

# Optimización multi-objetivo del desempeño y consumo energético de procesos de destilación intensificados para sistemas cuaternarios

C.L. Salas-Aguilar, A. Bonilla-Petriciolet \* y J.E. Jaime-Leal

Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Aguascalientes, México, 20256

*Multi-objective optimization of performance and energy consumption of intensified distillation processes for quaternary systems*

*Optimització multiobjectiu de l'acompliment i del consum energètic de processos de destil·lació intensificats per a sistemes quaternaris*

RECEIVED: 31 OCTOBER 2017; REVISED: 24 NOVEMBER 2017; ACCEPTED: 25 NOVEMBER 2017

## SUMMARY

This paper reports the design and multi-objective optimization of conventional and intensified distillation sequences for the separation of quaternary mixtures. Three cases of study were used to show the advantages and limitations of a set of conventional, non-sharp and intensified distillation sequences via the simultaneous optimization of the composition of a key component and the energy required for its separation. Results showed that the performance of these distillation configurations may vary substantially if these two metrics are the conflicting design objectives. Direct conventional distillation sequence can offer the same performance or even outperform intensified distillation sequences in some cases of study. This paper highlights the relevance of performing a reliable design of multi-component separation sequences to establish their limitations and capabilities.

**Keywords:** Multi-objective optimization; distillation; intensified process; quaternary mixtures.

## RESUMEN

Este artículo presenta el diseño y optimización multi-objetivo de sistemas de destilación convencionales e intensificados para la separación de mezclas cuaternarias. Tres casos de estudio fueron utilizados para demostrar las ventajas y limitaciones de las configuraciones de

destilación convencionales, nonsharp e intensificadas en términos de la optimización simultánea de la composición de un compuesto clave y el consumo energético para su separación. Los resultados indican que el desempeño de estos esquemas de destilación puede variar sustancialmente cuando la pureza y eficiencia energética del proceso son los objetivos en conflicto. La secuencia convencional de destilación directa puede igualar o incluso mejorar el desempeño de algunos procesos intensificados en las mezclas analizadas. En este trabajo se resalta la importancia de realizar un diseño robusto de secuencias de separación multicomponente con la finalidad de evaluar sus ventajas y limitaciones.

**Palabras clave:** Optimización multi-objetivo; destilación; procesos intensificados; mezclas cuaternarias.

## RESUM

Aquest article presenta el disseny i la optimització multiobjectiu de sistemes de destil·lació convencionals i intensificats per a la separació de mescleres quaternaris. Tres casos d'estudi van ser utilitzats per demostrar els avantatges i les limitacions de les configuracions de destil·lació convencionals, nonsharp i intensificades en

\* Corresponding author: [petriciolet@hotmail.com](mailto:petriciolet@hotmail.com)

termes de l'optimització simultània de la composició d'un compost clau i el consum energètic per a la seva separació. Els resultats indiquen que l'acompliment d'aquests esquemes de destil·lació pot variar substancialment quan la puresa i la eficiència energètica del procés són els objectius en conflicte. La seqüència convencional de destil·lació directa pot igualar o fins i tot millorar l'acompliment d'alguns processos intensificats en les barreges analitzades. En aquest treball es ressalta la importància de realitzar un disseny robust de seqüències de separació multicomponent amb la finalitat d'avaluar els seus avantatges i limitacions.

**Paraules clau:** Optimització multi-objectiu, destil·lació, processos intensificats, mescles quaternàries.

## INTRODUCTION

Los problemas relacionados con el desarrollo sostenible han fomentado la búsqueda de soluciones para lograr un uso eficiente de la energía en el proceso de destilación <sup>1-3</sup>. A la fecha, se han propuesto esquemas de operación alternativos para el proceso de destilación que han sido orientados a la reducción del consumo energético y los costos de inversión <sup>4</sup>. Diversos autores han reportado procesos intensificados para generar ahorros energéticos <sup>2,5-8</sup>, los cuales incluyen a los sistemas térmicamente acoplados <sup>9,10</sup>, las columnas de pared divisoria con acoplamiento térmico <sup>3,11</sup>, los sistemas híbridos como la destilación reactiva <sup>12,13</sup>, entre otros <sup>14-16</sup>. El uso de procesos de destilación intensificados para sistemas multicomponente ha sido reconocido como una alternativa para reducir consumos energéticos y costos de operación <sup>15,16</sup>. Este tipo de esquemas puede ofrecer ventajas operativas en comparación con los sistemas de destilación convencionales. No obstante, la modelación y simulación de estos procesos intensificados se puede dificultar ya que no existen métodos de diseño para la determinación efectiva de los valores óptimos de los grados de libertad que permitan la mejor operación del esquema de separación.

Las operaciones de separación y purificación que involucran sistemas multifásicos y multicomponentes constituyen un desafío en términos de su modelación y diseño debido a su carácter no lineal y multivariable <sup>17</sup>. Esta etapa de diseño implica la resolución de problemas de optimización que se caracterizan por la presencia de uno o varios objetivos a optimizarse en forma simultánea y cuyas funciones objetivo pueden ser no convexas, sujetas a diversas restricciones y que involucran variables de diseño continuas y discretas <sup>18</sup>. Las tareas de modelación y diseño para los procesos intensificados son más complicadas en comparación a los procesos convencionales y pueden diferir considerablemente de un caso a otro <sup>19</sup>. Por tanto, métodos de optimización robustos son fundamentales para realizar el diseño de secuencias intensificadas de destilación. Es conveniente indicar que el uso herramientas de optimización para el diseño de procesos en Ingeniería Química se ha incrementado sustancialmente <sup>10,20-23</sup>.

El costo de separación en los procesos intensificados depende de las concentraciones de los productos, las cuales determinan la energía requerida en la separación. Ambos criterios de optimización son importantes para determinar la eficacia del proceso pues se requiere maximizar la pureza de las corrientes que contienen a los compuestos claves al menor costo posible. Estos objetivos se encuentran en conflicto y dependen de los diferentes grados de libertad del esquema de separación que sea utilizado. La identificación de los valores óptimos de los grados de libertad es un problema de optimización multi-objetivo y multivariable. A la fecha, pocos estudios han realizado la caracterización y comparación del desempeño de procesos intensificados para sistemas multicomponentes empleando diferentes objetivos en conflictos <sup>24</sup>. En particular, los resultados obtenidos en un estudio previo indicaron que el desempeño de separación de los sistemas intensificados es altamente dependiente de sus grados de libertad cuando se realiza un diseño considerando *múltiples objetivos en conflicto* <sup>24</sup>. También, se estableció que los esquemas de separación convencionales pueden ofrecer una mejor relación entre la pureza deseada para un componente clave y la energía requerida para la separación en contraste con un sistema intensificado si el diseño se realiza con una optimización multi-objetivo. Estos resultados sugieren que en sistemas multicomponente las diferencias de operación entre los esquemas de separación intensificados y convencionales sean aún más sustanciales considerando que sus grados de libertad varían significativamente.

En el presente trabajo se reporta el diseño y optimización multi-objetivo de esquemas de destilación convencionales e intensificados para la separación de sistemas cuaternarios. La optimización de estos procesos de destilación se ha realizado considerando como objetivos en conflicto al consumo energético y la pureza de la corriente donde se obtiene un compuesto clave empleando un método de optimización estocástico. Diversas mezclas han sido analizadas para caracterizar el desempeño de estos procesos de destilación con diferentes condiciones de operación y modelos termodinámicos. Los resultados obtenidos se utilizaron para realizar un comparativo detallado del desempeño de varios esquemas de destilación intensificados y, a su vez, se han establecido sus ventajas y limitaciones con respecto a configuraciones convencionales de destilación. Un comparativo de estas características no ha sido reportado en la literatura y las conclusiones obtenidas son relevantes para el área de intensificación de procesos de separación.

## METODOLOGÍA

### Casos de estudio seleccionados

Se han empleado tres mezclas cuaternarias como casos de estudio que incluyen hidrocarburos e isómeros. Estos casos de estudio son los siguientes:

Mezcla M1: n-pentano, n-hexano, n-heptano, n-octano. Alimentación: z(0.15, 0.35, 0.15, 0.35), F = 100 kmol/h, 1 atm y líquido saturado. Modelo termodinámico: Chao-Seader. <sup>11</sup>

Mezcla M2: i-butano, n-butano, n-pentano, i-hexano. Alimentación:  $z(0.4, 0.1, 0.1, 0.4)$ ,  $F = 100$  kmol/h, 1 atm y líquido saturado. Modelo termodinámico: Chao-Seader.<sup>17</sup>

Mezcla M3: n-butano, benceno, n-heptano, n-nonano. Alimentación:  $z(0.05, 0.1, 0.1, 0.75)$ ,  $F = 100$  kmol/h, 4.6 bar y líquido saturado. Modelo termodinámico: BK-10.<sup>25</sup>

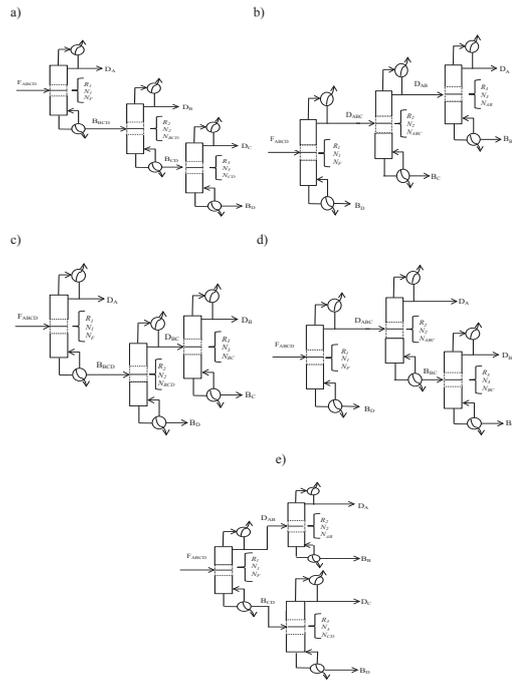
Este conjunto de mezclas se utilizó para el diseño de los sistemas intensificados de destilación y comparar sus capacidades y limitaciones con respecto a las secuencias convencionales. Se utilizaron las mismas condiciones de la alimentación y modelos reportados en las referencias ya indicadas<sup>11,17,25</sup>. Es conveniente mencionar que todos los sistemas estudiados no presentan azeotropía homogénea o heterogénea.

