9 922	3 999	4 737	6 547
Costo total (\$/año)	124 380	146 070	198 280	95 210	110 300	146 600

Tabla 4.12 Diseño y costos de la STAI. Mezcla M3.

	R=1.3 Rmin			Optimizado		
	M3-F1	M3-F2	M3-F3	M3-F1	M3-F2	M3-F3
Columna Principal						
Etapas Totales	53	49	40	78	72	59
Etapas de Interconexión	34	30	21	53	47	33
Etapas de Alimentación	43	40	34	65	61	50
FL (líq. interconexión, kmol/hr)	270.466	323.635	472.89	207.51	247.069	359.887
Relación de Reflujo	8.327	11.713	33.72	6.465	9.034	25.222
Flujo de Destilado (kmol/hr)	39.60	33	16.10	39.60	33	16.10
Agotador Lateral						
Etapas Totales	26	30	38	40	47	61
Flujo de Fondos (kmol/hr)	20.807	33.03	67.80	20.807	33.03	67.80
Qreb (Carga Térmica, kcal/hr)	2201170	2494130	3310190	1766560	1972880	2562900
Costo de calentamiento (\$/año)	80 266	90 950	120 710	64 418	71 940	93 457
Costo de enfriamiento (\$/año)	5 183	5 889	7 859	4 148	4 648	6 080
Costo total (\$/año)	111 170	124 220	160 290	97 173	107 080	134 950

La relación de reflujo es una de las variables más importantes en el diseño de las columnas de destilación, y por lo tanto resulta importante contar con una buena aproximación de su valor de diseño. En la Tabla 4.13 se muestran los datos de los reflujos de diseño óptimos que se obtuvieron para cada caso. Un detalle destacable en estos resultados es que cada columna del arreglo tiene un valor óptimo diferente, y que solamente en un par de casos los reflujos de diseño coinciden en el mismo valor para ambas; para todos los casos analizados, los reflujos óptimos van de un 1.02 a 1.1 veces la relación de reflujo mínima.

Tabla 4.13 Relaciones de reflujo de las secuencias optimizadas.

Mezcla	Alimentación	STAD R/R_{min}		STAI R/R_{min}	
		Sección I	Sección II	Sección I	Sección II
M1	<i>F1</i>	1.044	1.048	1.040	1.088
	<i>F2</i>	1.039	1.046	1.025	1.079
	<i>F3</i>	1.03	1.044	1.026	1.073
M2	<i>F1</i>	1.058	1.03	1.023	1.027
	<i>F2</i>	1.042	1.03	1.021	1.026
	<i>F3</i>	1.028	1.028	1.018	1.024
M3	<i>F1</i>	1.033	1.10	1.03	1.065
	<i>F2</i>	1.031	1.077	1.029	1.056
	<i>F3</i>	1.028	1.10	1.025	1.049

Cabe resaltar que esta optimización se llevó a cabo para arreglos preliminares, utilizando métodos cortos y termodinámica ideal; por lo tanto al validar los diseños mediante simulaciones rigurosas y realizar los ajustes necesarios a las variables, estos porcentajes podrían variar. A pesar de ello, 1.3 veces la relación de reflujo mínima pareciera ser un valor bastante grande para este tipo de arreglos, por lo cual resultaría conveniente replantear el uso de ese valor de diseño cuando se trata de arreglos no convencionales.

4.2.1 Problemas de Convergencia. Restricciones de Flujo

En el caso de la optimización de la STAI se presentaron algunos problemas de convergencia para el modelo, causados por la falta de una restricción física dentro del mismo, como se discute a continuación.

El diseño de la secuencia acoplada se obtiene a partir de un diseño equivalente de dos columnas (Figura 4.1). En el modelo sujeto a optimización se incluye la restricción de que los reflujo de operación tenían que ser mayores a los reflujo mínimos de las columnas. Sin embargo, con esta sola restricción había ocasiones en las que el modelo no convergía, o bien daba resultados que no eran coherentes (como hacer algún flujo cero).

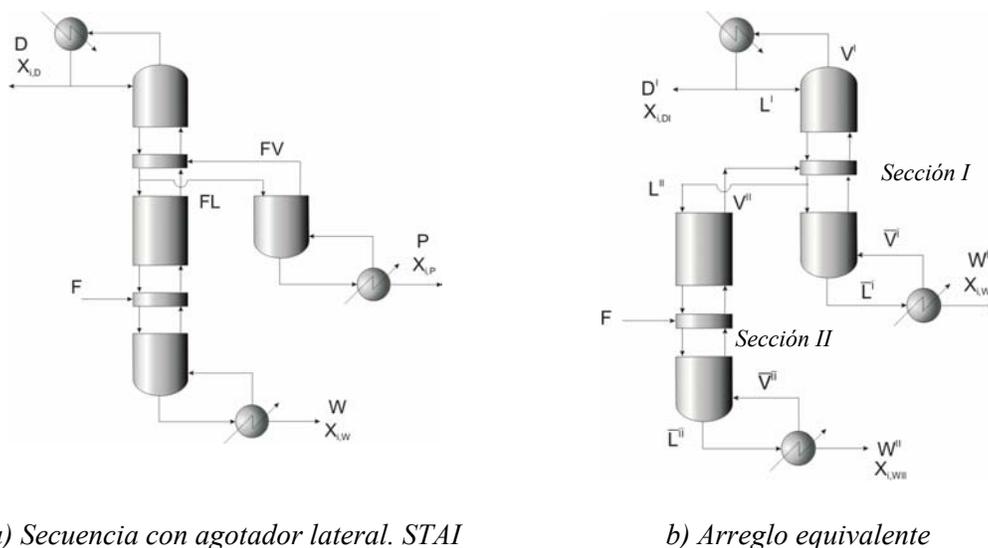


Figura 4.1. Secuencia equivalente para el diseño de la STAI.

Glinos y Malone (1985)

Al analizar el problema resultó evidente que a pesar de que se estaba asegurando que los reflujos de operación fueran factibles, no se estaba asegurando que todos los flujos internos lo fueran. Específicamente el líquido que alimenta a la sección de agotamiento de la *Sección I* constituía un problema. Es decir, se está asegurando que L^I y L^{II} sean mayores a los flujos de líquido mínimos requeridos en las secciones de rectificación de las columnas respectivas, pero existen combinaciones de L^I y L^{II} que cumplen con la restricción $R_i \geq R_{i,\min} \forall i \in \{1 \dots t\}$ pero que pueden hacer que \bar{L}^I valga incluso 0.

Debido a ello se introdujo la restricción:

$$\bar{L}^I \geq L_{\min}^I - L_{\min}^{II} \quad (4.1)$$

O escrito de otra manera:

$$\bar{L}^I \geq R_{\min}^I D^I - R_{\min}^{II} D^{II} \quad (4.2)$$

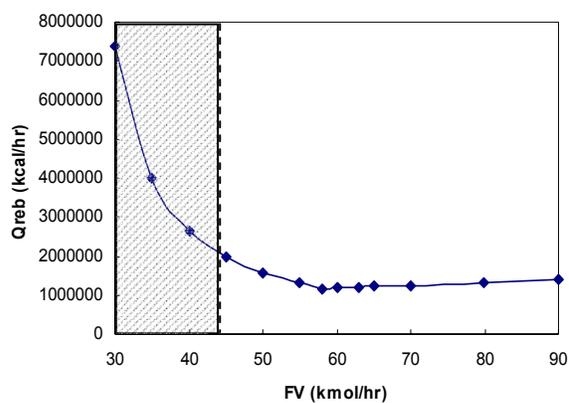
Una vez introducida esta restricción adicional el problema fue resuelto satisfactoriamente. Un resultado que se considera importante de mencionar es el hecho de que para todas las soluciones óptimas encontradas el valor de \bar{L}^I siempre tendió a ser el mínimo impuesto por la restricción; más digno de mencionar es que ese valor de \bar{L}^I no es otra cosa que el valor del flujo de interconexión del arreglo acoplado. Es decir, se obtuvieron arreglos óptimos cuando el valor de FL tiende a ser su valor mínimo.

4.3 FLUJOS DE INTERCONEXIÓN ÓPTIMOS

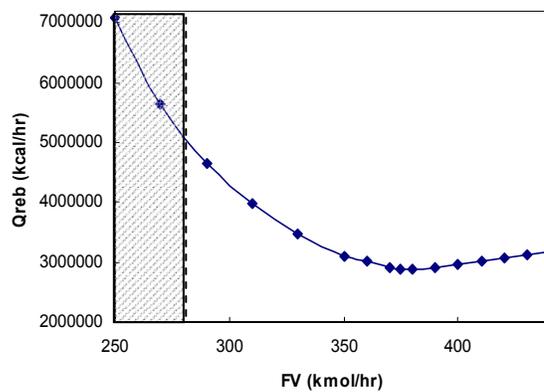
De acuerdo a los resultados del problema matemático de la sección anterior, los arreglos se ven optimizados cuando los flujos de interconexión tienden a su valor mínimo. Sin embargo, se sabe que el valor mínimo de un reflujo sólo será suficiente cuando el número de etapas del arreglo tienda a infinito, y que por lo tanto ese valor ya constituye un límite de operación para cualquier arreglo con número finito de etapas. Dicho de otra manera, aun cuando el “flujo óptimo” encontrado en la solución matemática del modelo de las corrientes de interconexión pudiera no ser suficiente para la separación real de la mezcla, sí será el mínimo valor que podrá tomar esa variable para cualquier estructura, aun cuando ésta no se encuentre optimizada.

En la Figura 4.1 se muestran las curvas de optimización de algunas mezclas analizadas, en particular las correspondientes a los diseños mostrados en las Tablas 4.1 y 4.3 (método de Hernández y Jiménez, 1996). Con una línea punteada se muestra la localización del valor mínimo del flujo de interconexión (mínimo matemático del arreglo) calculado con las extensiones de la ecuación de Underwood del método propuesto por Glinos y Malone (1985).

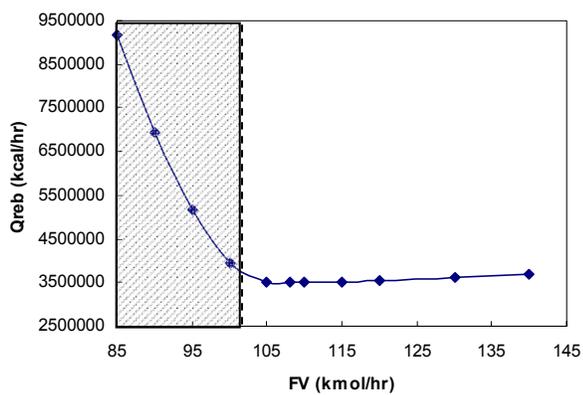
Se puede observar que las cargas térmicas más altas se dan del lado izquierdo de esta línea punteada; esto indica que la búsqueda en esa región (sombreada) es inadecuada, debido a que el agotador/rectificador lateral está trabajando con flujos menores al mínimo, y por lo tanto se requieren reflujo muy altos en la columna principal para lograr la separación deseada. De acuerdo a esto, si se conoce el valor mínimo de ese flujo de interconexión la búsqueda puede hacerse más eficiente tomando este valor como punto de partida.



a) M1-F1

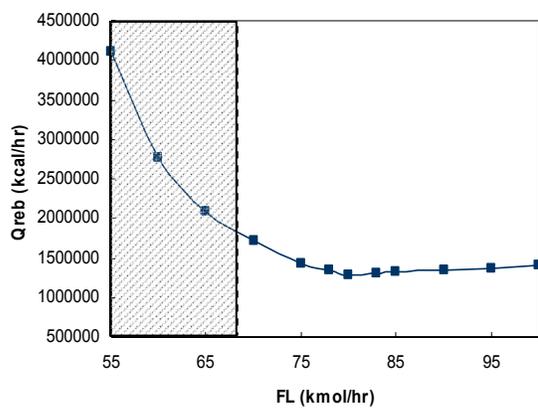


b) M2-F2

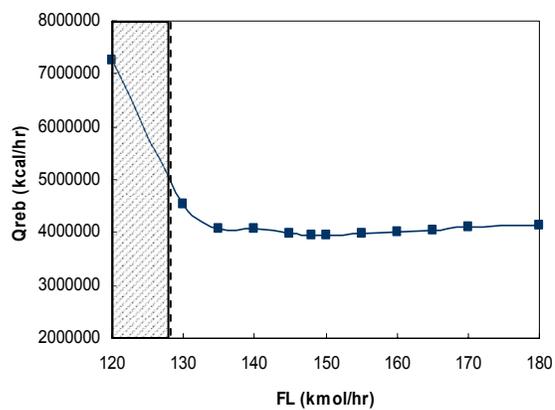


c) M3-F3

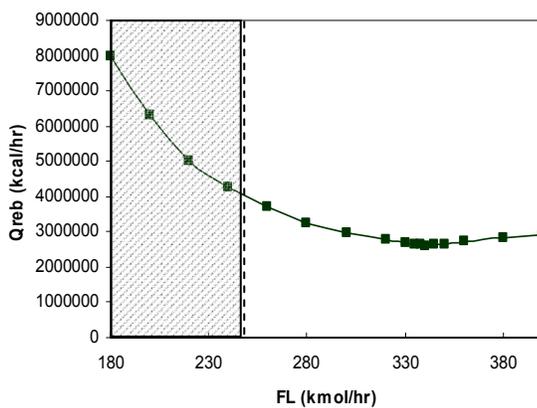
Figura 4.2 Optimización de la STAD.



a) M1-F2



b) M2-F3



c) M3-F2

Figura 4.3 Optimización de la STAI.

Para validar esta tendencia se realizó el cálculo de estos flujos mínimos (***FVmin**** y ***FLmin****) para el banco de mezclas reportado por Salado-Gutiérrez (2006); en dicha referencia el autor utilizó la metodología de Hernández y Jiménez (1996) para la determinación de dichos flujos óptimos de interconexión (***FVopt*** y ***FLopt***). El cálculo de estos valores mínimos se llevó a cabo utilizando las volatilidades relativas reportadas en la tesis de Salado-Gutiérrez (2006).

De la Tabla 4.14 a la 4.16 se muestran los resultados para la STAD y a partir de la Tabla 4.17 se presentan los resultados para la STAI. Se puede apreciar que para la segunda secuencia el valor óptimo del flujo de interconexión es más cercano a su valor mínimo, lo cual confirma la tendencia encontrada en la etapa de optimización matemática. Salado-Gutiérrez (2006) no reporta sus curvas de optimización, pero se puede observar que casi todos los valores mínimos calculados se encontrarían del lado izquierdo de dichas curvas, separando la región de más alto consumo de energía (sólo 3 de 60 datos se salen de la tendencia).

Tabla 4.14 Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAD. **ESI>1.**

MEZCLA	40/20/40		15/70/15	
	<i>FVmin*</i>	<i>FVopt</i>	<i>FVmin*</i>	<i>FVopt</i>
2-2dimetilpropano, 2-3dimetilbutano, 1-1dimetilciclopentano	53.8	70	139.56	165
isobutano, n-pentano, 2-3dimetilbutano	68.57	115	167.18	220
2,2-dimetil-butano, 3-metil-hexeno, trans-2-hepteno	96.8	145	215.82	275
3-metil-pentano, 3-metil-hexano, n-heptano	213.63	340	402.59	570
n-hexano, 3-etil-pentano, n-heptano	271.8	466	496.43	770

Tabla 4.15 Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAD. ESI=1.

MEZCLA	40/20/40		15/70/15	
	<i>FVmin*</i>	<i>FVopt</i>	<i>FVmin*</i>	<i>FVopt</i>
n-pentano, 3metil-pentano, 2,3-dimetil-pentano	45.51	64	129.21	146
2,3-dimetil-butano, 2,2-dimetil-pentano, n-heptano	59.45	86	160.42	205
n-hexano, 3-metil-hexeno, trans-2-hepteno	79.41	111	207.5	255
3-metil-trans-2-penteno, 2,2-dimetil-pentano, 3,3-dimetil-pentano	155.76	270	379.28	610
2,4-dimetil-pentano, 1,1-dimetil-ciclopentano, 3-etil-pentano	180.71	316	442.92	688

Tabla 4.16 Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAD. ESI<1.

MEZCLA	40/20/40		15/70/15	
	<i>FVmin*</i>	<i>FVopt</i>	<i>FVmin*</i>	<i>FVopt</i>
2-metil-1-buteno, 4-metil-1-penteno, n-heptano	26.92	31	88.88	92
n-pentano, 4-m-1-penteno, trans-3-hepteno	27.89	32	92.83	95
n-pentano, 2,2-dimetil-butano, 1,1-dimetil-ciclopentano	29.38	39	98.7	109
2,2-dimetil-butano, 2-metil-pentano, 3-etil-pentano	30.63	38	103.66	105
3-metil-pentano, n-hexano, n-heptano	28.5	33	104.78	101

Tabla 4.17 Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAI. ESI>1.

MEZCLA	40/20/40		15/70/15	
	<i>FLmin*</i>	FLopt	<i>FLmin*</i>	FLopt
2,2-dimetilpropano, 2,3-dimetilbutano, 1-dimetilciclopentano	33.12	35	94.79	106
isobutano, n-pentano, 2,3-dimetilbutano	34.89	37	101.09	111
2,2-dimetil-butano, 3-metil-hexeno, trans-2-hepteno	34.85	42	105	118
3-metil-pentano, 3-metil-hexano, n-heptano	34.95	40	115.3	128
n-hexano, 3-etil-pentano, n-heptano	37.65	46	126.42	142

Tabla 4.18 Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAI. ESI=1.

MEZCLA	40/20/40		15/70/15	
	<i>FLmin*</i>	FLopt	<i>FLmin*</i>	FLopt
n-pentano, 3metil-pentano, 2,3-dimetil-pentano	53.77	61	131.42	158
2,3-dimetil-butano, 2,2-dimetil-pentano, n-heptano	62.63	73	153.79	189
n-hexano, 3-metil-hexeno, trans-2-hepteno	83.91	108	202.5	250
3-metil-trans-2-penteno, 2,2-dimetil-pentano, 3,3-dimetil-pentano	138.68	105	339.53	251
2,4-dimetil-pentano, 1,1-dimetil-ciclopentano, 3-etil-pentano	175.8	172	442.55	328

Tabla 4.19 Valores óptimos y mínimos de los flujos de interconexión. STAI. $ESI < 1$.

MEZCLA	40/20/40		15/70/15	
	<i>FLmin*</i>	FLOpt	<i>FLmin*</i>	FLOpt
2-metil-1-buteno, 4-metil-1-penteno, n-heptano	74.56	91	153.38	186
n-pentano, 4-m-1-penteno, trans-3-hepteno	94.84	121	187.62	238
n-pentano, 2,2-dimetil-butano, 1,1-dimetil-ciclopentano	125.58	160	235.02	278
2,2-dimetil-butano, 2-metil-pentano, 3-etil-pentano	151.24	202	276.12	352
3-metil-pentano, n-hexano, n-heptano	288.33	408	479.04	682

Se analizaron las simulaciones rigurosas llevadas a cabo para la determinación de los flujos óptimos de interconexión que salieron de la tendencia encontrada, y no se encontró ningún error ni en las simulaciones ni en los cálculos de los valores mínimos; la única razón probable de esta desviación es la cercanía de las volatilidades relativas entre componentes.

4.4 CONCLUSIONES PRELIMINARES

La discusión de resultados del presente capítulo puede resumirse de la siguiente manera:

- La definición de la *pseudo-corriente* de alimentación para arreglos con acoplamientos térmicos y el cálculo de su condición térmica puede considerarse una medida de la energía ahorrada al acoplar térmicamente secuencias de destilación. Debido a ello, el considerar dicho cálculo en la etapa de diseño significa una mejor aproximación de las variables de diseño.
- De acuerdo a los resultados de la optimización matemática, se puede observar que los incrementos en cuanto a costo anual de las secuencias resultan significativos cuando se eligen reflujos de diseño en base a heurísticas utilizadas para secuencias convencionales. Por otro lado, a pesar de que los reflujos óptimos tienden a valores muy pequeños, cercanos a 1.02 veces el reflujo mínimo, en la mayoría de los casos el número de etapas de los arreglos optimizados no se incrementan en más de un 50% al requerido para diseños con $R=1.3R_{min}$, a diferencia de lo esperado para secuencias convencionales.
- Los problemas de restricciones presentados durante la solución del modelo dieron lugar a la definición del flujo óptimo de interconexión para la secuencia STAI. Este resultado puede no ser un valor adecuado para la operación del sistema, pero se puede utilizar como un límite inferior de esa variable.
- Se corroboró la tendencia de esta solución con un banco de 15 mezclas diferentes, para 2 alimentaciones en cada caso. En 57 de 60 casos se mantuvo el mismo resultado.

