

## Optimización estocástica multiobjetivo de secuencias de destilación intensificadas para la separación de mezclas cuaternarias

RAMÍREZ, Norma†, GÓMEZ, Fernando, GUTIÉRREZ, Claudia

Recibido 04 de Abril, 2016; Aceptado 16 de Octubre, 2016

### Resumen

Las secuencias de destilación térmicamente acopladas permiten reducir el consumo energético en la separación de mezclas, y han sido ampliamente estudiadas desde el punto de vista del diseño, la optimización y el control para la purificación de mezclas ternarias. No obstante, las mezclas cuaternarias no han sido tan estudiadas ya que el problema de diseño se vuelve más complejo por el incremento tanto en el número de componentes como en el número de secuencias. Debido a ello se propone en este trabajo el desarrollo de una estrategia de optimización estocástica multiobjetivo para resolver el problema de diseño de secuencias de destilación intensificadas para la separación de mezclas cuaternarias. La estrategia de optimización se basa en el algoritmo genético multiobjetivo NSGA-II, y las restricciones se manejan mediante una estrategia evolutiva multiobjetivo. La estrategia de optimización es acoplada al simulador de procesos Aspen Plus, lo que permite la simulación rigurosa de las secuencias. Como caso de estudio se eligen las secuencias acopladas directa e indirecta, para la separación de una mezcla cuaternaria con cinco diferentes composiciones de alimentación. Los resultados muestran interesantes resultados en términos del consumo de energía y el número de etapas.

**Optimización multiobjetivo, secuencias intensificadas, mezclas cuaternarias.**

### Abstract

Thermally coupled distillation sequences allows reducing the energy consumption in the separation of mixtures, and they have been extensively studied for the separation of ternary mixtures from the point of view of design, optimization and control. However, quaternary mixtures have not been studied since the design problem becomes more complex by the increase in the number of components and the number of sequences. Therefore, in this paper the development of a multi-objective stochastic optimization strategy to solve the design problem intensified distillation sequences for the separation of quaternary mixtures is proposed. The optimization strategy is based on multi-objective genetic algorithm NSGA-II, and restrictions are handled by a multi-objective evolutionary strategy. The optimization strategy is coupled to the process simulator Aspen Plus, allowing rigorous simulation sequences. As case study the direct and indirect coupled sequences for the separation of a quaternary mixed, with five different feed compositions, are chosen. The results show interesting results in terms of energy consumption and the number of stages.

**Multiobjective optimization, intensified sequences, quaternary mixtures.**

**Citación:** RAMÍREZ, Norma, GÓMEZ, Fernando, GUTIÉRREZ, Claudia. Optimización estocástica multiobjetivo de secuencias de destilación intensificadas para la separación de mezclas cuaternarias. Revista de Simulación y Laboratorio 2016, 3-9: 1-7

† Investigador contribuyendo como primer autor  
rvne8910@gmail.com

## Introducción

Las secuencias de destilación térmicamente acopladas posibilitan reducir el consumo energético en la separación de mezclas de fluidos. Debido a ello, han sido ampliamente estudiadas desde el punto de vista del diseño, la optimización y el control para la purificación de mezclas ternarias. En contraparte, la separación de mezclas cuaternarias ha sido poco explorada. Las investigaciones reportadas versan sobre la síntesis (Errico y Rong, 2012; Rong y col., 2014; Errico y col., 2015; Kim, 2015), el diseño y control (Esparza-Hernández y col., 2005; Porras-Rodríguez y col., 2007; Alcántara-Ávila y col., 2008), así como la optimización de secuencias acopladas (Vazquez-Castillo y col., 2009; Cortez-Gonzalez y col., 2012; Torres-Ortega y col., 2015) para la separación de mezclas cuaternarias. Con respecto a la optimización cabe mencionar que se han utilizado estrategias tales como evolución diferencial y algoritmos genéticos. En particular, los algoritmos genéticos son una técnica robusta que ha sido ampliamente utilizada en la optimización de procesos químicos (Bhaskar y col., 2016). No obstante, su principal desventaja radica en que el tiempo de cómputo requerido es muy elevado. Con el objetivo de atacar esta desventaja, recientemente se ha propuesto el uso de un algoritmo genético multiobjetivo con manejo de restricciones, el cual es acelerado mediante el uso de redes neuronales (Gutiérrez-Antonio y Briones-Ramírez, 2015). Esta estrategia ha sido empleada en la optimización de secuencias acopladas para la separación de mezclas ternarias. Sin embargo, no ha sido utilizada para la purificación de mezclas cuaternarias. Por lo tanto, en este trabajo se propone el uso de un algoritmo genético multiobjetivo, con manejo de restricciones, acelerado mediante redes neuronales para la optimización de secuencias cuaternarias intensificadas de destilación.

