

**METODOLOGÍA PARA EL MODELADO Y OPTIMIZACIÓN DE LA SÍNTESIS DE
SECUENCIAS DE DESTILACIÓN**

JHON EDER ZAFRA ORTIZ

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2013

**METODOLOGÍA PARA EL MODELADO Y OPTIMIZACIÓN DE LA SÍNTESIS DE
SECUENCIAS DE DESTILACIÓN**

JHON EDER ZAFRA ORTIZ

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de Ingeniero
Químico**

Director

Ph.D. VIVIANA SÁNCHEZ TORRES

Co-Director

Ms.C. OMAR J. GUERRA FERNÁNDEZ

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2013

AGRADECIMIENTOS

Agradezco de manera especial al profesor Omar Guerra Fernández por su apoyo e inagotable paciencia, su confianza en mi trabajo y su gran aporte, no solo en la dirección del proyecto, sino en mi formación personal y profesional.

Quiero agradecer a la Dra. Viviana Sánchez Torres y al ingeniero químico Jorge Trujillo Amariz por sus valiosos aportes y el tiempo dedicado durante el desarrollo del proyecto de investigación.

Expreso mi profundo agradecimiento a la Universidad Industrial de Santander, especialmente a la escuela de ingeniería química y su gran cuerpo docente por todas las enseñanzas impartidas que han contribuido y seguirán haciéndolo a mi desarrollo profesional.

A Lucy, Teresa, Emma y Diana

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	13
1. DESCRIPCIÓN METODOLÓGICA.....	17
1.1 SUPERESTRUCTURA, SIMULACIÓN Y MODELO DE COSTOS.	18
1.1.1 Planteamiento de la superestructura	18
1.1.2 Variables de entrada y sus límites.	19
1.1.3 Valores numéricos para las variables de entrada.....	20
1.1.4 Simulación y diseño	20
1.1.5 Cálculo de costos.....	23
1.2 MODELADO MATEMÁTICO.....	24
1.2.2 Modelos de regresión para costos y recuperaciones.....	24
1.3 OPTIMIZACIÓN Y VALIDACIÓN	26
1.3.2 Problema de optimización:.....	26
1.3.3 Función objetivo.....	26
1.3.4 Restricciones de la función objetivo.....	27
1.3.5 Formulación Matemática.....	27
1.3.6 Proceso iterativo para validar el modelo de optimización	28
2. RESULTADOS Y ANÁLISIS	30
2.1 MODELOS MATEMÁTICOS.....	30
2.2 SECUENCIA ÓPTIMA.	32
2.3 CONDICIONES OPERATIVAS ÓPTIMAS.....	33
2.4 VALIDACIÓN DEL MODELO DE OPTIMIZACIÓN	35
3. CONCLUSIONES	36
4. RECOMENDACIONES.....	38
BIBLIOGRAFÍA.....	44
ANEXOS.....	49

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Datos del caso de estudio.....	21
Tabla 2. Parámetros para el diseño de los condensadores y rehervidores.	22
Tabla 3. Resultados para las recuperaciones de los componentes clave en cada columna.	33
Tabla 4. Condiciones óptimas de operación.	34
Tabla 5. Resultados para los productos deseados en el caso de estudio	34
Tabla 6. Comparación de resultados.	35
Tabla C. 1. Costo de inversión para la columna I	51
Tabla C. 2. Costo de operación para la columna I	51
Tabla C. 3. Costo de Inversión para la columna II.	53
Tabla C. 4. Costo de operación y TAC para la columna II	53
Tabla D. 1. Coeficientes de regresión. Columna I.....	57
Tabla D. 2. Coeficientes de regresión. Columna II.....	58
Tabla E. 1. Valores de los coeficientes de regresión ajustados para cada columna en cada iteración. (a) depropanizadora. (b) deisobutanizadora.....	61

LISTA DE FIGURAS

Pág.