CAPÍTULO 5

RESULTADOS: SECUENCIA PETLYUK/KAIBEL

Dentro de este capítulo se presentan los resultados obtenidos para la secuencia con acoplamiento térmico total. Primero se analizan las consecuencias de considerar el diseño de la estructura con columnas independientes (Petlyuk) respecto al uso del arreglo con pared divisora (Kaibel), y una vez establecidas las diferencias se muestran los resultados de la etapa de optimización. Para la definición de límites factibles de los flujos de interconexión se lleva cabo el cálculo de la región constante de V_{min} como función de la distribución del componente intermedio dentro del prefraccionador, y se discute la manera en que estos datos pueden ser usados como límites de búsqueda. De manera similar al capítulo anterior, en algunos casos solamente se mostrarán resultados representativos para poder llevar a cabo el análisis de los mismos, y el resto se muestra en los apéndices.

5.1. DISEÑO

Mucho se ha discutido sobre la conveniencia y la factibilidad de la secuencia Petlyuk para la separación de mezclas ternarias; de acuerdo a Agrawal y col. (1998), uno de los principales inconvenientes de este arreglo es la diferencia de presiones (y caídas de presión) que debe de existir para que el flujo de las corrientes de interconexión sea posible. Este problema parece solucionarse si se reemplaza el arreglo de prefraccionador y columna principal por un arreglo equivalente de columna con pared divisora. Ambas estructuras son básicamente las mismas, salvo que en el caso de la columna con pared divisora es necesario

que el número etapas del prefraccionador sea igual a la suma de las etapas comprendidas entre los platos de interconexión de la columna principal. Sin embargo, es necesario considerar que debido a que el ajuste del número de etapas se lleva a cabo manipulando las recuperaciones de los componentes o bien manipulando el reflujo de diseño del prefraccionador, el impacto tanto en los flujos internos como en la diferencia en el número de etapas entre ambos arreglos puede verse reflejado en una diferencia importante de costos al momento de elegir el mejor arreglo.

A continuación se presenta una comparación entre los diseños de la secuencia Petlyuk y la secuencia Kaibel; en ambos casos se utilizó la misma metodología de diseño (Castro y Jiménez, 2002), con la única diferencia de que la restricción de la igualdad de número de etapas se relajó para el caso del arreglo Petlyuk. Los diseños se realizaron para un reflujo igual a 1.3 veces el mínimo. En la Tabla 5.1 se muestran los resultados para la mezcla M1.

Para la primera mezcla (M1) las diferencias de costos anuales entre diseños son realmente significativas; para las tres alimentaciones analizadas la secuencia Petlyuk presenta costos menores que la secuencia Kaibel, particularmente para la alimentación con bajo contenido del componente intermedio (F1), en donde el costo anual de la secuencia Petlyuk es 31.99% menor al arreglo de pared divisora. Los resultados obtenidos para la mezcla 1 pueden explicarse al observar que el número de etapas requerido para el prefraccionador en la secuencia Kaibel es menor que en la secuencia Petlyuk. En la metodología de diseño utilizada el número de etapas del prefraccionador se ajusta mediante el reflujo de diseño de la primera columna; por lo tanto para disminuir el número de etapas del arreglo es necesario incrementar el reflujo, lo cual afecta directamente el valor de los flujos de interconexión, y por lo tanto los flujos internos, sin contar que también tiene un efecto directo en el diámetro de la columna. En la Tabla 1 puede observarse que para la columna Kaibel los flujos de interconexión son $FL1=24.93$ kmol/hr y $FV2=70.80$ kmol/hr mientras que para el arreglo Petlyuk los flujos son de 90.9 kmol/hr y 138.38 kmol/hr respectivamente. Estos incrementos impactan directamente el costo de servicios y de inversión.

Tabla 5.1 Diseño de las secuencias Petlyuk y Kaibel, Mezcla M1.

VARIABLES	Petlyuk			Kaibel		
	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>
Etapas Prefraccionador	21	20	20	12	14	16
Etapas Columna Principal	31	29	28	28	29	28
Relación de Reflujo	2.113	3.328	10.84	4.025	4.326	11.52
Flujo de Liq. de interconexión, FL1(kmol/hr)	24.93	24.93	25.877	90.9	55.26	36.28
Flujo de Vap. de interconexión, FV2(kmol/hr)	70.80	67.62	61.651	138.38	99.62	73.54
Carga Térmica, Qreb (kcal/hr)	821140	933100	1208400	1287800	1136200	1276500
Costo Calentamiento \$/año	29943	34026	44063	46959	41433	46547
Costo enfriamiento \$/año	1808	2098	2823	2919	2581	2985
Costo Total	43143	47941	59701	63438	56615	62536

A pesar de que los mayores incrementos en el número de etapas se dan en los casos de las mezclas 2 y 3, Tablas 5.2 y 5.3, las diferencias en cuanto a costos no fueron tan significativas, y para ambas mezclas el arreglo Kaibel presenta costos ligeramente menores que la secuencia Petlyuk. Esta diferencia va de un 0.81% a un 3.95% en cuanto a costos y hasta un 5.47% respecto a cargas térmicas de los ebulliciones.

Para las mezclas 2 y 3 se presenta el caso contrario; para todas las alimentaciones analizadas es necesario disminuir el reflujo de diseño del prefraccionador; esto reduce los flujos internos y por lo tanto el diámetro de las columnas, lo cual hace que el costo fijo no se incremente de manera importante a pesar del mayor número de etapas requerido, y que el costo de servicios sea menor en todos los casos.

Tabla 5.2 Diseño de las secuencias Petlyuk y Kaibel, Mezcla M2.

VARIABLES	Petlyuk			Kaibel		
	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>
Etapas Prefraccionador	30	29	28	32	37	46
Etapas Columna Principal	75	75	74	76	75	74
Relación de Reflujo	8.878	12.685	35.475	8.761	12.323	34.214
Liq. de interconexión, FL1(kmol/hr)	68.021	67.582	65.91	62.73	56.88	54.65
Vap. de interconexión, FV2(kmol/hr)	110.43	104.532	89.105	105.24	94.24	79.14
Carga Térmica, Qreb (kcal/hr)	2115100	2439300	3181100	2090300	2375200	3071400
Costo Calentamiento \$/año	77126	88951	116000	76222	86613	112000
Costo enfriamiento \$/año	4988	5765	7550	4929	5612	7289
Costo Total	106700	120890	152690	105830	118590	149090

Tabla 5.3 Diseño de las secuencias Petlyuk y Kaibel, Mezcla M3.

VARIABLES	Petlyuk			Kaibel		
	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>
Etapas Prefraccionador	28	28	27	30	34	41
Etapas Columna Principal	69	69	67	69	69	67
Relación de Reflujo	7.401	9.941	26.102	7.295	9.575	24.614
Liq. de interconexión, FL1(kmol/hr)	54.80	54.64	41.23	50.062	44.93	41.23
Vap. de interconexión, FV2 (kmol/hr)	109.75	112.24	106.21	104.80	101.83	106.753
Carga Térmica, Qreb (kcal/hr)	1987600	2152300	2593000	1962800	2080900	2451100
Costo Calentamiento \$/año	72477	78484	94553	71574	75881	89381
Costo enfriamiento \$/año	4674	5075	6152	4615	4905	5814
Costo Total	103170	110500	129810	102200	107770	124680

5.2. OPTIMIZACIÓN DE LAS ESTRUCTURAS PRELIMINARES

Una vez establecida la diferencia entre la instalación de una secuencia Petlyuk y una secuencia Kaibel se llevó a cabo la optimización matemática de los arreglos. Se consideraron los dos casos: cuando el número de etapas del prefraccionador es independiente del número de etapas de la columna principal, y cuando está sujeto a la restricción mecánica de igualdad de etapas.

En las tablas de resultados solamente se reportan algunos datos generales de diseño y los datos de costos; los diseños completos se pueden revisar en el Apéndice B. Al igual que en el caso de las STAD y STAI, los diseños optimizados se comparan contra arreglos diseñados con un reflujo de 1.3R_{min}.

5.2.1. *Secuencia Petlyuk, columnas independientes*

Primero se presentarán los resultados encontrados para el arreglo de columnas independientes (Petlyuk). En la Tabla 5.4 se muestran los resultados para las tres alimentaciones de la mezcla M1; los resultados de las mezclas M2 y M3 se presentan en las Tablas 5.5 y 5.6 respectivamente.

En todos los casos se encontraron ahorros de energía significativos cuando los arreglos son optimizados respecto a aquellos diseñados siguiendo la heurística de elegir el reflujo de diseño como 1.3 veces el mínimo. Para la mezcla M1 se encontraron ahorros del 9.3 al 15.59%, en el caso de las mezclas M2 y M3 los ahorros calculados se encuentran en el rango del 12.74 al 16.54% y se observó que en todos los casos los ahorros dependen de la alimentación analizada, incrementándose de manera directa con la fracción mol del componente intermedio presente en dicha corriente.

Tabla 5.4 Optimización del diseño de la secuencia Petlyuk, Mezcla M1.

VARIABLES	R=1.3 Rmin			Optimizado		
	F1	F2	F3	F1	F2	F3
Etapas Totales	52	49	48	70	69	67
Relación de Reflujo	2.113	3.328	10.84	1.577	2.507	8.226
Liq. de interconexión, FL1(kmol/hr)	24.93	24.93	25.877	20.611	20.466	20.65
Vap. de interconexión, FV2(kmol/hr)	70.80	67.62	61.651	66.26	62.775	55.46
Carga Térmica, Qreb (kcal/hr)	821140	933100	1208400	690550	765890	946510
Costo Calentamiento \$/año	29943	34026	44063	25181	27929	34515
Costo enfriamiento \$/año	1808	2098	2823	1497	1700	2200
Costo Total	43143	47941	59701	39092	42411	50390

Tabla 5.5 Optimización del diseño de la secuencia Petlyuk, Mezcla M2.

VARIABLES	R=1.3 Rmin			Optimizado		
	F1	F2	F3	F1	F2	F3
Etapas Totales	105	104	102	154	167	158
Relación de Reflujo	8.878	12.685	35.475	6.79	9.662	26.956
Liq. de interconexión, FL1(kmol/hr)	68.021	67.582	65.91	55.33	54.929	55.143
Vap. de interconexión, FV2(kmol/hr)	110.43	104.532	89.105	98.015	92.363	79.56
Carga Térmica, Qreb (kcal/hr)	2115100	2439300	3181100	1672000	1904300	2440000
Costo Calentamiento \$/año	77126	88951	116000	60969	69442	88985
Costo enfriamiento \$/año	4988	5765	7550	3934	4492	5787
Costo Total	106700	120890	152690	92635	103320	127430

Tabla 5.6 Optimización del diseño de la secuencia Petlyuk, Mezcla M3.

VARIABLES	R=1.3 Rmin			Optimizado		
	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>
Etapas Totales	97	97	94	136	137	139
Relación de Reflujo	7.401	9.941	26.102	5.682	7.539	19.48
Liq. de interconexión, FL1(kmol/hr)	54.80	54.64	41.23	44.206	43.465	41.699
Vap. de interconexión, FV2 (kmol/hr)	109.75	112.24	106.21	98.66	100.241	106.753
Carga Térmica, Qreb (kcal/hr)	1987600	2152300	2593000	1585700	1684200	1961500
Costo Calentamiento \$/año	72477	78484	94553	57824	61417	71458
Costo enfriamiento \$/año	4674	5075	6152	3718	3961	4644
Costo Total	103170	110500	129810	90026	94841	109550

5.2.2. Columna de Pared Divisora (Kaibel)

Una vez optimizada la secuencia Petlyuk se procedió a incluir la restricción de igualdad de etapas del prefraccionador con la sección media de la columna principal. Los resultados obtenidos se muestran a partir de la Tabla 5.7, en la cual se presentan los diseños para la mezcla M1. Fue precisamente en el caso de la mezcla M1 en donde se encontraron las mayores diferencias entre costos. Para la alimentación de bajo contenido de B se encontró que el diseño optimizado es un 37.07% más barato que el diseño Kaibel con un reflujo de 1.3 Rmin. Para la alimentación equimolar el ahorro potencial es de 24.41% y para la alimentación con alto contenido de B de 19.41%.

Tabla 5.7 Optimización del diseño de la secuencia Kaibel, Mezcla 1.

VARIABLES	1.3 Rmin			Optimizado		
	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>
Etapas Totales	40	43	44	74	69	66
Relación de Reflujo	4.025	4.326	11.52	1.596	2.521	8.226
Liq. de interconexión, FL1(kmol/hr)	90.9	55.26	36.28	23.027	22.231	20.861
Vap. de interconexión, FV2 (kmol/hr)	138.38	99.62	73.54	68.80	64.69	55.714
Carga Térmica, Qreb (kcal/hr)	1287800	1136200	1276500	695160	768710	946600
Costo Calentamiento \$/año	46959	41433	46547	25350	28031	34518
Costo enfriamiento \$/año	2919	2581	2985	1508	1706	2200
Costo Total	63438	56615	62536	39919	42794	50398

En el caso de las mezclas M2 y M3 (para las 3 diferentes alimentaciones) los diseños optimizados requieren de 40 a 60 etapas más que los arreglos no optimizados, pero el costo de la secuencia optimizada es alrededor de un 12% menor que el de la secuencia diseñada con $R=1.3$ Rmin debido a que en todos los casos los requerimientos energéticos son menores. Los resultados se presentan en las Tablas 5.8 y 5.9 respectivamente.

Tabla 5.8 Optimización del diseño de la secuencia Kaibel, Mezcla 2.

VARIABLES	1.3 Rmin			Optimizado		
	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>
Etapas Totales	108	112	120	164	167	184
Relación de Reflujo	8.761	12.323	34.214	6.798	9.669	26.962
Liq. de interconexión, FL1(kmol/hr)	62.73	56.88	54.65	53.718	53.409	54.056
Vap. de interconexión, FV2(kmol/hr)	105.24	94.24	79.14	96.438	90.91	78.625
Carga Térmica, Qreb (kcal/hr)	2090300	2375200	3071400	1673800	1905000	2440000
Costo Calentamiento \$/año	76222	86613	112000	61036	69485	89003
Costo enfriamiento \$/año	4929	5612	7289	3938	4494	5788
Costo Total	105830	118590	149090	93087	104180	129020

Tabla 5.9 Optimización del diseño de la secuencia Kaibel, Mezcla 3.

VARIABLES	1.3 Rmin			Optimizado		
	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>	<i>F1</i>	<i>F2</i>	<i>F3</i>
Etapas Totales	99	103	108	139	147	158
Relación de Reflujo	7.295	9.575	24.614	5.685	7.539	19.46
Liq. de interconexión, FL1(kmol/hr)	50.062	44.93	41.23	42.804	42.06	40.37
Vap. de interconexión, FV2 (kmol/hr)	104.80	101.83	106.753	97.185	98.72	105.21
Carga Térmica, Qreb (kcal/hr)	1962800	2080900	2451100	1586400	1684200	1959600
Costo Calentamiento \$/año	71574	75881	89381	57847	61414	71458
Costo enfriamiento \$/año	4615	4905	5814	3719	3961	4644
Costo Total	102200	107770	124680	90026	95633	109550

Una observación interesante desprendida de los resultados, y que parece más digna de tomarse en cuenta cuando se trata de los arreglos optimizados, es que para cada diseño obtenido (para la misma separación), la diferencia entre los flujos de interconexión de líquido y vapor calculados (FV2-FL1) es muy similar. Este resultado parece consistente con lo encontrado en un trabajo previo, en donde la optimización se realizó solamente en base los flujos de interconexión (Ramírez-Corona, 2002): *“Además de que para todos los casos estudiados los flujos de interconexión iniciales presentaron buenos resultados, para cada espacio de búsqueda la nueva combinación óptima muestra cierta tendencia. De manera general, la diferencia entre los valores de los dos flujos de interconexión fijados (FV2-FL1), para los casos estudiados, es aproximadamente constante entre cada combinación que presenta un óptimo local”*. Esta observación se discutirá más a detalle junto con el análisis de los resultados obtenidos para la determinación de las regiones constantes de V_{min} .

Se mencionó anteriormente que la secuencia Kaibel es la versión mecánicamente factible de la secuencia Petlyuk. Debido a ello y para facilitar la comparación de todos los resultados, en las Figuras 5.1, 5.2, 5.3 se muestra un resumen de los costos anuales de todos los casos analizados. En la Figura 5.1 se presentan los resultados para la mezcla M1, en la Figura 5.2 los costos de la mezcla M2 y finalmente en la Figura 5.3 los correspondientes a la mezcla M3.

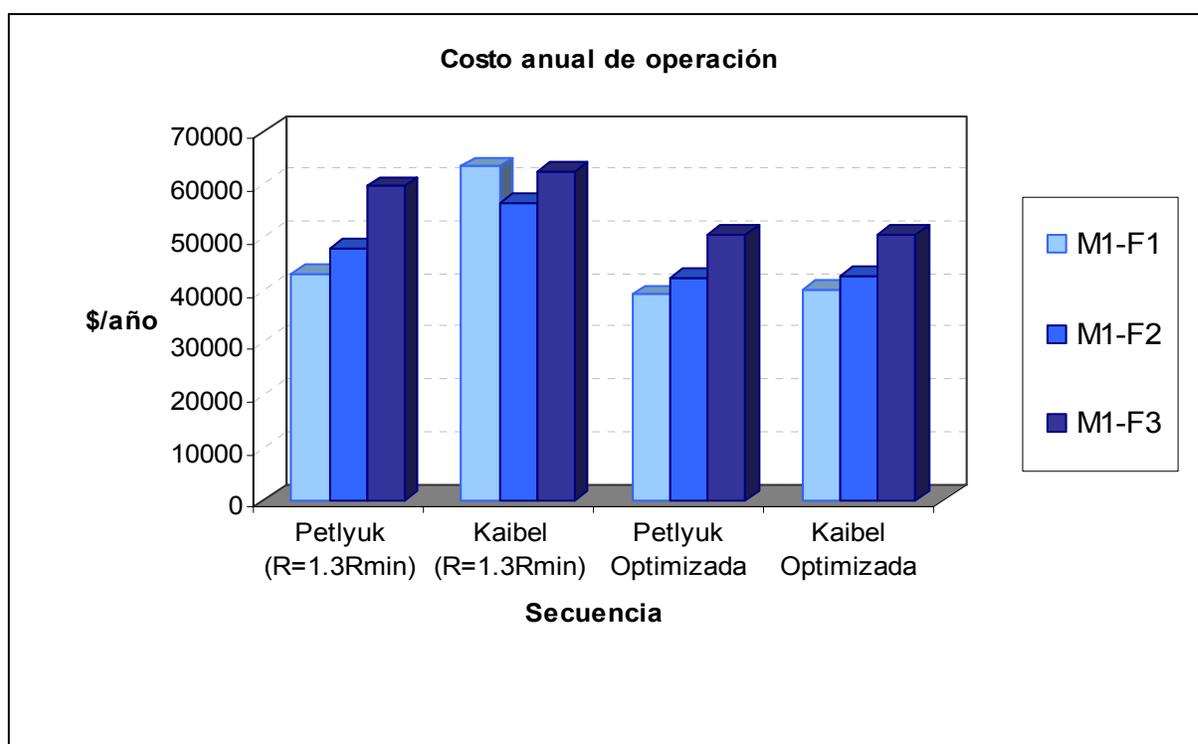


Figura 5.1 Costos anuales para las secuencias con acoplamiento térmico total.
Mezcla M1.