### Configuraciones de destilación utilizadas y comparadas en este estudio

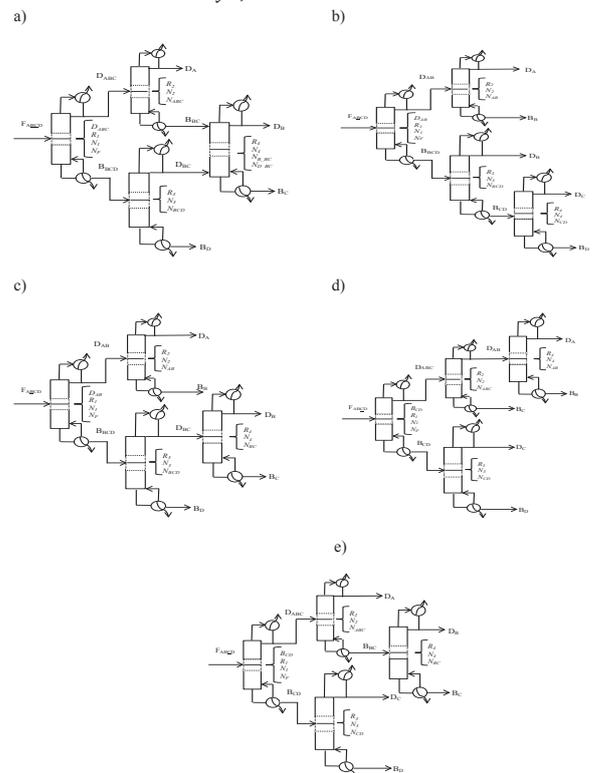
Trece diferentes secuencias de separación que incluyen secuencias convencionales, nonsharp (NS) e intensificadas fueron elegidas. Las estructuras de las secuencias de separación se muestran en las Figuras 1 – 3 donde se indican los parámetros de diseño y la nomenclatura usada en cada esquema de separación. Cinco de las secuencias de separación pertenecen a esquemas de separación convencionales, tres a secuencias del tipo nonsharp donde las secuencias NS\_DS, NS\_DS2 y NS\_DISS se utilizaron en la mezcla M2, mientras que las secuencias NS\_IDS, NS\_DS1 y NS\_DISS fueron analizadas con las mezclas M1 y M3. Cinco configuraciones intensificadas fueron obtenidas mediante el procedimiento propuesto por Rong<sup>14</sup> a partir de secuencias nonsharp. Este método se utiliza para la obtención de esquemas intensificados y se basa en una estrategia secuencial para el cambio de estructuras de sistemas de separación convencionales mediante la integración de calor y acoplamientos térmicos que permitan generar configuraciones termodinamicamente equivalentes<sup>14</sup>. Usualmente, el diseño de las secuencias intensificadas se realiza a prueba y error, con heurísticas o extrapolando los parámetros determinados para secuencias convencionales<sup>26,27</sup>. En este trabajo se ha utilizado una optimización multi-objetivo para establecer los mejores valores de los grados de libertad de las secuencias de destilación.

### Formulación del problema de optimización multi-objetivo para el diseño de las secuencias de destilación

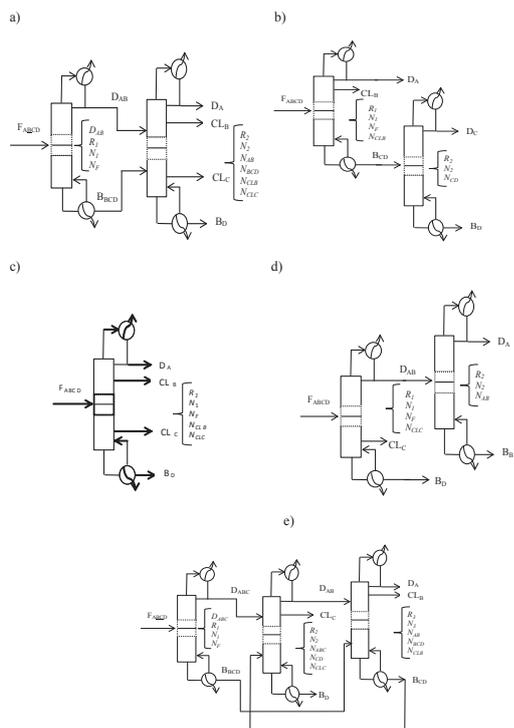
Las secuencias de destilación se simularon con Aspen Plus® 7.0 suponiendo un modelo de equilibrio para resolver el conjunto de ecuaciones de diseño (MESH) que describen al proceso. El diseño de las secuencias de separación se formuló como un problema de optimización multi-objetivo. El objetivo principal de cualquier secuencia de separación es mejorar la purificación de los componentes de interés utilizando los requerimientos de energía más bajos. Estas variables están en conflicto para el caso de secuencias de destilación y dependen de la selección de los valores para los grados de libertad del proceso.



**Figura 1** Variables de diseño de las secuencias de destilación convencionales para la separación de mezclas cuaternarias: a) Secuencia directa DS, b) Secuencia indirecta IS, c) Secuencia directa-indirecta DIS, d) Secuencia indirecta-directa IDS y e) Secuencia simétrica SS.



**Figura 2** Variables de diseño de las secuencias de destilación nonsharp para la separación de mezclas cuaternarias. Estas secuencias fueron obtenidas considerando a los arreglos para el corte ABCD, ABCD y ABCD: a) Secuencia directa-indirecta-simétrica NS\_DISS, b) Secuencia directa NS\_DS1, c) Secuencia directa-indirecta NS\_DIS, d) Secuencia indirecta-directa NS\_IDS y e) Secuencia directa NS\_DS2.



**Figura 3** Variables de diseño de las secuencias de destilación intensificadas para la separación de mezclas cuaternarias: a) Secuencia intensificada IS1, b) Secuencia intensificada IS3, c) Secuencia intensificada IS6, d) Secuencia intensificada IS9 y e) Secuencia intensificada IS12.

El diseño de los sistemas de destilación se realizó a través de la minimización del consumo de energía y la maximización simultánea de la pureza de un componente clave. Esta formulación implica una optimización con dos objetivos simultáneos. Los parámetros de diseño se utilizaron como variables de optimización para la obtención de los frentes de Pareto entre la composición del componente clave (es decir, más ligero)  $x_A$  en la corriente principal y el consumo de energía total en el proceso de separación  $Q$ . El consumo de energía total del sistema involucra las cargas térmicas de los rehervidores y condensadores de las columnas de destilación

$$Q = |Q_c| + |Q_h| \quad (1)$$

donde  $Q$  es la energía total del sistema,  $Q_c$  y  $Q_h$  son las cargas térmicas del condensador y rehervidor.

Las secuencias de separación analizadas tienen diferentes grados de libertad, los cuales definen al tipo de problema de optimización que debe resolverse. La dimensión del problema de optimización es diferente para cada secuencia de destilación y fue definido como:

Secuencia directa (DS) e indirecta (IS)

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, R_2, N_2, N_{BCD} \text{ o } N_{ABC}, R_3, N_3, N_{CD} \text{ o } N_{AB}) \quad (2)$$

Secuencia directa-indirecta (DIS) e indirecta-directa (IDS)

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, R_2, N_2, N_{BCD} \text{ o } N_{ABC}, R_3, N_3, N_{BC}) \quad (3)$$

Secuencia simétrica (SS)

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, R_2, N_2, N_{AB}, R_3, N_3, N_{CD}) \quad (4)$$

Secuencia nonsharp directa-indirecta simétrica (NS\_DISS):

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, D_{ABC}, R_2, N_2, N_{ABC}, R_3, N_3, N_{BCD}, R_4, N_4, N_{B_{BC}}, N_{D_{BC}}) \quad (5)$$

Secuencia nonsharp directa (NS\_DS1) y directa-indirecta (NS\_DIS):

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, D_{ABC}, R_2, N_2, N_{AB}, R_3, N_3, N_{BCD}, R_4, N_4, N_{CD} \text{ o } N_{BC}) \quad (6)$$

Secuencia nonsharp indirecta-directa (NS\_IDS) y directa (NS\_DS2):

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, B_{CD}, R_2, N_2, N_{ABC}, R_3, N_3, N_{CD}, R_4, N_4, N_{AB} \text{ o } N_{BC}) \quad (7)$$

