

OPTIMIZACIÓN DE UNA TORRE DE DESTILACIÓN REACTIVA PARA LA PRODUCCIÓN DE ETILENGLICOL CON BASE A UNA FUNCIÓN DE CARÁCTER TÉRMICO

OPTIMIZATION OF A REACTIVE DISTILLATION TOWER FOR THE PRODUCTION OF ETHYLENE GLICOL BASED ON AN OBJECTIVE FUNCTION OF THERMAL CHARACTER

Juan Diego Castañeda Vargas*

Recibido: 15 de agosto de 2018

Aceptado: 16 de octubre de 2018

Resumen

Este artículo presenta la importancia y la aplicación de un modelo de optimización para el diseño y simulación de procesos químicos, conocido como programación secuencial cuadrática (SQP), el cual es una extensión de los multiplicadores de Lagrange asistido con condiciones Karush Kuhn Tukker (KKT). Inicialmente se explican los modelos disponibles en el simulador Aspen Plus® y se escoge por un criterio de convergencia el modelo SQP. Asimismo, con base en un caso de estudio, se realiza un análisis centrado en la formulación de la función objetivo, las restricciones para el sistema de optimización y la solución de este mediante el simulador de procesos mencionado. Para aplicar los conceptos se toma como caso de estudio una torre de destilación reactiva para la producción de etilenglicol con múltiple alimentación y una zona reaccionante ubicada en las primeras cinco etapas, que es modelada en el simulador Aspen Plus® versión 9.0. Para la verificación de la solución se utilizan dos análisis posoptimización, el cálculo del costo anual totalizado (TAC) y las superficies de respuesta, para encontrar el comportamiento de las restricciones y la función objetivo con respecto a las variables independientes del sistema. La función objetivo es tomada como la relación del calor del rehervidor y el producto de fondos, teniendo en cuenta que el coste de calentamiento de la mezcla es significativo en la operación de la torre, el cual está restringido a la obtención de una composición de óxido de etileno en cimas del 95 % y una composición de etilenglicol en fondos mayor a 90 %. Como resultado de la optimización, disminuye el calor utilizado por el rehervidor y el condensador, en otras palabras, la cantidad de servicios de enfriamiento realizadas con agua y las de calentamiento efectuadas con vapor de alta presión son minimizadas.

Palabras clave: optimización SQP, Aspen Plus, destilación reactiva, TAC, superficie de respuesta.

Abstract

In this article, we present the importance and application of an optimization model for the design and simulation of chemical processes, known as quadratic sequential programming (SQP), which is an extension of Lagrange multipliers assisted with Karush Kuhn Tukker conditions. (KKT). When performed by simulation, initially the models available in the Aspen Plus® simulator are discussed and the SQP model is chosen by

* Estudiante de Ingeniería Química. Semillero de investigación Simulación de Procesos Químicos, grupo de investigación Procesos de Separación no Convencionales-GPS, Fundación Universidad de América, Bogotá D. C., Colombia. juan.castaneda@estudiantes.uamerica.edu.co

a convergence criterion. Likewise, an analysis is made for a case study focused on the formulation of the objective function, the restrictions for the optimization system and its solution using the aforementioned process simulator. To apply the concepts, a reactive distillation tower for the production of ethylene glycol with multiple feed and a reactive zone located in the first 5 stages is taken as a case study. This is modeled in the Aspen Plus® simulator in its version 9.0. For the verification of the solution, 2 post optimization analyzes are used, the first one for the calculation of the Totalized Annual Cost (TAC), and as a second method, the response surfaces are used to find the behavior of the constraints and the objective function with respect to the independent variables of the system. The objective function is taken as the ratio of the heat of the reboiler and the bottom product, taking into account that the cost of heating the mixture is significant in the operation of the tower, which is restricted to obtain an ethylene oxide composition. In peaks of 95 % and a composition of ethylene glycol in funds greater than 90 %. As a result of the optimization, the heat used by the reboiler and by the condenser is decreased, in other words, the amount of cooling services provided by water, such as the heating ones provided by high pressure steam are minimized.

Keywords: SQP optimization, ASPEN plus, reactive distillation, TAC, response surface.

INTRODUCCIÓN

A medida que la tecnología y la ciencia avanzan se desarrollan nuevas herramientas que las complementan. Un ejemplo común de estas herramientas son los simuladores de procesos químicos (Carlson, 1996). Por medio de bloques de operaciones, los simuladores permiten una simulación correcta y concreta de un proceso específico, lo que implica que efectuar cambios o modificaciones al proceso no tiene ningún riesgo colateral (Catá, González, González y Corsano, 2009). El simulador más común y de uso más accesible es el paquete Aspen (Fernández y Tovar, 2016). Este paquete ofrece diversas herramientas para la formulación y mejoramiento de un proceso sin importar su procedencia (Vega, Ruiz, Martínez y Erdmann, 2015), ya sea por medio de análisis y diseño barométrico (ofrecidos por Aspen Hydraulics), por análisis y diseño de redes térmicas (Aspen Energy Analyser, Aspen Exchanger Design and Rating), o por otras herramientas incluidas en este paquete, que pueden ser vinculadas al diseño primario del proceso en cualquiera de los simuladores disponibles para este paquete (Aspen HYSYS o Aspen Plus®, respectivamente) (Peters, Banks, Bridgwater y Dufour, 2017). El uso que últimamente está tomando renombre en la simulación de procesos es la optimización, que es una herramienta para mejorar un proceso por medio de modelos y algoritmos ya programados dentro del simulador.

