



Conciencia Tecnológica

ISSN: 1405-5597

contec@mail.ita.mx

Instituto Tecnológico de Aguascalientes

México

Sánchez Mares, Francisco
Uso de Arreglos Matriciales para obtener Secuencias Óptimas de Separación de Mezclas
Multicomponentes
Conciencia Tecnológica, núm. 27-30, 2005
Instituto Tecnológico de Aguascalientes
Aguascalientes, México

Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=94403014>

- Cómo citar el artículo
- Número completo
- Más información del artículo
- Página de la revista en redalyc.org

redalyc.org

Sistema de Información Científica

Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal

Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto

Uso de Arreglos Matriciales para obtener Secuencias Óptimas de Separación de Mezclas Multicomponentes

Divulgación tecnológica

Ing. Francisco Sánchez Mares
Maestría en Ciencias en Ingeniería Química
Instituto Tecnológico de Aguascalientes
fsanchez96@hotmail.com

Av. López Mateos 1801 Ote., Esq. Av. Tecnológico Aguascalientes, Ags.,
Tel. 9105002 Ext. 103 fax (0149) 700423 C.P.20256

Resumen

La separación de sistemas multicomponentes ha sido de gran importancia para la industria. Un ejemplo es la petroquímica, la separación del petróleo (mezcla de hasta 277 compuestos de hidrocarburos) tiene como resultado gran cantidad de subproductos con distinto valor agregado. Una alternativa ampliamente utilizada en la separación de sistemas multicomponentes son los trenes de separación debido a que son eficientes y económicos, sin embargo, el encontrar cual es la secuencia óptima es un problema que ha atraído la atención de diversos investigadores.

El presente trabajo muestra una alternativa novedosa en la síntesis de secuencias de separación de mezclas multicomponentes, basándose en dos reglas heurísticas básicas: tratar de separar los componentes más abundantes primero y hacer la separación más difícil al último.

Estas dos reglas se conjugan en un arreglo matricial que las hará interactuar entre si, de tal manera que la respuesta del arreglo sea la óptima para los componentes de la mezcla con base en las reglas antes mencionadas, sin embargo, esto no garantiza que sea la mejor en base a economía.

La secuencia propuesta puede ser analizada en base a sus costos, y proponer una nueva secuencia a partir del método evolutivo, al tener las dos secuencias se hace una comparación en costos y se concluye si es la mejor o todavía existe otra más económica. Si existe otra, entonces seguiremos evolucionando la secuencia hasta obtener la óptima.

Al aplicar los arreglos matriciales en los ejemplos presentados en este trabajo se obtiene en la mayoría de los casos la mejor secuencia, pero también hay algunos donde se presenta otra alternativa muy cercana a la óptima.

Palabras clave

Reglas heurísticas, arreglo matricial, método evolutivo.

Introducción

Aún cuando con frecuencia se puede diseñar un separador complejo para obtener todos los productos deseados de mezclas multicomponentes, generalmente se utiliza una secuencia de separadores simples debido a que frecuentemente resulta más económico que un separador complejo.

Al aumentar al número de componentes de una mezcla, el problema de síntesis de separación se complica por la naturaleza combinatorial del problema. El número de subproblemas de separación y por lo tanto la cantidad de posibles secuencias que se pueden generar dependen del número de componentes de la mezcla original. La Tabla 1 muestra el número de secuencias según el número de componentes de la mezcla.

Número de componentes [N]	Número de subgrupos $[N(N+1)/2] - N$	Número de subproblemas de separación $[(N-1)(N)(N+1)/6]$	Número de posibles secuencias $[2(N-1)!/N!(N-1)!]$
2	1	1	1
3	3	4	2
4	6	10	5
5	10	20	14
6	15	35	42
7	21	56	132
8	28	84	429
9	36	120	1,430
10	45	165	4,862

Tabla 1. Número de posibles secuencias de separación en función del número de componentes.

Por lo tanto el problema se complica significativamente al considerar más de una posible operación unitaria para la separación de los componentes. Es necesario entonces tener un procedimiento eficiente que detecte la secuencia de separación óptima (o cercana a la óptima), y de ser posible, con un mínimo de esfuerzo computacional.