Secuencia intensificada 1 (IS1):

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, D_{AB}, R_2, N_2, N_{AB}, N_{BCD}, N_{CLB}, N_{CLC}) \quad (8)$$

Secuencia intensificada 3 (IS3):

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, N_{CLB}, R_2, N_2, N_{CD}) \quad (9)$$

Secuencia intensificada 6 (IS6):

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, N_{CLB}, N_{CLC}) \quad (10)$$

Secuencia intensificada 9 (IS9):

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, N_{CLC}, R_2, N_2, N_{AB}) \quad (11)$$

Secuencia intensificada 12 (IS12):

$$\min Q \text{ y } \max x_A = f(R_1, N_1, N_F, D_{ABC}, R_2, N_2, N_{ABC}, N_{CD}, N_{CLC}, R_3, N_3, N_{AB}, N_{BCD}) \quad (12)$$

donde  $D_{ABC}$  y  $B_{CD}$  son flujos de destilado y fondos de la primer columna que contiene los compuestos A, B, C y D.  $N_{B_{BC}}$ ,  $N_{D_{BC}}$ ,  $N_{ABC}$ ,  $N_{AB}$ ,  $N_{BCD}$ ,  $N_{BC}$ ,  $N_{CD}$ ,  $N_{CLB}$  y  $N_{CLC}$  son las ubicaciones para las etapas de interconexión de los flujos de separadores anteriores y la ubicación de las salidas laterales de los componentes intermedios B y C. Las condiciones de operación de las secuencias de destilación se muestran en las Tablas 1 – 3. Los flujos de las salidas laterales de las columnas intensificadas se consideraron como fase líquida para fines de diseño y modelación. Para el balance de materia se consideró que la mezcla podía separarse en sus compuestos puros y esta condición se utilizó para definir los flujos de productos. Bajo esta perspectiva, la maximización de la composición del compuesto clave implica también la optimización de su recuperación. Por tanto, el análisis de datos y la discusión de resultados se centraron en la composición de las corrientes de los productos.

Los problemas de optimización presentan variables continuas y discretas. La presencia de variables discretas tiene incidencia en la complejidad del problema de optimización por generar discontinuidades en las funciones objetivo. Para reducir el número de variables de diseño discretas se emplearon las siguientes relaciones que permiten el manejo de las

etapas de alimentación en las secuencias directas, indirectas y nonsharp como variables continuas:  $N_{ABC} = \beta_{ABC} \times N_1$ ,  $N_{BCD} = \beta_{BCD} \times N_1$ ,  $N_{AB} = \beta_{AB} \times N_1$ ,  $N_{BC} = \beta_{BC} \times N_1$  y  $N_{CD} = \beta_{CD} \times N_1$  donde  $\beta \in (0, 1)$ . Para el caso de la secuencia NS\_DISS se utilizaron las siguientes relaciones:  $N_{B,BC} = \beta_{B,BC} \times (0.5N_4)$  y  $N_{D,BC} = N_{B,BC} + (0.5N_4)$ . Un enfoque similar fue utilizado para el manejo de otros parámetros de diseño que son variables discretas.

En cuanto a las interconexiones y ubicación de las salidas laterales de las secuencias intensificadas, estas variables fueron definidas para la secuencia IS1 como:  $N_{CLB} = \beta_{CLB} \times N_2$ ,  $N_{AB} = \beta_{D-I} \times N_{CLB}$ ,  $N_{BCD} = N_{CLB} + \beta_{B-I} (N_2 - N_{CLB})$  y  $N_{CLC} = N_{BCD} + \beta_{CLC} \times (N_2 - N_{BCD})$ . En las secuencias IS3, IS6 e IS9, la etapa de salida del primero destilador y la interconexión de entrada al segundo destilador están dadas por:  $N_{CLB} = \beta_{CLB} \times N_1$ ,  $N_{BCD} = \beta_{B-I} \times N_2$ ,  $N_{CLC} = N_F + \beta_{CLC} \times (N_1 - N_F)$  y  $N_{AB} = \beta_{D-I} \times N_2$ . Las interconexiones de entrada a la segunda columna y la ubicación de la salida lateral en el segundo destilador en la secuencia IS12 fueron definidas como:  $N_{CLC} = \beta_{CLC} \times N_2$ ,  $N_{ABC} = \beta_{D-I} \times N_{CLB}$  y  $N_{CD} = N_{CLC} + \beta_{B-III} (N_2 - N_{CLC})$ . Para el tercer destilador se utilizaron las relaciones:  $N_{CLB} = \beta_{CLB} \times N_3$ ,  $N_{AB} = \beta_{D-II} \times N_{CLB}$  y  $N_{BCD} = N_{CLB} + \beta_{B-I} (N_3 - N_{CLB})$ . Para el caso del flujo de las corrientes  $D_{ABC}$ ,  $D_{AB}$  y  $B_{CD}$  en las secuencias nonsharp, estas variables de diseño se manejaron como:  $D_{ABC} = F_A + \beta_{FBI} \times F_B + \beta_{FCI} \times F_C$ ,  $D_{AB} = F_A + \beta_{FB2} \times F_B$  y  $B_{CD} = F_D + \beta_{FC2} \times F_C$ . En las secuencias intensificadas IS1 e IS12, estos grados de libertad se manipularon con las siguientes expresiones:  $D_{AB} = F_A + \beta_{FBI} \times F_B$  y  $D_{ABC} = F_A + \beta_{FBI} \times F_B + \beta_{FCI} \times F_C$  donde  $\beta_{FBI}$ ,  $\beta_{FB2}$ ,  $\beta_{FCI}$  y  $\beta_{FC2} \in (0, 1)$ ,  $F_A$ ,  $F_B$  y  $F_C$  son los flujos de alimentación de A, B y C. Los límites de las variables de decisión utilizados para resolver el problema de diseño multi-objetivo fueron:  $\beta_{AB}$ ,  $\beta_{ABC}$ ,  $\beta_{BC}$ ,  $\beta_{BCD}$ ,  $\beta_{CD}$ ,  $\beta_{B,BC}$ ,  $\beta_{D,BC}$ ,  $\beta_{CLB}$ ,  $\beta_{CLC}$ ,  $\beta_{D-II}$  y  $\beta_{B-III} \in (0.2, 0.8)$ ,  $\beta_{FBI} \in (0.6, 0.9)$ ,  $\beta_{FCI} \in (0.1, 0.4)$ ,  $\beta_{FB2}$  y  $\beta_{FC2} \in (0.1, 0.9)$  y  $N_4 \in (3, 50)$ .

**Tabla 1** Parámetros de operación seleccionados para el diseño de las secuencias de destilación convencionales en sistemas cuaternarios.

Mezcla	Parámetro	Secuencia Convencional				
		DS	IS	DIS	IDS	SS
M1	$F_{ABCD}$ , kmol/h	100	100	100	100	100
	$D_{AB}$ , kmol/h	-	-	-	-	50
	$D_A$ , kmol/h	15	15	15	15	15
	$D_B$ , kmol/h	35	-	35	35	-
	$B_C$ , kmol/h	-	15	-	-	-
	$B_D$ , kmol/h	35	35	35	35	35
	$P$ , atm	1	1	1	1	1
M2	$F_{ABCD}$ , kmol/h	100	100	100	100	100
	$D_{AB}$ , kmol/h	-	-	-	-	50
	$D_A$ , kmol/h	40	40	40	40	40
	$D_B$ , kmol/h	10	-	10	10	-
	$B_C$ , kmol/h	-	10	-	-	-
	$B_D$ , kmol/h	40	40	40	40	40
	$P$ , atm	1	1	1	1	1
M3	$F_{ABCD}$ , kmol/h	100	100	100	100	100
	$D_{AB}$ , kmol/h	-	-	-	-	15
	$D_A$ , kmol/h	5	5	5	5	5
	$D_B$ , kmol/h	10	-	10	10	-
	$B_C$ , kmol/h	-	15	-	-	-
	$B_D$ , kmol/h	75	75	75	75	75
	$P$ , atm	4.5	4.5	4.5	4.5	4.5

**Tabla 2** Parámetros de operación seleccionados para el diseño de las secuencias de destilación nonsharp en sistemas cuaternarios.

Mezcla	Parámetro	Secuencia Nonsharp				
		NS_DISS	NS_DS1	NS_DIS	NS_DS2	NS_IDS
M1	$F_{ABCD}$ , kmol/h	100	100	-	-	100
	$D_{AB}$ , kmol/h	-	-	-	-	50
	$B_{CD}$ , kmol/h	-	50	-	-	-
	$D_A$ , kmol/h	15	15	-	-	15
	$D_B$ , kmol/h	35	-	-	-	-
	$B_D$ , kmol/h	35	35	-	-	35
	$P$ , atm	1	1	-	-	1
M2	$F_{ABCD}$ , kmol/h	100	-	100	100	-
	$D_{AB}$ , kmol/h	-	-	-	-	-
	$D_A$ , kmol/h	40	-	40	40	-
	$D_B$ , kmol/h	10	-	-	10	-
	$B_C$ , kmol/h	-	-	10	-	-
	$B_D$ , kmol/h	40	-	40	40	-
	$P$ , atm	1	-	1	1	-
M3	$F_{ABCD}$ , kmol/h	100	100	-	-	100
	$D_{AB}$ , kmol/h	-	-	-	-	15
	$B_{CD}$ , kmol/h	-	85	-	-	-
	$D_A$ , kmol/h	5	5	-	-	5
	$D_B$ , kmol/h	10	-	-	-	-
	$B_D$ , kmol/h	75	75	-	-	75
	$P$ , atm	4.5	4.5	-	-	4.5

**Tabla 3** Parámetros de operación seleccionados para el diseño de las secuencias de destilación intensificadas para sistemas cuaternarios.

