

Integration of design and control for distillation columns through dynamic optimization

Iván Pérez-Gallegos*, Claudio B.-Arroyo**, Victor M. Rivera* and Eliseo Hernandez-Martinez*

**Facultad de Ingeniería y Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana-Región Xalapa*
(e-mail: elisehernandez@uv.mx)

***Departamento de Ingeniería Química, CUCEI-Universidad de Guadalajara*
(e-mail: cbedolla@uv.mx)

Abstract: In this work, a methodology for the integration of design and control methods for distillation columns through dynamic optimization tools is proposed. For this, a dynamic model of the distillation column that can be adapted to different mixtures (binary and multicomponent) is established. The proposal focuses on defining an objective function to simultaneously maximize the performance in the mixture separation under the lowest energy consumption. The design variables (i.e., number of trays and feeding stage), as well as the controller parameters, are considered as decision variables. The results obtained show that it is possible to improve the overall performance of the distillation column, compared to traditional strategies.

Keywords: distillation column, optimization, design and control integration.

I. INTRODUCTION

El objetivo central de la industria química es la transformación de materia prima a productos de alto valor agregado. Una de las etapas de mayor importancia es la purificación de los productos, ya que es donde se alcanzan los estándares de calidad requeridos (Henley and Seader, 1990). Entre los procesos de separación, la columna de destilación es una de las operaciones que permite alcanzar altas purezas, por lo que cuenta con un número importante de aplicaciones (Treybal, 1988). Generalmente, el equipo de destilación se ubica al final del tren de proceso, por lo que está expuesta a constantes perturbaciones, lo que exige la implementación de esquemas de control robustos para regular la pureza de los productos a una referencia constante.

El diseño, optimización y control del proceso, típicamente se realiza mediante una secuencia de etapas, con estudios independientes, es decir, primero se realiza el diseño del equipo a las condiciones de operación y los requerimientos del producto y posteriormente se hace la implementación esquemas de control y optimización (Smith and Corripio, 1991; Jiang and Agrawal, 2019). Aunque esta estrategia permite alcanzar resultados aceptables, se identifican limitaciones en el ajuste de las variables y parámetros de diseño, en las etapas subsecuentes de control y optimización (Lecuona et al., 2017). Debido a esta problemática han surgido distintas propuestas que abordan el estudio de la interacción del diseño y el control en columnas de destilación.

Por ejemplo, se han establecido criterios de controlabilidad respecto a las variaciones en los parámetros de diseño (Cui et al., 2021), así mismo se ha evaluado el desempeño del controlador considerando diferentes parámetros de diseño y el control. Entonces, la integración de diseño y control se vuelve una opción viable para realizar propuestas de intensificación del proceso (Salas-Aguilar et al., 2018; Guitierrez and De-Prada, 2003). Biasi et al. (2021) presentan un enfoque basado en la mejora de la eficiencia termodinámica de la columna. Cui et al., (2021) incluyen los aspectos económicos buscando reducir los costos de operación relacionados con el consumo energético. Aunque estas propuestas presentan resultados interesantes, el principal inconveniente es la reestructuración de la columna. Además, estos estudios consideran el análisis de la columna en estado estacionario, lo que limita su alcance donde se presentan perturbaciones dinámicas en el proceso.

En este trabajo, se propone una metodología para la integración de los métodos de diseño y estrategias de control mediante herramientas de optimización dinámica. Se define una función objetivo para maximizar el rendimiento en la separación, considerando como variables de decisión de diseño al plato de alimentación, (N_a), y del controlador los parámetros de sintonizado K_p y K_i . Para evaluar la propuesta se consideran tres mezclas, una binaria, una ternaria y una mezcla multicomponente de gas natural.