Aunque existen distintos enfoques para encontrar una alternativa óptima como lo son métodos heurísticos y los métodos algorítmicos, su principal desventaja es que se tiene que analizar secuencia por secuencia y determinar su costo para cada una, esto es una actividad que puede ocupar algo de tiempo, aun cuando con la ayuda de la computadora se reduce al máximo este trabajo, es necesario buscar otras alternativas distintas.

Fundamentos teóricos

1. Técnicas heurísticas y síntesis evolutiva.

Los métodos heurísticos, que abordan la solución de un problema por medio de reglas plausibles, pero no infalibles, se utilizan ampliamente para evitar tener que examinar todas las secuencias posibles con el fin de encontrar las disposiciones óptimas y casi óptimas.

Utilizando métodos heurísticos se pueden establecer rápidamente buenas secuencias sin diseñar y estimar el coste del equipo aun en el caso de que haya un gran número de componentes a separar.

Se han propuesto numerosas reglas heurísticas para secuencias sencillas compuestas de columnas de destilación ordinaria. Las reglas heurísticas más útiles se pueden seleccionar, de acuerdo con Seader y Westerberg[1] para desarrollar secuencias partiendo de la alimentación del proceso, en la forma que se indica a continuación.

1. Cuando los componentes adyacentes ordenados de la alimentación del proceso varían grandemente en la volatilidad relativa, la secuencia de las escisiones se establece en el orden de volatilidad relativa decreciente.

2. La secuencia de las escisiones para la separación de componentes se establece en el orden del porcentaje molar decreciente de la alimentación del proceso, cuando dicho porcentaje varia grandemente pero en cambio la variación de la volatilidad relativa es pequeña.

3. Cuando ni la volatilidad relativa ni el porcentaje molar en la alimentación varían grandemente, deben separarse los componentes uno a uno como productos de cabeza.

Estas tres reglas heurísticas están de acuerdo con numerosas observaciones relacionadas con el efecto de la presencia de componentes no clave sobre el coste de escisión de dos componentes clave.

Una vez que se ha desarrollado una buena secuencia de separación a partir de reglas heurísticas, puede tratar de mejorarse mediante síntesis evolutiva en la forma descrita por Seader y Westerberg. Este método consiste en desplazarse desde una secuencia de partida hacia secuencias cada vez mejores a través de una sucesión de pequeñas modificaciones. Para cada

secuencia es preciso evaluar su coste con el fin de determinar si es mejor. Las siguientes reglas evolutivas de Stephanopoulos y Westerberg proporcionan una aproximación sistemática.

1. Intercambiar las posiciones relativas de dos separadores adyacentes.

2. Sustituir una determinada separación usando el método I por la separación del método II.

Con frecuencia la síntesis evolutiva puede conducir a la secuencia óptima sin necesidad de examinar todas las secuencias. La eficacia depende de la estrategia utilizada para dirigir las modificaciones.

2. El método rápido.

Con la aplicación de métodos algorítmicos se han detectado secuencias de separación óptimas. Al revisar las reglas heurísticas y su posible ingerencia para explicar la estructura de secuencias óptimas, puede encontrarse que en la mayoría de los casos las secuencias que minimizan el consumo de servicios tienden a minimizar el costo anual del sistema. Entonces, se puede utilizar una regla heurística que cumpla con este objetivo y es de esperarse que la estructura que se genere sea óptima o una excelente aproximación al óptimo.

Un método rápido[2] para la síntesis de trenes de separación consiste en buscar la alternativa que minimice los flujos de alimentación a la secuencia:

$$\text{Min} \sum F_i \quad [1]$$

donde F_i es la alimentación a cada una de las columnas que contiene la secuencia que separa $n+1$ componentes. Esta función objetivo es parte de un problema de optimización bastante simple, que puede resolverse manualmente por principios como programación dinámica, métodos evolutivos o inclusive mediante simple inspección en algunos casos. Una vez que la estructura óptima se detecta, cada columna deberá diseñarse, para lo cual las variables de presión y razón de reflujo a su vez pueden establecerse por las heurísticas ya tratadas.