Mezcla	Parámetro	Secuencia Intensificada				
		IS1	IS3	IS6	IS9	IS12
M1	$F_{ABCD}$ , kmol/h	100	100	100	100	100
	$D_{AB}$ , kmol/h	15	15	15	15	15
	$CL_B$ , kmol/h	35	35	35	-	35
	$CL_C$ , kmol/h	15	-	15	15	15
	$B_D$ , kmol/h	-	35	-	35	35
	$P$ , atm	1	1	1	1	1
	M2	$F_{ABCD}$ , kmol/h	100	100	100	100
$D_{AB}$ , kmol/h		40	40	40	40	40
$CL_B$ , kmol/h		10	10	10	-	10
$CL_C$ , kmol/h		10	-	10	10	10
$B_D$ , kmol/h		-	40	-	40	40
$P$ , atm		1	1	1	1	1
M3		$F_{ABCD}$ , kmol/h	100	100	100	100
	$D_{AB}$ , kmol/h	5	5	5	5	5
	$CL_B$ , kmol/h	10	10	10	-	10
	$CL_C$ , kmol/h	10	-	10	10	10
	$B_D$ , kmol/h	-	75	-	75	75
	$P$ , atm	4.5	4.5	4.5	4.5	4.5

### Método de optimización multi-objetivo utilizado en el diseño de las secuencias de destilación

Para el diseño de las secuencias de separación se utilizó un método de optimización multi-objetivo del tipo estocástico. Los métodos de optimización multi-objetivo son confiables para resolver problemas de diseño con diferentes variables y funciones objetivo<sup>18</sup>. Uno de los algoritmos más utilizado en la optimización multi-objetivo de procesos es el método de evolución diferencial (DE)<sup>28-31</sup>. Este método ha sido usado para resolver problemas de optimización con variables de decisión continuas y cuya estrategia de búsqueda está inspirada en los procesos de evolución biológica<sup>32,33</sup>. El método DE involucra cuatro etapas básicas: la inicialización de la población, su mutación,

cruzamiento y selección en cada iteración<sup>33</sup>. Una iteración de este algoritmo comprende la manipulación de los individuos incluidos en la población (es decir, soluciones) de una generación para obtener nuevos individuos (es decir, nuevas soluciones). El desempeño numérico de este método ha sido mejorado mediante una modificación del algoritmo que evita la revisión del espacio de búsqueda al mantener un registro de los puntos visitados recientemente. Esta modificación se basa en la incorporación de algunos conceptos de la metaheurística de búsqueda tabú en el método DE<sup>32</sup>. Este método de optimización se conoce como evolución diferencial con lista tabú (DETL). La adaptación del método DETL para resolver problemas con objetivos múltiples requiere una modificación en el paso de selección y la manipulación de las soluciones de cada generación<sup>34</sup>. Este algoritmo de optimización multi-objetivo se conoce como MODE-TL y fue desarrollado por Sharma y Rangaiyah<sup>35</sup>. Este método híbrido es capaz de resolver problemas de diseño de procesos complejos que involucran funciones objetivo de caja negra, multivariables y con la presencia de restricciones<sup>28,35-37</sup>. Para el diseño robusto de las secuencias de destilación se utilizó el método de optimización MODE-TL en este estudio. Este método fue usado para determinar los frentes de Pareto entre la eficacia de la separación y el consumo de energía de las diferentes configuraciones de destilación. Este algoritmo se encuentra programado en Excel 2007® y vinculado con Aspen Plus® para el diseño de los procesos de destilación. Los parámetros del algoritmo utilizados en este estudio para este método multi-objetivo fueron: tamaño de población (NP) = 100 individuos, una lista tabú (TL) del 50 % de todos los individuos (TL = 50), un radio tabú de  $Tr = 0.001$ , un máximo número de generaciones  $G_{max} = 200$  y una probabilidad de cruce (Cr) y mutación (Mut) de 0.9 y 0.8. Estos parámetros fueron determinados usando los resultados obtenidos en cálculos preliminares. Los resultados de la optimización multi-objetivo fueron usados para identificar la dependencia entre los atributos en conflicto, establecer el impacto de las variables de diseño en el desempeño de cada sistema de separación y para realizar la comparación entre los diferentes esquemas de separación estudiados.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

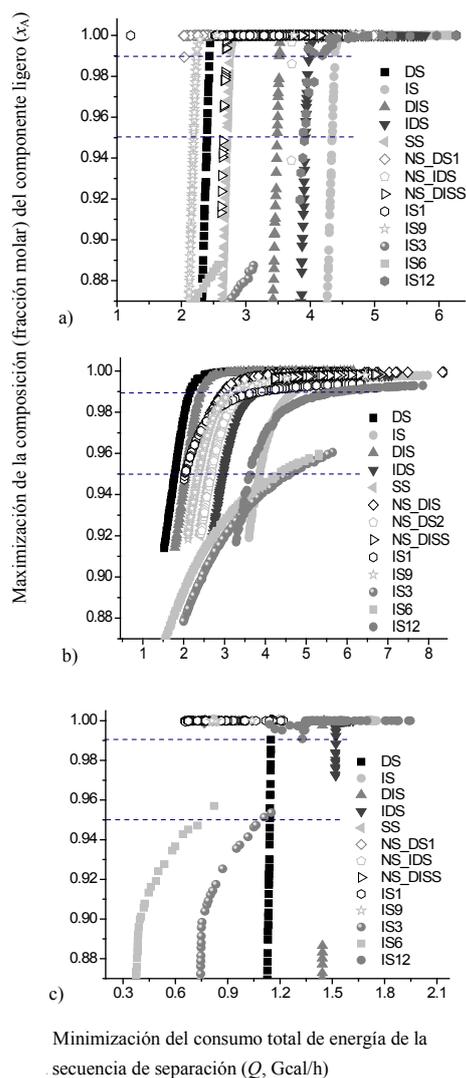
Los frentes de Pareto obtenidos para la composición del componente más ligero ( $x_A$ ) en la corriente principal con respecto al consumo total de energía (Q) de todas las secuencias de separación y las mezclas M1 – M3 se presentan en la Figura 4. En esta figura solamente se muestra la región de composición  $x_A > 0.9$ , la cual ha sido seleccionada para el análisis de todos los esquemas de separación. Estos diagramas son útiles para caracterizar y comparar las configuraciones de destilación en términos de su eficacia de separación para el compuesto más ligero  $x_A$  y sus correspondientes requerimientos energéticos. También, se puede identificar la región operativa donde una

configuración de destilación alcanza la mayor pureza del compuesto clave y establecer los parámetros de diseño correspondientes para alcanzar dicha separación incluyendo su consumo de energía. En general, la relación  $x_A - Q$  de las configuraciones de destilación depende de las características termodinámicas de la mezcla bajo análisis. Sin embargo, se pueden identificar algunas tendencias. Por ejemplo, la secuencia indirecta IS mostró el mayor consumo energético para lograr una composición dada de  $x_A$  en la mayor parte de las mezclas, mientras que las secuencias SS, DIS e IDS ofrecen un comportamiento de separación intermedio dependiendo de las especificaciones deseadas para la composición del producto A. La secuencia directa DS puede competir con los sistemas intensificados y, en la mezcla M2, mostró un menor consumo energético Q para una composición dada del componente ligero  $x_A$ . En el caso de las secuencias de destilación nonsharp, la configuración con arreglo  $\overline{A}BCD$  (NS\_DS1) presentó el mejor desempeño para la separación de las mezclas M1 y M3, seguida de la configuración  $\overline{A}BCD$  (NS\_DISS) y, por último, la configuración  $\overline{A}BCD$  (NS\_IDS). Para la mezcla M2, la mejor configuración nonsharp fue  $\overline{A}BCD$  (NS\_DS2), seguida por las configuraciones  $\overline{A}BCD$  (NS\_DIS) y  $\overline{A}BCD$  (NS\_DISS).

Para el caso de las configuraciones intensificadas, las secuencias IS1 e IS9 presentan comportamientos similares para composiciones  $x_A > 0.99$  en la mezcla M1, ver Figura 4a. No obstante, para la región donde la pureza varía entre el 90 y 99 %, ligeros cambios en la energía suministrada al proceso ocasionan cambios drásticos en la composición del componente ligero  $x_A$  en la secuencia IS9. Las secuencias IS3 e IS6 alcanzan purezas del componente ligero del 89 %. En este sistema, la secuencia IS12 presentó el mayor consumo energético para el mismo rango de composiciones del componente ligero  $x_A$  en contraste con los otros sistemas intensificados. La Figura 4b muestra que las secuencias intensificadas IS3 e IS6 tienen el peor desempeño en términos de la relación  $x_A - Q$  en comparación con las secuencias convencionales y nonsharp para la mezcla M2. Las secuencias IS1 e IS9 presentaron comportamientos similares a las secuencias nonsharp en términos de pureza y energía requerida para la separación. En el caso de la mezcla M3, la secuencia IS12 presenta un consumo energético intermedio comparado con los otros sistemas de destilación, ver Figura 4c. Las configuraciones intensificadas, IS1 e IS9 presentan comportamientos similares para  $x_A > 0.99$  mientras que las secuencias IS3 e IS6 presentan el peor desempeño en dicha región en comparación con todas las configuraciones analizadas.