Un problema de optimización se puede diferenciar de cualquier otro por su planteamiento, desarrollo y solución (Nocedal y Wright, 2006). Estos problemas se caracterizan por tener una función objetivo que se puede maximizar o minimizar en un área acotada por ciertas restricciones. Aunque el concepto de optimización es muy utilizado, generalmente ha sido mal interpretado. La optimización de un proceso siempre está relacionada con un criterio económico (Ravindran, Ragsdell y Reklaitis, 2006), ya sea para obtener más ganancias con los productos, reducir el costo de inversión en equipos, entre otras razones. Es por esto que la naturaleza y la formulación de las funciones objetivo deben estar relacionadas con variables que se puedan traducir en parámetros económicos (Ferrer, 2016); las restricciones, por otra parte, son generalmente tomadas por demandas del producto de interés o por requerimientos de diseño (Taha, 2011).

Actualmente, la optimización ha sido un foco en la investigación y desarrollo de nuevos conocimientos, que garantiza que en el momento de poner en marcha un proceso, previamente simulado con las restricciones de diseño necesarias (Zapata y Agudelo, 2015), este se inicie con una

maximización de ingresos por producción (lo que depende del comportamiento que presente el mercado) o por una minimización de gastos. Algunos autores afirman que la optimización es una herramienta para mejorar la operación de un proceso o asumir la toma de decisiones, como escogencia de equipos, tipo de servicios, entre otras (Orjuela, 2017).

Para ilustrar las ideas anteriormente mencionadas, este estudio toma como caso de estudio la simulación de una torre de destilación reactiva, la cual realiza una optimización operacional enfocada en el rehervidor de la columna para la producción de etilenglicol a partir de la hidratación de óxido de etileno, proceso que es simulado en Aspen Plus® v.9.

MATERIALES Y MÉTODOS

En el diseño de sistemas reaccionantes suele buscarse la obtención de altos valores de conversión; sin embargo, esto frecuentemente lleva al incremento de algunas de las variables de diseño, como los tiempos de retención y el tamaño de los reactores (Fogler, 2011), en otras palabras, reactores de volumen infinitos o tiempos de reacción infinitos. Un método para solucionar el problema anteriormente descrito es el uso de un sistema mixto de separación y reacción, como la destilación reactiva (Catá et ál., 2009). Una torre de destilación reactiva está constituida por una zona de reacción, donde existe un número de platos con cierta cantidad de *hold-up* (cantidad de catalizador) y una o más zonas de destilación. Al mezclar estos dos conceptos se pueden obtener conversiones y selectividades altas (Zapata y Agudelo, 2015). Igualmente, al ser un proceso en el cual se usa el punto de ebullición como medida para la separación, los gastos con mayor peso son los de calentamiento en el rehervidor (de Figueirêdo, Guedes, de Araújo, Vasconcelos y Brito, 2011); por tal motivo, la optimización para el caso de estudio tiene como formulación principal la relación de la cantidad de energía por unidad molar de producto obtenido.

Algoritmos de optimización

Dependiendo de la función objetivo y las restricciones, la interpretación del problema y la disposición de cálculo no siempre será igual entre un sistema y otro (Taha, 2011), en otras palabras, la solución de un problema de optimización es función del problema que se deba resolver; por tal motivo, no es lo mismo optimizar el rendimiento de un reactor, que determinar el número de etapas de una torre de destilación (Edgar, Himmelblau y Lasdon, 2001).

El principal problema al realizar una optimización recae en la convergencia de las restricciones, más cuando estas son solucionadas por métodos computacionales; para esto, algunos modelos están disponibles predeterminadamente en programas de modelamiento y simulación, como el paquete de simulación Aspen (Figueirêdo, Brito, Ramos, Vasconcelos y Brito, 2015). En Aspen Plus® se pueden utilizar modelos de optimización, como la programación no lineal integral mixta (MINLP) o el algoritmo de optimización de límite por aproximación cuadrática (BOBYQA). Estos modelos son resueltos con matemáticas vectoriales avanzadas (Schefflan, 2016), que han sido desarrolladas a partir del modelo de programación cuadrática secuencial (SQP). Algunos autores, como Baş y Boyacı (2007), proponen el uso de este modelo para el diseño de procesos, debido a su exactitud comprobada en procesos reales, simplicidad de programación y disponibilidad computacional.

El modelo SQP es un algoritmo basado en el método de búsqueda de mínimos y máximos de los multiplicadores de Lagrange, con la asistencia de la metodología de las condiciones KKT para restricciones de igualdad y desigualdad (Nocedal y Wright, 2006). Al aplicar este modelo, el resultado es un sistema de ecuaciones conformada por derivadas parciales de la función objetivo con cada una

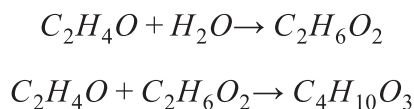
de las variables independientes del sistema (incluida las variables de sensibilidad). El modelo puede ser planteado tal como lo muestra la ecuación 1, donde K es la función objetivo; μ_i la restricción i del sistema; σ_i , la variable de sensibilidad para la restricción i , y x , cada una de las variables independientes del sistema.

$$L(x_i, \sigma_i, \mu_i) = K(x) + \sum_{i=1}^n \sigma_i \mu_i \quad (1)$$

La función objetivo propuesta para este problema es la minimización de la carga térmica de rehervición por kmol de mezcla obtenida con fondos, que está sujeta a que la composición de esta debe ser mayor al 90 % de etilenglicol y que la composición de óxido en cimas sea mayor al 95 %. Esta función objetivo es comúnmente utilizada en modelos de destilación y permite una correcta optimización (de Figueirêdo et ál., 2011).

