

Systematic methodology to achieve self-optimizing TITO control for a dividing wall column

R.R. Díaz-Vásquez, F. Guerrero-Morán, G.R. Urrea-García,
D. Cantú-Lozano, G. Luna-Solano

Instituto Tecnológico de Orizaba, Orizaba, México (itorizaba@hotmail.com; Tel.: +52 272 724 4096)

Abstract: A methodology to select a self-optimizing control structure for a dividing wall column (DWC) is evaluated, the proposed methodology uses reflux flow rate and reboiler heat input as manipulated variables to control temperature of different stages of the column. The selection of the multivariable control structure is based on the minimization of a cost function dependent on the amount of impurity in each product stream of the column. The design sequence of each control loop also reduces the interaction between the control loops.

Keywords: Algorithm, control structure, dividing wall column, cost function, distillation.

1. INTRODUCCIÓN

La destilación es considerada la tecnología de separación más importante en la industria química y es responsable de una parte relevante del consumo global de energía (Staaq y col., 2014). Las columnas de pared divisoria (DWC) (Figura 1) son columnas de destilación intensificada que se utilizan para separar mezclas ternarias y multicomponentes (Agrawal y Ramapriya, 2016). Se han reportado ventajas con respecto a las secuencias de destilación, por ejemplo, un menor costo de capital y ahorros de energía (Long y Lee, 2014). Además, este ahorro energético favorece el desarrollo de una industria sostenible, y la fusión de varias columnas en una sola, conlleva a la reducción de espacio (Kiss y Bildea, 2011).

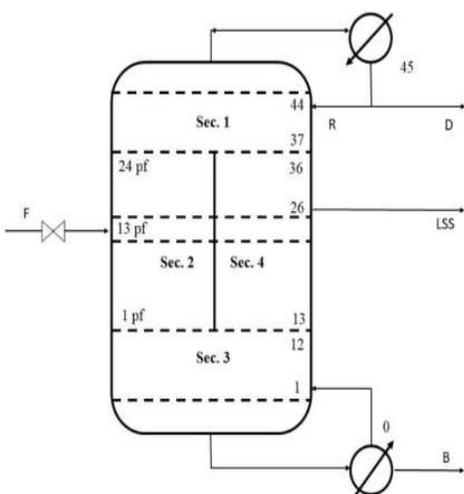


Fig. 1. Secciones y etapas de la DWC.

Sin embargo, debido a la no linealidad del proceso, no siempre se garantiza el consumo mínimo de energía de las columnas de pared divisoria. Por tanto, los controles juegan un papel fundamental en la consecución del ahorro energético prometido por las DWC (Donahue y col., 2016).

Los controladores de temperatura han sido preferidos por su desempeño superior, y porque los controladores de composición resultan costosos, requieren un mantenimiento oneroso y pueden causar grandes retardos. Sin embargo, con respecto a las configuraciones de control, aunque tanto estudios experimentales como simulados confirman que el control de modelo predictivo (MPC) provee un control más estricto y tiempos de asentamiento más cortos que el control PID (Donahue y col., 2016); también se ha encontrado que sistemas de control de temperatura y sus variantes (Wu y col., 2020; Pan y col., 2019; Jia y col., 2018; Wang y col., 2018) son alternativas factibles de control. Este estudio diseñará una configuración de control de dos entradas y dos salidas (TITO) y evaluará su efecto sobre el desempeño del sistema en las columnas de pared divisoria.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

Para evaluar el comportamiento del proceso, incluyendo sus no linealidades y caracterización de sus perfiles de temperatura, composición y tasa de flujo de todas las corrientes; se utilizó un código Fortran, cuya base se puede encontrar en Luyben (1990); el código fuente para la simulación de este proceso es tomado de Matla-González y colaboradores (2013). Se necesitan algunas especificaciones tanto para el prefraccionador como para la columna principal para definir los parámetros de diseño de la columna en el código fuente de la simulación (número de etapas, composiciones y temperaturas en estado estable) que se proporcionan en el conjunto de datos. Los datos de las etapas necesarias para el código fuente se pueden calcular utilizando ecuaciones correspondientes al balance de materia, relación de equilibrio, sumas de fracciones molares y ecuaciones de balance de energía (también llamadas MESH) (Wang y Henke, 1966).