Cabe mencionar que esta estrategia de optimización se encuentra acoplada al simulador de procesos Aspen Plus, por lo que en la optimización se consideran los balances de masa y energía así como las relaciones de equilibrio.

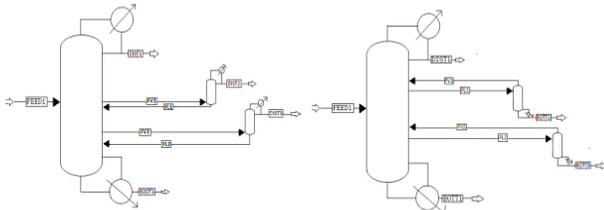
El artículo se encuentra organizado de la siguiente manera. Primero se presentará la mezcla elegida como caso de estudio, así como las secuencias de destilación térmicamente acopladas seleccionadas. Posteriormente se planteará el problema de optimización, y se describirá la herramienta utilizada para resolverlo. Finalmente, se analizarán los resultados obtenidos.

## Caso de estudio

Se seleccionó como caso de estudio a la mezcla cuaternaria compuesta por 2 metil-2 buteno (A), ciclopentano (B), benceno (C), tolueno (D). El estudio se lleva a cabo sobre diferentes composiciones de alimentación, con el fin de observar el impacto de dicha variable sobre el consumo energético de las secuencias acopladas cuaternarias. Las composiciones de la alimentación analizadas son las siguientes: F1 (70% de A, 10% de B, C, D), F2 (70% de B, 10% de A, C, D), F3 (70% de C, 10% de A, B, D), F4 (70% de D, 10% de A, B, C), F5 (25% de A, B, C, D).

Se seleccionó un flujo de 100 kmol/h, y el modelo Chao-Seader es utilizado para el cálculo del equilibrio de fases, debido a que los componentes de la mezcla son hidrocarburos. Las recuperaciones requeridas son del 99% para cada uno de los componentes. Las secuencias térmicamente acopladas que serán analizadas en el presente trabajo son la secuencia cuaternaria directa y la secuencia cuaternaria indirecta, las cuales se presentan en la Figura 1.

La secuencia térmicamente acoplada directa consta de una columna principal con dos rectificadores laterales, mientras que la secuencia térmicamente acoplada indirecta consiste en una columna principal con dos agotadores laterales.



**Figura 1** Secuencias cuaternarias intensificadas

### Problema de optimización

La optimización de las secuencias intensificadas directa e indirecta implica la minimización simultánea tanto de la carga térmica,  $Q_i$ , (asociada a costos de operación) como del número de etapas,  $N_i$ , (asociado a costos de capital) de cada columna de destilación:

$$\text{Min} (Q_i, N_i)$$

(1)

Sujeto a las restricciones de purzas y recuperaciones en cada uno de los componentes de la mezcla, así como a las correspondientes al modelo de cada columna. Las variables manipulables incluyen la relación de reflujo de líquido, el número de etapas, la localización de la etapa de alimentación, los flujos de interconexión así como la localización de dichos flujos.

Para resolver este problema se empleará un algoritmo genético multiobjetivo acelerado mediante redes neuronales (Gutiérrez-Antonio y Briones-Ramírez, 2015).

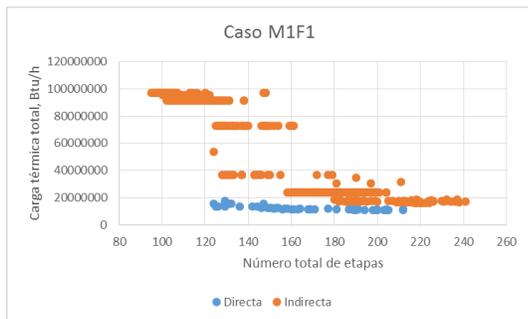
En esta estrategia las redes neuronales son utilizadas como un modelo subrogado, que se emplea para la evaluación tanto de las funciones objetivo como de las funciones de restricción. Esto posibilita reducir de manera significativa el tiempo de cómputo. Asimismo, esta estrategia considera el manejo de restricciones, y se encuentra acoplada al simulador de procesos Aspen Plus. Esto posibilita que todos los resultados sean obtenidos de manera rigurosa.