II. METODOLOGÍA

2.1. Modelo de columna de destilación

La columna de destilación se describe mediante el balance de masa del componente volátil en los N platos de la columna, considerando lo siguiente i) alimentación en un único plato, ii) condensador y rehervidor totales, iii) los compuestos en cada fase están completamente mezclados y en equilibrio, iv) los flujos molares dentro de la columna son constantes en cada plato, v) la columna es adiabática, y vi) no se considera acumulación de vapor a lo largo del sistema. Entonces, los balances se pueden describir como:

Balance para el plato *i*

$$\frac{d(M_i X_i)}{dt} = V_{i+1} y_{i+1} - V_i y_i + L_{i-1} x_{i-1} - L_i x_i \quad (1)$$

$$\frac{d(M_i)}{dt} = V_{i+1} - V_i + L_{i-1} - L_i \quad (2)$$

2.2 Diseño de las columnas de destilación

Para el cálculo de los parámetros de diseño se aplican los métodos de diseño clásicos. Para la mezcla binaria se utiliza el método de McCabe-Thiele, especificando los datos de alimentación a la columna y los requerimientos en la corriente de destilado Mientras que para la mezcla ternaria y multicomponente se aplica el método corto Fenske-Underwood- Gilliland. Las características de la alimentación para cada uno de los tres casos se muestran a continuación.

TABLA I. ESPECIFICACIONES DE LA ALIMENTACIÓN PARA LAS MEZCLAS BINARIA, TERNARIA Y MULTICOMPONENTE

MEZCLA BINARIA				
F	x _F	D	x _D	q
100 kmol/h	0.5	50 kmol/h	0.5	0.5
MEZCLA TERNARIA				
F	x _F	D	x _D	q
100 kmol/h	0.4,0.3,0.3	39.85 kmol/h	0.915	0.5
MULTICOMPONENTE				
F	x _F	D	x _D	q
1123.41 kmol/h	0.42061, 0.26692, 0.19713, 0.02958, 0.05685, 0.01207, 0.01104, 0.0058	771.98 kmol/h	0.386	1

donde la mezcla binaria está compuesta por benceno-tolueno, la ternaria por benceno-tolueno-oxileno y la multicomponente es una mezcla de hidrocarburos (metano, etano, propano, i-butano, n-butano, i-pentano, n-pentano y n-hexano) donde para esta ultima el producto de interés es el etano.

2.3. Implementación del controlador tipo PI

Se implementa un esquema de control de tipo PI, considerando como variable de control a la relación de reflujo (R) de la columna. El esquema de control es como sigue

$$u(t) = U_n + K_p e(t) + K_i \int_{\tau_i}^{\infty} e(t) dt \quad (6)$$

Nominal Proporcional Integral

Balance para el plato de alimentación *N_a*

$$\frac{d(M_{Na} X_{Na})}{dt} = V_{Na+1} y_{Na+1} - V_{Na} y_{Na} + L_{Na-1} x_{Na-1} - L_{Na} x_{Na} + F x_f \quad (3)$$

$$\frac{d(M_{Na})}{dt} = V_{Na+1} - V_{Na} + L_{Na-1} - L_{Na} + F \quad (4)$$

donde *L_i* y *V_i* son el flujo de líquido y vapor plato *i*, *x* y *y* son la fracción mol de las fases líquido y vapor, *F* es el flujo de alimentación a la columna y *x_f* la fracción alimentada del compuesto volátil. Para el cálculo de las fracciones mol en el equilibrio líquido-vapor se utiliza la ley de Raoult .

$$y_i P = x_i P_i^{sat} \quad (i=1,2,\dots,N) \quad (5)$$

donde $e(t) = x_{D,ref}(t) - x_D(t)$, la variable manipulada (*u*) es la relación de reflujo (*R*), *K_P* y *K_i* son los parámetros ajustables del controlador. Para la metodología secuencia, el sintonizado del controlador se realiza usando las reglas propuestas por Skogestad (2003). Mientras que para la integración del control y diseño los parámetros se consideran variables de decisión del método de optimización.