La secuencia con el mejor desempeño para la separación de la mezcla M1 es la secuencia intensificada IS1 seguida de las secuencias NS\_DS1, IS9, DS, SS y NS\_DISS, las cuales tienen consumos energéticos de 1.21, 2.03, 2.05, 2.14, 2.59 y 2.61 Gcal/h, respectivamente, para obtener una composición de  $x_A = 0.99$ . Para la mezcla M2, la secuencia directa DS es mejor que las secuencias DIS, IS1, NS\_DIS, SS, IS9, IDS, IS y las peores secuencias son IS6 e IS3, ver Figura 4b. La

energía requerida en estas secuencias son 1.7, 1.9, 1.91, 2.4, 2.5, 2.52, 2.9, 3.8, 5.4 y 5.6 Gcal/h para alcanzar una pureza del componente más ligero del 95% donde las secuencias IS3 e IS6 no consiguen purezas por encima del 96%. Para  $x_A > 0.95$ , la secuencia DS es la mejor opción en la mezcla M2. En cuanto a la mezcla M3, la secuencia con el mejor desempeño es IS1 para  $x_A > 0.99$ , la cual es superior a las configuraciones NS\_DS1, DS, NS\_DISS, SS e IS12, ver Figura 4c. El consumo energético de estas configuraciones es 0.72, 0.76, 1.05, 1.16, 1.17 y 1.30 Gcal/h para alcanzar una pureza del 99%. Las secuencias IS3 e IS6 no alcanzan purezas por encima del 96%.



**Figura 4** Frentes de Pareto para la separación de las mezclas cuaternarias en las secuencias convencionales, nonsharp e intensificadas. Mezclas cuaternarias: a) M1, b) M2 y c) M3.

Los valores límites para las composiciones alcanzadas para los compuestos B, C y D se presentan en la Tabla 4. En la Figura 5 se presentan los perfiles de composición obtenidos para las corrientes de producto de la mezcla M1 como una función de la composición del componente clave donde  $x_A > 0.9$ . Los resultados confirman que la mejora de la com-

posición del componente clave  $x_A$  aumenta las composiciones de  $x_B$ ,  $x_C$  y  $x_D$  cuya tendencia prevalece en todas las mezclas bajo estudio y configuraciones de destilación. No obstante, la tendencia de los perfiles de composición puede diferir sustancialmente dependiendo del tipo de configuración, las características de la mezcla y el grado de recuperación del componente ligero A. Por ejemplo, la composición de A tiene un impacto significativo en las purezas de las corrientes de los compuestos B, C y D principalmente en las secuencias nonsharp (NS\_DISS, NS\_DIS, NS\_IDS, NS\_DS1, NS\_DS2) e intensificadas (IS1, IS3, IS6, IS9, IS12). Para estos esquemas de separación, ligeras variaciones en la pureza del componente más volátil  $x_A$  pueden provocar cambios exponenciales en la composición de las corrientes de proceso de destilación especialmente en la región donde  $x_A > 0.99$ . En la mezcla M1, el comportamiento del perfil de las composiciones de B, C y D es similar al obtenido en las secuencias DS, SS, NS\_DISS, IS9 e IS12, cuyas composiciones oscilan entre 0.6 y 0.99 cuando  $x_A > 0.9$  y para IS3 e IS6 varían entre 0.3 – 0.9. Para el caso de IS, IDS y DIS se tienen variaciones entre 0.95 y 0.99 para dichas composiciones. En las secuencias NS\_DS1, NS\_IDS e IS1 se puede identificar que ligeras variaciones de  $x_A$  ocasionan cambios drásticos en la composición de las corrientes del proceso cuando  $x_A > 0.99$ , ver Figura 5.

Las secuencias DS, IDS, SS, NS\_DS2, IS1, IS3, IS6, IS9 e IS12 tienen comportamientos similares para las composiciones de las corrientes de proceso en la región  $x_A > 0.90$  para la mezcla M2. Las secuencias IS, DIS y NS\_DISS muestran cambios sustanciales en la composición de B, C y D cuando  $x_A > 0.99$ . En el caso de M3, todas las secuencias presentaron comportamientos similares con excepción del esquema DS donde las máximas composiciones alcanzadas fueron 0.2 para el componente C, 0.4 para B y 0.9 para D en la región  $x_A > 0.90$ , y en las secuencias IS3 e IS6 donde las purezas alcanzadas de B y C fueron similares a la configuración DS pero en una región donde  $x_A < 0.96$ . El comportamiento de separación de estas secuencias de destilación puede variar sustancialmente para la región de  $0.95 < x_A < 0.99$ , ver Figura 4. La selección de la mejor configuración de destilación depende de la composición del componente clave deseado y es evidente que la configuración IS muestra el peor desempeño considerando la relación  $x_A - Q$ . El esquema intensificado IS1 y la secuencia nonsharp NS\_DS1 pueden ofrecer el mejor desempeño de separación para la mezcla M1 y M3 cuando  $x_A > 0.99$ . Para las mezclas M2 y M3, las secuencias intensificadas IS3 e IS6 son incapaces de llegar a una composición del producto  $x_A$  mayor a 0.96, mientras que para M1 solo alcanza una composición máxima de 0.89. En esta región de operación, la composición de los productos B, C y D obtenida con las secuencias IS3 e IS6 muestran una alta sensibilidad con respecto a la composición  $x_A$ . La secuencia directa DS puede superar a algunos de los esquemas intensificados especialmente en composiciones de  $x_A$  superiores a 0.96 para las mezclas M1 y M2, mientras que la secuencia

**Tabla 4** Valores límite de las composiciones y consumo energético obtenidos en la optimización multi-objetivo para las secuencias de destilación directa, indirecta, nonsharp e intensificadas en sistemas cuaternarios.

Mezcla	Secuencia	Q, Gcal/h	$x_A$	$x_B$	$x_C$	$x_D$
M1	DS	2.14 - 3.98	0.689 - 0.999	0.853 - 0.998	0.543 - 0.934	0.831 - 0.981
	IS	4.20 - 6.18	0.801 - 0.999	0.906 - 0.999	0.901 - 0.999	0.971 - 0.999
	DIS	3.26 - 5.06	0.690 - 0.999	0.859 - 0.999	0.789 - 0.992	0.958 - 0.998
	IDS	3.75 - 5.78	0.759 - 0.999	0.886 - 0.997	0.801 - 0.994	0.982 - 0.999
	SS	2.59 - 4.59	0.801 - 0.999	0.915 - 0.999	0.565 - 0.671	0.823 - 0.864
	NS_DISS	2.61 - 4.61	0.913 - 0.999	0.920 - 0.999	0.638 - 0.999	0.852 - 0.999
	NS_DS1	2.03 - 5.11	0.989 - 0.999	0.779 - 0.999	0.548 - 0.936	0.870 - 0.999
	NS_IDS	3.70 - 4.77	0.831 - 0.999	0.927 - 0.999	0.338 - 0.999	0.811 - 0.999
	IS1	1.21 - 6.26	0.999 - 0.999	0.875 - 0.937	0.312 - 0.411	0.736 - 0.832
	IS3	0.97 - 3.12	0.655 - 0.887	0.383 - 0.939	0.072 - 0.657	0.678 - 0.901
	IS6	0.48 - 2.57	0.645 - 0.887	0.384 - 0.881	0.144 - 0.484	0.536 - 0.864
	IS9	2.05 - 3.74	0.801 - 0.999	0.330 - 0.997	0.408 - 0.792	0.776 - 0.956
IS12	2.13 - 11.7	0.250 - 0.999	0.102 - 0.992	0.001 - 0.925	0.439 - 0.994	
M2	DS	1.52 - 5.91	0.914 - 0.999	0.551 - 0.984	0.384 - 0.840	0.869 - 0.974
	IS	3.60 - 7.97	0.919 - 0.997	0.649 - 0.990	0.835 - 0.999	0.977 - 0.999
	DIS	1.78 - 6.15	0.914 - 0.999	0.656 - 0.999	0.623 - 0.731	0.907 - 0.933
	IDS	2.70 - 7.08	0.917 - 0.997	0.611 - 0.991	0.889 - 0.999	0.972 - 0.999
	SS	2.40 - 6.80	0.920 - 0.997	0.590 - 0.991	0.350 - 0.511	0.861 - 0.882
	NS_DISS	4.21 - 6.83	0.996 - 0.998	0.968 - 0.993	0.408 - 0.611	0.852 - 0.902
	NS_DIS	2.47 - 8.37	0.967 - 0.999	0.650 - 0.999	0.572 - 0.810	0.893 - 0.952
	NS_DS2	2.42 - 6.79	0.921 - 0.997	0.684 - 0.991	0.213 - 0.999	0.871 - 0.940
	IS1	2.01 - 6.35	0.947 - 0.993	0.698 - 0.931	0.262 - 0.493	0.818 - 0.899
	IS3	1.99 - 5.64	0.878 - 0.960	0.513 - 0.841	0.386 - 0.524	0.846 - 0.881
	IS6	0.97 - 5.31	0.831 - 0.959	0.135 - 0.838	0.186 - 0.782	0.762 - 0.945
	IS9	2.10 - 6.45	0.918 - 0.997	0.628 - 0.991	0.231 - 0.545	0.816 - 0.886
IS12	3.28 - 7.85	0.916 - 0.992	0.594 - 0.955	0.521 - 0.953	0.903 - 0.992	
M3	DS	1.05 - 1.15	0.605 - 0.999	0.383 - 0.602	0.175 - 0.343	0.880 - 0.938
	IS	1.69 - 1.75	0.999 - 0.999	0.827 - 0.991	0.616 - 0.990	0.969 - 0.999
	DIS	1.40 - 1.45	0.606 - 0.999	0.598 - 0.789	0.288 - 0.690	0.923 - 0.999
	IDS	1.51 - 1.61	0.972 - 0.999	0.675 - 0.985	0.464 - 0.985	0.967 - 0.999
	SS	1.17 - 1.21	0.999 - 0.999	0.597 - 0.997	0.177 - 0.534	0.902 - 0.982
	NS_DISS	1.16 - 1.17	0.999 - 0.999	0.688 - 0.985	0.187 - 0.954	0.892 - 0.998
	NS_DS1	0.76 - 0.77	0.998 - 0.999	0.260 - 0.999	0.267 - 0.642	0.909 - 0.998
	NS_IDS	1.54 - 1.55	0.995 - 0.999	0.680 - 0.932	0.141 - 0.881	0.920 - 0.985
	IS1	0.65 - 1.21	0.999 - 0.999	0.395 - 0.820	0.084 - 0.144	0.843 - 0.890
	IS3	0.68 - 2.43	0.620 - 0.957	0.101 - 0.405	0.199 - 0.433	0.862 - 0.951
	IS6	0.25 - 0.82	0.619 - 0.956	0.101 - 0.403	0.102 - 0.156	0.799 - 0.861
	IS9	0.81 - 1.04	0.999 - 0.999	0.595 - 0.993	0.122 - 0.577	0.887 - 0.944
IS12	1.14 - 1.94	0.990 - 0.999	0.482 - 0.782	0.171 - 0.494	0.893 - 0.999	