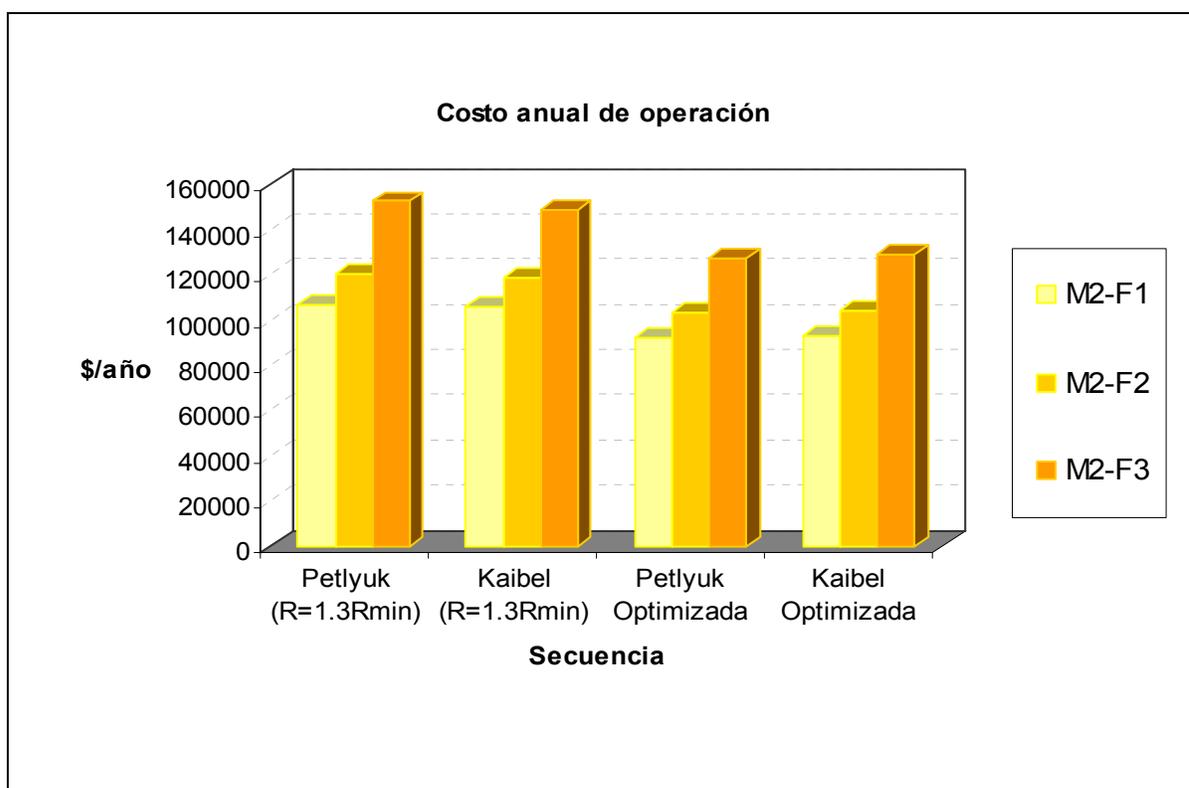


Figura 5.2 Costos anuales para las secuencias con acoplamiento térmico total.

Mezcla M2.

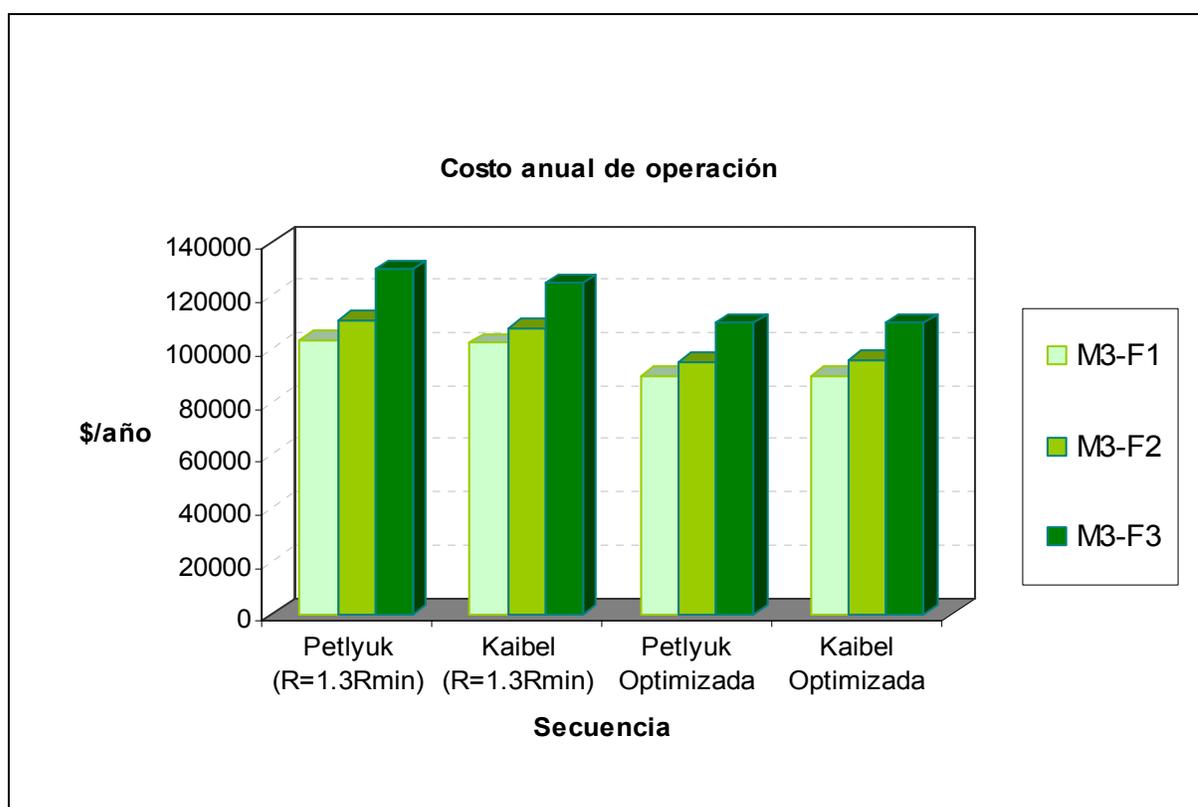


Figura 5.3 Costos anuales para las secuencias con acoplamiento térmico total.
Mezcla M3.

5.2.3. *Reflujo Óptimo de Diseño*

Se encontró que la diferencia de costos entre las estructuras con $R=1.3 R_{min}$ y la estructura optimizada puede resultar realmente significativa, mayor al 10% en todos los casos e incluso superior al 30% para uno de los casos de estudio (a diferencia de lo establecido para secuencias convencionales, 4 a 6%). También es posible observar que para ambos arreglos de prefraccionador (Petlyuk y Kaibel) el número de etapas y la distribución de las mismas es diferente, pero que los diseños óptimos tienden al mismo valor en costos (la variación es, casi en todos los casos, menor al 1%).

Por lo tanto, es necesario elegir el reflujo de diseño de manera más adecuada para tratar de asegurar menores incrementos en costos respecto a arreglos óptimos y asegurar también que el arreglo pueda instalarse con o sin pared divisora y tener un costo similar. Para ello se analizaron los reflujos de diseño encontrados para los arreglos óptimos; en la Tabla 5.10 se muestran los resultados para el arreglo de columnas independientes y en la Tabla 5.11 los de la columna con pared divisora.

En ambos casos, Kaibel y Petlyuk, los reflujos de diseño óptimos se encontraron en el orden de $R=1.02 R_{min}$. Este puede parecer un valor de diseño demasiado pequeño, pero es necesario hacer notar que, debido a la manera en se define el reflujo en la metodología de diseño utilizada, realmente ninguna de las secciones de la columna opera a esa relación de reflujo. Es decir, los reflujos de operación de cada sección de la secuencia serán diferentes, y en la mayoría de los casos superiores, al reflujo de diseño especificado. Esta puede ser una de las razones de la magnitud del incremento en el costo anual de operación entre el diseño óptimo y el diseño con $R=1.3R_{min}$. (Ver Tablas 5.10 y 5.11).

Tabla 5.10 R/Rmin de los arreglos optimizados de la secuencia Petlyuk.

Mezcla/alimentación	Rdiseño/Rminpet	R1/R1min	R2/R2min	R3/R3min
<i>M1-F1</i>	1.02	1.08	1.58	1.06
<i>M1-F2</i>	1.02	1.07	1.88	1.05
<i>M1-F3</i>	1.017	1.066	2.43	1.052
<i>M2-F1</i>	1.026	1.051	4.366	1.037
<i>M2-F2</i>	1.025	1.0426	4.972	1.034
<i>M2-F3</i>	1.022	1.033	6.196	1.0338
<i>M3-F1</i>	1.03	1.058	1.03	58.94
<i>M3-F2</i>	1.029	1.049	1.029	33.48
<i>M3-F3</i>	1.026	1.042	1.026	21.46

Tabla 5.11 R/Rmin de los arreglos optimizados de la secuencia Kaibel.

Mezcla/alimentación	Rdiseño/Rminkbl	R1/R1min	R2/R2min	R3/R3min
<i>M1-F1</i>	1.005	1.20	1.528	1.019
<i>M1-F2</i>	1.009	1.16	1.83	1.029
<i>M1-F3</i>	1.015	1.005	2.42	1.052
<i>M2-F1</i>	1.032	1.018	4.47	1.045
<i>M2-F2</i>	1.030	1.012	5.073	1.041
<i>M2-F3</i>	1.026	1.006	6.262	1.037
<i>M3-F1</i>	1.03	1.026	1.03	56.66
<i>M3-F2</i>	1.035	1.0164	1.035	32.63
<i>M3-F3</i>	1.032	1.013	1.032	21.11

Por ejemplo, en el caso M1-F1 de la columna con pared divisora se tiene de una diferencia del 37% entre costos, pero si analizamos los reflujos reales a los cuales está operando cada sección de la secuencia (Figura 5.4) se puede observar que para el arreglo con diseño en $R=1.3 R_{min}$ los valores de reflujo en cada sección son muy superiores a 1.3 veces el mínimo. Por lo tanto, al momento de fijar el valor de diseño es necesario tomar en cuenta que cada sección operará a condiciones de reflujo mayores al especificado, y que generalmente serán diferentes entre sí.

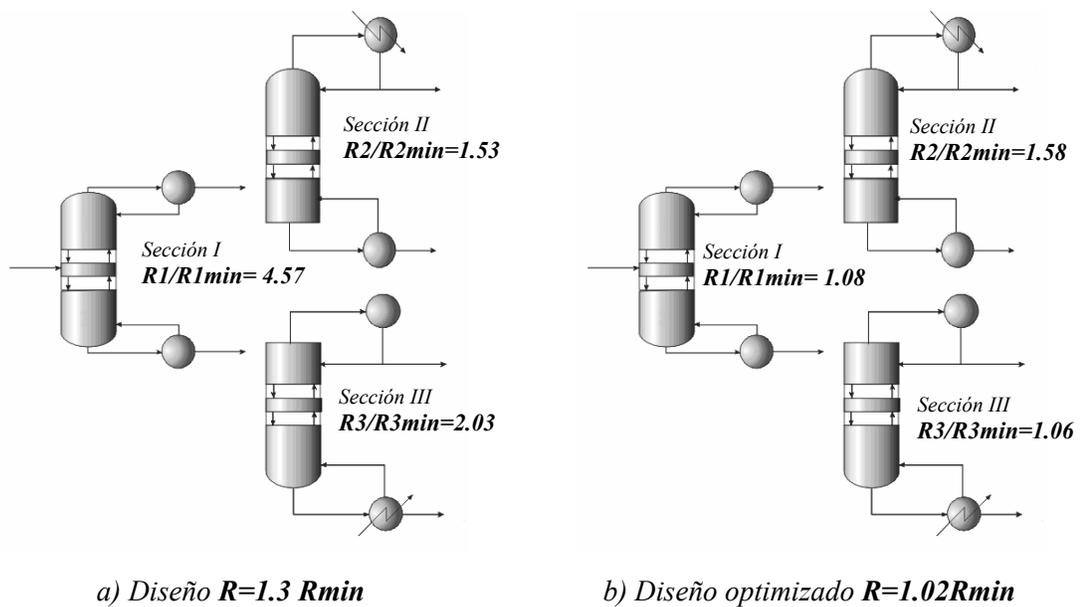


Figura 5.4 Reflujos de operación de la secuencia Kaibel. Mezcla 1, alimentación 40/20/40.

5.3. REGIONES DE MÍNIMO CONSUMO DE ENERGÍA

Christiansen y Skogestad (1997) reportaron la existencia de una región en donde el requerimiento mínimo de vapor es “casi constante”, y cuyos límites corresponden a dos valores de la recuperación del componente intermedio en el prefraccionador. Después de analizar los conceptos que ellos plantean, se observó que era posible utilizarlos para definir valores óptimos de los flujos de interconexión.

5.3.1. Cálculo de la región constante de V_{min}

Se calcularon los flujos mínimos de vapor requeridos por la secuencia (Petlyuk-Kaibel) como una función de la distribución del componente intermedio en el prefraccionador. El cálculo de dichos requerimientos de vapor se realizó con las ecuaciones reportadas por Castro y Jiménez (2002). En las Figuras 5.5, 5.6 y 5.7 se muestran los resultados obtenidos para las 3 mezclas analizadas. Puede observarse que para los casos de estudio utilizados en el presente trabajo la región de mínimo requerimiento de vapor (delimitada por dos distribuciones de B; la distribución correspondiente a la minimización del consumo de vapor en el prefraccionador, la cual es denominada como *separación preferida*, y la distribución de B para la cual los flujos de vapor de las secciones correspondientes a la columna principal se igualan o “balancean” en la etapa de extracción lateral, definida como condición de *Columnas Balanceadas*) es completamente constante, a diferencia de lo reportado por Christiansen y Skogestad (1997) en donde se observa que la línea que define la región de mínimo consumo de energía, para sus casos de estudio, presenta cierta pendiente.

Esta observación resulta interesante, debido a que pareciera ser que la existencia de dicha pendiente corresponde más a una suposición errónea que a un comportamiento particular de sus mezclas. Para el cálculo del V_{min} de la secuencia dichos autores dividen

la columna en un arreglo de 3 columnas desacopladas, similar al utilizado en el presente trabajo pero con dos implicaciones diferentes:

- Consideran que la alimentación a la segunda columna del arreglo es un vapor saturado y que la alimentación a la tercera columna es un líquido saturado.
- El requerimiento mínimo de vapor de la columna principal es una suma de los requerimientos de cada una de las columnas del arreglo.

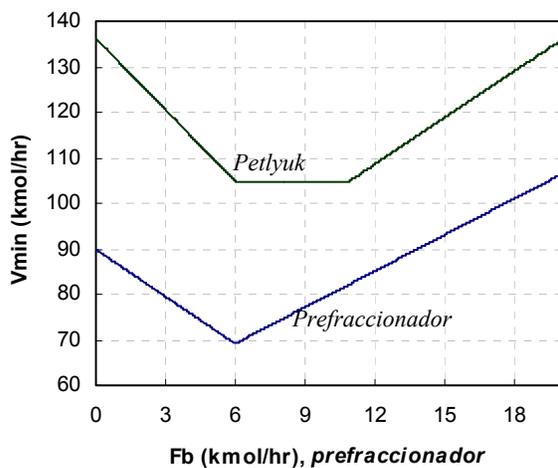
En la metodología se explicó que el requerimiento mínimo de vapor de la columna principal es función de las volatilidades relativas, la composición de las alimentaciones netas, y las condiciones térmicas de las mismas:

$$V_{\min, principal} = \max(V_{\min}^{II}, V_{\min}^{III}) = f(\alpha_i, D^I, W^I, q^{D^I}, q^{W^I}) \quad (5.1)$$

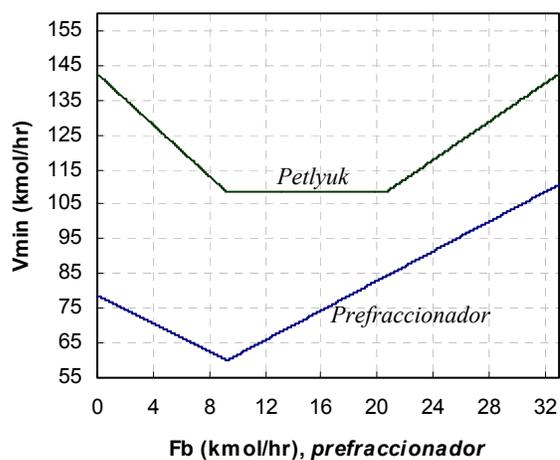
En el capítulo anterior se discutió la importancia de incluir el cálculo de las condiciones térmicas de las pseudos-corrientes de alimentación y se mostró que los valores de esta variable pueden ser muy diferentes de 1 y 0. Por lo tanto se puede inferir que esta suposición conduce a un error en la aproximación del V_{\min} de la secuencia.

En el presente trabajo las condiciones térmicas de las alimentaciones a las secciones II y III se calculan para cada valor de B en el destilado del prefraccionador, y son un vapor sobrecalentado y un líquido subenfriado respectivamente (Castro y Jiménez 2002).

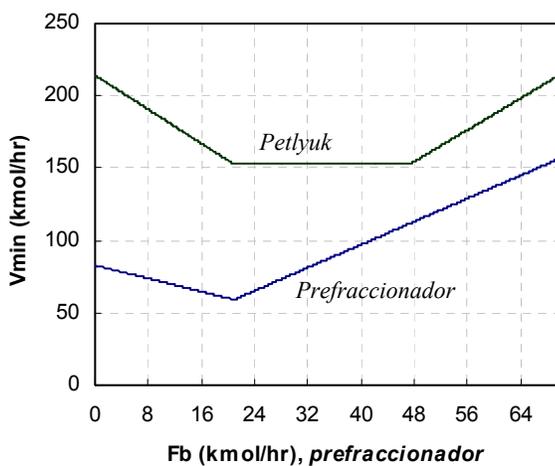
Para análisis posteriores se determinaron las regiones de mínimo requerimiento de vapor para todas las mezclas reportadas en la tesis de Gutiérrez-Salado (2006). En las Tablas 5.12, 5.13, 5.14 se muestran los datos correspondientes a las distribuciones de B que limitan la región constante, mientras que los diagramas se muestran en el Apéndice C.



a) 40/20/40

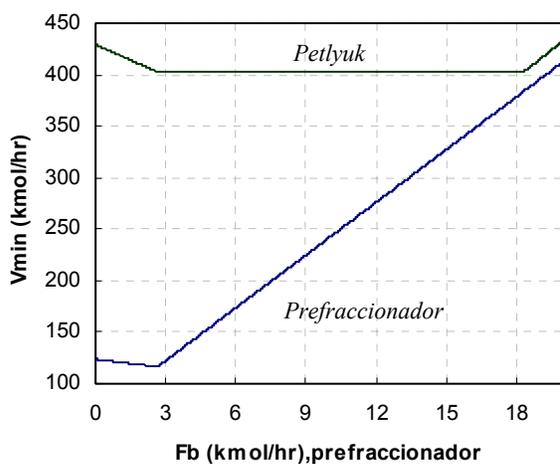


b) 33/33/34

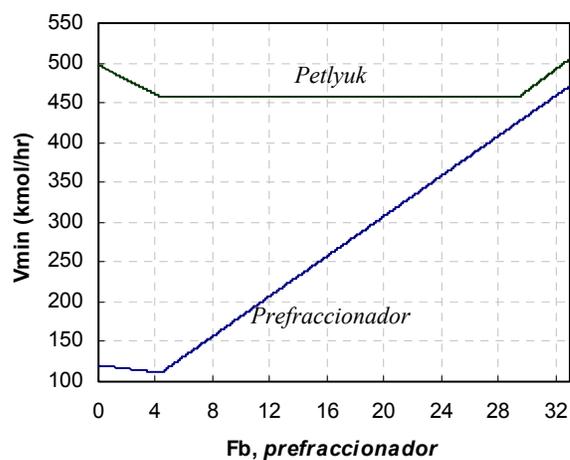


c) 15/70/15

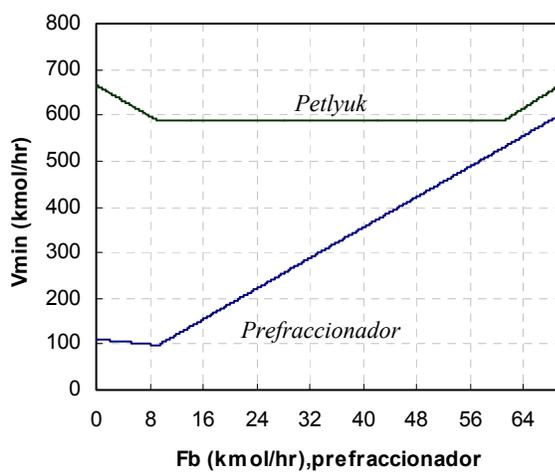
Figura 5.5 Mínimo consumo de vapor para la secuencia Petlyuk. Mezcla M1.



a)40/20/40

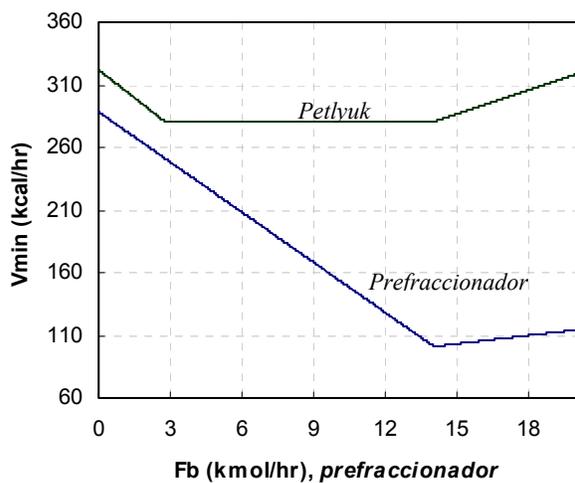


b)33/33/34

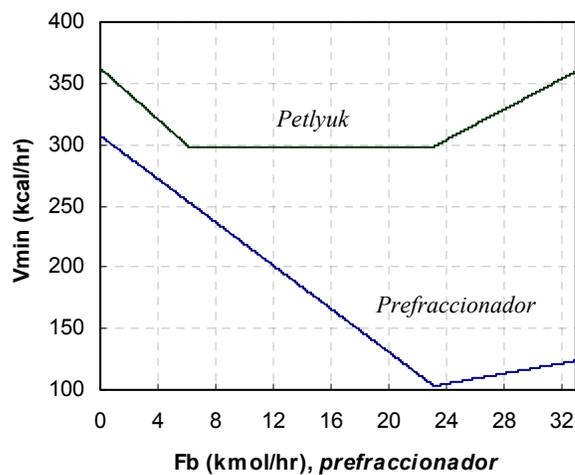


c)15/70/15

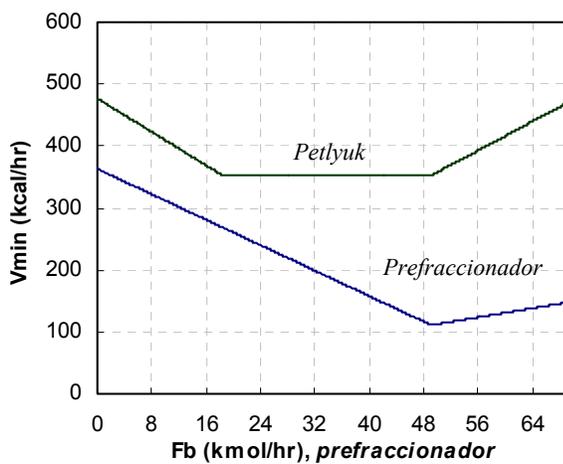
Figura 5.6 Mínimo consumo de vapor para la secuencia Petlyuk. Mezcla M2.



a) 40/20/40



b) 33/33/34



c) 15/70/15

Figura 5.7 Mínimo consumo de vapor para la secuencia Petlyuk. Mezcla M3.