2.4 Problema de control optimo

La optimización de la columna se realiza evaluando tres funciones objetivo independientes, i) minimizar el error de regulación, ii) minimizar el consumo energético y iii) la minimización de ambas como sigue:

- Minimizar el error del controlador, que es el objetivo de la controlabilidad dinámica.

$$\min \int_{t_i}^{t_f} \left\{ \alpha_1 \frac{(x(t)_d - x_d^{ref})^2}{x_d^{esc}} \right\} dt \quad (7)$$

- Minimizar el consumo energético, que es el objetivo de diseño de procesos, y simultáneamente.

$$\min \int_{t_i}^{t_f} \left\{ \alpha_2 \frac{(Q_R(t) - Q_R^{ref})^2}{Q_R^{esc}} \right\} dt \quad (8)$$

- Minimizar el error del controlador y el consumo energético, siendo el objetivo final de optimización.

$$\min \int_{t_i}^{t_f} \left\{ \alpha_1 \frac{(x(t)_d - x_d^{ref})^2}{x_d^{esc}} + \alpha_2 \frac{(Q_R(t) - Q_R^{ref})^2}{Q_R^{esc}} \right\} dt \quad (9)$$

donde *t_i* y *t_f* son el tiempo inicial y final del proceso, $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$ son los parámetros de ponderación, *x(t)_d* y *Q_R(t)* son la fracción de destilado y el flujo de vapor durante el tiempo de proceso, *x_d^{ref}* y *Q_R^{ref}* son valores de referencia para el error y

el vapor acumulado, el flujo de vapor está representado por Q_R , x_d^{esc} y Q_R^{esc} son factores de escala para la fracción y el flujo de vapor respectivamente. Las simulaciones numéricas y la solución de los problemas de optimización se realizan en MATLAB 2020b

III. RESULTADOS

3.1. Columna de destilación binaria

La aplicación del método de McCabe-Thiele provee las especificaciones de la columna para la simulación dinámica del proceso de destilación. Para una fracción de destilado $x_D=0.97$, $F=100$ kmol/h, $D=50$ kmol/h, $q=0.5$ (50% vapor de alimentación), $R=2.5$ se requiere una columna de 13 platos con alimentación en el plato 7. El plato de alimentación es una de las variables más importantes en el diseño, ya que define las condiciones de la mezcla de alimentación. En la Figura 1 se muestra como cambia la fracción de destilado respecto al plato de alimentación, donde se observa que la máxima fracción se alcanza cuando la alimentación es en el plato 7. Cabe mencionar que la relación de reflujo se considera la variable manipulada, por lo que se debe evaluar el efecto que sufre el desempeño de la columna si se modifica dicha variable. Con un cambio del 10% se observa que el plato con mayor cambio es plato 10 (Figura 1). Eso sugiere que hay regiones donde el controlador puede mejorarse con la posición del plato de alimentación, así mismo, la consideración de la variación del número de etapas totales de la columna representaría un menor esfuerzo para el rehervidor, sin embargo, un aumento en esta variable referente a lo predicho por el método de diseño, no implica cambios considerables en la fracción alcanzada a la salida, por lo cual se utiliza solo N_a para la propuesta de nuevas configuraciones. También, cabe mencionar que la relación de reflujo presenta incidencia directa sobre el flujo de vapor y consecuentemente influye sobre la energía usada en la operación de la columna.

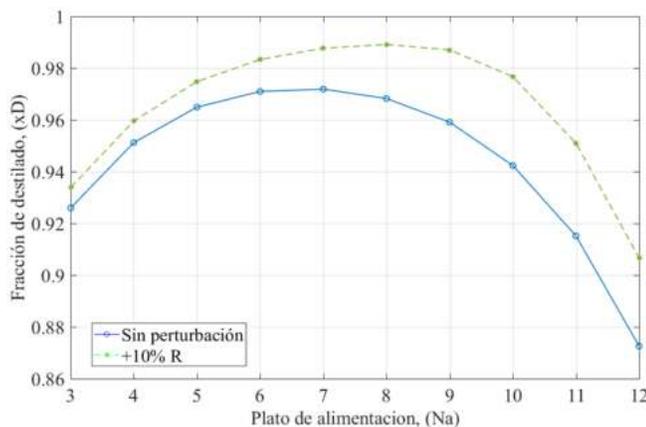


Figura 1. Fracción de destilado a diferente posición del plato de alimentación.