Los parámetros de la DWC y las condiciones en estado estacionario son mostrados en la Tabla 1 y Tabla 2 respectivamente. Los valores del proceso de destilación fueron obtenidos de Luyben (2013).

Tabla 1. Parámetros de la columna.

| Sección de la columna | Parámetro | Valor | Unidad |
|-----------------------|-------------------------|--------|---------|
| Prefracc. (Sec. 2) | Número de etapas | 24 | - |
| | Etapas de alimentación | 13 | - |
| | Flujo de alimentación | 1000 | [mol/s] |
| | Diámetro | 5.63 | [m] |
| Columna principal | Número de etapas | 44 | - |
| | Alimentación líquida | 12 | - |
| | Alimentación de vapor | 37 | - |
| | Etapas de flujo lateral | 26 | - |
| | Diámetro (Sec. 1 y 3) | 7.23 | [m] |
| | Diámetro (Sec. 4) | 4.53 | [m] |
| | Tasa de reflujo | 667.2 | [mol/s] |
| | Presión de los fondos | 67.89 | [kPa] |
| | Presión del domo | 37.49 | [kPa] |
| | Calor del reboiler | 35.344 | [MW] |
| Eficiencia de etapa | 100 | [%] | |

Tabla 2. Condiciones de estado estacionario en el proceso de destilación de la DWC.

| Cond. | Componente | | | Tasa de flujo | T |
|-------------------|------------|--------|--------|---------------|-----|
| | B | T | X | | |
| Unidad | [mol%] | [mol%] | [mol%] | [mol/s] | [K] |
| Aliment. | 30 | 30 | 40 | 1000 | 355 |
| Destilado | 99 | 1 | 0 | 303 | 322 |
| Corriente lateral | 0.1 | 99 | 0.9 | 296 | - |
| Fondos | 0 | 1 | 99 | 401 | 404 |

El nuevo algoritmo propuesto se expone en la Figura 2, donde la metodología para encontrar una estructura de control óptima es descrita brevemente. El diagrama de flujo establece una variable n , como un contador del número de veces que el proceso debe repetirse en función del número de variables manipuladas establecidas. La variable m , por otra parte, puede ser cualquiera de los seis grados de libertad de una columna de destilación tradicional con una corriente lateral: las tasas de flujo del reflujo, del destilado, de la corriente lateral, de los fondos, de calor del reboiler y del condensador; además en la DWC se añade la fracción líquida que regresa al prefraccionador. En esta metodología, el proceso de selección inicia con el análisis de una variable manipulada. Se consideran dos variables manipuladas (m) y el orden de $m1$ y $m2$, se discutirá a continuación, a medida que se analiza la DWC.