3. Heurísticas aplicadas.

Este trabajo se basa en las dos primeras reglas heurísticas propuestas por Seader y Westerberg, para desarrollar secuencias partiendo de la alimentación del proceso.

El motivo de seleccionar estas heurísticas:

- a) Proviene de la experiencia de diseñadores.

- b) Son fáciles de medir, ya que la volatilidad y el flujo manejado son conocidos desde un principio.
- c) El método rápido es un método basado solamente en flujos y provee de buenas secuencias al diseñador.

4. Criterios para flujos y volatilidades.

Al desear obtener una secuencia directa, se tienen que implicar los cortes en cada arreglo, por ejemplo si se desea evaluar el corte A/B se necesita tener como datos la razón entre la volatilidad (α) de A y la de B , es decir:

$$\text{Corte } ij = (\alpha_i/\alpha_j) \quad [2]$$

$$\text{Volatilidad relativa } ij = (\alpha_i/\alpha_j) \quad [3]$$

Para los flujos en el corte A/B se presentan dos opciones para evaluarlo, la primera es el evaluar la razón entre dos flujos, por ejemplo A/B .

$$\text{Corte } ij = \text{Flujo } i / \text{Flujo } j \quad [4]$$

Sin embargo, si obtenemos la razón de A/B y si A tiene un caudal muy grande y B uno muy pequeño entonces al dividirlos se obtendrá un resultado muy alto, mismo que engañaría al arreglo matricial, diciéndole que posiblemente este corte presenta el flujo más grande, de tal manera que la propuesta efectuada se descarta y se utiliza la siguiente:

$$\text{Corte } ij = (\text{Flujo de } i + \text{Flujo de } j) / \text{suma de todos los flujos involucrados} \quad [5]$$

De esta manera el arreglo matricial tiene una buena percepción del orden de las magnitudes de flujos de cada corte propuesto.

Materiales y métodos

El proyecto se basa en el siguiente objetivo: *generar una alternativa novedosa, rápida y confiable en la obtención de la secuencia de separación óptima de una mezcla multicomponentes.*

El desarrollo de este proyecto se lleva a cabo de la siguiente forma:

1. Revisión de la teoría de síntesis de secuencias de separación.

En esta parte se analizan todas las aportaciones a la síntesis de procesos de distintos autores tanto en métodos algorítmicos como heurísticos.

2. Diseño de los arreglos matriciales.

En esta etapa se relaciona el problema de la secuencia como si fuera un diseño de experimentos y se llega a la conclusión de que esta comparación puede generar resultados interesantes, mismos que pueden obtener una buena secuencia a partir de esta analogía.

En esta etapa del proyecto:

a). Se intenta aplicar arreglos ortogonales ya existentes a la síntesis de procesos, relacionando su número de componentes con los factores del arreglo y el número de corridas con las alternativas, esto genera un intento fallido pero presenta resultados interesantes.

b). Cuando se observa que existe la posibilidad de generar una buena secuencia, pero que no existe un arreglo adecuado para nuestro problema, se realiza el diseño de los arreglos matriciales adecuados.

3. Pruebas con sistema de tres componentes en arreglos matriciales.

a). Teniendo los arreglos adecuados, se procede a evaluar un problema de cinco secuencias, pero por separado, es decir, primero para volatilidades y se observó que generó la secuencia óptima para esa condición. Posteriormente se evalúa la condición de flujos y también se genera la secuencia óptima.

b). Sabiendo que el arreglo funcionaba perfectamente, se procede a unir las dos condiciones en nuevo arreglo matricial, mismo que vuelve a generar una secuencia óptima idéntica.

4. Desarrollo de un programa de cómputo para evaluar sistemas de más de tres componentes con arreglos matriciales.

Al observar que el arreglo generaba secuencias aceptables, se procede a la programación de varios arreglos, para facilitar el trabajo de experimentación y análisis de resultados.

5. Resultados.

En esta etapa se evalúan dos problemas encontrados en la literatura y se comprueba la efectividad de los arreglos generados para encontrar buenas secuencias. Se genera un paquete de programas, cada programa evalúa secuencias, dando distinto peso a cada opción (volatilidad y flujos) y se obtienen opciones interesantes. Estos programas se realizan en C++ Builder.