Tabla 5.12 Distribuciones del componente intermedio en el prefraccionador que limitan la región constante de V_{min} . Mezclas con $ESI > 1$.

MEZCLA	Alimentación 40/20/40		Alimentación 15/70/15	
	S.Preferida	C.Balanceadas	S.Preferida	C.Balanceadas
2-2dimetilpropano, 2-3dimetilbutano, 1-1dimetilciclopentano	3.564	15.558	12.474	56.638
isobutano, n-pentano, 2-3dimetilbutano	3.702	16.044	12.957	56.449
2,2-dimetil-butano, 3-metil-hexeno, trans-2-hepteno	3.434	16.878	12.019	57.723
3-metil-pentano, 3-metil-hexano, n-heptano	2.768	18.114	9.695	60.440
n-hexano, 3-etil-pentano, n-heptano	2.794	18.188	9.779	60.447

Tabla 5.13 Distribuciones del componente intermedio en el prefraccionador que limitan la región constante de V_{min} . Mezclas con $ESI = 1$.

MEZCLA	Alimentación 40/20/40		Alimentación 15/70/15	
	S.Preferida	C.Balanceadas	S.Preferida	C.Balanceadas
n-pentano, 3metil-pentano, 2,3-dimetil-pentano	6.499	10.039	22.742	45.338
2,3-dimetil-butano, 2,2-dimetil-pentano, n-heptano	6.941	10.599	24.296	44.225
n-hexano, 3-metil-hexeno, trans-2-hepteno	7.829	10.199	27.403	41.390
3-metil-trans-2-penteno, 2,2-dimetil-pentano, 3,3-dimetil-pentano	8.399	11.037	29.398	40.122
2,4-dimetil-pentano, 1,1-dimetil-ciclopentano, 3-etil-pentano	8.901	10.389	31.155	38.323

Tabla 5.14 Distribuciones del componente intermedio en el prefraccionador que limitan la región constante de V_{min} . Mezclas con $ESI < 1$.

MEZCLA	<i>Alimentación 40/20/40</i>		<i>Alimentación 15/70/15</i>	
	<i>S.Preferida</i>	<i>C.Balanceadas</i>	<i>S.Preferida</i>	<i>C.Balanceadas</i>
2-metil-1-buteno, 4-metil-1-penteno, n-heptano	9.131	5.004	33.374	31.960
n-pentano, 4-m-1-penteno, trans-3-hepteno	10.497	4.408	36.741	29.118
n-pentano, 2,2-dimetil-butano, 1,1-dimetil-ciclopentano	11.755	3.868	41.144	25.367
2,2-dimetil-butano, 2-metil-pentano, 3-etil-pentano	12.513	3.540	43.798	23.106
3-metil-pentano, n-hexano, n-heptano	15.036	2.294	52.626	15.372

5.3.2. *Diseño en la región constante de V_{min}*

De acuerdo al método de diseño reportado por Castro y Jiménez (2002), utilizado en el presente trabajo, el cálculo del flujo mínimo de vapor en el prefraccionador y la distribución del componente intermedio se calculan resolviendo simultáneamente la ecuación de Underwood para las dos raíces existentes; esta solución corresponde a lo que Christiansen y Skogestad (1997) denominan como la *separación preferida*. Los resultados obtenidos de la etapa de optimización sugieren que el valor óptimo de diseño corresponde precisamente a esta distribución de B. Por un lado esto es debido a que dicha solución corresponde a un mínimo, tal como se discutió anteriormente, y por otro debido a que, por la forma en que están escritas las ecuaciones, el único valor que satisface ambas ecuaciones es el correspondiente a *la separación preferida*.

La existencia de una región constante de V_{min} para la secuencia hace pensar que lo más adecuado es escribir el modelo matemático de manera tal que se evite que la solución sea forzada de alguna manera a caer en el valor de *la separación preferida*, y que todas las posibles distribuciones de B en el prefraccionador sean consideradas. Desafortunadamente esta reflexión se realizó mientras se analizaban otras variables de diseño y después de haber completado la etapa de optimización. Con la finalidad de determinar las posibles consecuencias de esta omisión, se realizó un ensayo rápido con un par de casos de los cuales se desprendieron las siguientes observaciones:

- Debido a que para cualquier punto dentro de esta región el consumo mínimo de vapor es el mismo, el costo asociado a servicios permanecerá constante.
- Los diseños cambian en cuanto a estructura de platos y valores de los flujos de interconexión, y por lo tanto el costo asociado a inversión varía dependiendo del valor de la distribución de B en el prefraccionador.

- De acuerdo a los resultados del ensayo que se realizó, los diseños con menores flujos internos se obtienen con la distribución de B correspondiente a la *separación preferida*, y conforme la distribución de B se mueve hacia el punto correspondiente a la condición de *columna balanceada* los flujos se van incrementando. Es decir, aún cuando el número de etapas pudiera disminuir, los diámetros siempre van a aumentar.

Resultaría inadecuado concluir algo con sólo un par de casos analizados, pero se deja planteado para trabajo futuro

5.4. LIMITES FACTIBLES PARA LOS FLUJOS DE INTERCONEXIÓN

Desde los primeros capítulos del presente trabajo se ha mencionado que el diseño por analogía de secciones, como el propuesto por Hernández y Jiménez (1996), resulta de gran utilidad cuando se necesita obtener una estructura inicial de manera rápida. Sin embargo, un diseño de este tipo requiere de un trabajo posterior de optimización, basado en la búsqueda de la mejor combinación de flujos de interconexión, explicado en el Capítulo 3.

En la Tabla 5.15 se muestra el diseño de una secuencia Petlyuk para la separación de la mezcla M1 con alimentación equimolar, y en la Figura 5.8 la superficie de respuesta correspondiente a la optimización de los flujos de interconexión. Generar una superficie de este tipo requiere de un número de simulaciones significativas, sobre todo si no se tiene una idea clara del rango de valores en el cual hay que realizar la búsqueda.

Tabla 5.15 Estructura inicial de la secuencia Petlyuk.

VARIABLES	
PREFRACTIONADOR	
Etapas totales	19
Etapas de Alimentación	9
COLUMNA PRINCIPAL	
Etapas totales	31
Etapas de interconexión superior	6
Etapas de Interconexión inferior	24
Etapas de extracción lateral	13
FL1 (líquido de interconexión, kmol/hr)	19.01 <i>inicial</i>
FV2 (vapor de interconexión kmol/hr)	61.32 <i>inicial</i>
Relación de reflujo	3.26
Flujo de Destilado (kmol/hr)	33
Flujo de corriente lateral (kmol/hr)	33.03

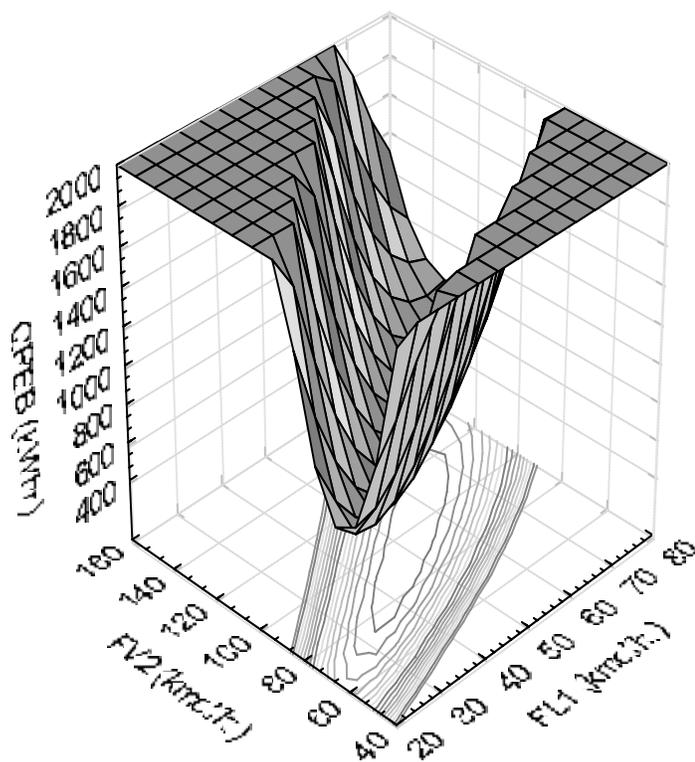


Figura 5.8 Optimización de la secuencia Petlyuk. Superficie de respuesta.

En la Figura 5.9 se presentan los datos utilizados para generar la superficie de respuesta mostrada. La búsqueda se realizó con un cambio en los flujos de 5 kmol/hr; si fuera necesario realizar una búsqueda más cerrada eso implicaría más puntos de búsqueda. Las combinaciones óptimas de flujos se encuentran en *negritas* (Figura 5.9), y un detalle interesante de esta búsqueda es que coincidentemente en cada combinación óptima las diferencias entre los flujos de interconexión (FV2-FL1) son similares, y se encuentran en un rango comprendido entre los 42 y 52 kmol/hr.

FL=25.34 kmol/hr		FL= 35.34 kmol/hr		FL= 40.34 kmol/hr		FL= 45.34 kmol/hr	
FV kmol/hr	Qr (KWhr)	FV kmol/hr	Qr (KWhr)	FV kmol/hr	Qr (KWhr)	FV kmol/hr	Qr (KWhr)
47.34	1658.96	57.73	1354.28	62.73	1252.45	67.73	1150.64
52.73	1252.73	62.73	1049.09	67.73	947.32	72.73	845.58
57.73	967.78	67.73	744.03	72.73	713.00	77.73	732.54
62.73	703.17	72.73	671.55	77.73	681.21	82.73	685.96
67.73	691.56	77.73	650.64	82.73	641.48	87.73	645.48
72.73	761.60	82.73	670.85	87.73	641.72	92.73	620.72
77.73	922.96	87.73	771.83	92.73	701.47	97.73	641.40
82.73	1124.83	92.73	923.22	97.73	872.98	102.73	772.47
87.73	1599.41	97.73	1269.74	102.73	1004.56	107.73	974.16
92.73	1851.86	102.73	1549.17	107.73	1347.40	112.73	1279.09

FL=50.34 kmol/hr		FL=55.34 kmol/hr		FL=65.34 kmol/hr		FL=70.34 kmol/hr	
FV kmol/hr	Qr (KWhr)						
72.73	1028.69	82.73	793.62	92.73	822.71	92.73	894.43
77.73	774.14	87.73	751.74	97.73	771.49	97.73	842.54
82.73	742.09	92.73	700.86	102.73	721.03	102.73	781.48
87.73	690.84	97.73	660.75	107.73	681.09	107.73	731.15
92.73	650.60	102.73	621.10	112.73	631.60	112.73	686.23
97.73	620.90	107.73	622.10	117.73	662.96	117.73	641.90
102.73	611.90	112.73	672.97	122.73	723.88	122.73	693.32
107.73	682.47	117.73	763.55	127.73	774.56	127.73	744.30
112.73	868.62	122.73	994.98	132.73	825.14	132.73	814.96
117.73	1095.50	127.73	1247.10	137.73	995.86	137.73	845.96

Figura 5.9 Datos de la optimización de la secuencia Petlyuk.

Sin embargo, parece ser que esta “coincidencia” tiene explicación. Consideremos el arreglo básico de 3 columnas a partir del cual se obtiene el diseño, Figura 5.10. Los flujos de interconexión que se están fijando son el vapor que alimenta el fondo de la columna prefraccionadora (FV2) y el reflujo del domo de la misma (FL1); bajo la suposición de flujo molar constante y condición de líquido saturado en la alimentación, FV2 es igual al vapor que sale del domo de la columna y por lo tanto la diferencia $FV2-FL1$ es simplemente el destilado neto del prefraccionador (D^I).

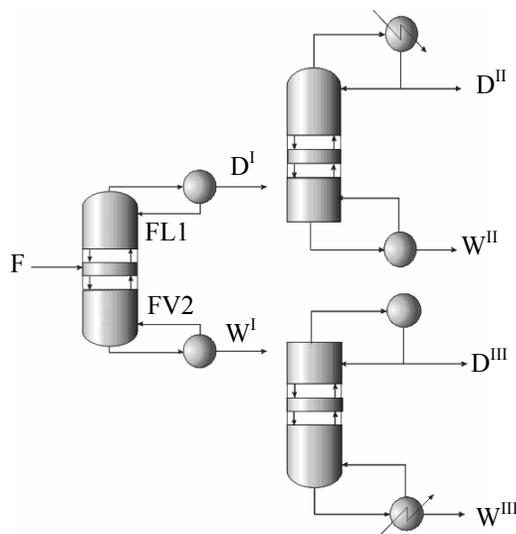


Figura 5.10 Arreglo de 3 columnas desacopladas.

Debido a que la finalidad de la columna prefraccionadora es la separación entre A (componente clave ligero) y C (componente clave pesado), se puede establecer que la diferencia mínima entre FV2 y FL1 debería ser igual al flujo alimentado del componente ligero y la diferencia máxima igual a la suma de la alimentación de los componentes ligero e intermedio; de otra manera tendríamos al componente ligero en los fondos y/o al pesado en el domo, lo cual provocaría que la columna principal trabajara de manera ineficiente. En base a esto podemos establecer que existen dos límites definidos solamente por el balance de materia del arreglo desacoplado:

$$FV2 - FL1 \geq z_A F \quad (5.1)$$

$$FV2 - FL1 \leq z_A F + z_B F \quad (5.2)$$

En la Tabla 5.16 se muestra un ejemplo de lo que está ocurriendo; se tomaron los datos correspondientes a un flujo de líquido de interconexión $FL1 = 45.34 \text{ kmol/hr}$ y se analizaron las composiciones de lo que sería el flujo de destilado neto del prefraccionador para diferentes valores de $FV2$. Puede observarse de manera clara lo discutido previamente, particularmente en los valores de los extremos de la tabla, en donde no sólo se ve el efecto de la separación no completa entre los componentes claves, sino que el flujo neto del componente intermedio no parece factible.

Tabla 5.16 Composiciones del destilado neto del prefraccionador. $FL1=45.34 \text{ kmol/hr}$.

$FV2$ (kmol/hr)	D^I ($FV2 - FL1$)	$D_A^I x_A^I$ (kmol/hr)	$D_B^I x_B^I$ (kmol/hr)	$D_C^I x_C^I$ (kmol/hr)
67.72	22.39	25.955	-0.728	0.0108
73.72	27.39	28.446	1.2	0.0168
77.72	32.39	30.599	3.734	0.0296
83.72	37.39	32.034	7.716	0.0717
87.72	42.39	32.606	12.291	0.194
93.72	47.39	32.815	16.618	0.455
97.72	52.39	32.899	20.692	0.921
103.72	57.39	32.927	24.475	1.613
107.72	62.39	32.945	28.05	2.44
113.72	67.39	32.953	31.643	3.389
117.72	72.39	32.967	35.183	4.356

De acuerdo a lo anterior parece ser que realmente el único espacio factible de búsqueda estaría dado por la distribución de B en el prefraccionador, y este espacio de búsqueda podría quedar delimitado utilizando los conceptos de región constante de mínimo requerimiento de vapor (Christiansen y Skogestad, 1997). Si a condiciones de reflujo mínimo se espera que fuera de esta región los requerimientos de vapor sean mayores, para condiciones de operación reales esta posibilidad debería aumentar. En base a esto, se consideró que dichos valores podrían ser introducidos como límites de búsqueda de al menos uno de los flujos de interconexión.

Por lo tanto, si se introduce la región de mínimo consumo de vapor a los balances de materia anteriormente planteados, los límites de búsqueda quedarían de la siguiente manera:

$$FV2 - FL1 \geq z_A F + \min[(x_B D^I)_{SP}, (x_B D^I)_{SB}] \quad (5.3)$$

$$FV2 - FL1 \leq z_A F + \max[(x_B D^I)_{SP}, (x_B D^I)_{SB}] \quad (5.4)$$

En la Figura 5.11 se muestra la solución de la ecuación de Underwood para todas las distribuciones posibles (netas) del componente intermedio. Se encuentra que la distribución del componente intermedio en el domo del prefraccionador correspondiente a la separación preferida (SP) es igual a 9.30 kmol/hr, mientras que la distribución correspondiente al arreglo de columnas balanceadas (SB) es igual a 20.62 kmol/hr.

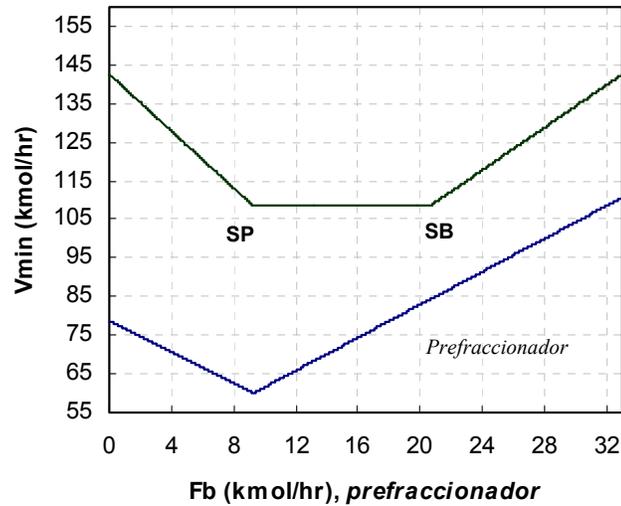


Figura 5.11 Flujos mínimos de vapor para la secuencia Petlyuk. M1-F2.

Para el caso presentado, los valores límite quedarían definidos como se muestra a continuación:

$$FV2 - FL1 \geq 33 + \min[9.30, 20.62] \geq 42.30 \text{ kmol/hr} \quad (5.5)$$

$$FV2 - FL1 \leq 33 + \max[9.30, 20.62] \leq 53.62 \text{ kmol/hr} \quad (5.6)$$

Si eliminamos los valores fuera de estos límites, las tablas de datos de búsqueda quedarían reducidas significativamente, tal como se observa en la Figura 5.12 (sombreado), sin dejar de contener la información necesaria para encontrar la combinación óptima de flujos de interconexión.