Figura 1. Metodología planteada para la optimización de la síntesis de secuencias de destilación.....	17
Figura 2. Superestructura para el caso de estudio.	18
Figura 3. Gráfica de paridad. Modelo de costos operacionales para la columna I. $C3iC4$	30
Figura 4. Gráfica de paridad. Modelo de costos operacionales para la columna II. $iC4nC4$	31
Figura 5. Secuencia óptima para el caso de estudio.	32
Figura 6. Comportamiento del error relativo en función de las iteraciones	35
Figura D.1. Recuperación de $C3$ vs $C3$ experimental para la columna I.....	59
Figura D.2. Recuperación de $iC4$ vs $iC4$ experimental para la columna I.	59
Figura D.3. Recuperación de $iC4$ vs $iC4$ experimental para la columna II.....	60
Figura D.4. Recuperación de $nC4$ vs $nC4$ experimental para la columna II.	60

LISTA DE ANEXOS

	Pág
ANEXO A. Límites de las variables de entrada para el caso de estudio.....	49
ANEXO B. Datos de diseño para cada columna de destilación del caso de estudio.	50
ANEXO C. Cálculo del costo total anual (TAC).....	51
ANEXO D. Estimación de coeficientes de regresión y gráficas de paridad de los modelos matemáticos	55
ANEXO E. Detalle de las iteraciones	61

RESUMEN

TÍTULO: METODOLOGÍA PARA EL MODELADO Y OPTIMIZACIÓN DE LA SÍNTESIS DE SECUENCIAS DE DESTILACIÓN*

AUTOR: JHON EDER ZAFRA ORTIZ**

PALABRAS CLAVE: Síntesis, secuencias de destilación, optimización por superestructura, costo total anual, MINLP.

Este proyecto plantea una metodología para la síntesis de secuencias de destilación basada en herramientas computacionales de simulación, modelado y optimización de procesos.

El problema de síntesis es abordado con el planteamiento de una superestructura donde se incluyen $N - 1$ columnas de destilación para N componentes y sus posibles combinaciones. Posteriormente, apoyados en datos obtenidos de simulaciones fueron determinados modelos de costos y recuperaciones para que la superestructura fuera modelada como un problema de optimización tipo MINLP, el cual tiene como función objetivo minimizar el costo total anual. La solución de este problema de optimización arrojó la secuencia óptima de columnas destilación y los valores óptimos de las variables operativas (temperatura del rehervidor, relación de reflujo y flujo de alimentación) tomadas para la construcción de los modelos de cada columna involucrada en la superestructura.

Un caso de estudio correspondiente a una mezcla de tres hidrocarburos livianos para producir dos productos especificados (separaciones *non-sharp*), donde se adicionan todas las posibilidades de *bypasses*, separadores de corrientes y mezcladores al diagrama de flujo es desarrollado para mostrar la aplicabilidad de la metodología propuesta resultando en una disminución de hasta el 26% del costo inicial sin optimizar y del 7% con respecto al problema resuelto usando separaciones del tipo *Sharp*.

*Proyecto de Grado

**Facultad de Ingenierías Físico-Químicas, Escuela de Ingeniería Química, Directora: Viviana Sánchez Torres, Ph. D. Co-Director: Omar José Guerra Fernandez, M.Sc.

ABSTRACT

TITLE: MODELING AND OPTIMIZATION METHODOLOGY FOR THE SYNTHESIS OF DISTILLATION SEQUENCES *

AUTHOR: JHON EDER ZAFRA ORTIZ**

KEYWORDS: Distillation sequences synthesis, superstructure optimization, total annual cost, MINLP.

This project proposed a methodology for the synthesis of distillation sequences based on simulations, modeling and optimization tools.

The synthesis of multi-component distillation problem was addressed by proposing, a superstructure where all $N - 1$ distillation columns for N components and their possible combinations were included. Then, rigorous simulations were carried out in order to get cost and recuperation data. Afterward, the superstructure was modeled resulting in a Mixed Integer Non Linear Programming MINLP optimization problem which has as objective function to minimize the Total Annual Cost (TAC). The solution of the MINLP formulation results in the optimal sequence and optimal values for the operating parameters taken to formulate each distillation column model.