Considerando $N_a=7$, la Figura 2 muestra el desempeño del controlador frente a las perturbaciones externas en la energía del flujo de alimentación y fracción de destilado alimentado. De $t=10$ a $t=60$ se implementaron perturbaciones de q , del -20%, 0% y +20% respectivamente, mientras que para $t=60$ a

$t=120$ se perturbó la fracción de alimentación en -2%, +2% y 0%, respectivamente. Finalmente, después de $t=120$ se introdujeron perturbaciones mixtas de q y x_f . Podemos notar que el controlador implementado es capaz de llevar al valor de referencia al proceso frente a las diferentes perturbaciones, manteniendo el valor de R entre R_{min} y valores menores al R total.

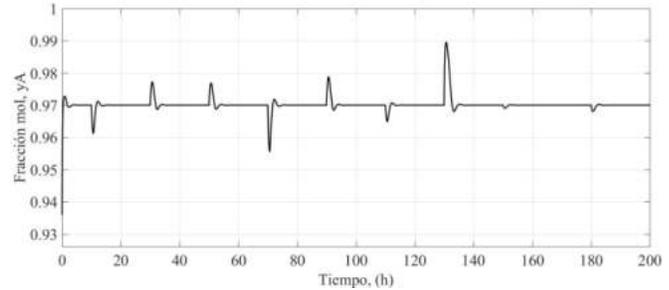


Figura 2. Respuesta del controlador frente perturbaciones en la alimentación.

Para evaluar el desempeño del controlador se calcula la integral del error cuadrático, el flujo de vapor y la cantidad de destilado acumulados. En la Figura 3 se observa que el plato de alimentación sugerido por el método de diseño (plato 7) es el que permite obtener mayor cantidad de destilado con un menor consumo energético. Sin embargo, no es el que muestra mejor desempeño para regular las perturbaciones externas, identificando que la zona de rectificación es donde se obtiene un menor error total.

Los resultados se muestran de forma normalizada tomando como referencia los valores obtenidos con $N_a=7$. Se muestra que es posible mejorar el proceso en términos de la eficiencia del controlador mediante el reajuste de los parámetros del sintonizado

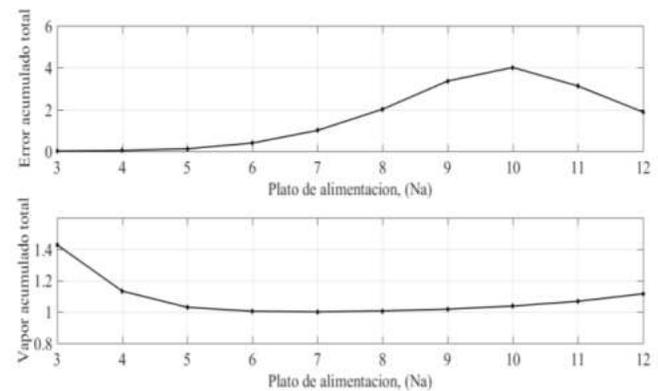


Figura 3. Integral del al cuadrado y vapor acumulado total

Por consiguiente, se implementa la búsqueda de los parámetros del controlador mediante un esquema de optimización, donde los valores de K_p y K_i corresponden al rango del valor menor y mayor obtenidos por el sintonizado previo realizado mediante las reglas de Skogestad. (Ecs. 7-9). La Figura 4 muestra el error del controlador para las diferentes propuestas de la función objetivo.