Este algoritmo funciona de la siguiente manera. A partir de una solución inicial factible (desde el punto de vista físico) se genera una población de individuos. Dichos individuos son evaluados en términos de los valores de las funciones objetivo y de restricción. Con base en la evaluación se seleccionan a los mejores individuos para ser los padres de la siguiente generación. La estrategia considera elitismo, por lo que los mejores individuos pasan a la siguiente generación; con esto se evita perder la mejor solución. Este proceso se repite hasta que se cumple el criterio del máximo número de generaciones. Para la evaluación de las funciones objetivo y de restricción se emplean de manera alternada el simulador de procesos Aspen Plus y las redes neuronales; éstas últimas son reentrenadas cada vez que el simulador de procesos es empleado, lo cual permite mejorar la predicción de las mismas.

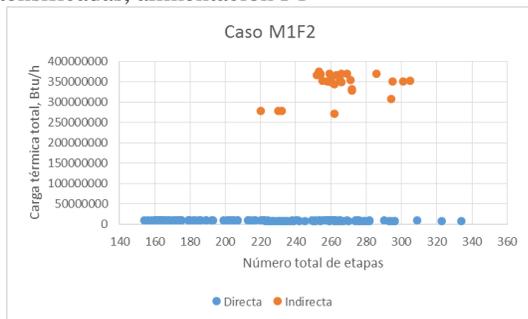
El número de individuos y generaciones se determina mediante un proceso de sintonización, en el cual se busca el menor número de ambos parámetros a partir del cual no se observe un cambio significativo en la función objetivo. En este trabajo, se utilizaron poblaciones de 1000 individuos y 250 generaciones.

**Resultados**

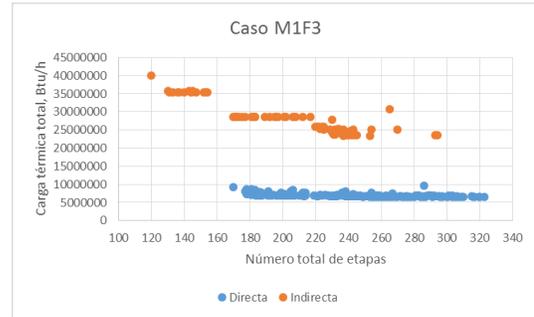
En esta sección se analizarán los resultados del proceso de optimización, en términos del consumo de energía así como el número de etapas. Los resultados se presentan agrupando los objetivos en dos principales: carga térmica y número total de etapas de la secuencia. Ambos objetivos serán representados en un Frente de Pareto, el cual incluye al conjunto de diseños óptimos desde la mínima carga térmica total hasta el mínimo número de etapas así como todos aquellos entre estos extremos. Las Figuras 2-6 muestran los Frentes de Pareto para las diferentes alimentaciones del caso de estudio. En el caso de la alimentación F1, se observa que la carga térmica para ambas secuencias es similar, pero se requiere un mayor número de etapas para la secuencia indirecta. Por otra parte, se observa una mayor estabilidad en las soluciones para la secuencia directa, particularmente para los casos F1, F2, F3 y F5.



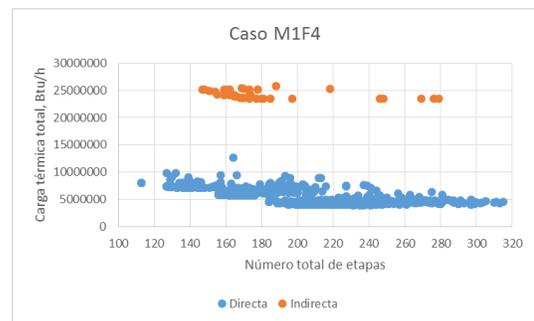
**Figura 2** Frente de Pareto de las secuencias intensificadas, alimentación F1