Simulación de la torre de destilación reactiva

La producción de etilenglicol por hidratación de óxido de etileno implica una reacción en serie que produce dietilenglicol (Weibull y Nycander, 1954) al hidratar el óxido de etileno. El etilenglicol producido puede volver a reaccionar para producir dietilenglicol, así como se muestra a continuación:



Si se quisiera diseñar un proceso convencionalmente, el número de equipos mínimo podría resumirse a una batería de reactores en paralelo, un sistema de separación y un sistema de bombeo para retornar el reactivo sobrante (Baur, Higler, Taylor y Krishna, 2000; Ciric y Miao, 1994). Con la destilación reactiva, el número de equipos se reduce a 1, incluyendo el condensador y el rehervidor. En otras palabras, el uso de una torre de destilación reactiva para este sistema garantiza mayor conversión de óxido de etileno (Tuchlenski et ál., 2001) y, a su vez, la selectividad del etilenglicol al óxido de etileno (Krishna, 2002).

El catalizador empleado para este sistema de reacción es una solución diluida de ácido sulfúrico al 0.5-10 % (se utiliza en total 2.5 m³), distribuida de manera equitativa en cada una de las etapas reaccionantes. Las expresiones cinéticas para este caso son expresadas en ley de potencias y se pueden tomar como cinéticas elementales (ecuaciones 2 y 3) (Baur et ál., 2000).

$$r_{EG} = 1.1719 \times 10^{16} e^{\left(\frac{-9547.7}{T(K)}\right)} x_{EO} x_w \quad (kmol \ m^{-3} \ h^{-1}) \quad (2)$$

$$r_{DEG} = 1.5819 \times 10^{16} e^{\left(\frac{-9547.7}{T(K)}\right)} x_{EO} x_{EG} \quad (kmol \ m^{-3} \ h^{-1}) \quad (3)$$

Como lo muestra la figura 1, se utilizará una torre de destilación con múltiple alimento: una mezcla de agua y de óxido de etileno en el primer plato (segunda etapa teórica) y cuatro corrientes consecutivas con agua (Yang, Wu, Zhao, Wang y Lu, 2006). Por otra parte, la función objetivo empleada en la torre de destilación es la minimización de la relación de calor de rehervición y del producto de fondos, que está basada en la facilidad con la que la relación sea convertida en un parámetro económico (de Figueirêdo et ál., 2011), lo que se corrobora con un parámetro posoptimización conocido como TAC (suponiendo que existe una persona interesada en hacer una inversión para este equipo) (An et ál., 2015). Los servicios de calentamiento y enfriamiento para la torre, tomadas

de las bases encontradas en la literatura, son proporcionados generalmente por vapor saturado (en cualquiera de sus tres presentaciones) y por agua de enfriamiento. El modelo termodinámico con el que se predice las propiedades termodinámicas de los componentes fue Wilson, para el caso de la no idealidad del líquido asistido UNIFAC en las sustancias sin coeficientes binarios restantes. Para la torre de destilación reactiva fue utilizado el modelamiento de la columna RadFrac de Aspen Plus® (ver figura 1).

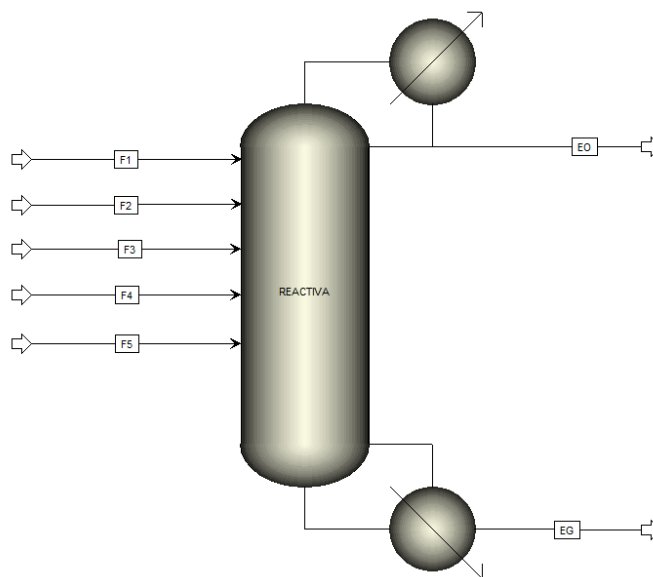


Figura 1. Esquema de la torre de destilación reactiva para la producción de etilenglicol en RadFrac utilizando el paquete termodinámico WILSON.

Las corrientes de alimento están a presión atmosférica y en punto de saturación líquida. Asimismo, la torre de destilación fue simulada bajo la convergencia del flujo de rehervidor (BR) y la relación de destilado a alimento (D/F). En la tabla 1 se evidencian los parámetros necesarios para la simulación.