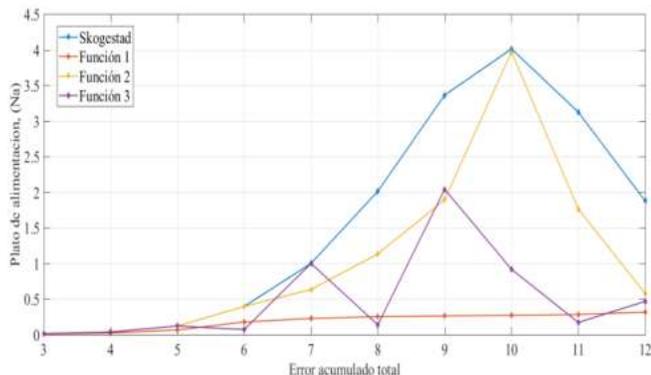


Figura 4. Error acumulado del controlador implementando el esquema de optimización

En base a estos resultados se puede proponer diferentes configuraciones para la operación de la columna de destilación:

- Configuración 1: alimentando la columna entre las etapas 3 y 7, podemos disminuir el error del controlador. Para $N_a=3$, con valores de 6.69911 y 0.01050 para K_p y K_i respectivamente, podemos lograr una disminución del 99% en el error acumulado total, sin embargo, esto a expensas de una disminución del -43.7% del destilado acumulado al final del proceso.
- Configuración 2: alimentando la columna entre las etapas 6 y 8, específicamente para $N_a=7$, $K_p=1.3951266$ y $K_i=0.01050$, se alcanza una disminución del 77% en el error total, y a su vez una disminución en el flujo de vapor del 5% en comparación del método tradicional.

La selección de la configuración debe elegirse de acuerdo con lo que se desee mejorar, ya que una disminución en el flujo de vapor, si bien puede significar un menor costo energético, puede estar condicionada a una disminución del destilado total del producto. Así mismo, con la controlabilidad del proceso, un mejor rendimiento del controlador puede implicar un aumento en el flujo de vapor.

3.2 Columna de destilación ternaria

Para el segundo caso, el diseño de la columna de destilación se realizó mediante método corto FUG, considerando una alimentación de 100 kg/mol con fracciones molares de 0.4, 0.3 y 0.3 de benceno, tolueno y o-xileno respectivamente. Considerando al benceno como compuesto clave ligero (LK) y el tolueno el compuesto clave pesado (HK) y una corriente de destilado un 0.95 de LK y un 0.15 de HK. El método de diseño indica que la columna requiere de 13 platos con alimentación en la etapa 10, la relación de reflujo para el condensador y el rehervidor son para $R=2.6634$ y $R_b=2.422$, respectivamente.

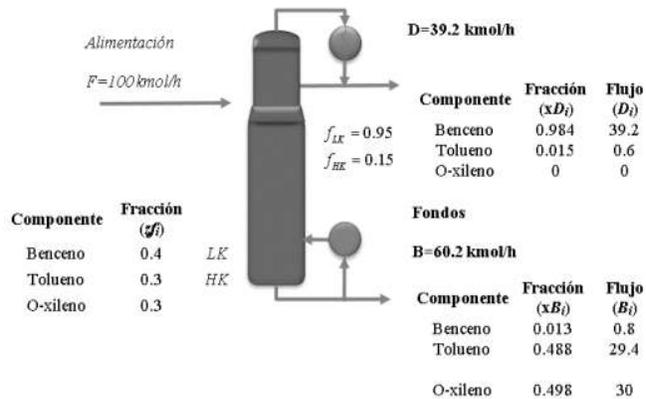


Figura 5. Balance de masa para la mezcla ternaria

Mediante este diseño se realizó una simulación del estado dinámico del proceso y aplicando el mismo procedimiento descrito para la columna binaria. Mediante la solución del problema de optimización se minimiza el vapor y error acumulados, encontrado que se puede mejorar el desempeño del proceso si se alimenta entre las etapas 3 y 7. Alimentando en la etapa 4, con valores para $K_p=0.9518$ y $K_i=0.2$, se logra una disminución del 64% de error total, conjunto a esto se logra una disminución del 8% de vapor acumulado, lo que implica menor energía en la producción de vapor del rehervidor de la columna.