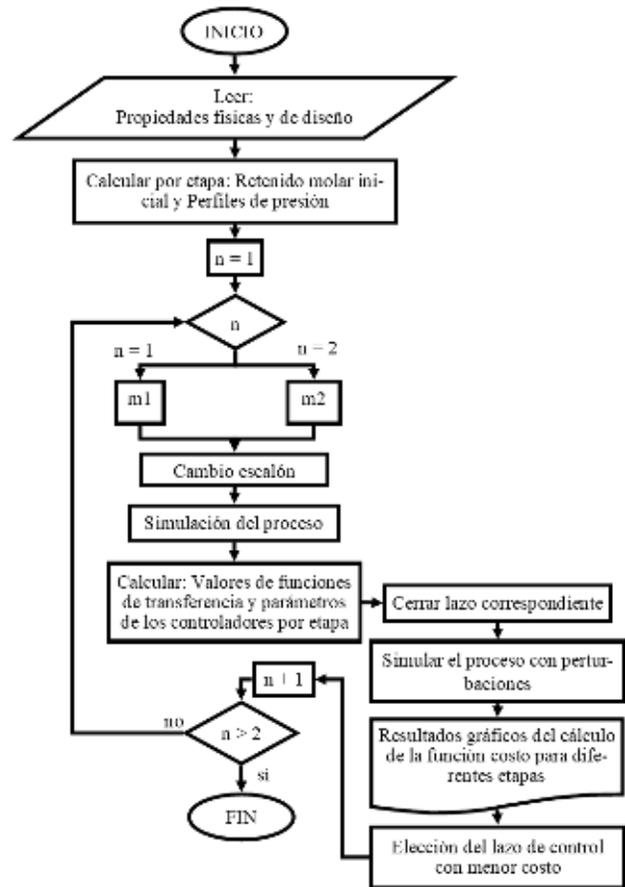


Fig. 2. Algoritmo para seleccionar una estructura de control óptima.

Los controladores elegidos para desarrollar las estructuras fueron los Proporcionales-Integrales (PI); a causa de que se considera un modo de control con cierta robustez respecto al ruido (Smith y Corripio, 2014). Para estimar los parámetros del controlador se estudió una primera variable manipulada con un cambio escalón. Se utilizó el método de ajuste número tres de Smith y Corripio (2014) para encontrar los valores de las funciones de transferencia. Después, para calcular los parámetros del controlador PI, se utilizó el método de ajuste SIMC (Grimholt y Skogestad, 2018). Una vez realizados los cálculos para el primer lazo de control, se cerró el lazo para controlar una temperatura y se estudió la siguiente variable manipulada. Se repitió el método hasta estudiar las dos variables manipuladas (reflujo y calor del hervidor).

La respuesta de cada lazo de control se evaluó utilizando una función costo (1) para la DWC de tres productos, denotada como J en \$/kmol propuesta por Khanam y col. (2014):

$$J = Bx_{B,Tol} + LSS(x_{LSS,Ben} + x_{LSS,O-Xyl}) + Dx_{D,Tol} \quad (1)$$

Para establecer la función objetivo se asume un proceso donde la energía de funcionamiento no es una limitante, por lo tanto, la DWC puede operar a su máxima capacidad.

Además, se realiza la suposición de que los costos unitarios son los mismos para los tres componentes, y que el precio de los productos depende de su pureza; así la función de costo se expresa como la suma total de impurezas en las corrientes de salida, a mayor cantidad de impurezas en los productos mayor costo. Donde las variables $x_{i,j}$ indican la composición de la corriente de salida (i) con respecto al componente principal en cuestión (j). Los componentes o-Xileno (o-Xyl), Tolueno (Tol) y Benceno (Ben), corresponden en ese orden a los componentes de la mezcla con volatilidades baja, media y alta; y por tanto cada uno es el componente principal en los fondos, la corriente lateral y el destilado, respectivamente. Por consiguiente, la impureza clave en la corriente del destilado (D), es el componente Tol; en la corriente lateral (LSS), las impurezas clave son Ben y o-Xyl; y en la corriente de los fondos (B), la impureza clave es el componente Tol.

Para simular un comportamiento de DWC real, el proceso de destilación se somete a tres alteraciones diferentes en la composición de la alimentación, que se muestran en la Tabla 3.

Tabla 3. Perturbaciones en el proceso

| Perturbación | Tiempo | Composición de la alimentación BTX |
|--------------|--------|------------------------------------|
| Unidad | [h] | [mol%- mol%- mol%] |
| 1 | 20 | 30-35-35 |
| 2 | 60 | 30-30-40 |
| 3 | 100 | 35-30-35 |

3. RESULTADOS

El modelado de la respuesta de la temperatura de cada plato se realiza asumiendo un primer orden más tiempo muerto (FOPDT), caracterizado por la función de transferencia (2).

$$G(s) = \frac{Ke^{-\theta s}}{\tau s + 1} \quad (2)$$

3.1 Estructura de control 1

Los valores de la función de transferencia calculados para la temperatura de las etapas 7 y 41 se muestran en la Tabla 4. Después, los parámetros del controlador fueron determinados, tomando en cuenta el valor de la constante de tiempo de lazo cerrado, τ_c sugerida por Dahlin (1968) (Tabla 5). En este caso, las variables manipuladas, m_1 y m_2 , son la tasa de reflujo y la tasa de calor al rehervidor, respectivamente.