Tabla 1. Especificaciones de diseño de la columna de destilación reactiva

Parámetro	
Alimento 1	7.31 mol agua s ⁻¹
	2.24 mol óxido s ⁻¹
Alimento 2	1.39 mol óxido s ⁻¹
Alimento 3	1.32 mol óxido s ⁻¹
Alimento 4	1.34 mol óxido s ⁻¹
Alimento 5	1.36 mol óxido s ⁻¹
Reflujo de rehervidor (BR)	15
Relación destilada a alimentación (D/F)	0.01
Etapas teóricas	10
Etapas teóricas reaccionantes	De 2 a 6
Hold-up de etapa reaccionante	0.5

Fuente: Yang et ál. (2006).

El sistema simulado permite la estimación de la temperatura de servicios, en la que se considera la temperatura del condensador y del rehedvidor (Luyben, 2013). En este caso el condensador tiene una temperatura de 10 °C, por lo que se utiliza un servicio de refrigeración proporcionado por agua, la cual ingresa a 4 °C y abandona el condensador a 9 °C en contracorriente. Por otra parte, debido a que la temperatura del rehedvidor es 184 °C, es necesario el uso de vapor saturado de alta presión a una temperatura de 250 °C, que ingresa en fase gaseosa y abandona el rehedvidor en líquido saturado.

El problema formulado para la optimización de la torre de destilación reactiva es la disminución de la relación entre el calor en rehedvidor y el flujo de fondos, en la que se encuentra la mayor distribución de etilenglicol (producto de interés en este caso). Esto puede ser interpretado como la cantidad de calor que se debe suministrar al sistema para obtener un kilo mol de mezcla; en cambio, las restricciones del sistema son formuladas con la premisa de aumentar las composiciones de etilenglicol y óxido de etileno para fondos y cimas, respectivamente. Las variables independientes del modelo son las mismas que bajo un análisis de grados de libertad hacen al sistema plenamente especificado. El reflujo de rehedvidación (BR) y la relación destilado a cimas (D/F) y los rangos de cada variable son establecidos con un análisis de sensibilidad, con el objetivo de tener una interpretación física válida. El problema de optimización puede resumirse como:

Minimizar:

$$K = \frac{Q_R}{B}$$

Sujeto a:

$$x_{fondos}^{EG} \leq 0.9$$

$$x_{cimas}^{OE} \leq 0.95$$

Variando:

$$0.001 \leq \frac{D}{F} \leq 0.01$$

$$1 \leq BR \leq 30$$

Análisis posoptimización

Optimizar un proceso no implica necesariamente la mejora del mismo. Diversas optimizaciones desembocan en fallos operativos o deficiencia en la calidad del proceso, ya sea por la formulación incorrecta de la función objetivo o restricciones, entre otras consecuencias. Es por esto que se debe realizar un análisis posoptimización para verificar el resultado que se proclama óptimo (Zhu, Xu, Liu, Zhang y Wang, 2016).

Como ya se había mencionado anteriormente, se utiliza el costo total anualizado (TAC) y las superficies de respuesta como los parámetros posoptimización; según lo explicado, el valor del TAC optimizado debe ser menor al del diseño original (Figueirêdo et ál., 2015). Estos parámetros son calculados bajo correlaciones de torres de destilación propuestas por Luyben. Para ello es necesario calcular el diámetro y su altura, así como la hidráulica funcional, los cuales son calculados en Aspen

Plus* (An et ál., 2015), con el objetivo de que ningún plato de la torre sufra inundación o agotamiento de líquido. Las ecuaciones por las que se calculará el TAC están representadas a continuación (Luyben, 2013):

$$CC_{tubo\ y\ etapas} (USD) = 17640 D^{1.066} L^{0.802} \quad (4)$$

$$CC_{intercambiador} (USD) = 7296(A)^{0.65} \quad (5)$$

$$TAC \left(\frac{USD}{Año} \right) = \frac{Costos\ capitales}{Periodo\ recup.} + costos\ energia \quad (4)$$

Donde D es el diámetro de la columna; L , la longitud de la misma, y A , el área de intercambio del rehervidor o del condensador. Los costos capitales son la suma de los costos de tubos, platos, intercambiadores y catalizadores. Los costos de energía son tomados y calculados con los costos mostrados en la tabla 2. El área es calculada junto a la ecuación de diseño de un intercambiador de calor.

Tabla 2. Costos comunes para servicios en torres de destilación

Servicio utilizado	Costo (\$/GJ)
Servicios de calentamiento	
Vapor baja presión (6 bar, 160 °C)	7.78
Vapor media presión (11 bar, 184 °C)	8.22
Vapor alta presión (42 bar, 254 °C)	9.88
Electricidad	16.8
Servicios de refrigeración	
Agua de enfriamiento (5 °C a 15 °C)	4.43
Refrigerante a -20 °C	7.89
Refrigerante a -50 °C	13.11

Fuente: Luyben (2013).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En el diseño original, los productos obtenidos por cimas están constituidos por el restante de óxido que no reaccionó en el sistema, mientras que para los fondos se encuentra una mezcla, la cual tiene como componente mayoritario el etilenglicol con una composición de 89 % en fracción molar; en cambio, para batería de reactores la composición de etilenglicol ronda entre el 25 % al 40 % bajo las mismas condiciones (Schoenmakers y Bessling, 2003). Desde el punto de vista de la ingeniería química, el cambio de una batería de reacción a una torre de destilación reactiva muestra la evolución del proceso, en otras palabras, el proceso químico es reducido a un equipo donde se hace reacción y separación simultáneamente.