**Figura 3** Frente de Pareto de las secuencias intensificadas, alimentación F2

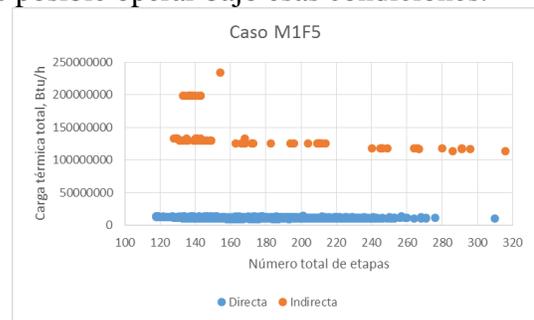


**Figura 4** Frente de Pareto de las secuencias intensificadas, alimentación F3



**Figura 5** Frente de Pareto de las secuencias intensificadas, alimentación F4

Es posible apreciar en las Figuras 2-6 que para todas las alimentaciones consideradas la secuencia térmicamente acoplada directa es la que presenta los menores consumos de energía. En cada Figura pueden observarse los diseños correspondientes a la mínima relación de reflujo (que corresponde al máximo número de etapas) así como al mínimo número de etapas; dichos diseños representan los extremos del Frente de Pareto, aunque en realidad carecen de interés desde el punto de vista práctico pues no es posible operar bajo esas condiciones.



**Figura 6** Frente de Pareto de las secuencias intensificadas, alimentación F5

Otro aspecto interesante que permite analizar el Frente de Pareto es el efecto de la configuración en la carga térmica, para un número fijo de etapas totales. Por ello, en la Tabla 1 se presentan algunos diseños seleccionados que presentan un número similar de etapas totales (alrededor de 150).

M1F1		
	$N_T$	$Q_T$ (Btu/h)
Directa	150	2,267,228.80
Indirecta	150	36,692,239.45

M1F2		
	$N_T$	$Q_T$ (Btu/h)
Directa	154	9,951,768.48
Indirecta	220	278,722,425.69

M1F3		
	$N_T$	$Q_T$ (Btu/h)
Directa	170	9,200,616.02
Indirecta	152	35,469,496.40

M1F4		
	$N_T$	$Q_T$ (Btu/h)
Directa	151	7,133,940.58
Indirecta	151	7,389,746.36

M1F5		
	$N_T$	$Q_T$ (Btu/h)
Directa	150	10,820,853.20
Indirecta	149	129,829,001.00

**Tabla 1** Diseños seleccionados de los Frentes de Pareto con un número total de etapas de alrededor de 150.

De la Tabla 1 puede observarse que en todos los casos, para un número similar de etapas, la carga térmica de la secuencia térmicamente acoplada directa es siempre menor. Por lo tanto, se espera que las secuencias que se comparan sean similares en costos de capital, y que las secuencias acopladas directas sean substancialmente menores en términos del consumo de energía.

Esto implica a su vez menores costos de servicios (vapor y agua de enfriamiento), así como una reducción en las emisiones de  $CO_2$  del proceso de separación, las cuales están directamente asociadas a la producción de vapor de calentamiento. Así pues, la metodología propuesta permite llevar a cabo el diseño y optimización simultáneos de sistemas de separación complejos, tales como las secuencias con acoplamiento térmico. El caso de estudio para una mezcla cuaternaria muestra un mejor comportamiento, en términos de carga térmica y número de etapas, para la secuencia térmicamente acoplada cuaternaria directa. Por otra parte, el esfuerzo computacional debido al enlace entre el software de simulación de procesos y el software de optimización se ve considerablemente reducido a través del uso de redes neuronales. Asimismo, todos los diseños obtenidos a través del método satisfacen las restricciones de pureza y recuperación, debido al uso de estrategias de manejo de restricciones.

### Agradecimiento

Se agradece el apoyo proporcionado por la Universidad de Guanajuato y la Universidad Autónoma de Querétaro para el desarrollo de este trabajo.

### Conclusiones

En este trabajo se presentó una estrategia para la optimización de secuencias intensificadas, para la separación de mezclas cuaternarias. La estrategia emplea un algoritmo genético multiobjetivo con manejo de restricciones, el cual es acelerado mediante redes neuronales. Como resultado Frentes de Pareto son obtenidos, los cuales incluyen un conjunto de diseños óptimos que representan los mejores compromisos entre los objetivos de interés, los cuales involucran la minimización de la carga térmica total y la minimización del número total de etapas en la secuencia.