Tabla 4. Valores de función de transferencia.

| Etapas (S) | 7 | 41 |
|-------------------------|--------|----------|
| Variable manipulada (m) | Qr | R |
| K | 6.5522 | -0.4916 |
| θ | 0 | 0 |
| τ | 7488 | 60720.12 |

Tabla 5. Parámetros para control PI obtenidos con el método de sintonización SIMC.

| Parámetro | Valor | |
|---------------|----------|------------|
| Etapas (S) | 7 | 41 |
| K_c | 0.3629 | -2.5122 |
| K_c Unidad | [MW/K] | [mol/(sK)] |
| τ_i [h] | 2.0854 | 16.8667 |
| T_{ref} [K] | 386.7833 | 326.944 |

La primera variable manipulada seleccionada para esta solución fue el reflujo. En la Figura 3, se expone la respuesta de la función costo del proceso de destilación evaluado con la ecuación (6). Se seleccionó el control de la etapa 41 (S41) debido a que proporciona un buen equilibrio entre desempeño y robustez para el control de composición de la corriente de destilado.

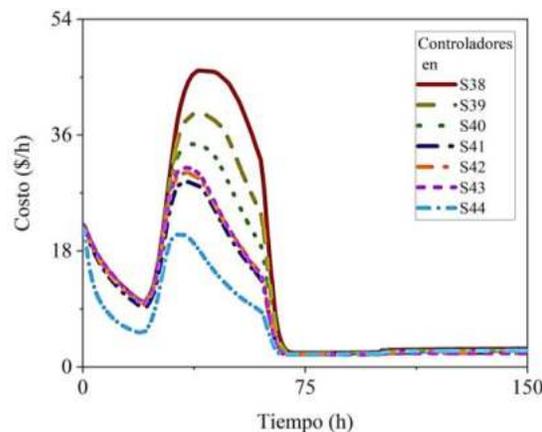


Fig. 3. Respuesta de costos con un lazo de control.

Una vez que se mantiene el lazo cerrado para el control de la temperatura del plato 41 con la tasa de reflujo, se procedió a obtener la función de transferencia para la temperatura de los platos 1 a 7 de la sección 3 de la columna, usando como variable manipulada la tasa de calor al rehervidor. Después, se diseñaron y evaluaron los controladores, utilizando como variables manipuladas el reflujo y el calor del reboiler. En la Figura 4, se muestra la respuesta de la función costo del proceso de destilación con dos lazos. Se seleccionó el control de la etapa 7 (S7) debido a que proporciona un buen equilibrio entre desempeño y robustez para el control de composición de las corrientes del destilado y fondo de la columna. En la Figura 5 se muestra el comportamiento de la composición en las corrientes de salida, se nota que existe una mejora en comparación con el comportamiento de la composición del destilado en la Figura 4. Finalmente, para este lazo cerrado, el comportamiento de las temperaturas controladas se presenta en la Figura 6, que muestra que S41 se somete a un control de temperatura adecuado, ya que tiene un tiempo de asentamiento mínimo, además de permanecer en el punto de consigna; por su parte, S7 también tiene un control adecuado, aunque sutilmente complicado por la interacción con el bucle anterior, ya que sí presenta una

pequeña desviación, pero luego de la tercera perturbación regresa rápidamente al estado estacionario.