El principal problema de la función objetivo es su convergencia; para ello se itera dentro del simulador con diferentes tolerancias, hasta hacer que sea la mínima posible; esta decisión es tomada por el tipo de programación disponible en el simulador. Las restricciones están propuestas para maximizar la composición de etilenglicol en los fondos y la obtención de composiciones altas de óxido de etileno en cimas. Por disponibilidad, el modelo que se utiliza para la optimización es la programación cuadrática secuencial (SQP) (de Figueirêdo et ál., 2011).

Tabla 3. Comparación de resultados para el diseño original y optimizado

Variable	Escenario	
	Original	Optimizado
Reflujo rehervidor (BR)	15	13.55
Relación D/F	0.01	0.001
Flujo de fondos (Kmol/h)	26.31	26.315
Calor rehervidor (GJ/h)	22.14	20.5763
K (GJ/Kmol)	0.8415	0.78192
X_{EO}	97.43%	99.81 %
S_{EO-EG}	85.03%	85.98 %

La teoría de optimización dicta que, generalmente, las variables independientes que competan al modelo encuentran su valor óptimo en el límite inferior o superior (Khuri y Mukhopadhyay, 2004). Para este problema, la relación D/F encuentra su valor óptimo en el límite inferior, mientras que el flujo de fondos permanece en el mismo punto. Obedeciendo a la teoría, como lo muestra la figura 2, la función objetivo tiene un comportamiento lineal, debido a que la relación del calor de rehervición es una función directamente proporcional a la cantidad de líquido que se deba evaporar, en otras palabras, depende totalmente del reflujo de rehervición (BR) y la relación de destilado a alimentación (D/F).

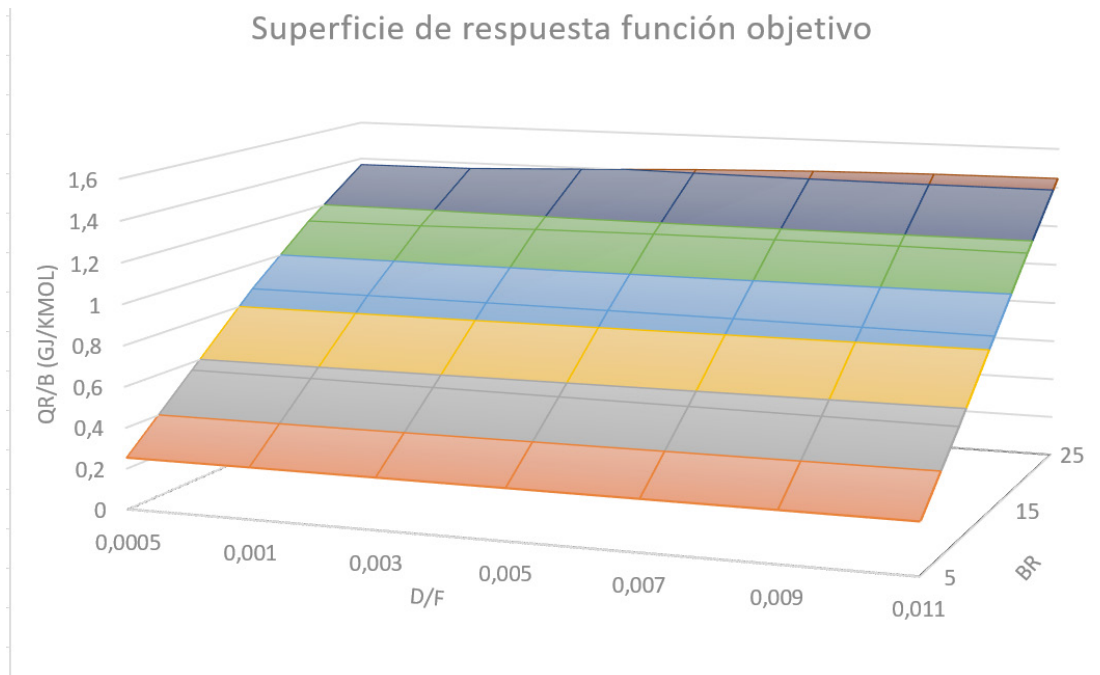


Figura 2. Comportamiento de la función objetivo con relación a BR y D/F.

De manera análoga, este análisis para las restricciones muestra que se puede despreciar la restricción de cimas al observar la variable de respuesta, que, en este caso, es la composición de óxido de etileno en cimas (figura 3), es decir, no tiene un cambio significativo en su valor, lo que muestra que en este espacio de soluciones la restricción se cumple y el problema converge sin problema (Gunst, 1996).