FL=25.34 kmol/hr		FL= 35.34 kmol/hr		FL= 40.34 kmol/hr		FL= 45.34 kmol/hr	
FV kmol/hr	Qr (KWhr)	FV kmol/hr	Qr (KWhr)	FV kmol/hr	Qr (KWhr)	FV kmol/hr	Qr (KWhr)
47.34	1658.96	57.73	1354.28	62.73	1252.45	67.73	1150.64
52.73	1252.73	62.73	1049.09	67.73	947.32	72.73	845.58
57.73	967.78	67.73	744.03	72.73	713.00	77.73	732.54
62.73	703.17	72.73	671.55	77.73	681.21	82.73	685.96
67.73	691.56	77.73	650.64	82.73	641.48	87.73	645.48
72.73	761.60	82.73	670.85	87.73	641.72	92.73	620.72
77.73	922.96	87.73	771.83	92.73	701.47	97.73	641.40
82.73	1124.83	92.73	923.22	97.73	872.98	102.73	772.47
87.73	1599.41	97.73	1289.74	102.73	1004.56	107.73	974.16
92.73	1851.86	102.73	1549.17	107.73	1347.40	112.73	1279.09

FL=50.34 kmol/hr		FL=55.34 kmol/hr		FL=65.34 kmol/hr		FL=70.34 kmol/hr	
FV kmol/hr	Qr (KWhr)						
72.73	1028.69	82.73	793.62	92.73	822.71	92.73	894.43
77.73	774.14	87.73	751.74	97.73	771.49	97.73	842.54
82.73	742.09	92.73	700.86	102.73	721.03	102.73	781.46
87.73	690.84	97.73	660.75	107.73	681.09	107.73	731.15
92.73	650.60	102.73	621.10	112.73	631.60	112.73	686.23
97.73	620.90	107.73	622.10	117.73	662.96	117.73	641.90
102.73	611.90	112.73	672.97	122.73	723.88	122.73	693.32
107.73	682.47	117.73	763.55	127.73	774.56	127.73	744.30
112.73	868.62	122.73	994.98	132.73	825.14	132.73	814.96
117.73	1095.50	127.73	1247.10	137.73	995.86	137.73	845.96

Figura 5.12 Eliminación de datos de acuerdo a límites de flujo.

Planteando FV2 en función del flujo neto de B en el prefraccionador, es posible graficar las curvas de optimización en el gráfico de Vmin. En la Figura 5.13 se muestran las curvas de optimización del caso de estudio; cada serie representa un flujo de líquido (FL1) y cada punto el flujo de vapor (FV2) correspondiente a una distribución de B en el prefraccionador. Se puede observar que para todos los casos presentados FV2 óptimo siempre se localizó dentro de la región plana, con una tendencia bastante clara.

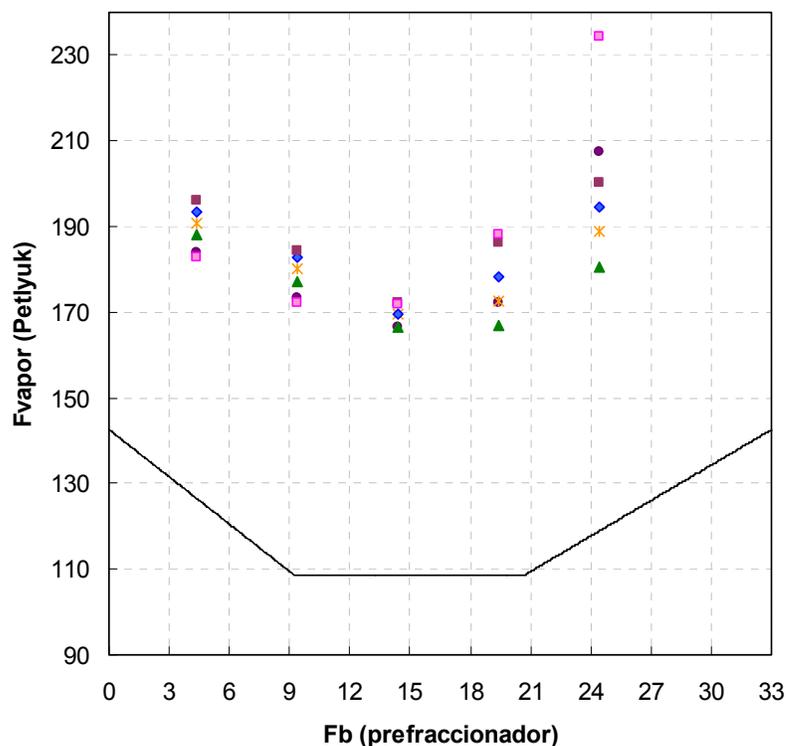
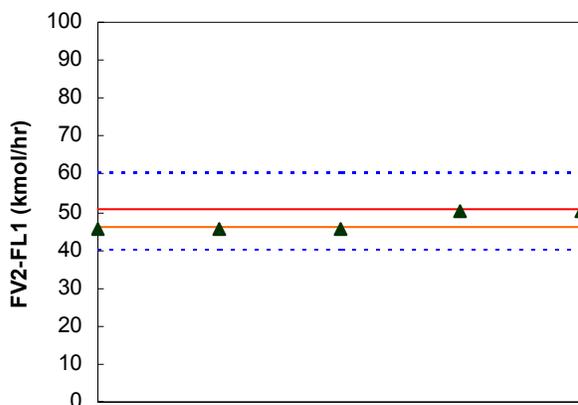


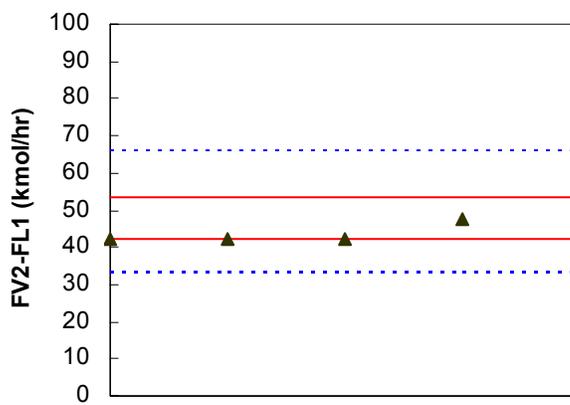
Figura 5.13 Curvas de optimización en función de la distribución de B en el prefraccionador.

De acuerdo a los resultados obtenidos, limitar la búsqueda en esta región pareciera ser factible. En las Figuras 5.14, 5.15 y 5.16 se graficaron las combinaciones óptimas del procedimiento de optimización de las estructuras correspondientes a las 3 mezclas analizadas. Con líneas punteadas se representaron los límites asociados a los balances de materia, con líneas sólidas los límites asociados a la distribución de B dentro de la región de V_{min} constante, y los datos de la serie representan la diferencia $FV2-FL1$ de cada óptimo local. Como dato adicional, es necesario mencionar que la combinación óptima de flujos de interconexión de cada serie es en general el 3er o 4to dato.

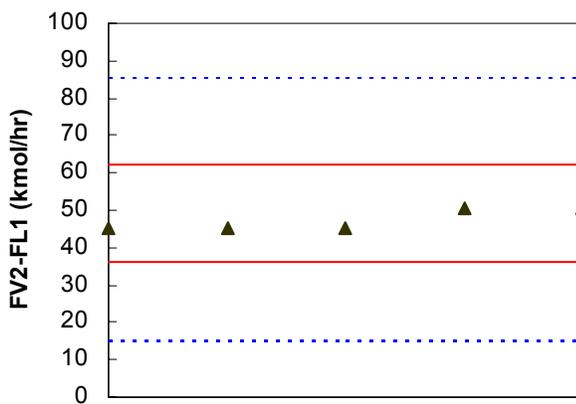
Para contar con resultados adicionales se llevó a cabo el diseño y optimización de 6 casos más, tomando algunas de las mezclas reportadas por Gutiérrez- Salado (2006). Los resultados se muestran en la Figura 5.14.



a) 40/20/40

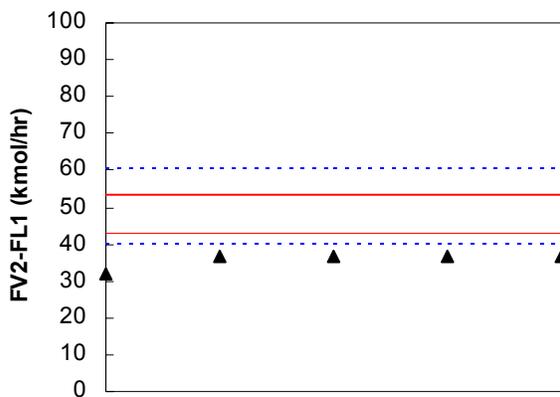


b) 33/33/34

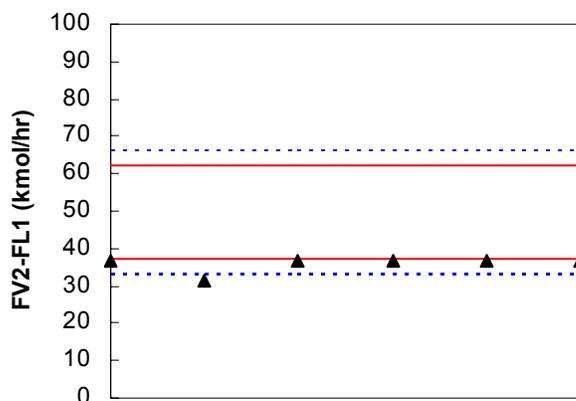


c) 15/70/15

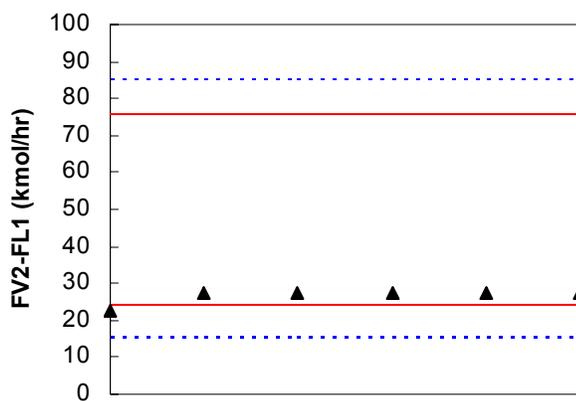
Figura 5.14 Límites para la optimización de flujos de interconexión. Mezcla M1.



a) 40/20/40

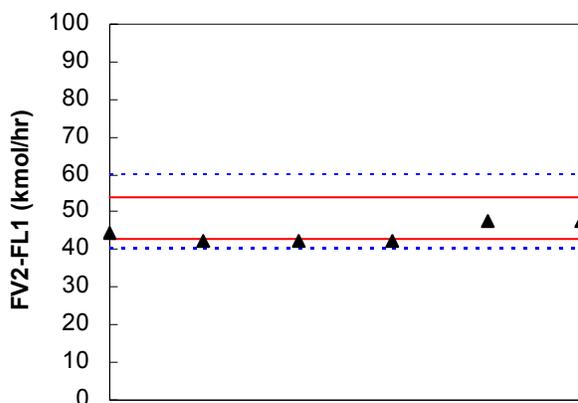


b) 33/33/34

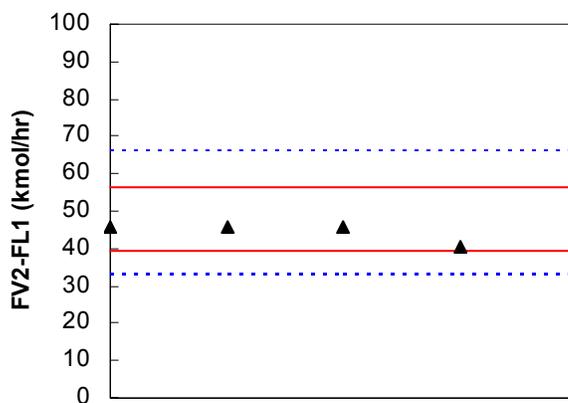


c) 15/70/15

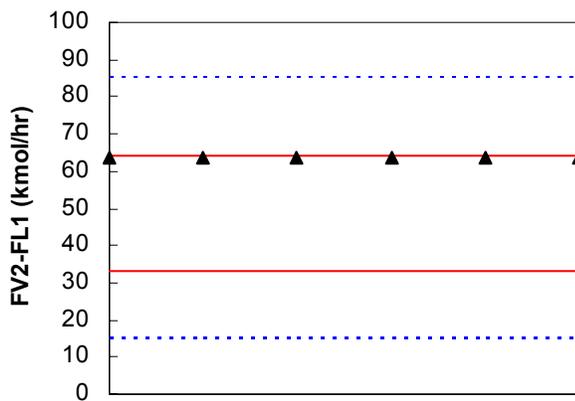
Figura 5.15 Límites para la optimización de flujos de interconexión. Mezcla M2.



a) 15/70/15

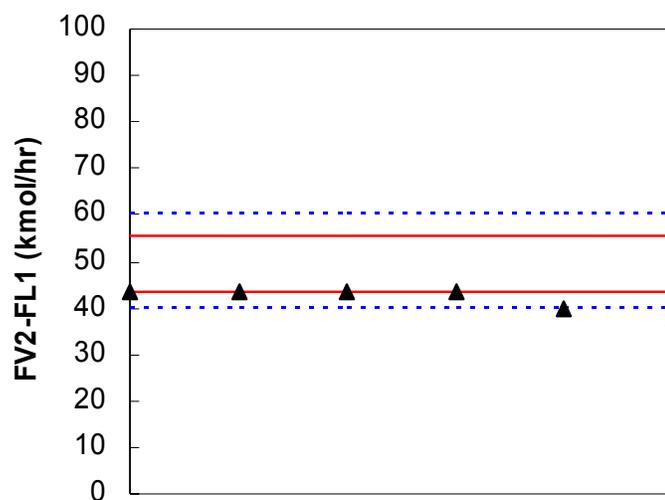


b) 33/33/34

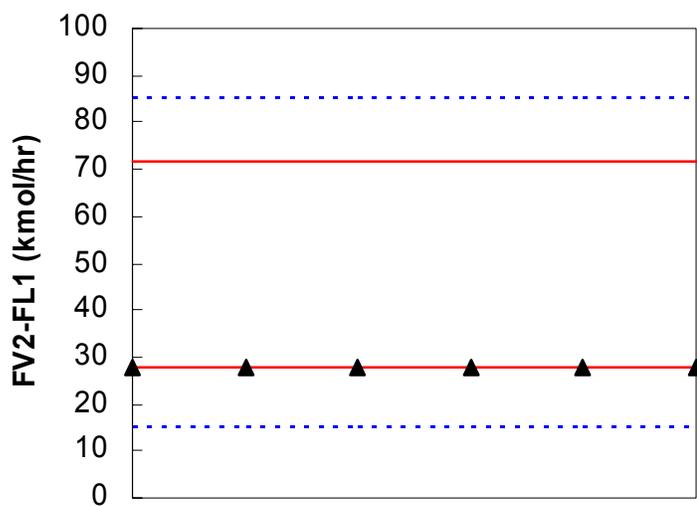


c) 15/70/15

Figura 5.16 Límites para la optimización de flujos de interconexión. Mezcla M3.



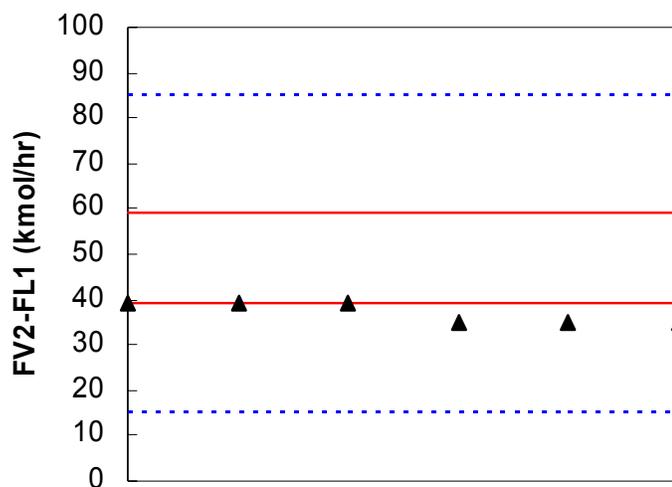
a) 2-2dimetilpropano, 2-3dimetilbutano, 1-1dimetilciclopentano.
40/20/40



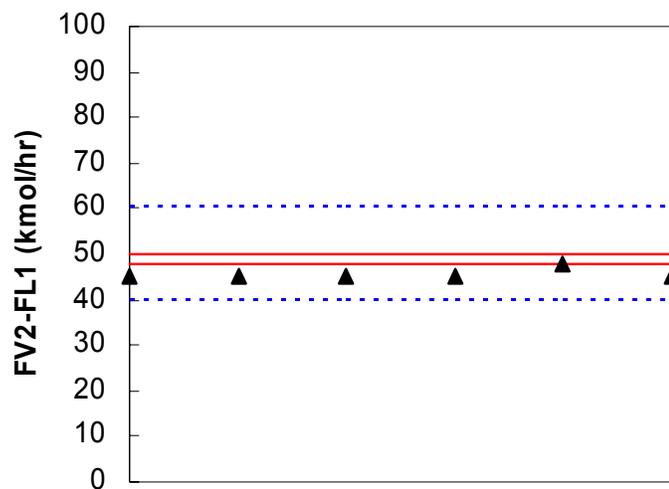
b) isobutano, n-pentano, 2-3dimetilbutano.

15/70/15

Figura 5.17 Límites para la optimización de flujos de interconexión.
Mezclas con ESI>1.

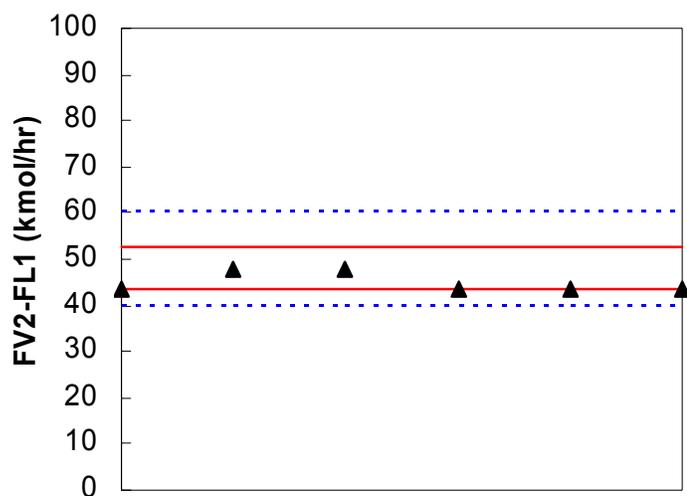


a) 2,3-dimetil-butano, 2,2-dimetil-pentano, n-heptano.
15/70/15

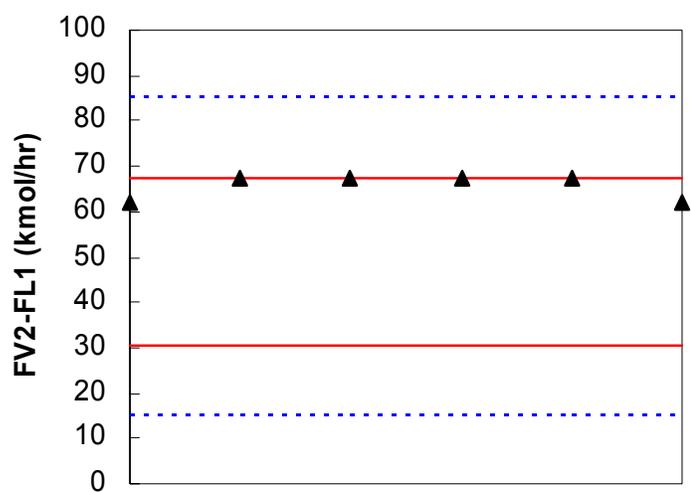


b) n-hexano, 3-metil-hexeno, trans-2-hepteno.
40/20/40

Figura 5.18 Límites para la optimización de flujos de interconexión.
Mezclas con ESI=1.



a) 2,2-dimetil-butano, 2-metil-pentano, 3-etil-pentano
40/20/40



b) 3-metil-pentano, n-hexano, n-heptano
15/70/15

Figura 5.19 Límites para la optimización de flujos de interconexión.
Mezclas con $ESI < 1$.

De acuerdo a los resultados observados, a excepción del caso M2-F1, las combinaciones óptimas se encuentran incluidas dentro de la región limitada por el balance de materia, y para la mayoría de los casos los óptimos locales tienden a la diferencia correspondiente a alguna de las distribuciones límites de B, generalmente la correspondiente a la *separación preferida*. Es necesario hacer notar que todas las estructuras iniciales se diseñaron para la distribución de B correspondiente a la solución simultánea de la ecuación de Underwood, lo cual podría ser la causa de la tendencia de los datos hacia la *separación preferida*.