The case of study was the separation of a ternary mixture of light hydrocarbons into two desired multicomponent products streams (non-sharp separation). In addition, all possible alternatives of bypassing, splitting and mixing were taken into account to formulate the flow sheet and the superstructure. This example showed the applicability of the proposed approach as a good and practical technical-economic analysis for the synthesis of distillation column sequences resulting in an optimized cost 26% lower than the non-optimized total annual cost and in a saving of 7% in relation when the case of study was solved using a sharp separation.

*Undergraduated Degree Work

**Faculty of Physical-Chemical engineering, Chemical Engineering School, Advisors: Viviana Sánchez Torres, Ph.D., Omar J. Guerra Fernández, M.Sc.

INTRODUCCIÓN

La destilación es uno de las operaciones unitarias ampliamente usada para la separación de mezclas en productos específicos¹ y es responsable de cerca del 95% de todas las separaciones en la industria química. Sus aplicaciones van desde la rectificación de alcohol, obtención de fracciones del petróleo hasta la biorefinería². La separación de los componentes de una mezcla se presenta como resultado del adicionamiento de energía al sistema y las diferencias entre las volatilidades¹ de los constituyentes.

La demanda energética de la separación, la cual ocupa más del 70% del requerimiento energético de todo un proceso³, contribuye considerablemente al costo total de las plantas químicas y, por consecuente, tiene una gran influencia en la eficiencia económica de una unidad. Teniendo en cuenta lo anterior, la optimización económica de las secciones de fraccionamiento (condiciones de operación, diseño de columnas y planteamiento de secuencias) se hace de vital importancia durante la fase de síntesis de cualquier proceso químico⁴ y procura encontrar la secuencia de separación que resulte en un mejor comportamiento en términos de costo de inversión y operación¹⁻⁴.

La separación por destilación de mezclas multicomponentes pueden ser clasificada en las siguientes categorías⁵:

- a) Categoría 1: Separaciones *Sharp*: Procura una separación en componentes puros.
- b) Categoría 2: Separaciones *non-Sharp*: Separa mezclas multicomponentes para la obtención de productos multicomponentes con composiciones específicas.

Gran variedad de trabajos se han realizado enfocándose en la primera categoría^{6,7,8,9,10}, la cual consiste en una separación de la mezcla en componentes

puros (*Sharp*) donde los componentes clave no se distribuyen en el destilado y fondos⁴, mientras que para la segunda categoría, donde se permite una distribución de los componentes clave tanto en el destilado como en los fondos (*non-sharp*), no ha sido objeto de estudio riguroso, aun cuando esta clase es relevante para la industria del petróleo y gas, e.g. pooling, blending y recobro de gas¹¹.

En la etapa de síntesis de cualquier secuencia de destilación, primero se debe tomar cada columna de destilación y definir sus variables de diseño y operación¹². Una vez definidas las variables son modeladas con cuatro tipos de ecuaciones: balances de masa y energía, ecuaciones de restricción (equilibrio y condiciones de transferencia) y ecuaciones constitutivas (constantes de equilibrio, propiedades físicas y de transporte y condiciones de reacción), también conocidas como las ecuaciones MESH (*Mass, Equilibrium, Summ and heat*)¹³. Las ecuaciones de balance y de restricción son función de variables de las propiedades (Valor K, entalpías, etc.), variables de diseño (flujo de alimentación, locación del plato de alimentación, número de platos, etc.) y variables intensivas (temperatura, presión y composición); mientras tanto las ecuaciones constitutivas, que son las que representan el modelo de propiedades, son función sólo de propiedades intensivas¹³.