3.3. Columna de destilación multicomponente

Para el caso del fraccionamiento de la mezcla de gas natural, el diseño de la columna desetanizadora se realiza mediante el método FUG. La mezcla contiene 8 componentes donde se buscaba obtener 771.98 kmol/h de destilado con una concentración de etano de 0.3871 (producto de interés principal). En base a estos parámetros de diseño obtenidos, se procedió a realizar la simulación dinámica del proceso y los valores obtenidos fueron contrastados con las corrientes conocidas de una planta procesadora de gas. Del mismo modo que en los casos anteriores se realizó la implementación del controlador tipo PI y la búsqueda de la minimización del flujo de vapor y el error de regulación, buscando mayor flujo de destilado. Los resultados muestran que se mejora el rendimiento global de la columna si se alimenta entre las etapas 8 y 12. Por ejemplo, si se alimenta en la etapa sugerida por el método de diseño, usando valores de K_p y K_i como 91.12 y 0.31, respectivamente se puede obtener un aumento del +2% del destilado total, con una disminución del 47% del error del controlador y una reducción del 1% del vapor en la columna.

En los 3 casos de estudio se pueden obtener mejoras en la corriente de destilado, de igual manera una disminución del flujo de vapor, así como una mejora en la controlabilidad del proceso.

IV. CONCLUSIÓN

En este trabajo se presenta una estrategia para integrar la etapa de diseño y control mediante herramientas de optimización dinámica. Los resultados muestran la región de operación de

columna donde se obtiene el mejor desempeño de ambos, menor consumo energético y mayor desempeño del controlador. La metodología propuesta es sistemática y puede ser aplicada a diferentes mezclas (binarias y multicomponentes) y diferentes condiciones de operación. Si bien esta estrategia puede ser aplicable como propuesta de mejora en planta, esta dirigida para la etapa de diseño del equipo, con el fin de evitar intervenciones o modificaciones en equipos ya construidos lo que resulta en tiempos muertos de operación. El trabajo aún queda abierto para analizar el efecto del número de platos de la columna, es decir, incluirla como variable de decisión en la función objetivo.

REFERENCES

- [1] Henley, E.J., & Seader, J.D. (1990) Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química. México: Reverte.
- [2] Treybal R.E. (1988). Operaciones de transferencia de masa. México: Mc Graw Hill
- [3] Smith, C.A., & Corripio, A.B. (1991). Control automático de procesos. Teoría y práctica. México: Editorial Limusa.
- [4] Jiang, Z., & Agrawal, R. (2019). Process intensification in multicomponent distillation: A review. *Chemical Engineering Research and Design*, 147, 122-145.
- [5] Lecuona, N. E. S., Aldaco, A. T., Leyte, R. L., & González, E. V. T. (2017) Estudios de los consumos de energía en un sistema de evaporación con compresión y re-compresión. 13° Congreso Iberoamericano de Ingeniería Mecánica.
- [6] Cui, C., Zhang, X., Lyu, H., Wang, S., Sun, J., Qu, Y., ... & Zhang, Q. (2021). Process intensification in ternary distillation via comparative grassroots and retrofit designs. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 164, 108423.
- [7] Salas-Aguilar, C. L., Bonilla-Petriciolet, A., & Jaime-Leal, J. E. (2018). Optimización multi-objetivo del desempeño y consumo energético de procesos de destilación intensificados para sistemas cuaternarios. *Afinidad*, 75(582).
- [8] Gutiérrez G, De Prada C (2003). Diseño Integrado y Síntesis de Procesos Químicos. Universidad de Valladolid. España. 1-6.
- [9] Biasi, L. C., Romano, A. L., Zemp, R. J., Heinkenschloss, M., Batista, F. R., & Meirelles, A. J. (2021). Distillation Columns with Multiple Phase Divisions: How They Improve Thermodynamic Efficiency and Decrease Energy Consumption. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 60(43), 15690-15705.
- [10] Luyben, W. L. (2012). Principles and case studies of simultaneous design. John Wiley & Sons.
- [11] Skogestad, S. (2003). Simple analytic rules for model reduction and PID controller tuning. *Journal of process control*, 13(4), 291-309.