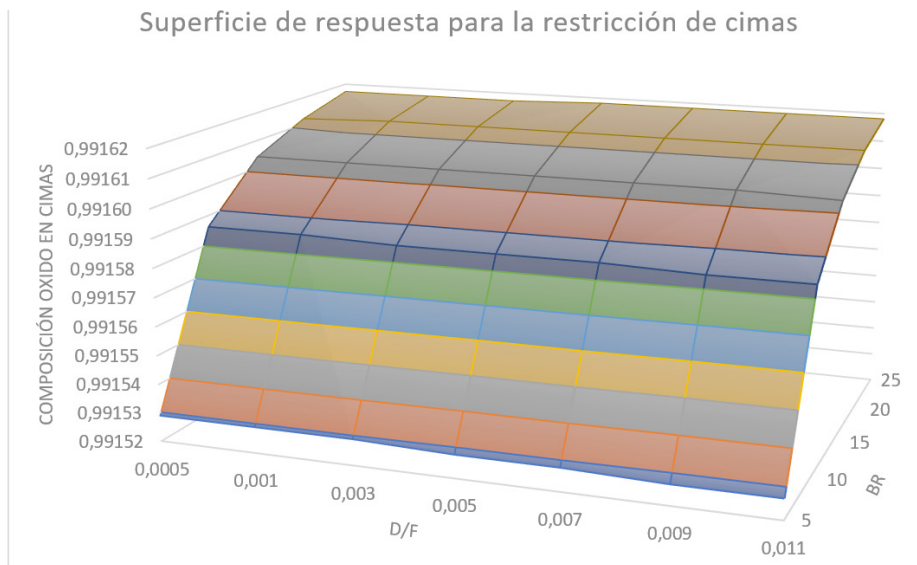


Figura 3. Comportamiento de la restricción de cimias en relación a BR y D/F.

La segunda restricción es la de mayor importancia para este problema de optimización. Los valores que se obtienen para cada espacio de soluciones muestran valores muy lejanos; así, el problema de optimización puede ser planteado sin la restricción de cimias, mientras que la restricción de fondos es la crucial para la convergencia a la solución del problema (Bezerra et ál., 2008). Como lo muestra la figura 3, el valor óptimo recae en la zona con menor pendiente en la superficie, haciendo énfasis en la teoría vectorial, el óptimo restringido de la función objetivo.

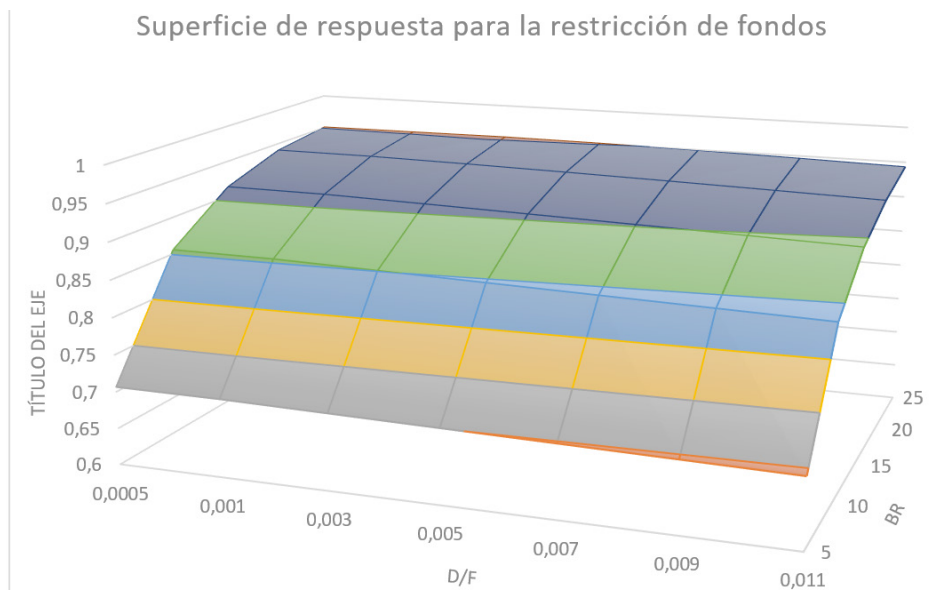


Figura 4. Comportamiento de la restricción de fondos en relación a BR y B.

Costo total anualizado (TAC)

El comportamiento esperado para la optimización es traducido en la disminución del TAC respecto al original, como se puede observar en la tabla 4. Las variables independientes para este sistema dependen del dimensionamiento de la torre; igualmente, para amortiguar el aumento de reflujo de rehervición, el diámetro del plato debe aumentar con el fin de disminuir los riesgos de inundamiento, caso similar a la relación de destilado a alimento. Como consideraciones secundarias, gracias a una búsqueda en el mercado se establece que el precio de la dilución de 5 % de ácido sulfúrico (que actúa como catalizador) tiene un precio de 7 dólares por cada kg de solución; asimismo, la densidad reportada para esta solución es 770 m³/kg (Tuchlenski et ál., 2001).

Tabla 4. Cálculo riguroso para el TAC en la columna de destilación reactiva para ambos casos

Diseño original		Diseño optimizado	
Q _C	-6648.76 kW	Q _C	-6217.71 kW
Q _R	6151.45 kW	Q _R	5715.64 kW
A _C	561.42 m ²	A _C	525.02 m ²
A _R	311.21 m ²	A _R	289.16 m ²
C _{Cond}	446.81 k\$	C _{Cond}	427.76 k\$
C _{Reb}	304.49 k\$	C _{Reb}	290.28 k\$
N	10	N	10
H	5.856 m	H	5.856 m
D	2.072 m	D	1.998 m
C _{tubo y plato}	158.24 k\$	C _{tubo y plato}	152.25 k\$
Hold Up	2.5 m ³	Hold Up	2.5 m ³
C _{catalizador}	13.475 k\$	C _{catalizador}	13.475 k\$
C _{Serv Cal}	1917.95 k\$/año	C _{Serv Cal}	450.93 k\$/año
C _{Serv Enf}	929.497 k\$/año	C _{Serv Enf}	41.60 k\$/año
m _{Vapor}	3.58 kg/s	m _{Vapor}	3.32 kg/s
m _{Agua}	317.01 kg/s	m _{Agua}	296.454 kg/s
C _{capitales}	923.01 k\$/año	C _{capitales}	883.77 k\$/año
TAC	3155.12 k\$/año	TAC	787.12 k\$/año
Amortización	3 años	Amortización	3 años

La primera condición que se observa es que los costos fijos disminuyen notablemente, en la media en que el diámetro se reduce, así como el calor empleado para el condensador y el rehervidor, respectivamente, lo que como consecuencia disminuye las áreas de intercambio de ambas; igualmente, los costos variables del modelo (que constan en el costo del uso de servicios de la torre) bajan. En otras palabras, los costos de compra del equipo y los costos de uso disminuyen. Este comportamiento es proporcionado por la formulación de la función objetivo; ahora, con otra función objetivo puede que el modelo SQP no converja y se tenga que emplear otros algoritmos (como los anteriormente mencionados).