La etapa de optimización de secuencias de columnas de destilación ha sido centro de grandes estudios desde 1977 cuando Seader y Westerberg¹⁴ propusieron un método empírico para la obtención de la secuencia óptima; posteriormente, Stephanopoulos y Westeberg¹⁵ desarrollaron lo que se conoció como técnicas evolucionarias, las cuales, basadas en experiencias anteriores, realizaban pequeñas pero sucesivas mejoras continuas al diagrama de flujo hasta encontrar la síntesis óptima. Desde 1988 se adicionaron a las aproximaciones basadas en la experiencia de los diseñadores, propuestas que tienen en cuenta herramientas matemáticas y computacionales para el planteamiento de secuencias. Andrecovich y Westerberg¹⁶ usaron la optimización estructural como base de su metodología en la determinación de la mejor secuencia. Fraga y Matias¹⁷; Wang et al¹⁸; Floquet et

al¹⁹; Linke y Kokossis²⁰, entre otros plantean el uso de métodos estocásticos o algoritmos genéticos en la optimización y Hauan y Lien²¹ realizó un diseño basado en la noción de vectores fenológicos en la que toma como caso de estudio la destilación reactiva.

Aun cuando se han propuesto nuevas aproximaciones para abordar el problema de síntesis, la optimización de secuencias de destilación basados en una superestructura permite fácilmente ser incorporada como parte de la optimización de un proceso pues muestra todos los posibles esquemas de separación para una mezcla dada²², además, involucra variables continuas y discretas ofreciendo un marco claro para la optimización simultánea de la configuración y los parámetros operativos¹.

Esta aproximación, generalmente, resulta en un problema de optimización matemática que puede ser clasificado como no-lineal (NLP), linear integral mixto (MILP) o no linear integral mixto (MNILP) dependiendo del tipo de modelo usado para el proceso de separación⁴.

Este trabajo apunta al planteamiento de una metodología para el modelado, optimización y validación en la síntesis de secuencias de destilación orientada a la obtención de productos multicomponentes, es decir, separaciones *non-sharp* donde la función objetivo se presenta como el costo anual total. La metodología se prueba con un caso de estudio compuesto por una mezcla de hidrocarburos livianos que se ha de separar en dos productos con composiciones definidas, en este ejemplo, se evalúa la secuencia óptima de columnas (menor costo total anual) y las mejores condiciones operacionales. Las columnas de destilación descritas conciernen a ejemplos de equipos instaladas a nivel industrial cuyos datos son reportados en la literatura^{23,24}.

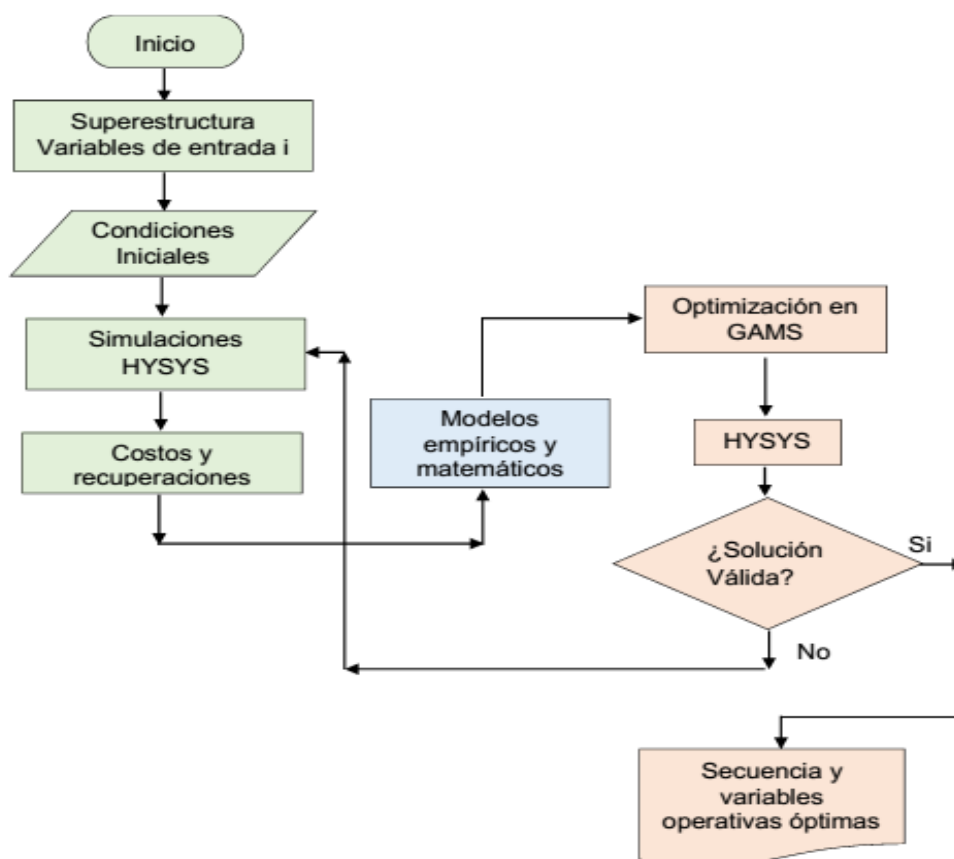
Una vez definido el caso de estudio se plantea una superestructura que tiene en cuenta todas las posibilidades de separación de corrientes, mezcladores y columnas y se corren una serie de simulaciones para cada columna en HYSYS