Resultados y discusión

Para probar la efectividad del método se seleccionaron varios problemas de la literatura, los cuales han sido ampliamente estudiados por diversos autores. Sin embargo debido a la brevedad del documento solo se exponen dos ejemplos.

1. Separación de parafinas ligeras por destilación ordinaria.

Considere la separación de una mezcla de cinco hidrocarburos ligeros en componentes puros por destilación ordinaria estudiada por Heaven[3] (1969), Usando una base de cálculo de 100 mol/hora. Ver la Tabla 2.

Especie	Fracción	Corte	Flujos	Volatilidad relativa
A: Propano	0.5	A/B	0.33334	2.0
B: Iso – butano	0.15	B/C	0.6	1.33
C: N – butano	0.25	C/D	1.25	2.4
D: Iso – pentano	0.20	D/E	0.571428571	1.25
E: N – pentano	0.35			

Tabla 2. Datos para el problema de Heaven.

Los datos se introducen en el arreglo matricial mostrado en la Tabla 3.

Corte	1	2	3	4	5	Respuesta
A/B	1	1	1	2	1	Y_1
B/C	1	1	2	2	2	Y_2
C/D	1	2	2	2	1	Y_3
D/E	1	2	2	2	2	Y_4
A/B	2	2	2	1	1	Y_5
B/C	2	2	1	1	2	Y_6
C/D	2	1	1	1	1	Y_7
D/E	2	1	1	1	2	Y_8

Tabla 3. Arreglo matricial $L_8(4^5)$.

En el arreglo matricial se observan números uno y dos, el número uno se refiere a flujos y el dos a valores de volatilidad.

Evaluando el arreglo matricial dándole el mismo peso tanto a flujos como a volatilidades (50% flujos y 50% volatilidad) se obtienen los siguientes resultados:

A/B = 10.566699 (último en realizar)
 B/C = 12.710000 (segundo en efectuar)
 C/D = 14.301428 (efectuar primero)
 D/E = 11.095714 (tercero en efectuar)

La Figura 1 muestra la secuencia para la relación 50/50 y la Figura 2 presenta el tren de separación obtenido para una relación 10% flujos y 90% flujos.

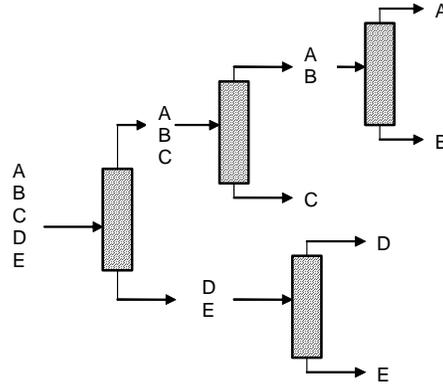


Figura 1. Secuencia óptima. (50% volatilidad y 50% flujos).

Y si se trabaja 10% volatilidad y 90% flujos se obtiene:

A/B = 6.8433337 (segundo en efectuar)
 B/C = 6.3550004 (último corte)
 C/D = 7.4941401 (efectuar primero)
 D/E = 6.6146802 (tercero en efectuar)

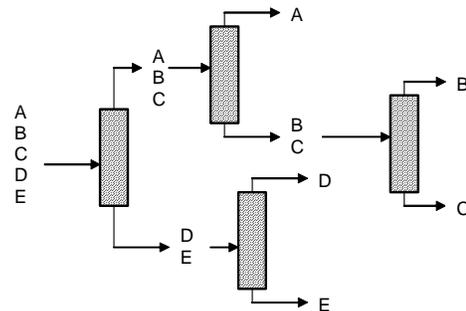


Figura 2. Segunda mejor secuencia. (10% volatilidad y 90% flujos).

Cabe mencionar que la primer secuencia esta reportada en la literatura como la mejor de las catorce posibles con un costo de 858,780 USD y la segunda como otra muy buena opción solo 0.53% arriba de la primera.

2. Separación de olefinas ligeras y parafinas por destilación ordinaria.

Considere la separación de una mezcla de olefinas ligeras y parafinas por destilación ordinaria. La mezcla de alimentación es presentada por Thompson y King

(1972[3], utilizando una base de cálculo de 100 mol/hora. La Tabla 4 presenta los datos del problema.