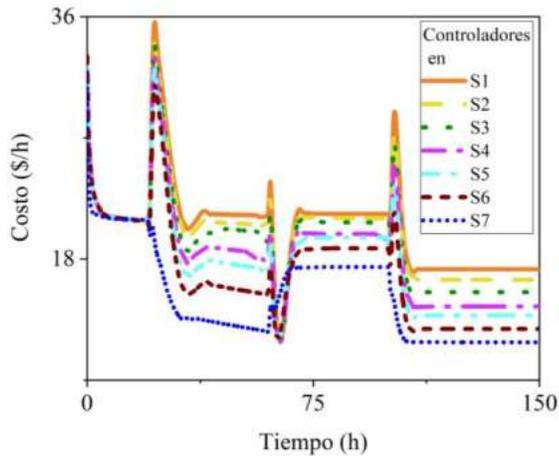


Fig. 4. Respuesta de costos con dos lazos de control.

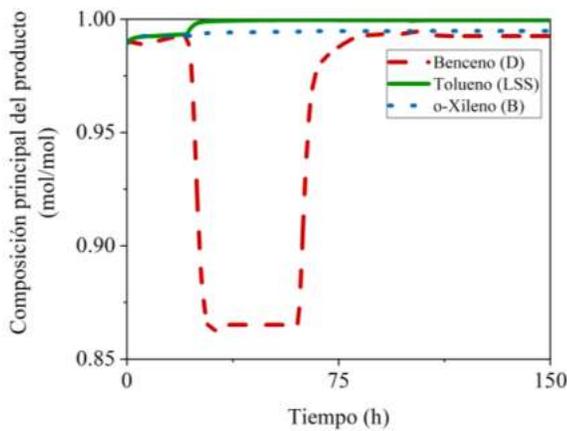


Fig. 5. Comportamiento de la composición en las corrientes de salida: destilado (D), fondos (B) y corriente lateral (LSS); con dos lazos de control.

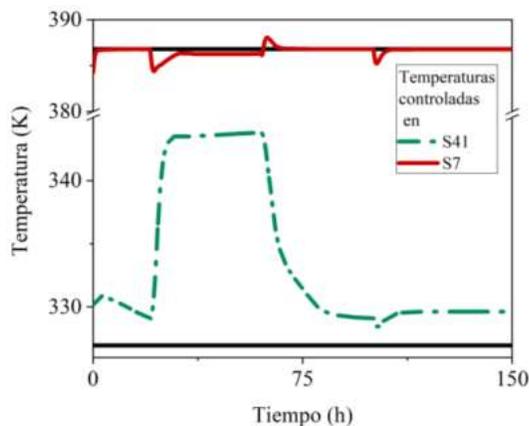


Fig. 6. Temperaturas controladas de las etapas S41 y S7 (dos lazos cerrados).

3.2 Estructura de control 2

Siguiendo el mismo procedimiento que en la sección 3.1 se calcularon los valores de las funciones de transferencia, que se muestran en la Tabla 6; y parámetros del controlador (Tabla 7). En esta solución, seleccionamos las mismas variables manipuladas que en la estructura de control 1, pero invirtiendo el orden; es decir, que la tasa de reflujo se usará para controlar la temperatura de los platos 1 al 7 en el fondo de la columna, mientras que la tasa de calor se usará para controlar los platos 38 a 44, cerca del domo de la columna.

Tabla 6. Valores de función de transferencia.

| Etapa (S) | 38 | 7 |
|-------------------------|---------|-----------|
| Variable manipulada (m) | Qr | R |
| K | 12.8768 | 0.0491593 |
| θ | 0.4901 | 1.076965 |
| τ | 9.317 | 4.566735 |

Tabla 7. Parámetros para control PI obtenidos con el método de sintonización SIMC.

| Parámetro | Valor | |
|---------------|-----------|------------|
| Etapa (S) | 38 | 7 |
| K_c | 0.7381468 | 34.503137 |
| K_c Unidad | [MW/K] | [mol/(sK)] |
| τ_I [h] | 3.92088 | 4.566735 |
| T_{ref} [K] | 341.1026 | 385.2263 |

Los resultados del primer lazo cerrado con la tasa de calor del reboiler manipulada se muestran en las Figuras 7. La Figura 7 establece la respuesta de la función costo. Es posible notar que no existe diferencia apreciable en los costos de las diferentes etapas controladas, por lo que se seleccionó la etapa 38 de la columna (S38) debido a que presenta un bajo tiempo de asentamiento y una menor interacción con el segundo lazo de control.