El cálculo de los valores límite se llevó a cabo con valores promedio de volatilidades relativas (las cuales se consideraron constantes) y considerando comportamiento ideal para el cálculo de la termodinámica, mientras que los barridos de las variables de optimización se llevaron a cabo mediante simulaciones rigurosas en donde las volatilidades relativas cambian a lo largo de la columna y las propiedades termodinámicas son calculadas mediante la correlación de Chao- Seader. Lo anterior da lugar a que aún sea posible refinar el cálculo de dichos límites.

Por otro lado, de acuerdo a Nikolaidis y Malone (1987) existen condiciones en las cuales la mejor solución de la secuencia Petlyuk corresponde a reducir el arreglo a las estructuras con agotador y/o rectificador lateral. Si esto es cierto, habrá algunos casos para los cuales las combinaciones óptimas se localizarán en alguno de los límites de balance de materia.

En base a lo anterior se puede establecer que los límites definidos por la distribución de B contienen en la mayoría de los casos a los valores óptimos; que existen casos para los cuales las combinaciones óptimas salen de esta región, pero que aún se encuentran incluidas dentro de la región limitada por el balance de materia; y que parece factible hacer uso de estos límites para la búsqueda de condiciones óptimas de operación.

Utilizar la región constante de V_{min} para limitar la búsqueda de los flujos óptimos de interconexión puede resultar arriesgado después de observar que existen datos que se salen de esta región, pero es claro que siempre será un buen valor inicial; los límites correspondientes a los balances de materia, a pesar de que hacen mayor el rango de búsqueda, representan límites más confiables.

5.5. CONCLUSIONES PRELIMINARES

La discusión de los resultados presentados en este capítulo puede resumirse de la siguiente manera:

- A pesar de que el ajuste de etapas del prefraccionador para pasar de una secuencia de columnas independientes a un arreglo de pared divisora parece trivial, la diferencia en costos puede resultar significativa.
- Al igual que en el caso de las STAD y STAI, los ahorros de los arreglos optimizados de las secuencias Petlyuk y Kaibel respecto a los diseñados con un $R=1.3$ R_{min} son mucho mayores que lo reportado para columnas convencionales, efecto que se ve potenciado debido a la manera en que son definidos los reflujos. De manera similar a las secuencias con agotador/rectificador lateral, en ningún caso se obtuvieron diseños óptimos que parecieran infactibles debido a un requerimiento de etapas excesivo.
- Cuando los diseños son optimizados, ambos arreglos de prefraccionador tienden al mismo costo mínimo.

- En el caso de la secuencia Petlyuk/Kaibel no se presentaron problemas de convergencia como los enfrentados en la optimización de la STAI. Lo anterior se debe a la definición del R_{min} del arreglo, la cual garantiza que ninguna sección trabaje por debajo de sus requerimientos mínimos.

- Se calculó la solución de V_{min} para todas las posibles distribuciones de B en el prefraccionador. A diferencia de lo reportado por Christiansen y Skogestad (1997) las regiones constantes encontradas no presentan ninguna pendiente, lo cual puede atribuirse a una mejor aproximación debido al cálculo de las condiciones térmicas de las pseudos-corrientes de alimentación.

- Se analizó la introducción del concepto de región constante de V_{min} para la definición de límites factibles en la búsqueda de condiciones óptimas de operación. Se encontró que aún cuando existen casos cuyas combinaciones óptimas se encuentran fuera de esta región, las distribuciones de B definidas constituyen un buen valor inicial.

CAPÍTULO 6

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1 CONCLUSIONES

De acuerdo con los resultados obtenidos y con base en el análisis de los mismos se presentan las siguientes conclusiones:

Debido a la elección de las metodologías de diseño utilizadas fue posible observar que la definición de pseudo-corrientes de alimentación y el cálculo de las condiciones térmicas correspondientes significan mejores aproximaciones de las variables de diseño. En el caso de la STAD y STAI nos permite inicializar la búsqueda de los flujos de interconexión con valores muy cercanos al óptimo; para la secuencia Petlyuk/Kaibel la definición de estas condiciones térmicas disminuye los errores al calcular las regiones de mínimo consumo de vapor.

Al optimizar matemáticamente los arreglos preliminares se encontró que en todos los casos los costos anuales son significativamente mayores, respecto a los arreglos óptimos, cuando se elige una razón de reflujo igual a 1.3 veces el reflujo mínimo. Sin embargo, a pesar de que en la mayoría de los casos los reflujo óptimos tienden a valores cercanos a 1.02 R_{min} , en ningún caso se obtuvieron diseños que parecieran poco factibles debido a un requerimiento excesivo de etapas; el número de etapas de los arreglos optimizados es, en la mayoría de los casos, un 50% mayor al requerido para diseños con $R=1.3R_{min}$, dando lugar a incrementos en el costo fijo de aproximadamente el 10%. En el

caso de la secuencia Petlyuk/Kaibel este efecto es aún más claro debido a la manera en que son definidos los reflujos.

En el caso de la STAI se encontraron algunos problemas de convergencia que fueron resueltos mediante la introducción de una restricción adicional, lo cual llevó a la observación de que el flujo de interconexión óptimo tiende a ser su valor a condiciones de operación límite. El problema de convergencia mencionado anteriormente sólo se presenta para la secuencia STAI; en el caso de la STAD no se da esa dependencia de los flujos de interconexión, y en el caso de la secuencia Petlyuk ese problema se previene al redefinir el reflujo de operación en función de la sección que limita la operación.

Para las secuencias con acoplamiento térmico total se observó que a pesar de que el ajuste de etapas del prefraccionador para pasar de una secuencia de columnas independientes a un arreglo de pared divisora parece trivial, la diferencia en costos resulta significativa cuando, para la misma separación, la sección prefraccionadora de la columna con pared divisora requiere menos etapas que el arreglo de columnas independientes. Se observó también que cuando los diseños son optimizados ambos arreglos de prefraccionador tienden al mismo costo mínimo, aún cuando la distribución de los platos sea diferente.

Para la determinación de V_{min} como función de la distribución del componente intermedio en el prefraccionador, se introdujo el cálculo de las condiciones térmicas de las pseudo-corrientes de alimentación y la redefinición del reflujo de operación, mejorando la aproximación a una región completamente constante, a diferencia de lo reportado por Christiansen y Skogestad (1997).

Se analizó la introducción del concepto de región constante de V_{min} para la definición de límites factibles en la búsqueda de condiciones óptimas de operación de la secuencia Petlyuk y se observó que aún cuando en algunos casos los óptimos locales se localizan fuera de ésta región, las distribuciones de B definidas constituyen en todos los casos un excelente valor inicial.

5.2 RECOMENDACIONES PARA TRABAJO FUTURO

Para concluir el presente trabajo y como consecuencia de las deficiencias observadas durante la realización del mismo, se presentan a continuación una serie de recomendaciones para trabajo futuro.

- El problema de convergencia de la STAI en la etapa de optimización se solucionó incluyendo una restricción para el valor de los flujos de interconexión, gracias a lo cual se observó un valor límite para esta variable. Sin embargo, este problema también podría ser solucionado redefiniendo el reflujo de operación en función de la sección que limita la operación, tal como se hace para la secuencia Petlyuk.
- Se mostró que 1.3 veces el reflujo mínimo es un valor demasiado alejado del valor óptimo de diseño y que el incremento en costos es significativo. En base a los resultados se considera que es necesario definir mejores valores de diseño que aseguren la factibilidad de los diseños a un buen costo.
- Todos los resultados presentados de la etapa de optimización matemática son los resultados obtenidos del modelo; debido a que son aproximaciones iniciales y a que las estimaciones de costos se llevaron a cabo con correlaciones sencillas, se propone validar los diseños obtenidos y llevar a cabo un análisis de costos rigurosos (por ejemplo, en el módulo de análisis de costos de Aspen®, ICARUS) para corroborar que las tendencias y los ahorros se cumplan en condiciones más reales.
- Christiansen y Skogestad (1997) introdujeron expresiones analíticas para el cálculo de las dos distribuciones de B que limitan la región constante de V_{min} , pero en dichas expresiones manejaron las suposiciones de condiciones de líquido y vapor saturado para las corrientes de interconexión, lo cual introduce un error en el cálculo. Debido a lo anterior, con la finalidad de mejorar las predicciones de las

regiones constantes de V_{min} , se recomienda incluir el cálculo las condiciones térmicas en las expresiones analíticas desarrolladas por los autores antes mencionados

- Durante la optimización matemática de las secuencias con acoplamiento térmico total, Petlyuk y Kaibel, sólo se consideró la solución simultánea de las ecuaciones de Underwood para el cálculo de V_{min} y la distribución de B en el prefraccionador. Sin embargo, lo más conveniente sería incluir todas las posibles distribuciones de B en el prefraccionador dentro de dicha optimización.
- Se determinaron condiciones para delimitar el espacio de búsqueda de condiciones de operación óptimas para las 3 secuencias analizadas. Se mostró la aplicación para el caso de estructuras con número de etapas fijo, pero aún queda abierta la posibilidad de utilizar estos valores para restringir el espacio de búsqueda y/o inicializar variables en el caso de optimizaciones matemáticas de modelos de etapa de equilibrio, así como la posibilidad de utilizarlos para definir espacios de operación controlables.

REFERENCIAS

- Adrian, T., Schoenmakers, H., Boll, M., “Model predictive control of integrated unit operations: Control of a divided wall column”, *Chemical Engineering and Processing.*, 43, 347-355, (2004).
- Agrawal, R.,Fidkowski, Z.T., “Are Thermally Coupled Distillation Columns Always Thermodynamically More Efficient for Ternary Distillations?”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 37, 3444-3454 (1998).
- Agrawal, R., Fidkowski, Z. T., “New Thermally Schemes for Ternary Distillation”, *AIChE Journal.*, 45, 485-496 (1999).
- Agrawal, R., “Thermally Coupled Distillation with Reduced Number of Intercolumn Vapor Transfers”, *AIChE Journal.*, 46, 2198 -2210 (2000).
- Alstad, V., Halvorsen, I.J., Skogestad, S., “Optimal Operation of a Petlyuk Distillation Column: Energy Savings by Overfractionating”, Proc. European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE-14), Mayo 2004, Lisboa, Portugal. Published by Elsevier, ISBN 0-444-51694-8, pp. 547-552.
- Amminudin, K.A., Smith, R., Thong, D.Y.C., Towler, G.P., “Design and Optimization of Fully Thermally Coupled Distillation Columns”, *Trans IChemE*, 79, 701-715 (2001).
- Barnés, F.J., Hanson, D.N., King, J., “Calculation of Minimum Reflux for Distillation Columns with Multiple Feeds”, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 11, 136-140 (1972).
- Brooke, A., Kendrick., Meeraus, A. And Raman, R., “GAMS – A User Guide”. *GAMS Development Corporation , Washington, DC, USA.* (1998).
- Caballero, J., Grossmann, I., “Generalized Disjunctive Programming Model for the Optimal Synthesis of Thermally Linked Distillation Columns”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 40, 2260-2274 (2001).
- Castro, A., Jiménez, A., “Método Corto para el diseño de columnas de destilación Térmicamente Acopladas Petlyuk”, *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 1, 85-96 (2002).

- Chávez-Contreras, R., Multiple Solutions for Interlinked Distillation Systems, PhD Thesis Dissertation, University of Utah, (1985).
- Christiansen, A.C., Skogestad, S., "Energy Savings in Complex Distillation Arrangements: Importance of Using the Preferred Separation", AIChE Annual Meeting, Los Angeles, paper 199d, (1997).
- Dünnebier, G., Pantelides C., "Optimal Design of Thermally Coupled Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 38, 162-176 (1999).
- Fidkowski, Z.; Krolikowski, L., "Thermally Coupled System of Distillation Columns: Optimization Procedure", *AIChE Journal*, 32, (4), 537-546 (1986).
- Fidkowski, Z.; Krolikowski, L., "Minimum Energy Requirements of Thermally Coupled Distillation Systems", *AIChE Journal*, 33, (4), 643-653, (1987).
- Fidkowski, Z.; Krolikowski, L., "Energy Requirements of Nonconventional Distillation Systems", *AIChE Journal*, 36, (8), 1275-1278 (1990).
- Fidkowski, Z.; Agrawal R., "Multicomponent Thermally Coupled Systems of Distillation Columns at Minimum Reflux, *AIChE Journal*", 47, 2713-2724 (2001).
- Finn, A. J., "Consider Thermally Coupled Distillation". *Chemical Engineering Progress*, October, 41-45, (1993).
- Glinos, K., Malone, M., F., "Design of Sidestream Distillation Columns", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 24, 822-828 (1985).
- Glinos, K., Malone, M., F., "Minimum Vapor Flows in a Distillation Column with a Sidestream Stripper", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 24, (4), 1087-1090, (1985).
- Glinos, K., Nikolaides, I., P., Malone, M., F., "New Complex Column Arrangements for Ideal Distillation", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 25, (3), 694-699, (1986).
- Grossmann E.I., Aguirre A.P. Barttfeld M., "Optimal Synthesis of Complex Distillation Columns Using Rigorous Models", *Computers and Chemical Engineering*, 29, 1203-1215 (2005).
- Gutiérrez-Salado, P.E., Influencia de las Volatilidades Relativas en Secuencias de Destilación Acoplados Térmicamente, Tesis presentada para obtener el grado de

- Licenciatura en Ingeniería Química, Instituto Tecnológico de Celaya, Enero 2006.
- Hairstone, D., "The Divide in Distillation", *Chemical Engineering*, April, 32-35 (1999).
- Halvorsen I. and Skogestad S., "Optimal Operation of Petlyuk Distillation: Steady State Behavior", *Journal of Process Control*, volume 9, (5), 1-23, (1999).
- Hernández, S., Jiménez, A., "Design of Optimal Thermally-Coupled Distillation Systems Using a Dynamic Model," *Trans. IChemE.*, **74**, Part A, 357-362 (1996).
- Hernández, S., Jiménez, A., "Design of Energy-Efficient Petlyuk Systems," *Comput. Chem. Eng.*, 23, 1005–1010 (1999).
- Jiménez, A., Hernández, S., Montoy, F.A., Zavala-García, M., "Analysis of Control Properties of Conventional and Nonconventional Distillation Sequences", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 40, (17), 3757-3761 (2001).
- Jiménez, G., A., *Diseño de Procesos en Ingeniería Química*, Editorial Reverté (2003).
- King, C., J., *Procesos de Separación*, Editorial Reverté (1988).
- Malone, M. F., Glinos, K., Marquez, F. E., Douglas, J. M. "Simple, Analytical Criteria for the Sequencing of Distillation Columns", *AIChE Journal*, 31, (4), 683-689 (1985).
- Mutalib, M. I. A., Smith, R., "Operation and Control of Dividing Wall Distillation Columns", *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 76, 308-318 (1998).
- Muralikrishna, V., Madahvan, K. P., Shah, S.S., "Development of Dividing Wall Distillation Column Design Space for a Specified Separation", *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 80, 155-166 (2002).
- Nikolaides, I.,P., Malone, M.F., "Approximate Design and Optimization of a Thermally Coupled Distillation with Prefractionation", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 27, 811-818 (1987).
- Ramírez-Corona, N., *Estudio Comparativo de Secuencias de Destilación No Convencionales para Mezclas Ternarias*, Tesis presentada para obtener el grado de Maestro en Ciencias en Ingeniería Química, Instituto Tecnológico de Celaya, Noviembre 2002.
- Seader, W.D., Henley, E.J., *Separation Process Principles*, John Wiley & Sons, Inc. (1999).

- Serra, M., Perrier, M., Espuña, A., Puigjaner, L., "Study of the Divided Wall Column Controllability: Influence of Design and Operation", *Computers and Chemical Engineering*, 24, 901-907 (2000).
- Serra, M., Perrier, M., Espuña, A., Puigjaner, L., "Analysis of Different Control Possibilities for the Divided Wall Column: Feedback Diagonal and Dynamic Matrix Control", *Computers and Chemical Engineering*, 25, 859-866 (2001).
- Segovia-Hernández, J.G., Hernández, S., Jiménez, A., "Control Behaviour of Thermally Coupled Distillation Sequences", *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 80, 783-789 (2002).
- Tedder, D. W., Rudd, D.F., "Parametric Studies in Industrial Distillation: Part I. Design Comparisons", *AIChE Journal.*, 24, 303-315 (1978).
- Triantafyllou, C.; Smith, R., "The Design and Optimization of Fully Thermally Coupled Distillation Columns", *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 70, 118-132 (1992).

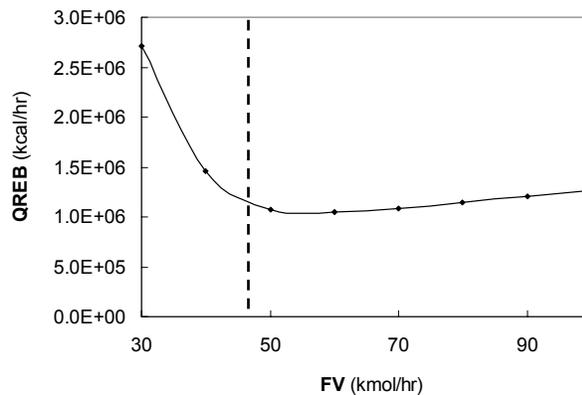
APÉNDICE A

FLUJOS DE INTERCONEXIÓN STAD Y STAI. LÍMITES

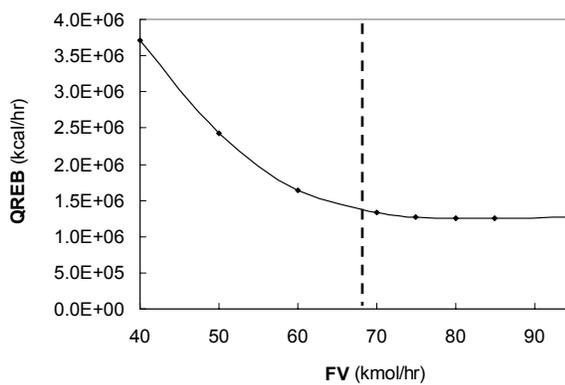
En éste apartado se muestra la introducción de límites para la búsqueda de valores óptimos de los flujos de interconexión para las 3 mezclas analizadas. Se tomaron las curvas de optimización reportadas por Ramírez-Corona (2002), con el respectivo ajuste de unidades y base de cálculo, debido a que en dicha referencia se utiliza el Sistema Inglés de medidas.

Primero se muestran las tendencias de la STAD y después las correspondientes a la STAI; la línea punteada representa el valor mínimo factible para la búsqueda de la variable de optimización. Existen algunos casos en donde dicha línea no aparece debido a que el valor determinado se encuentra fuera del rango de búsqueda, pero siempre del lado izquierdo.