V7.2. Posteriormente, se desarrollan modelos empíricos y matemáticos para los costos anuales y restricciones del proceso (Balances de masa y recuperaciones), los cuales son implementados en un software de modelado algebraico (GAMS) que proporciona como resultados la secuencia óptima de las columnas de destilación y los valores de las variables operacionales cumpliendo con la minimización del costo total anual, los resultados de las condiciones operacionales y la secuencia son validados usando nuevamente el software de simulación HYSYS V7.2.

1. DESCRIPCIÓN METODOLÓGICA

La metodología para el desarrollo de este trabajo se divide en tres etapas y es representada en la Figura 1: la primera etapa consiste en el planteamiento de la superestructura, variables de entrada y la obtención de datos de las simulaciones para, finalmente, el cálculo del costo total anual. La segunda etapa se compone del planteamiento de modelos empíricos para los costos y las recuperaciones, así como los modelos físicos de las restricciones. La tercera etapa, denominada optimización y validación, cuenta con el planteamiento del tipo de problema de optimización y su solución, concluyendo con la validación de los valores obtenidos en el simulador de procesos Aspen HYSYS V7.2.

Figura 1. Metodología planteada para la optimización de la síntesis de secuencias de destilación.



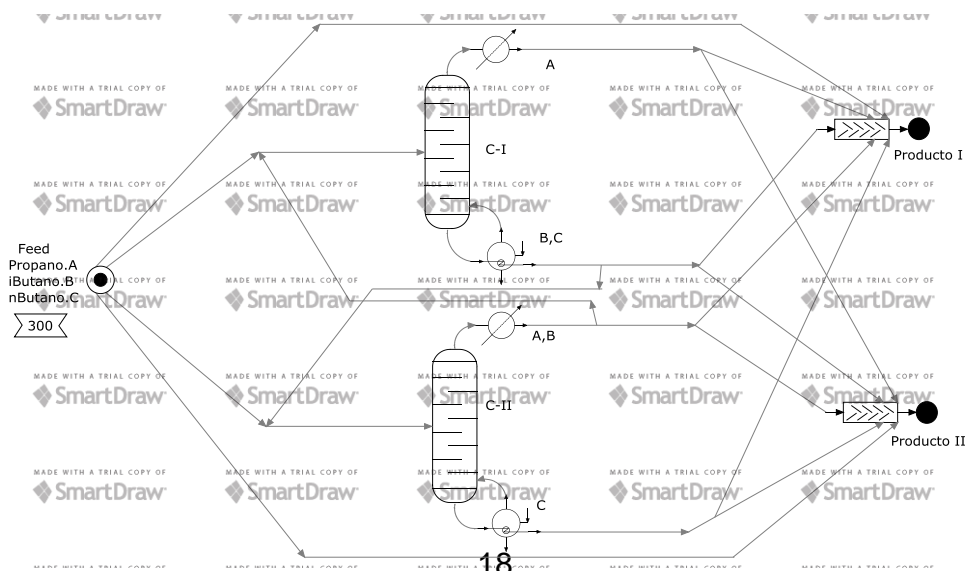
1.1 SUPERESTRUCTURA, SIMULACIÓN Y MODELO DE COSTOS.