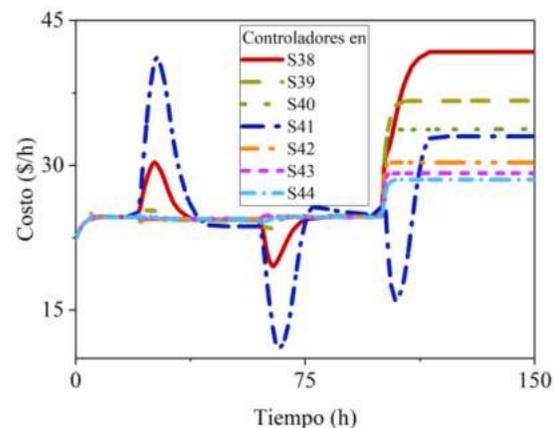


Fig. 7. Respuesta de costos con un lazo de control.

Una vez diseñado el primer lazo de control, se calcularon los valores de la función de transferencia de lazo abierto

utilizando el reflujo como variable manipulada y se diseñaron los controladores. Los resultados con dos lazos cerrados se muestran en las Figuras 8, 9 y 10. La Figura 8 expone la respuesta de la función costo del proceso con dos lazos. Nuevamente, se observa que prácticamente no hay diferencia entre los costos de las etapas de la sección III, por lo que la etapa seleccionada fue la S7. La Figura 9 muestra la composición de los productos. Finalmente, la Figura 10 muestra el comportamiento de las temperaturas controladas, aunque la temperatura de la etapa 38 opera con una pequeña desviación respecto al valor de referencia, se obtiene un control aceptable de la composición del o-xileno en la corriente del fondo; por otro lado, la etapa 7 tiene un control aceptable luego de corregir la respuesta del sistema después de la tercera perturbación.

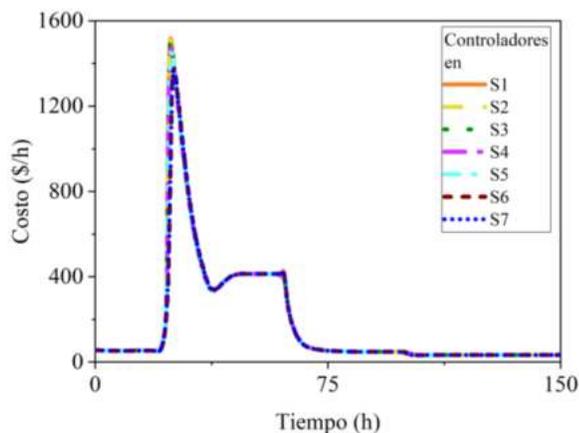


Fig. 8. Respuesta de costos con dos lazos de control.

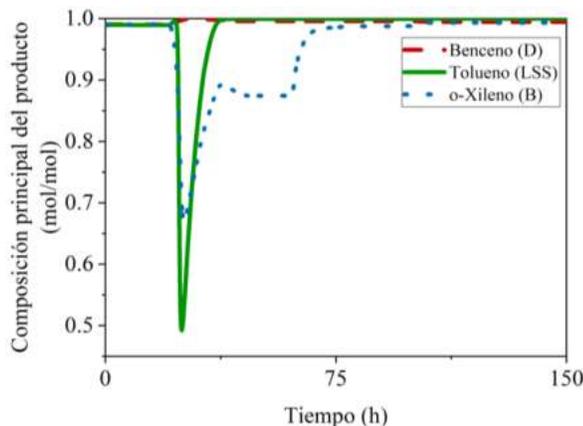


Fig. 9. Comportamiento de la composición en las corrientes de salida: destilado (D), fondos (B) y corriente lateral (LSS); con dos lazos de control.