CONCLUSIONES

Las industrias buscan minimizar el desperdicio de materias primas, energía, equipos, entre otros factores, para ahorrar dinero y maximizar sus utilidades. La aplicación descrita en este artículo es algo común para un proceso químico (Tuchlenski et ál., 2001); por esto es que, por lo general, en el diseño de procesos se tiene en cuenta la optimización y sus premisas. El diseñador debe estar consciente de que optimizar un proceso no tiene necesariamente que disminuir costos; esto depende de la formulación de la función objetivo (Baş y Boyacı, 2007).

Para este caso, la formulación de la función objetivo, así como las restricciones, tiene implícito los términos económicos que fueron buscados y comparados bajo la revisión de la literatura. Con esta aplicación se disminuye la cantidad de servicios de calentamiento y de enfriamiento, lo que implica disminuir el tamaño de los intercambiadores de calor presentes en el sistema, en otras palabras, una disminución en el costo energético y en el costo de inversión de la torre. Asimismo, se logra aumentar la producción de etilenglicol, la conversión de óxido de etileno y la selectividad del proceso.

Para esta aplicación en particular, el valor óptimo de reflujo de rehervición toma un valor que no está en los extremos; esto significa que esta variable no tiene tanto efecto como la relación D/F, lo que puede inferirse, dado que D/F obtiene su valor óptimo en el límite inferior del problema. Por ende, la variable que afecta más la optimización del problema es la relación de alimentación a destilado. Lógicamente, hacer que la distribución de flujos en el destilado sea menor favorece la producción de etilenglicol y dietilenglicol, debido a la distribución de temperatura en cada plato de la torre de destilación.

Con la solución de la optimización se puede comprobar que la construcción/inversión de una torre que opere en las condiciones óptimas y sujeta a la función objetivo propuesta es una torre más delgada y más económica.

Aunque ambas restricciones son válidas para el modelo de optimización, gracias al análisis de superficies de respuesta, la restricción de cimas no es tan necesaria en el problema; es por tal motivo que se puede llegar a la misma respuesta suprimiendo a esta del problema (sus valores para cada combinación de variables supera el 99%). Mientras que la restricción de fondos tiene una completa interacción para la solución del problema, sus cambios son considerables a medida que cada variable cambia.

AGRADECIMIENTOS

El autor expresa su gratitud al grupo de investigación en Procesos Separaciones no Convencionales (GPS), por el apoyo a la investigación.

ABREVIATURAS Y SÍMBOLOS

AC	Área del condensador (m ²)
AR	Área del rehervidor (m ²)
B	Flujo de fondos (kmol h ⁻¹)
BR	Reflujo de rehervición
C	Costo (k\$)
CC	Costo capital (k\$)
D	Diámetro (m)

D/F	Relación destilado alimento
DG	Dietilenglicol
EG	Etilenglicol
EO	Óxido de etileno
H	Altura (m)
K	Calor de rehidratación por unidad de fondos (GJ/h)
L	Función langriana
m	Flujo másico (kg/s)
μ_i	Restricción i
n	Flujo molar (kgmol/s)
N	Etapas teóricas
NF	Plato de alimentación
P	Presión (bar)
QC	Calor de condensador (GJ)
QR	Calor de rehidrador (GJ)
SEO-EG	Selectividad del óxido de etileno hacia etilenglicol
σ_i	Variable de sensibilidad para la restricción i
T	Temperatura (K)
TAC	Costo total anualizado (k\$/año)
W	Agua
x	Composición molar líquida
XEO	Conversión de óxido de etileno (%)
Xj	Variable independiente j

REFERENCIAS

- An, Y., Li, Y., Li, W., Huang, S., Ma, J., Shen, C., y Xu, C. (2015). Design/optimization of energy-saving extractive distillation process by combining preconcentration column and extractive distillation column. *Chemical Engineering Science*, 135, 166-178. doi:10.1016/j.ces.2015.05.003
- Baş, D., y Boyacı, İ. (2007). Modeling and optimization I: usability of response surface methodology. *Journal of Food Engineering*, 78(3), 836-845. doi:10.1016/j.jfoodeng.2005.11.024
- Baur, R., Higler, A., Taylor, R., y Krishna, R. (2000). Comparison of equilibrium stage and nonequilibrium stage models for reactive distillation. *Chemical Engineering Journal*, 76(1), 33-47. doi:10.1016/S1385-8947(99)00114-X
- Bezerra, M., Santelli, R., Oliveira, E., Villar, L., y Escalera, L. (2008). Response surface methodology (RSM) as a tool for optimization in analytical chemistry. *Talanta*, 76(5), 965-977. doi:10.1016/j.talanta.2008.05.019
- Carlson, E. (1996). Don't gamble with physical properties for simulations. *Chemical Engineering Progress*, 92(10), 35-46.
- Catá, Y., González, E., González, M., y Corsano, G. (2009). Experiencia en la integración de procesos en la industria papelera, utilizando el Aspen Plus. *Tecnología Química*, 29(2), 70-82.
- Ciric, A., y Miao, P. (1994). Steady state multiplicities in an ethylene glycol reactive distillation column. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 33(11), 2738-2748. doi:10.1021/ie00035a025