Para el caso de estudio seleccionado con las cinco composiciones de alimentación se encontró que la secuencia térmicamente acoplada directa es la que presenta los menores consumos de energía. Solo en el caso en el cual el componente ligero se encuentra en mayor proporción (F1), la secuencia indirecta presenta valores de carga térmica similares a los de la secuencia directa. En el resto de los casos, la secuencia indirecta presenta requerimientos energéticos excesivamente altos en comparación con la secuencia directa. La reducción en los requerimientos energéticos posibilita reducir, de manera indirecta, las emisiones de CO<sub>2</sub> del proceso de separación, disminuyendo así el impacto ambiental debido a la separación.

## Referencias

- Errico, M., Rong, B.G. (2012). Modified simple column configurations for quaternary distillations. *Computers & Chemical Engineering*, 36(10), 160-173.
- Rong, B.G., Errico, M., Segovia-Hernandez, J.G. (2014). New Intensified Distillation Systems for Quaternary Petlyuk Configuration. *Computer Aided Chemical Engineering*, 33, 97-102.
- Errico, M., Rong, B.G., Segovia-Hernández, J.G., Pirellas, P. (2015). Design and Optimization of Intensified Quaternary Petlyuk Configuration. *Computer Aided Chemical Engineering*, 37, 1367-1372.
- Kim, Y.K. (2015). Energy saving of side-column DWCs for quaternary separation. *Energy*, 86, 617-626.
- Esparza-Hernández, F., Irianda-Araujo, C.Y., Domínguez-Lira, L.M., Hernández, S. & Jiménez, A. (2005). Feedback Control Analysis of Thermally Coupled Distillation Sequences for Four-Component Mixtures. *Chemical Engineering Research and Design*, 83(9), 1145-1151.
- Porrás-Rodríguez, J.A., Hernández-Escoto, H., Segovia-Hernández, J.G. & Hernández, S. (2007). Design and control of thermally coupled and heat integrated distillation sequences for quaternary separations. *Computer Aided Chemical Engineering*, 24, 889-894.
- Alcántara-Ávila, J.R., Cabrera-Ruiz, J., Segovia-Hernández, J.G., Hernández, S. & Rong, B.G. (2008). Controllability analysis of thermodynamically equivalent thermally coupled arrangements for quaternary distillations. *Chemical Engineering Research and Design*, 86(1), 23-37.
- Vazquez-Castillo, J.A., Venegas-Sánchez, J.A., Segovia-Hernández, J.G., Hernández-Escoto, H., Hernández, S., Gutiérrez-Antonio, C. & Briones-Ramírez, A. (2009). Design and optimization, using genetic algorithms, of intensified distillation systems for a class of quaternary mixtures. *Computers & Chemical Engineering*, 33(11), 1841-1850.
- Cortez-Gonzalez, J., Segovia-Hernández, J.G., Hernández, S., Gutiérrez-Antonio, C., Briones-Ramírez, A., Rong, B.G. (2012). Optimal design of distillation systems with less than N - 1 columns for a class of four component mixtures. *Chemical Engineering Research and Design*, 90(10), 1425-1447.
- Torres-Ortega, C.E., Errico, M., Rong, B.G. (2015). Design and optimization of modified non-sharp column configurations for quaternary distillations. *Computers & Chemical Engineering*, 74, 15-27.

Bhaskar, V., Gupta, S.K., Ray, A.K. Applications of multiobjective optimization in Chemical Engineering. Report Kanpur 208016. [http://www.eng.uwo.ca/people/array/Ajay%20Publications%20PDF%20files/A23%20Bhsakar\\_Rev\\_ChemE%202000.pdf](http://www.eng.uwo.ca/people/array/Ajay%20Publications%20PDF%20files/A23%20Bhsakar_Rev_ChemE%202000.pdf) (accessed July 18, 2016).

Gutiérrez-Antonio, C., Briones-Ramírez, A. (2015). Multiobjective Stochastic Optimization of Dividing Wall Distillation Columns Using Surrogate Model Based on Neural Networks. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*, 29(4), 343-356.