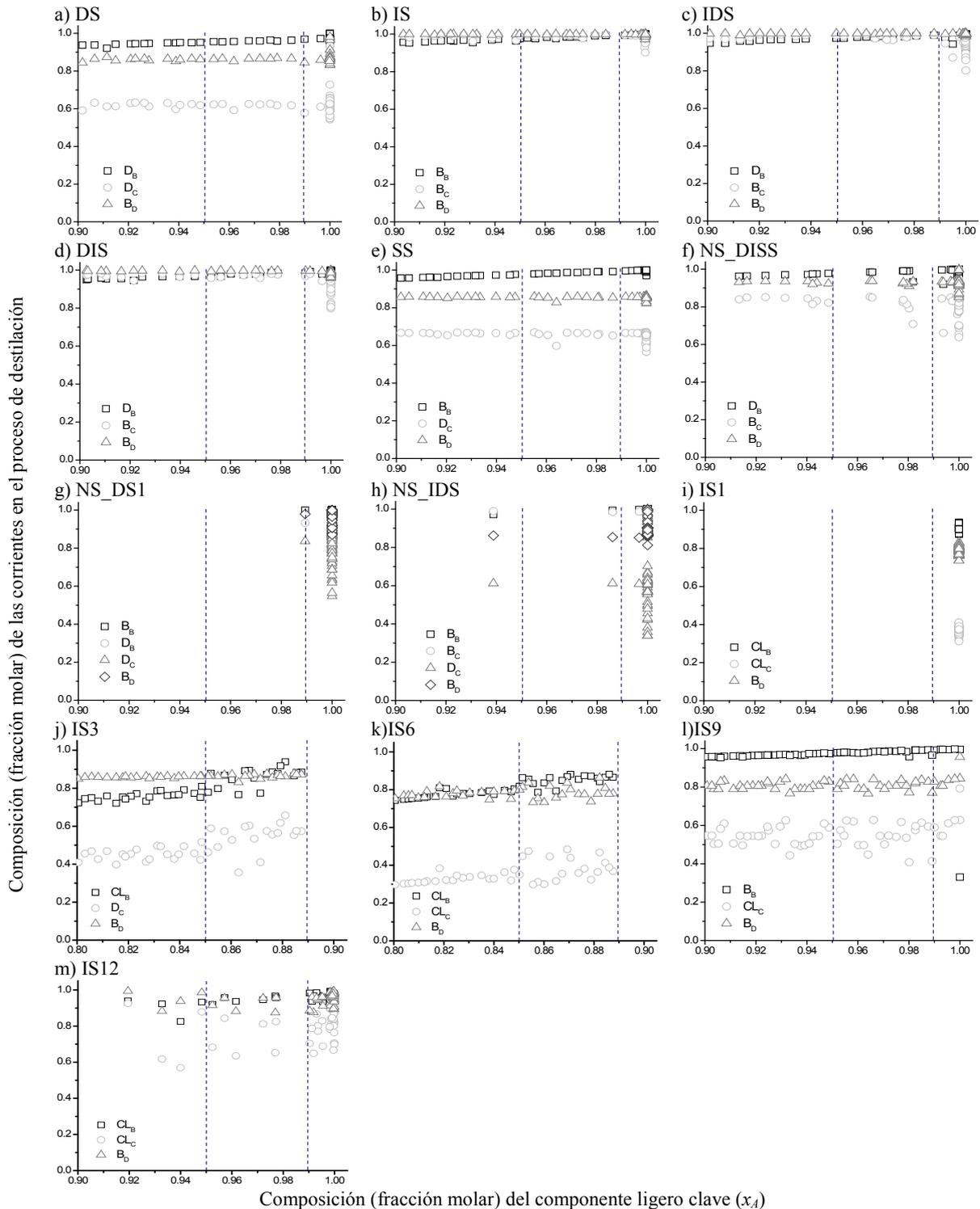
IS supera los sistemas intensificados en composiciones del componente ligero clave  $> 0.99$  para la mezcla M3. La secuencia DS también puede ofrecer purzas de los componentes B, C y D similares o mejores que los obtenidos con los sistemas intensificados.

Las secuencias IS1 e NS\_DS1 pueden ser la mejor opción para el proceso de destilación en las mezclas seleccionadas bajo la premisa de requerir una alta pureza del compuesto clave. La composición de los productos B, C y D obtenidos en la secuencia IS3 e IS6 podrían ser significativamente más bajos que los obtenidos con otras configuraciones de separación. Esta situación se ilustra en la Tabla 4 donde la purificación de los componentes restantes para la mezcla M2 usando las secuencias IS3 e IS6 es inferior a las obtenidas para las otras configuraciones de destilación. Las secuencias DS y SS son la segunda opción para una mayor purificación del componente ligero A donde sus composiciones para los compuestos B, C y D fueron mejores que las composiciones obtenidas con otras configuraciones en algunas mezclas. Sin embargo, la composición del componente C en todas las secuencias analizadas es menor a 0.5 en la región  $x_A > 0.90$ . El mejor desempeño de los objetivos

en conflicto  $x_A - Q$  para las mezclas M1 y M3 se obtiene con las secuencias IS1 e NS\_DS1. Sin embargo, las purzas alcanzadas en la secuencia IS1 son menores que las obtenidas con DS, IS, DIS, IDS, SS y NS\_DISS.

En general, la configuración IS presentó los mayores requerimientos de energía para una pureza dada del componente clave con excepción de la mezcla M2 donde las secuencias IS3 e IS6 presentan el peor desempeño de separación en términos de la relación  $x_A - Q$ . La secuencia de separación DS puede competir con el desempeño que presentan algunas de las secuencias intensificadas. Por ejemplo, la configuración DS requiere una energía de 1.2 Gcal/h para una composición  $x_A = 0.95$ . Este consumo energético representa un ahorro del 74 % con respecto a las secuencias IS3 e IS6.

Los valores límite de los parámetros de diseño obtenidos con la técnica de optimización multi-objetivo se muestran en la Tabla 5. Se observan algunas tendencias para el tamaño de los equipos y la ubicación de la etapa de alimentación para estos sistemas cuaternarios. Por ejemplo, el tamaño del segundo destilador disminuye entre 20 - 55 % con respecto al tamaño



**Figura 5** Composiciones de las corrientes del proceso de destilación para la mezcla cuaternaria M1.

del primer destilador y, a su vez, el tamaño del tercer equipo varía entre 50 y 95 % de las dimensiones del segundo equipo. El cuarto destilador presenta un tamaño similar al primer separador. En cuanto a la etapa de alimentación y/o ubicación de las salidas laterales, éstas generalmente se ubican entre 20 y 55 % del total de las etapas de cada destilador. Las múltiples alimentaciones y salidas laterales se presentan entre 15 - 25 % y 75 - 90 % del tamaño de cada destilador.

La relación de reflujo si tiene una relación clara con la composición del compuesto clave y la energía requerida para el proceso de separación. Sin embargo, los otros parámetros de diseño presentan un comportamiento no lineal con respecto a los objetivos en conflicto.