- De Figueirêdo, M., Guedes, B., de Araújo, J., Vasconcelos, L., y Brito, R. (2011). Optimal design of extractive distillation columns—A systematic procedure using a process simulator. *Chemical Engineering Research and Design*, 89(3), 341-346. doi:10.1016/j.cherd.2010.06.011
- Edgar, T., Himmelblau, D., y Lasdon, L. (2001). *Optimization of chemical processes* (2.ª ed.). Boston, EE. UU.: McGraw-Hill.
- Fernandez, J, y Tovar, N. (2016). Spreadsheet: una poderosa herramienta dentro de aspen HYSYS. *Revista Semilleros*, 2(1), 60-65.
- Ferrer, F. (2016). *Optimization techniques for automated software test data generation* (tesis de doctorado). Departamento de Lenguajes y Ciencias de la Computación, Universidad de Málaga, Málaga, España.
- Figueirêdo, M., Brito, K., Ramos, W., Vasconcelos, L., y Brito, R. (2015). Optimization of the design and operation of extractive distillation processes. *Separation Science and Technology*, 50(14), 2238-2247. doi:10.1080/01496395.2015.1023448
- Fogler, H. (2011). *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. México: Pearson Educación.
- Gunst, R. (1996). Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments. *Technometrics*, 38(3), 284-286. doi:10.1080/00401706.1996.10484509
- Khuri, A., y Mukhopadhyay, S. (2004). Response surface methodology. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics*, 2(2), 128-149. doi:10.1002/wics.73
- Krishna, R. (2002). Reactive separations: more ways to skin a cat. *Chemical Engineering Science*, 57(9), 1491-1504. doi:10.1016/S0009-2509(02)00020-9
- Luyben, W. (2013). *Distillation design and control using asp en simulation*. Hoboken, EE. UU.: John Wiley & Sons.
- Vega, M., Ruiz, L., Martinez, J., y Erdmann, E. (2015). Diseño del proceso de una torre de vacío. Ventajas de la simulación. *Revista de la Facultad de Ciencias Químicas*, 12, 30-37.
- Nocedal, J., y Wright, S. (2006). *Numerical optimization*. EE. UU.: Springer.
- Orjuela, J. (2017). *Optimización por técnicas metaheurísticas aplicadas a unidades destilación (CDU)–hidrorruptura (HC) para mantener rendimiento y calidad del diésel obtenidos* (tesis de maestría). Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D. C., Colombia.
- Peters, J., Banks, S., Bridgwater, A., y Dufour, J. (2017). A kinetic reaction model for biomass pyrolysis processes in aspen plus. *Applied Energy*, 188, 595-603. doi:10.1016/j.apenergy.2016.12.030
- Ravindran, A., Ragsdell, K., y Reklaitis, G. (2006). *Engineering optimization* (2.ª ed.). Hoboken, EE. UU.: John Wiley & Sons.
- Schefflan, R. (2016). *Teach yourself the basics of aspen plus* (2.ª ed.). EE. UU.: AIChE/Wiley Press.
- Schoenmakers, H., y Bessling, B. (2003). Reactive and catalytic distillation from an industrial perspective. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, 42(3), 145-155. doi:10.1016/S0255-2701(02)00085-5
- Smejkal, Q., y Šoóš, M. (2002). Comparison of computer simulation of reactive distillation using aspen plus and hysys software. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 41(5), 413-418. doi:10.1016/S0255-2701(01)00160-X
- Taha, H. (2011). *Investigación de operaciones* (7.ª ed.) México: Pearson Educación de México.

- Tuchlenski, A., Beckmann, A., Reusch, D., Düssel, R., Weidlich, U., y Janowsky, R. (2001). Reactive distillation—industrial applications, process design & scale-up. *Chemical Engineering Science*, 56(2), 387-394. doi:10.1016/S0009-2509(00)00240-2
- Weibull, B., y Nycander, B. (1954). The distribution of compounds formed in the reaction between ethylene oxide and water, ethanol, ethylene glycol, or ethylene glycol monoethyl ether. *Acta Chemica Scandinavica*, 8(5), 847-858. doi:10.3891/acta.chem.scand.08-0847
- Yang, B., Wu, J., Zhao, G., Wang, H., y Lu, S. (2006). Multiplicity analysis in reactive distillation column using Aspen Plus. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 14(3), 301-308. doi:10.1016/S1004-9541(06)60075-X
- Zapata, R., y Agudelo, Y. (2015). Use of advanced simulation software Aspen Plus as teaching tool in chemical reaction engineering. *Revista Educación en Ingeniería*, 10(19), 57-68. doi:10.26507/rei.v10n19.508
- Zhu, Z., Xu, D., Liu, X., Zhang, Z., y Wang, Y. (2016). Separation of acetonitrile/methanol/benzene ternary azeotrope via triple column pressure-swing distillation. *Separation and Purification Technology*, 169, 66-77. doi:10.1016/j.seppur.2016.06.009