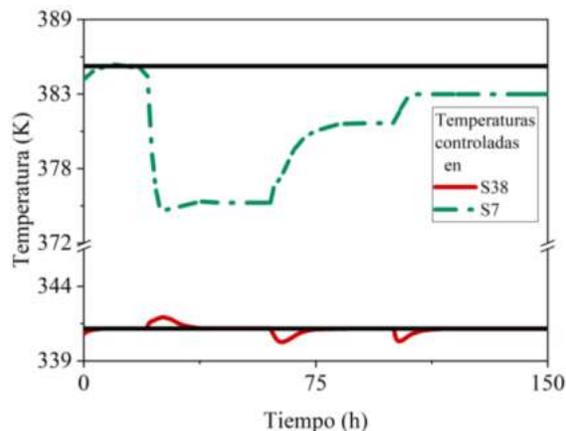


Fig. 10. Temperaturas controladas de las etapas S38 y S7 (dos lazos cerrados).

4. DISCUSIÓN

Se han presentado dos alternativas de control indirecto de la composición para una DWC, mediante control multivariable de la temperatura de dos platos; y se ha encontrado que la selección óptima es la estructura de control 1, donde los costos operativos son considerablemente más bajos que los presentados en la estructura de control 2, una vez que se cierra el segundo lazo.

Además, la optimalidad de ambas estructuras se evalúa no sólo buscando el menor costo en unidades por hora, sino también comparando los perfiles de temperatura de las etapas seleccionadas antes y después del control con perturbaciones. Donde se aprecia, que en ambas soluciones los primeros lazos logran mantener la temperatura controlada en su valor de referencia, mientras que en los siguientes lazos hay una desviación de 8 grados en promedio por encima o por debajo de la temperatura de referencia.

Por tanto, de acuerdo a los resultados presentados y el esfuerzo de sintonía requerido, se estima que las interacciones entre bucles son mayores en la segunda estructura de control, lo que podría deberse a la ubicación alejada de las etapas controladas con respecto a las variables manipuladas de cada lazo de control.

Por otra parte, el esquema de sintonización utilizado en este estudio comparado con Wu y col., (2020), Pan y col., (2019), Wang y col., (2018), y Jia y col., (2018) resulta novedoso desde la selección de las etapas controladas; puesto que, para este ejercicio los autores mencionados realizaron un análisis de sensibilidad realizando un paso escalón de entre $\pm 0.1\%$ y 1% en una de las posibles variables manipuladas, para contrastar gráficamente con las ganancias de las posibles etapas a controlar; mientras que el presente estudio selecciona la etapa controlada según su respuesta al control ya efectuado respecto principalmente a la función costo; cabe mencionar que la función costo se evalúa en función de la cantidad de impureza clave en cada corriente, lo cual resulta en la selección de la estructura de control que asegura una

alta pureza del componente deseado en cada corriente de producto. En cuanto al método de sintonización los primeros tres estudios citados llevan a cabo el método de ajuste de Tyreus-Luyben, que de acuerdo con la literatura (Smith y Corripio, 2014) parte de un ajuste que no coincide mucho con la respuesta real; por su lado Jia y col., (2018) utiliza al igual que en este estudio el método de ajuste SIMC.

Finalmente, el estudio presentado emplea a lo largo del proceso tres perturbaciones de $\pm 12.5\%$; este número de perturbaciones y su magnitud se consideran apropiados para evaluar el desempeño de la estructura de control, puesto que todos los estudios citados en este trabajo examinan sólo una perturbación; además de mencionar que el valor de las perturbaciones de este estudio es mayor que las que presentan Wu y col., (2020) y Wang y col., (2018) de $\pm 10\%$ en ambos casos.