Este conjunto de resultados demuestran que el diseño de secuencias de separación para sistemas multicomponente implica la resolución de problemas de

**Tabla 5** Valores límite de los parámetros de diseño obtenidos en la optimización multi-objetivo para las secuencias de destilación convencionales, nonsharp e intensificadas en sistemas cuaternarios.

Mezcla	Secuencia	R1	N <sub>1</sub>	N <sub>F</sub>	R <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>	N <sub>BCD</sub>	N <sub>ABC</sub>	N <sub>AB</sub>	R <sub>3</sub>	N <sub>3</sub>	N <sub>CD</sub>	N <sub>BC</sub>	N <sub>B,BC</sub>	N <sub>D,BC</sub>	R <sub>4</sub>	N <sub>4</sub>	N <sub>CLB</sub>	N <sub>CLC</sub>	D <sub>ABC</sub>	D <sub>AB</sub>	B <sub>CD</sub>	
M1	DS	1.20-11.1	27-50	9-35	1.20-1.25	12-30	6-20	-	-	1.20-1.34	4-30	2-20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
	IS	1.20-1.21	13-50	4-37	1.20-1.23	13-30	-	4-21	9-18	1.20-1.19	27-30	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
	DIS	1.20-1.22	19-50	9-30	1.20-1.22	16-30	5-19	-	-	1.20-1.23	9-30	-	5-22	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	IDS	1.20-1.21	15-49	5-37	1.20-1.19	22-30	-	7-16	-	1.20-1.33	6-30	-	3-21	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	SS	1.20-1.23	18-50	4-39	1.20-1.24	19-30	-	-	9-16	1.20-1.24	4-30	2-23	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	NS_DISS	1.20-1.26	19-50	6-31	1.20-1.19	28-30	2-23	12-16	-	1.20-1.19	7-30	-	-	2-16	3-40	1.29-1.17	4-50	-	-	37.5-38.1	-	-	-
	NS_DS1	1.20-5.83	27-50	9-16	1.20-1.19	28-30	2-20	-	14-17	1.20-1.68	4-29	2-37	-	-	-	1.21-1.18	4-50	-	-	-	-	18.5-23.5	-
	NS_IDS	1.20-1.51	16-50	4-34	1.20-1.48	13-30	-	4-22	4-27	1.20-7.34	4-30	2-20	-	-	-	1.34-1.19	7-50	-	-	-	-	-	39.9-48.4
	IS1	1.20-6.59	18-50	4-33	6.16-11.9	29-30	25-29	-	10-12	-	-	-	-	-	-	-	-	23-24	26-30	-	-	36.0-36.4	-
	IS3	1.22-11.9	11-49	4-19	1.20-1.32	6-30	-	-	-	-	-	2-22	-	-	-	-	-	3-15	-	-	-	-	-
	IS6	1.20-11.9	13-32	4-15	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3-12	10-24	-	-	-	-
	IS9	1.20-9.07	14-50	8-38	1.20-10.2	26-30	-	-	9-17	-	-	-	-	-	-	-	-	-	13-47	-	-	-	-
	IS12	1.20-9.21	5-50	4-31	1.20-5.36	11-30	8-24	3-16	2-14	1.45-11.3	10-30	8-27	-	-	-	-	-	4-24	3-22	37.5-50.8	-	-	-
	M2	DS	1.20-11.9	47-50	22-32	1.20-1.92	7-30	2-22	-	-	1.20-1.41	3-30	2-24	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IS		1.20-1.24	11-49	6-35	1.20-1.24	3-30	-	2-23	11-18	1.20-1.19	28-30	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
DIS		1.20-11.9	41-50	20-33	1.20-1.40	9-30	3-22	-	-	1.20-1.43	5-30	-	2-22	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
IDS		1.20-1.22	10-50	5-37	1.20-1.19	29-30	-	13-18	-	1.20-1.36	4-30	-	2-22	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
SS		1.20-1.29	5-49	2-35	1.20-1.19	29-30	-	-	12-17	1.20-1.24	4-29	2-23	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
NS_DISS		1.20-1.24	32-50	7-26	5.56-1.19	29-30	2-21	14-16	-	1.20-1.46	4-30	-	-	2-19	4-43	1.20-1.18	5-50	-	-	47.0-47.1	-	-	-
NS_DS1		1.24-5.09	32-50	8-31	1.20-1.18	27-30	3-23	-	8-16	1.20-1.69	5-30	-	2-32	-	-	1.21-1.18	4-50	-	-	-	-	41.0-43.5	-
NS_DS2		1.20-1.23	6-50	3-40	1.22-1.19	29-30	-	13-17	-	1.20-2.42	3-30	2-22	2-36	-	-	1.20-1.19	4-49	-	-	-	-	-	43.0-48.9
IS1		1.20-1.30	20-50	6-28	1.20-1.18	29-30	25-28	-	8-11	-	-	-	-	-	-	-	-	23-24	26-30	-	-	46.0-36.2	-
IS3		2.97-11.9	43-50	29-40	1.20-1.35	4-29	-	-	-	-	-	2-22	-	-	-	-	-	22-31	-	-	-	-	-
IS6		1.21-11.8	4-50	3-40	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2-31	3-47	-	-	-	-
IS9		1.20-1.21	4-50	2-31	1.20-1.19	23-30	-	-	11-17	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3-42	-	-	-	-
IS12		1.20-1.42	8-50	2-36	1.20-1.51	10-30	25-29	5-19	10-13	1.20-11.8	29-30	7-28	-	-	-	-	-	21-24	4-23	50.0-51.7	-	-	-
M3		DS	1.21-5.00	16-50	6-35	1.20-1.21	16-30	7-20	-	-	1.20-1.21	4-5	2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	IS	1.20-1.21	25-50	8-38	1.20-1.24	15-30	-	4-18	10-11	1.20-2.23	29-30	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
	DIS	1.21-4.96	20-50	9-36	1.20-1.20	23-30	6-14	-	-	1.20-1.23	9-36	-	4-20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	IDS	1.20-1.20	34-50	10-34	1.20-3.40	29-30	-	9-11	-	1.20-1.21	5-30	-	2-21	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	SS	1.20-1.23	21-50	10-32	1.20-2.00	21-30	-	-	7-12	1.20-1.22	3-30	2-23	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	NS_DISS	1.20-1.22	29-50	8-33	1.20-1.46	16-30	2-18	5-15	-	1.20-1.21	4-30	-	-	2-18	3-41	1.72-1.18	4-49	-	-	12.0-12.5	-	-	-
	NS_DS1	1.20-1.22	30-50	10-27	1.20-1.27	16-30	3-24	-	5-19	1.20-1.22	6-29	2-35	-	-	-	1.26-1.19	5-50	-	-	-	-	8.2-8.8	-
	NS_IDS	1.20-1.22	26-50	8-36	1.20-1.22	9-30	-	4-20	3-37	1.20-1.26	4-30	2-18	-	-	-	1.49-1.16	6-50	-	-	-	-	-	78.8-82.0
	IS1	1.20-2.11	15-50	4-34	1.21-1.14	18-30	14-28	-	5-11	-	-	-	-	-	-	-	-	13-23	15-29	-	-	11.0-13.5	-
	IS3	1.20-11.9	11-27	4-9	1.20-1.10	4-30	-	-	-	-	-	2-22	-	-	-	-	-	3-7	-	-	-	-	-
	IS6	1.20-11.9	9-30	4-9	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3-8	6-21	-	-	-	-
	IS9	1.20-1.24	26-50	10-37	1.20-6.14	24-30	-	-	7-18	-	-	-	-	-	-	-	-	-	20-46	-	-	-	-
	IS12	1.20-2.71	4-50	2-30	1.20-1.79	11-30	12-28	2-12	4-12	1.30-11.8	15-30	9-27	-	-	-	-	-	11-24	52	12.0-16.6	-	-	-

optimización complejos donde sus grados de libertad presentan un comportamiento no lineal. La complejidad de estos problemas de diseño incrementa para esquemas de separación intensificados donde se tiene un mayor número de grados de libertad. La determinación de los valores óptimos de estos grados de libertad requiere la aplicación de herramientas robustas y efectivas tales como los métodos evolutivos de optimización multi-objetivo. Este trabajo ha demostrado que las secuencias de separación tradicionales pueden ofrecer un mejor desempeño que algunos sistemas intensificados cuando se realiza su optimización multi-objetivo considerando a la composición de un compuesto clave y la energía como criterios en conflicto. Este comportamiento se vuelve más evidente al incrementar el número de compuestos en la mezcla a separar.