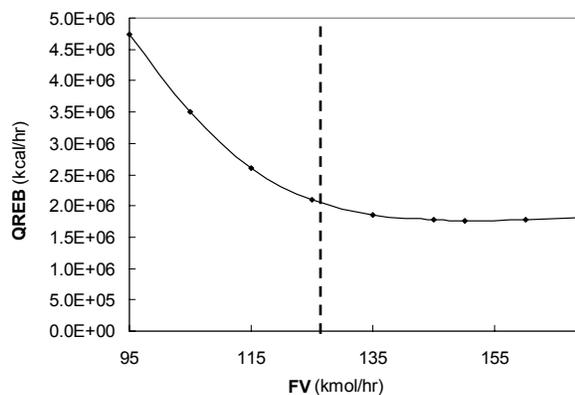
Es necesario aclarar que el rango de búsqueda de cada caso presentado fue elegido de manera intuitiva y tomando aquel primer valor con el que se logra convergencia del modelo en el simulador o que arroja un valor suficientemente razonable en cuanto a cargas térmicas al momento de ajustar las especificaciones de producto, esto da lugar a que en ocasiones se tenga un buen valor inicial pero en muchas otras no sea así, por lo cual tener un valor inicial factible desde la etapa previa a la optimización resulta bastante útil.



a) Alimentación 40/20/40

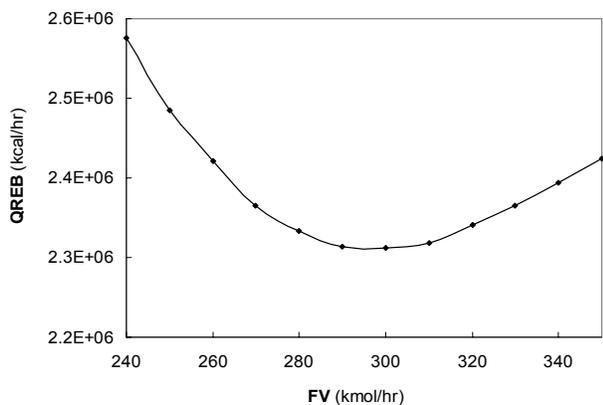


b) Alimentación equimolar

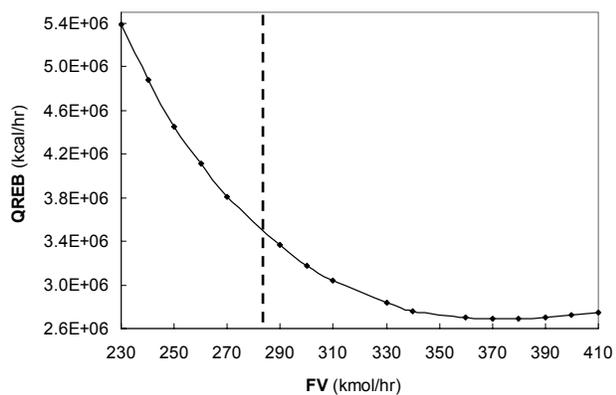


c) Alimentación 15/70/15

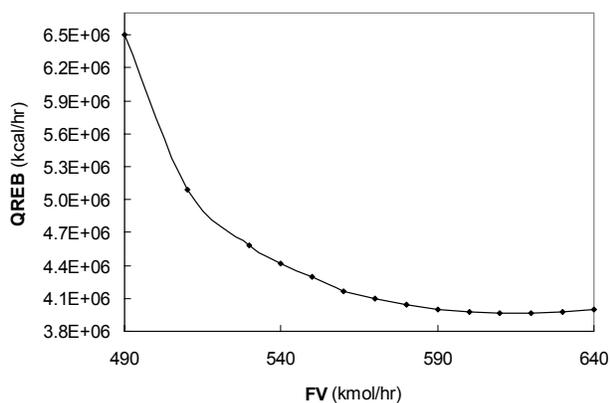
Figura B.1 Curvas de Optimización para la STAD, M1.



a) Alimentación 40/20/40

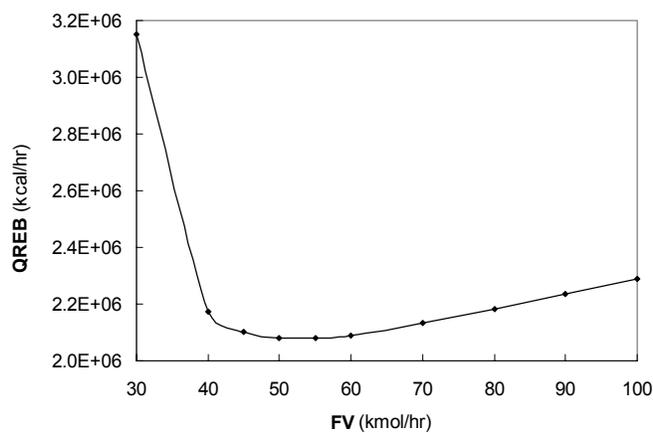


b) Alimentación equimolar

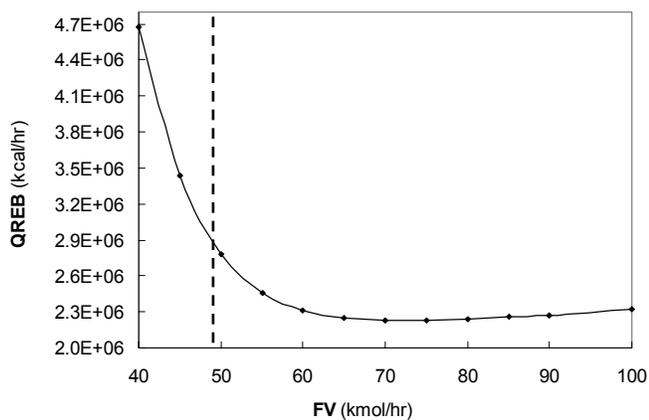


c) Alimentación 15/70/15

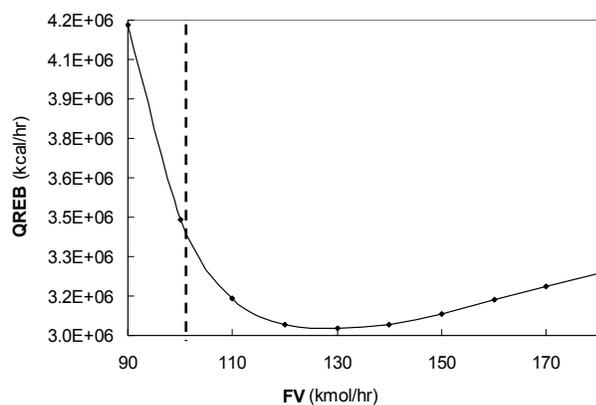
Figura B.2 Curvas de Optimización para la STAD, M2.



a) Alimentación 40/20/40

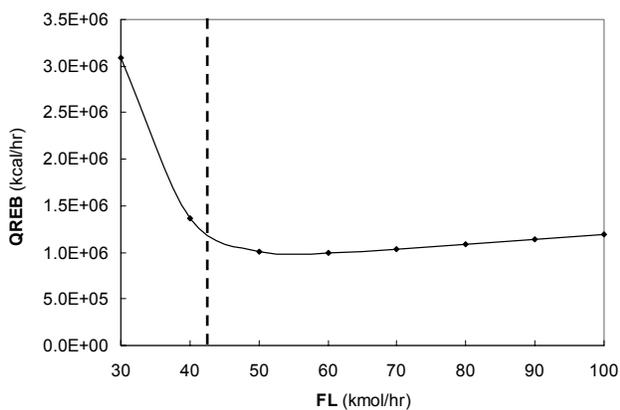


b) Alimentación equimolar

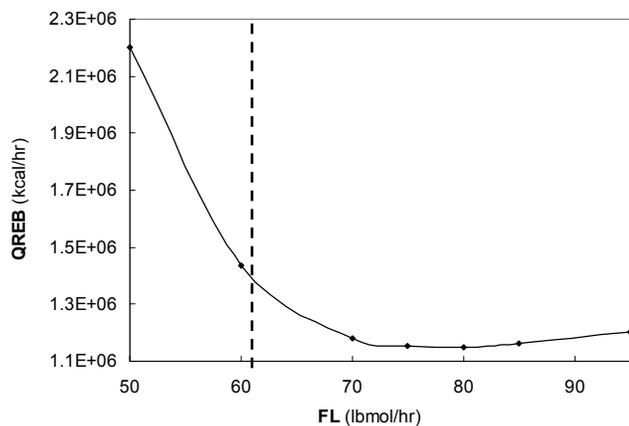


c) Alimentación 15/70/15

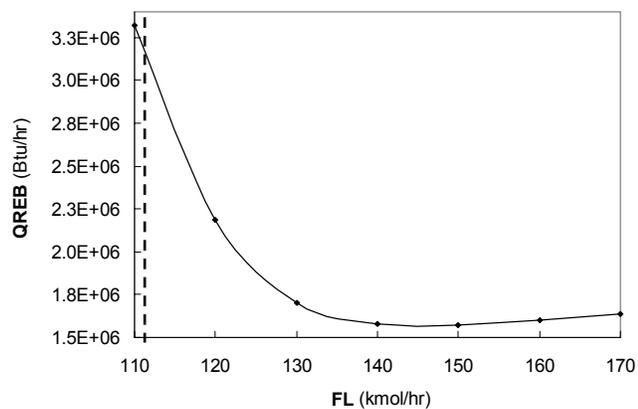
Figura B.3 Curvas de Optimización para la STAD, M3.



a) Alimentación 40/20/40

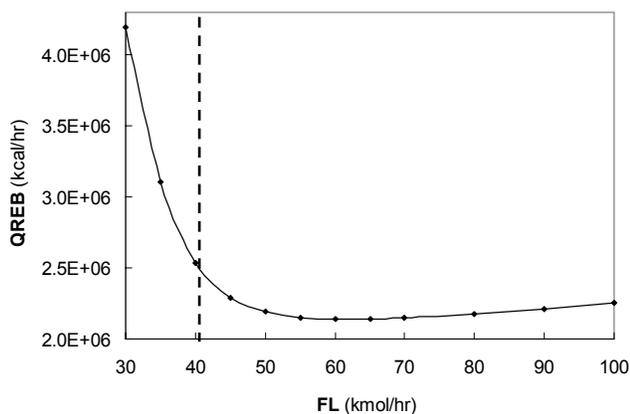


b) Alimentación equimolar

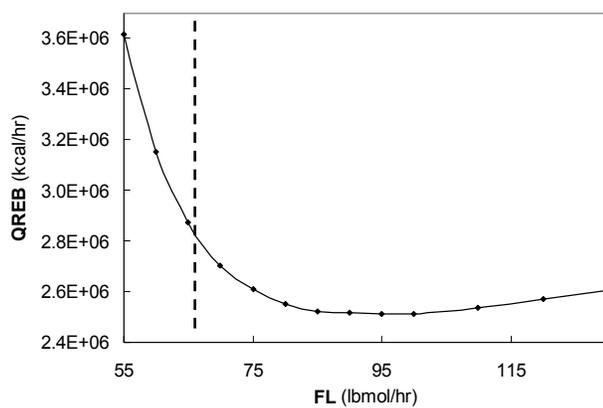


c) Alimentación 15/70/15

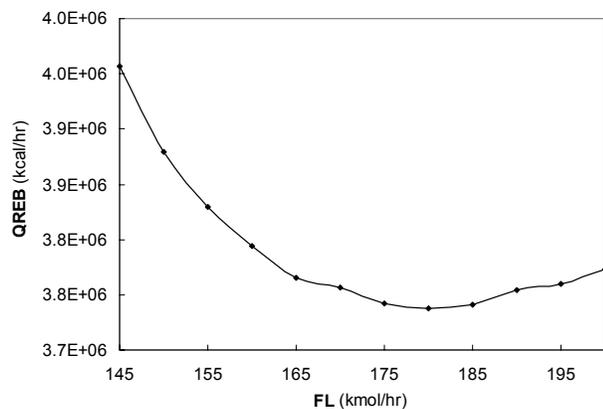
Figura B.4 Curvas de Optimización para la STAI, M1.



a) Alimentación 40/20/40

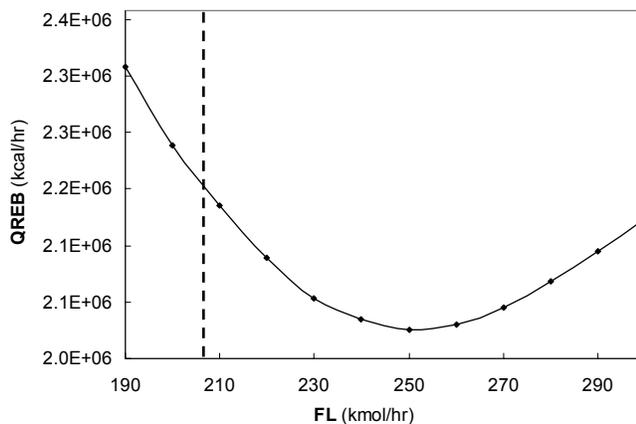


b) Alimentación equimolar

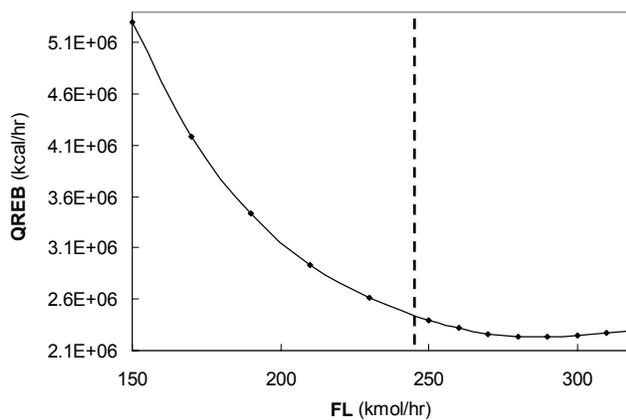


c) Alimentación 15/70/15

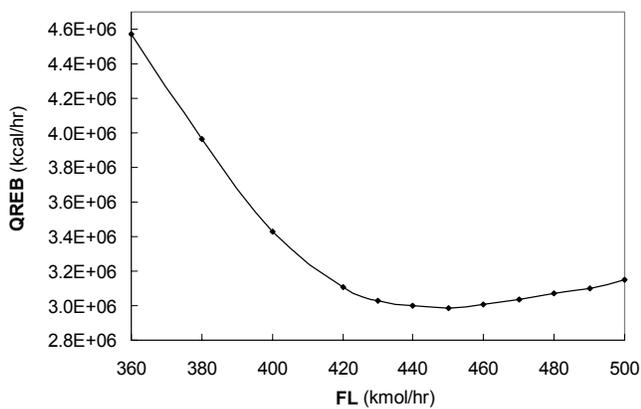
Figura B.5 Curvas de Optimización para la STAI, M2.



a) Alimentación 40/20/40



b) Alimentación equimolar



c) Alimentación 15/70/15

Figura B.6 Curvas de Optimización para la STAI, M3.

APÉNDICE C

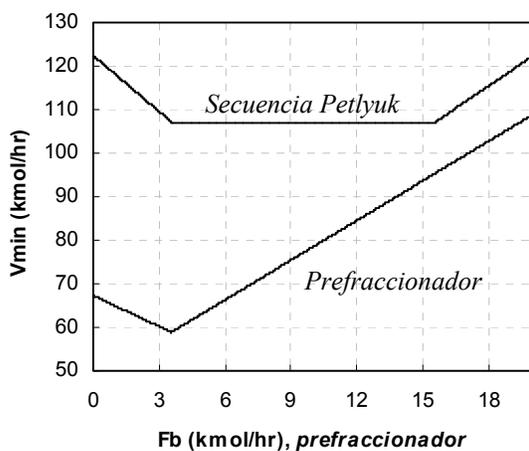
FLUJOS MÍNIMOS DE VAPOR

A continuación se presentan los diagramas de V_{min} de la secuencia Petlyuk/Kaibel, para las mezclas reportadas por Gutiérrez-Salado (2006). En la Tabla C.1 se listan las mezclas que se muestran en los diagramas.

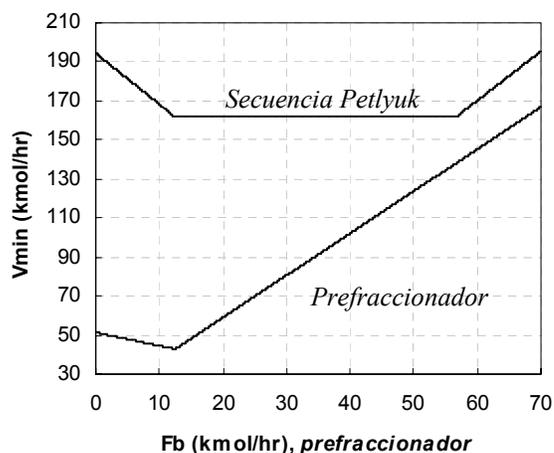
Tabla C.1. Banco de mezclas reportado por Gutiérrez-Salado (2006)

MEZCLA	COMPONENTES
M1-1	2-2dimetilpropano; 2-3dimetilbutano; 1-1dimetilciclopentano
M1-2	Isobutano; n-pentano; 2-3dimetilbutano
M1-3	2,2-dimetil-butano; 3-metil-hexeno; trans-2-hepteno
M1-4	3-metil-pentano; 3-metil-hexano; n-heptano
M1-5	n-hexano; 3-etil-pentano; n-heptano
M2-1	n-pentano; 3metil-pentano; 2,3-dimetil-pentano
M2-2	2,3-dimetil-butano; 2,2-dimetil-pentano; n-heptano
M2-3	n-hexano; 3-metil-hexeno; trans-2-hepteno
M2-4	3-metil-trans-2-penteno; 2,2-dimetil-pentano; 3,3-dimetil-pentano
M2-5	2,4-dimetil-pentano; 1,1-dimetil-ciclopentano; 3-etil-pentano
M3-1	2-metil-1-buteno; 4-metil-1-penteno; n-heptano
M3-2	n-pentano; 4-m-1-penteno; trans-3-hepteno
M3-3	n-pentano; 2,2-dimetil-butano; 1,1-dimetil-ciclopentano
M3-4	2,2-dimetil-butano; 2-metil-pentano; 3-etil-pentano
M3-5	3-metil-pentano; n-hexano; n-heptano

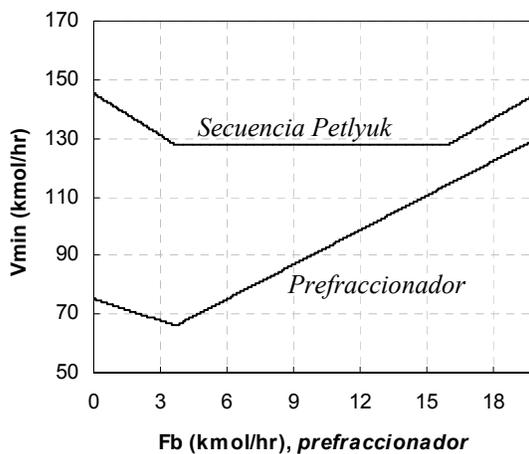
C.1 V_{min} DE LA SECUENCIA PETLYUK. MEZCLAS CON $ESI > 1$.