5. CONCLUSIONES

La metodología desarrollada nos permite encontrar estructuras óptimas al menos para dos variables manipuladas, y ejecutar el algoritmo en órdenes diferentes para resolver el caso de la DWC y corroborar la metodología. Si bien el control con una estructura multivariable puede resultar laborioso, se obtuvo el control indirecto de la composición del producto, seleccionando las temperaturas de diversas etapas; y su evaluación desde una perspectiva de conveniencia económica.

REFERENCIAS

Agrawal, R., and Ramapriya, G. M. (2016). *U.S. Patent No. 9,504,934*. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.

Dahlin, E. B. (1968). Designing and tuning digital controllers. *Instruments and Control systems*, 41(6), 77-83.

Donahue, M. M., Roach, B. J., Downs, J. J., Blevins, T., Baldea, M., and Eldridge, R. B. (2016). Dividing wall column control: common practices and key findings. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 107, 106-115.

Grimholt, C., and Skogestad, S. (2018). Optimal PI and PID control of first-order plus delay processes and evaluation of the original and improved SIMC rules. *Journal of Process Control*, 70, 36-46.

Jia, S., Qian, X., Yuan, X., and Skogestad, S. (2018). Control structure comparison for three-product Petlyuk column. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 26(8), 1621-1630.

Khanam, A., Shamsuzzoha, M., and Skogestad, S. (2014). Optimal operation and control of divided wall column. In J. J. Klemeš, P. S. Varbanov, P. Y. Liew (Eds.), *Computer Aided Chemical Engineering*, 33, 673-678. Elsevier, Great Britain.

Kiss, A. A., and Bildea, C. S. (2011). A control perspective on process intensification in dividing-wall columns. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 50(3), 281 - 292.

Long, N., and Lee, M. (2014). Review of retrofitting distillation columns using thermally coupled distillation sequences and dividing wall columns to improve energy efficiency. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 47(2), 87-108.

Luyben, W. L. (1990). *Process modeling, simulation, and control for chemical engineers* (2nd ed). McGraw-Hill, United States.

Luyben, W. L. (2013). *Distillation design and control using Aspen simulation* (2nd ed). John Wiley & Sons. Hoboken. New Jersey.

Matla-González, D., Urrea-García, G., Alvarez-Ramirez, J., Bolaños-Reynoso, E., and Luna-Solano, G. (2013). Simulation and control based on temperature measurements for Petlyuk distillation columns. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 8(6), 880-894.

Pan, H., Wu, X., Qiu, J., He, G., and Ling, H. (2019). Pressure compensated temperature control of Kaibel divided-Wall column. *Chemical Engineering Science*, 203, 321-332.

Smith, C. A., and Corripio, A. B. (2014). *Control automático de procesos* (2a ed). Wiley, México.

Staak, D., Grützner, T., Schwegler, B., and Roederer, D. (2014). Dividing wall column for industrial multi purpose use. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 75, 48-57.

Stephanopoulos, G. (1984). *Chemical process control: An introduction to theory and practice*. Prentice-Hall.

Wang, J. C., and Henke, G. E. (1966). *Hydrocarbon Processing*, 45(8), 155-163.

Wang, J., Yu, N., Chen, M., Cong, L., and Sun, L. (2018). Composition control and temperature inferential control of dividing wall column based on model predictive control and PI strategies. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 26(5), 1087-1101.

Wu, Y., Zhang, G., Xu, J., Qu, X., Wang, Z., Wang, T., ... and Ji, L. (2020). Enhanced separation of mixing diols by distillation in dividing wall column. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 149, 107859.

NOMENCLATURA

| Símbolo | |
|-----------|---|
| S | Etapas |
| J | Función costo |
| B | Corriente del fondo |
| LSS | Corriente lateral |
| D | Corriente del destilado |
| $X_{i,j}$ | Fracción líquida del componente j en la corriente i |
| K | Ganancia de estado estacionario del proceso |
| θ | Tiempo muerto |
| τ | Constante de tiempo |
| K_c | Ganancia del controlador |
| τ_i | Tiempo integral |
| T_{ref} | Temperatura de referencia |