Especie	Fracción	Corte	Flujos	Volatilidad relativa
A: Etano	0.20	A/B	1.33334	3.5
B: Propileno	0.15	B/C	0.75	1.2
C: Propano	0.20	C/D	1.33334	2.7
D: 1 – buteno	0.15	D/E	1	1.21
E: N – butano	0.15	E/F	1	3.0
F: N – pentano	0.15			

Tabla 4. Datos para el problema de Thompson y King.

Para este problema se utilizó el arreglo matricial mostrado en la Tabla 5.

Corte	1	2	3	4	5	6	Respuesta
A/B	1	1	1	1	2	1	Y_1
B/C	1	1	1	2	2	2	Y_2
C/D	1	1	2	2	2	1	Y_3
D/E	1	2	2	2	2	2	Y_4
E/F	1	2	2	2	2	1	Y_5
A/B	2	2	2	2	1	2	Y_6
B/C	2	2	2	1	1	1	Y_7
C/D	2	2	1	1	1	2	Y_8
D/E	2	1	1	1	1	1	Y_9
E/F	2	1	1	1	1	2	Y_{10}

Tabla 5. Arreglo matricial L_{10} (5^6).

La Figura 3 muestra la secuencia generada para la relación 50% volatilidad y 50% flujos.

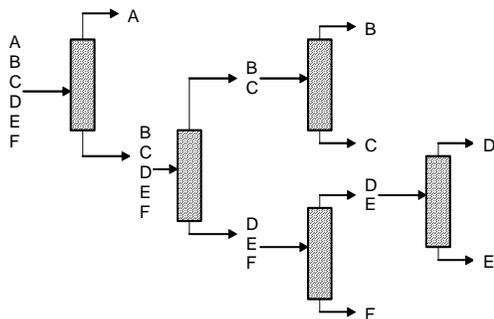


Figura 3. Secuencia (50% volatilidad y 50% flujos).

Esta secuencia viene reportada como una de las cuatro mejores secuencias obtenidas para este problema por Nadgir y Liu[3].

La secuencia generada para 10% volatilidad y 90% flujos se presenta en la Figura 4.

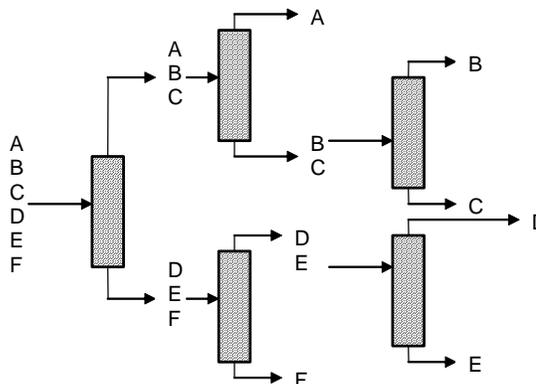


Figura 4. Secuencia (10% volatilidad y 90% flujos).

Conclusiones

El presente trabajo muestra una forma rápida de obtener secuencias de separación económicas a partir de dos reglas heurísticas importantes, basadas en la experiencia de diseñadores de secuencias de separación. Las mejores secuencias generadas por este método son las que tienen igual porcentaje de importancia tanto en flujos como en volatilidades (50% y 50%), aunque también se obtienen excelentes secuencias al darle mayor peso a los flujos (90% flujos y 10% volatilidades).

Agradecimientos

El autor de este artículo agradece a los profesores Dr. Omar Jair Purata Sifuentes y al Dr. Adrián Bonilla Petriciolet, de la Maestría en Ciencias en Ingeniería Química del Instituto Tecnológico de Aguascalientes por sus brillantes aportaciones a este proyecto.

Bibliografía

- [1] Ernest J. Henley y J.D. Seader (2003); *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*. Editorial Reverté. España
- [2] Arturo Jiménez Gutiérrez (2003); *Diseño de procesos en ingeniería química*. Editorial Reverté. España.
- [3] V. M. Nadgir y Y. A. Liu (1983); "A simple heuristic method for systematic síntesis of initial sequences for multicomponent separations". *AIChE Journal* (Vol 29, No. 6).