## CONCLUSIONES

En este estudio se ha analizado el desempeño de un conjunto de secuencias de destilación para la separación de mezclas cuaternarias donde los parámetros de diseño se han determinado con método de optimización multi-objetivo. Los resultados mostraron que el compromiso entre la composición de las sustancias de interés y la energía requerida para la separación puede variar sustancialmente para cada configuración de destilación. La selección de la mejor configuración para el proceso de destilación es complicada pues existe una gran cantidad de esquemas que pueden ofrecer una amplia variedad de diseños con relaciones  $x_A - Q$  semejantes y que compiten entre sí. El análisis del diseño multi-objetivo de las secuencias de separación convencionales, *nonsharp* e intensificados muestra claramente las dificultades que se presentan en la determinación de los valores óptimos de sus grados de libertad. Se pueden identificar algunas tendencias en el número de etapas y la ubicación de las etapas de alimentación e interconexiones en los sistemas de destilación analizados pero el resto de los otros parámetros de diseño presentan un comportamiento no lineal que no puede predecirse a priori. Por esta razón, los métodos cortos propuestos para el diseño de sistemas multicomponente de destilación presentan una incertidumbre sustancial en la determinación de las variables de operación. Esta incertidumbre es mayor cuando se aplican a sistemas intensificados ya que las especificaciones y desempeño del proceso de separación dependen de las propiedades termodinámicas de la mezcla y la configuración utilizada. Finalmente, algunas secuencias convencionales y *nonsharp* pueden competir, e incluso ser mejores, que algunos de los procesos intensificados en términos de consumo energético y eficacia para la separación del producto ligero clave. La optimización multi-objetivo es versátil para el diseño confiable de los sistemas de destilación para mezclas con varios compuestos.

## REFERENCIAS

1. Bonet-Ruiz A. E.; Bonet J.; Pleşu V.; Bozga G. Environmental performance assessment for reactive distillation processes. *RCR* **2010**, *54*, 315–325.
2. Vural G. I.; Wang Q.; Noël T.; Hessel V. Process-Design Intensification - Direct Synthesis of Adipic Acid in Flow. *Chem. Eng. Trans.* **2012**, *29*, 565–570.
3. Kiss, A. A. *Advanced Distillation Technologies: Design, Control and Applications*; 1st ed.; Wiley: United Kingdom, 2013.
4. Stankiewicz A.; Moulijn J. A. Process intensification: transforming chemical engineering. *Chem. Eng. Prog.* **2000**, *96*, 22–34.
5. Westerberg A. W. Synthesis in Engineering Design. *Comp. Chem. Eng.* **1989**, *13*, 365–376.
6. Emtir M.; Mizsey P.; Rev E., Fonyo Z. Economic and controllability investigation and comparison of energy-integrated distillation schemes. *Chem. Biochem. Eng. Q.* **2003**, *17*, 31–42.
7. Jiao Y.; Wang S. J.; Huang K.; Chen H.; Liu W. Design and Analysis of Internally Heat-Integrated Reactive Distillation Processes. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2012**, *51*, 4002–4016.
8. Emtir M.; Rev E.; Fonyo Z. Rigorous simulation of energy integrated and thermally coupled distillation schemes for ternary mixture. *Appl. Therm. Eng.* **2001**, *21*, 1299–1317.
9. Alcántara-Ávila J. R.; Cabrera-Ruiz J.; Segovia-Hernández J. G.; Hernández S.; Rong B. G. Controllability analysis of thermodynamically equivalent thermally coupled arrangements for quaternary distillations. *Chem. Eng. Res. Des.* **2008**, *86*, 23–37.
10. [10] Torres-Ortega C. E.; Errico M.; Rong B. G. Design and optimization of modified non-sharp column configurations for quaternary distillations. *Comp. Chem. Eng.* **2015**, *74*, 15–27.
11. Vázquez-Castillo J. A.; Venegas-Sánchez J. A.; Segovia-Hernández J. G.; Hernández-Escoto H.; Hernández S.; Gutiérrez-Antonio C.; Briones-Ramirez A. Design and optimization, using genetic algorithms, of intensified distillation systems for a class of quaternary mixtures. *Comp. Chem. Eng.* **2009**, *33*, 1841–1850.
12. Adams II T. A.; Seider W. D. Design heuristics for semi continuous separation processes with chemical reactions. *Chem. Eng. Res. Des.* **2009**, *87*, 263–270.
13. Li P.; Huang K.; Lin Q. A generalized method for the synthesis and design of reactive distillation columns. *Chem. Eng. Res. Des.* **2012**, *90*, 173–184.
14. Méndez-Valencia D. M.; Vázquez-Ojeda M.; Segovia-Hernández J. G.; Bonilla-Petriciolet A. Design and Control Properties of Arrangements for Distillation of Four Component Mixtures Using Less Than N-1 Columns. *Chem. Biochem. Eng. Q.* **2008**, *22*, 273–283.
15. Errico M.; Rong B. G.; Tola G.; Turunen I. A method for systematic synthesis of multicompo-

- nent distillation systems with less than N-1 columns. *Chem. Eng. Process.* **2009**, *48*, 907–920.
16. Rong B. G. A systematic procedure for synthesis of intensified nonsharp distillation systems with fewer columns. *Chem. Eng. Res. Des.* **2014**, *92*, 1955–1968.
  17. Cortez-González J.; Segovia-Hernández J. G.; Hernández S.; Gutierrez-Antonio C.; Briones-Ramírez A.; Rong B.G. Optimal design of distillation systems with less than N-1 columns for a class of four component mixtures. *Chem. Eng. Res. Des.* **2012**, *90*, 1425–1447.
  18. Rangaiah G. P.; Bonilla-Petriciolet A. *Multi-Objective Optimization in Chemical Engineering: Developments and Applications*; 1st ed.; Wiley: United Kingdom, 2013.
  19. Almeida R. C. P.; Swinkels P. L. J.; Grievink J. Designing reactive distillation processes: present and future. *Comp. Chem. Eng.* **2004**, *28*, 1997–2020.
  20. Filipe R. M.; Hauan S.; Matos H. A.; Novais A. Q. Multi-Objective Design of Reactive Distillation. *ESCAPE* **2007**, *1*, 407–412.
  21. Filipe R. M.; Hauan S.; Matos H. A.; Novais A. Q. A sensitivity analysis on optimal solutions obtained for a reactive distillation column. *ESCAPE* **2008**, *1*, 211–216.
  22. Barreto A. A.; Rodríguez D. I.; Gerbaud V.; Joulia X. Multi-objective optimization of three-phase batch extractive distillation. *ESCAPE* **2011**, *1*, 562–566.
  23. Gutiérrez-Antonio C.; Briones-Ramírez A.; Jiménez-Gutiérrez A. Optimization of Petlyuk sequences using a multi-objective genetic algorithm with constraints. *Comp. Chem. Eng.* **2011**, *35*, 236–244.
  24. Salas-Aguilar C.L.; Bonilla-Petriciolet A. On the design and separation performance of distillation sequences for ternary systems using multi-objective optimization. *Afinidad* **2017**, En prensa.
  25. Pleşu V.; Bonet R. A. E.; Bonet J.; Llorens J.; Iancu P. Shortcut assessment of alternative distillation sequence schemes for process intensification. *Comp. Chem. Eng.* **2015**, *83*, 58–71.
  26. Errico M.; Rong B.G.; Torres-Ortega C.E.; Segovia-Hernández J.G. The importance of the sequential synthesis methodology in the optimal distillation sequences design. *Comp. Chem. Eng.* **2014**, *62*, 1–9.
  27. Ramírez-Márquez C.; Cabrera-Ruiz J.; Segovia-Hernández J.G.; Hernández S.; Errico M.; Rong B.G. Dynamic behavior of the intensified alternative configurations for quaternary distillation. *Chem. Eng. Process.* **2016**, *108*, 151–163.
  28. Vázquez-Ojeda M.; Segovia-Hernández J. G.; Hernández S.; Hernández-Aguirre A.; Kiss A. A. Design and optimization of an ethanol dehydration process using stochastic methods. *Sep. Purif. Technol.* **2013**, *105*, 90–97.
  29. Errico M.; Pirellas P.; Torres-Ortega C. E.; Rong B. G.; Segovia-Hernández J. G. A combined method for the design and optimization of intensified distillation systems. *Chem. Eng. Process.* **2014**, *85*, 69–76.
  30. Vázquez-Castillo J. A.; Segovia-Hernández J. G.; Ponce-Ortega J. M. Multiobjective Optimization Approach for Integrating Design and Control in Multicomponent Distillation Sequences. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2015**, *54*, 12320–12330.
  31. Sánchez-Ramírez E.; Quiróz-Ramírez J. J.; Segovia-Hernández J. G.; Hernández S.; Ponce-Ortega J. M. Economic and environmental optimization of the biobutanol purification process. *Clean Technol. Envir.* **2016**, *18*, 395–411.
  32. Srinivas M.; Rangaiah G. P. Differential Evolution with Tabu List for Global Optimization and Its Application to Phase Equilibrium and Parameter Estimation Problems. *Industrial and Eng. Chem. Res.* **2007**, *46*, 3410–3421.
  33. Rangaiah G. P. *Stochastic Global Optimization: Techniques and Applications in Chemical Engineering*. World Scientific: Singapore, 2010.
  34. Sharma S.; Rangaiah G. P. A hybrid multi-objective optimization algorithm. 5<sup>th</sup> International Symposium on Design. *Operation and Control of Chemical Processes* **2010**, *1*, 1494–1503.
  35. Sharma, S.; Rangaiah G. P. An improved multi-objective differential evolution with a termination criterion for optimizing chemical processes. *Comp. Chem. Eng.* **2013a**, *56*, 155–173.
  36. Sharma, S.; Rangaiah, G. P. Multi-objective optimization of a bio-diesel production process. *Fuel* **2013b**, *103*, 269–277.
  37. Sánchez-Ramírez, E.; Quiróz-Ramírez, J. J.; Segovia-Hernández, J. G.; Hernández, S.; Bonilla-Petriciolet, A. Process Alternatives for Biobutanol Purification: Design and Optimization. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2015**, *54*, 351–358.