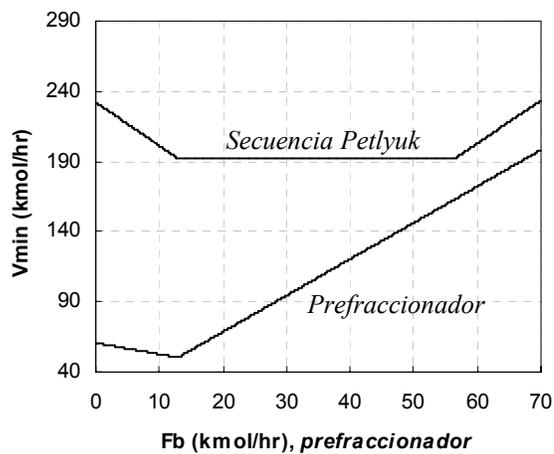
M1-1. Alimentación 40/20/40



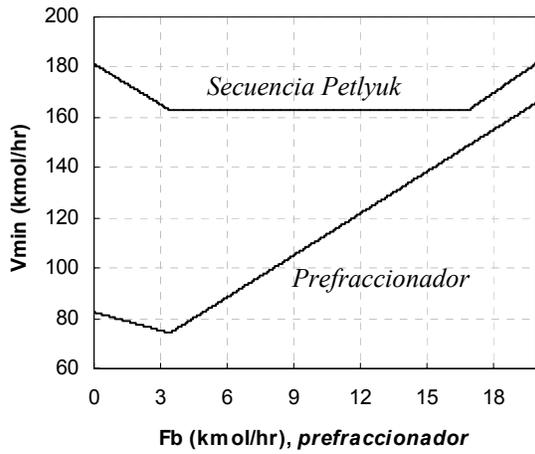
M1-1. Alimentación 15/70/15



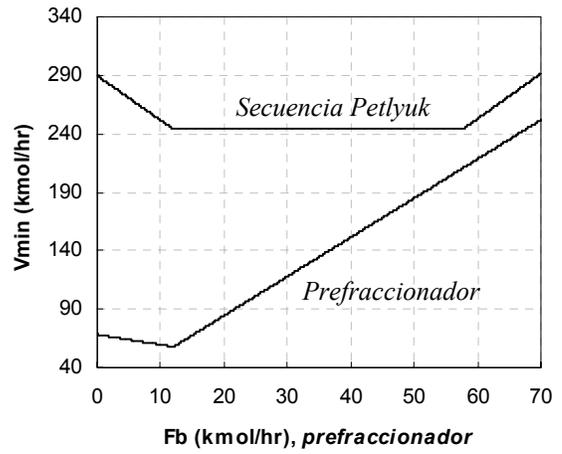
M1-2. Alimentación 40/20/40



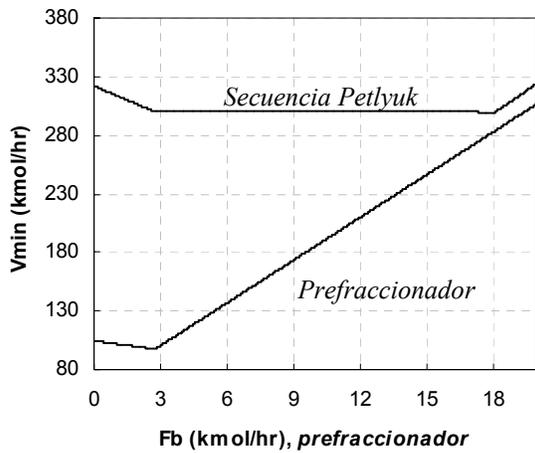
M1-2. Alimentación 15/70/15



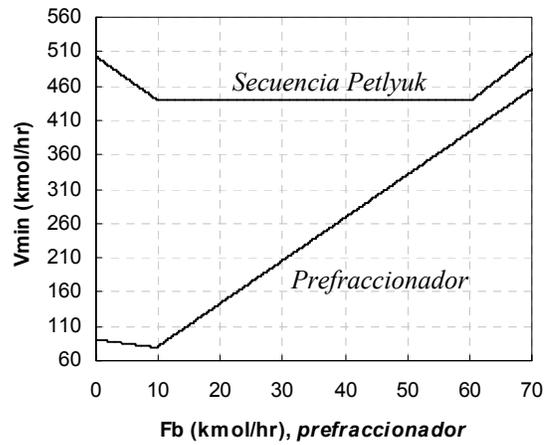
M1-3. Alimentación 40/20/40



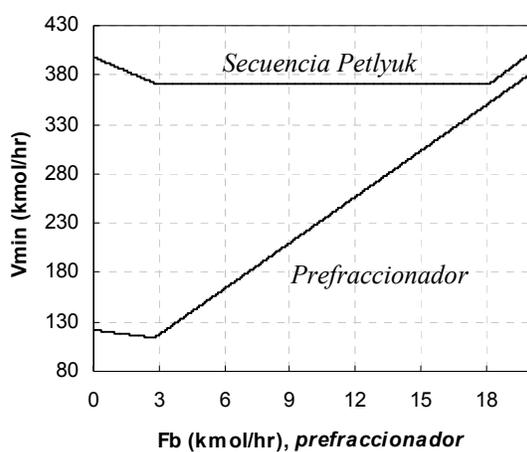
M1-3. Alimentación 15/70/15



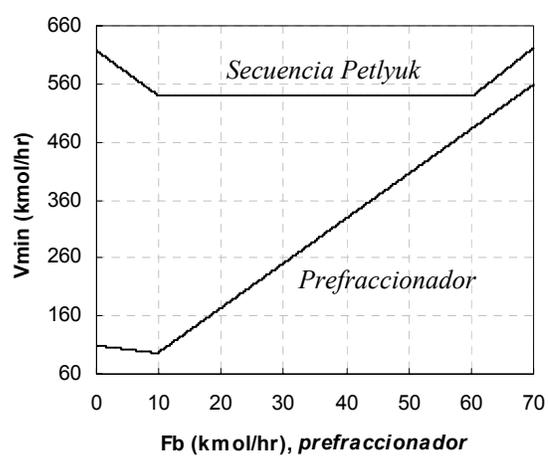
M1-4. Alimentación 40/20/40



M1-4. Alimentación 15/70/15

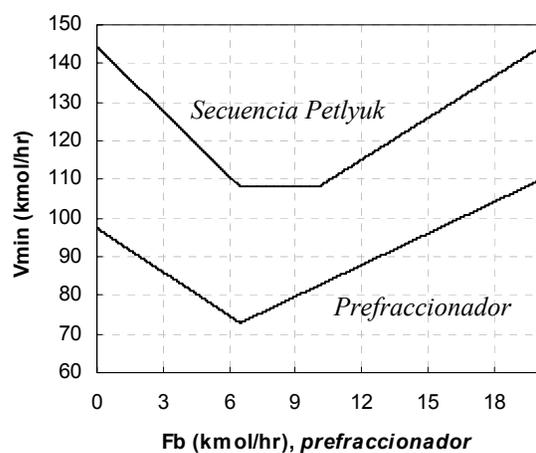


M1-5. Alimentación 40/20/40

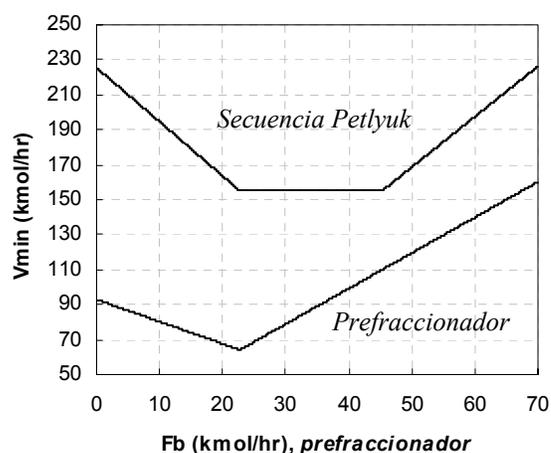


M1-5. Alimentación 15/70/15

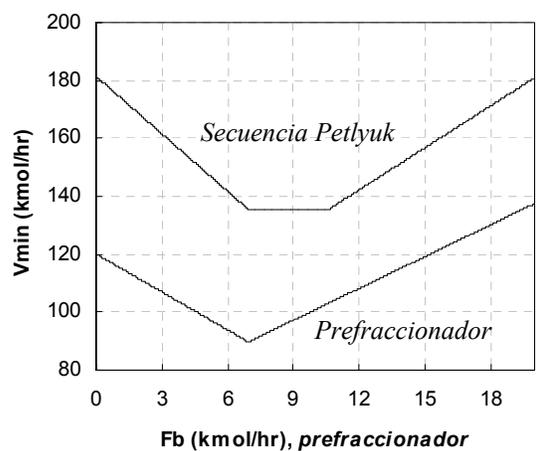
C.2 V_{min} DE LA SECUENCIA PETLYUK. MEZCLAS CON $ESI = 1$.



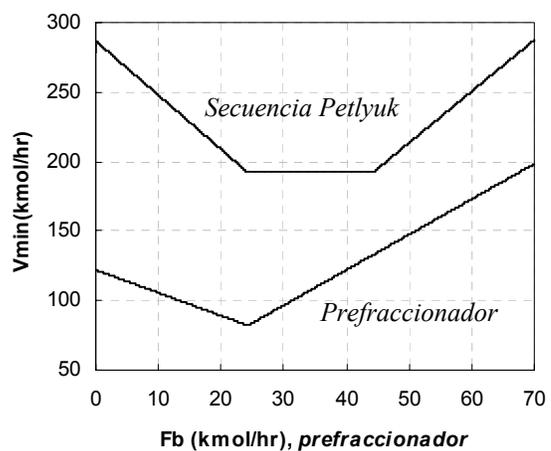
M2-1. Alimentación 40/20/40



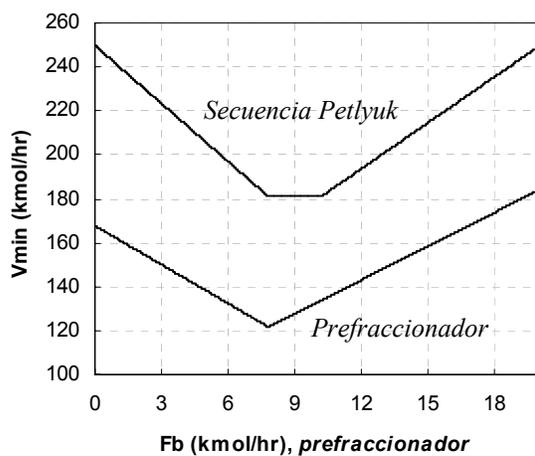
M2-1. Alimentación 15/70/15



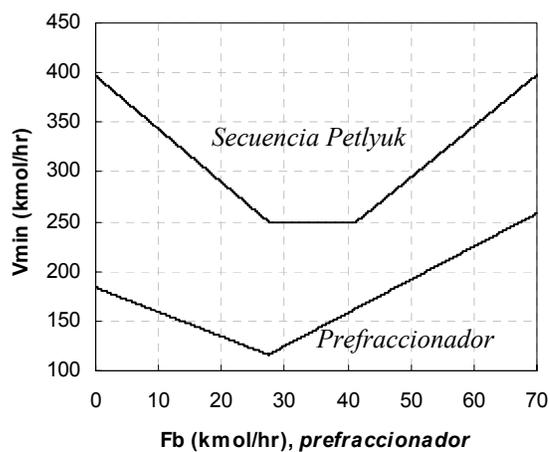
M2-2. Alimentación 40/20/40



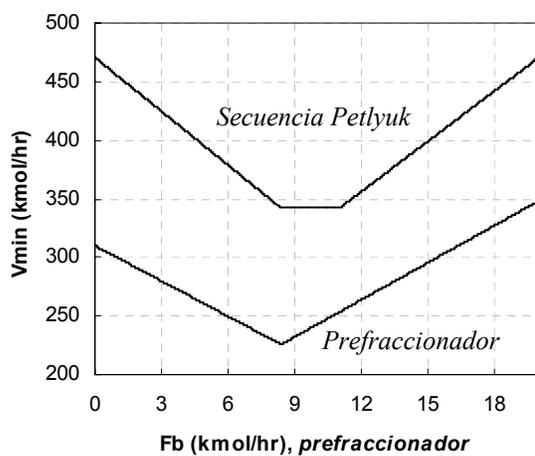
M2-2. Alimentación 15/70/15



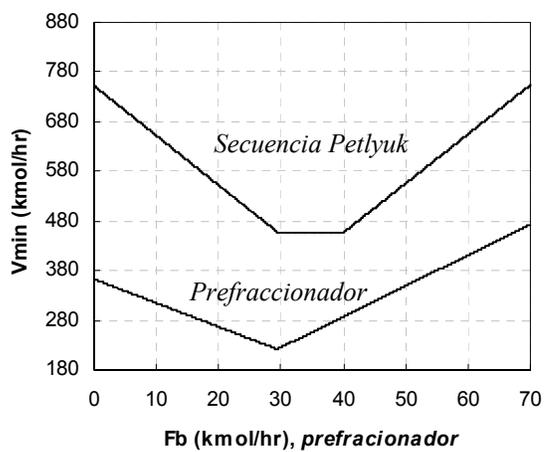
M2-3. Alimentación 40/20/40



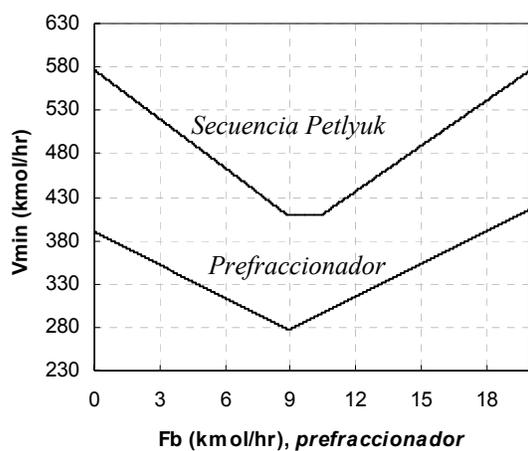
M2-3. Alimentación 15/70/15



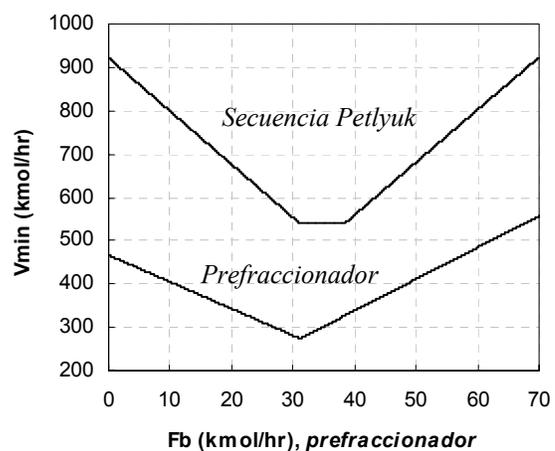
M2-4. Alimentación 40/20/40



M2-4. Alimentación 15/70/15

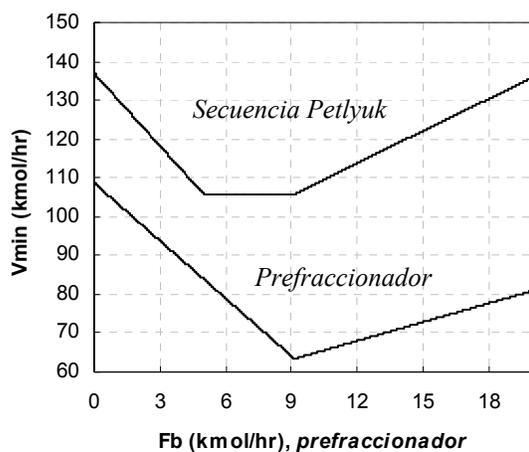


M2-5. Alimentación 40/20/40

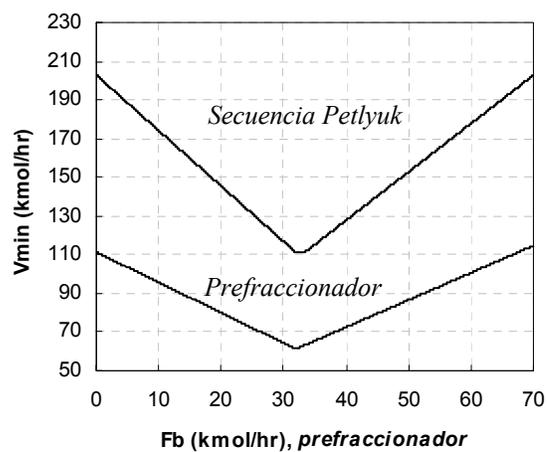


M2-5. Alimentación 15/70/15

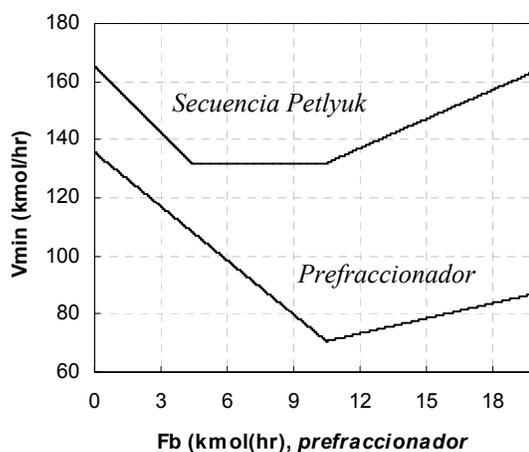
C.3 V_{min} DE LA SECUENCIA PETLYUK. MEZCLAS CON $ESI < 1$.



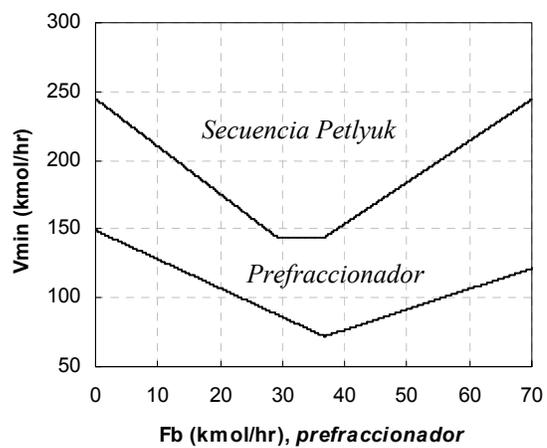
M3-1. Alimentación 40/20/40



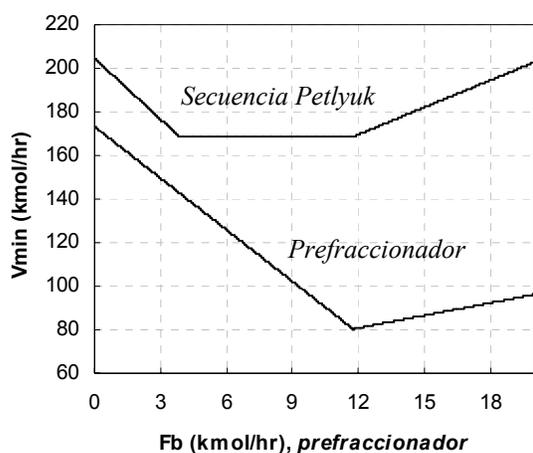
M3-1. Alimentación 15/70/15



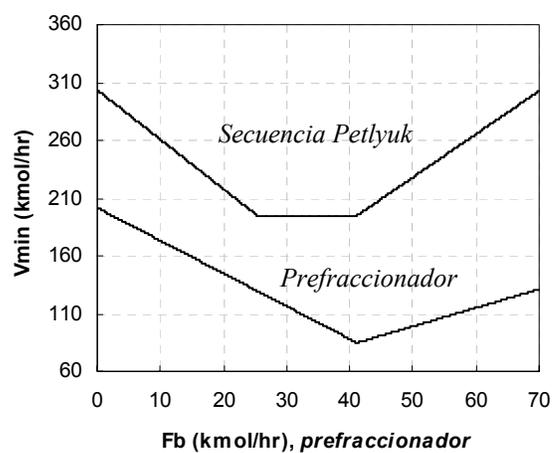
M3-2. Alimentación 40/20/40



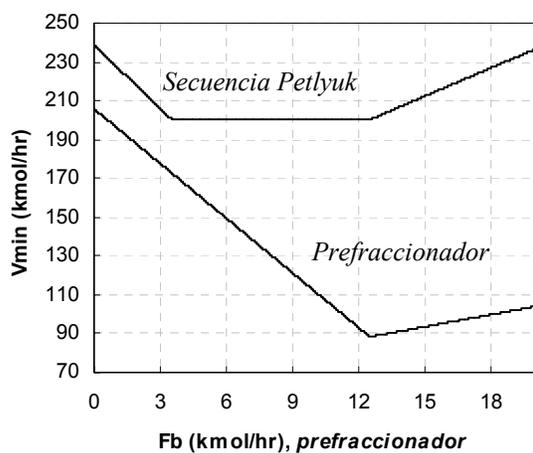
M3-2. Alimentación 15/70/15



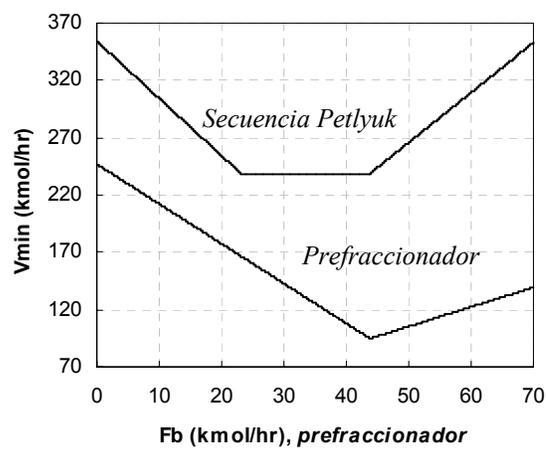
M3-3. Alimentación 40/20/40



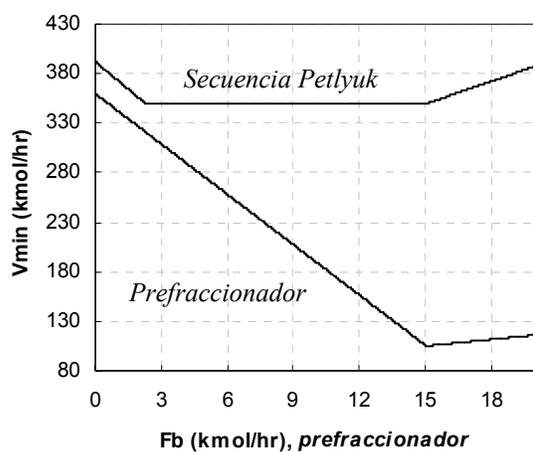
M3-3. Alimentación 15/70/15



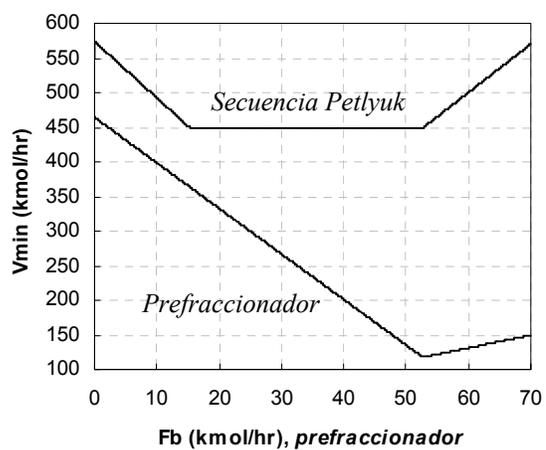
M3-4. Alimentación 40/20/40



M3-4. Alimentación 15/70/15



M3-5. Alimentación 40/20/40



M3-5. Alimentación 15/70/15