1.1.1. Planteamiento de la superestructura. Una superestructura consiste en un diagrama de flujo que incluye todas las posibles alternativas de interés donde se emplea variables continuas y discretas, habitualmente binarias, asociadas a la decisión de situar o no un equipo en el diagrama de flujo²⁵. La creación de una superestructura para la obtención de productos multicomponentes usando columnas destilación es generalizada para un número de componentes siguiendo los siguientes pasos²⁶:

- i. Un número máximo de columnas a $N - 1$, donde N representa el número de componentes en la corriente de alimento.
- ii. Un separador inicial para la corriente de alimentación.
- iii. Un separador en cada corriente producto de cada columna.
- iv. Un mezclador a la entrada de cada columna.
- v. Un mezclador antes de cada producto multicomponente deseado.

De acuerdo a lo anterior la superestructura para una mezcla de tres componentes en la corriente de alimentación y la obtención de dos productos, que corresponde al caso de estudio, se muestra en Figura 2.

Figura 2. Superestructura para el caso de estudio.



1.1.2 Variables de entrada y sus límites. Numerosos estudios acerca de la optimización de secuencias de columnas de destilación toman como variables principales la recuperación y el flujo de alimentación de cada torre^{16,22,26,27,28}, esto debido a que, tanto el grado de recuperación (0,99 para separaciones *Sharp*) del destilado y los fondos, así como carga a las columnas aumentan los costos operacionales de cada columna y, por ende, de la separación²⁹.

VARIABLES DE OPERACIÓN tales como presión, relación de reflujo y temperatura del rehervidor son fijadas en valores constantes y determinados por heurística o métodos *shortcuts*, por consiguiente, los resultados arrojados son poco realistas en cuanto a costos del proceso se refiere⁴. Al mismo tiempo, valores para las recuperaciones de los componentes clave son reportados en el rango de 0.0 a 1.0, incluyendo estos límites^{26,30,31}, aun cuando es conocido que estos valores son meramente teóricos, ya que por ejemplo, para un valor de recuperación de 1.0 se requieren un infinito número de etapas con el fin de alcanzar una separación perfecta³².

Por lo anterior, en este trabajo se plantea variar variables operativas que sean controladas en tiempo real en la industria de procesos químicos³³ tales como: relación de reflujo, temperatura del rehervidor y flujo de alimentación a cada torre, adicionalmente, se tomaron combinaciones de parámetros que arrojaran recuperaciones en el rango de 0,5-0,99 para los componentes clave, permitiendo una distribución de los componentes en el tope y fondo de la columna, situación que en ocasiones es inevitable, por ejemplo, en la separación de mezclas con isómeros o con componentes de punto de ebullición cercano.

Los límites para las variables de entrada son definidos de acuerdo a la literatura y adaptados al caso de estudio. Para el flujo de alimentación de cada columna el superior se establece cuando todo el flujo después del separador inicial se dirige hacia una de las columnas y el inferior cuando no existe un flujo de alimentación a estas²⁶. La relación de reflujo (Rr) localiza sus límites dependiendo del valor de reflujo mínimo calculado mediante la ecuación de Underwood³⁴; para cada torre los

límites máximo y mínimo serán $1,02R_{min}$ a $2,2R_{min}$ ²⁸ respectivamente. Finalmente, los límites para la temperatura del rehervidor fueron determinados basados en el trabajo de Floudas y Paules³⁵, el cual los define realizando una serie de simulaciones que toman como rango inicial la temperatura del agua de enfriamiento en el condensador de cima y la temperatura crítica de la mezcla en los fondos.

Los valores de los límites de las variables de entrada para el caso de estudio son presentados en el ANEXO A.

1.1.3 Valores numéricos para las variables de entrada. Los valores numéricos para las variables independientes o de entrada fueron obtenidos usando la ecuación 1^{36,37}. Posteriormente, un conjunto de datos correspondiente a 25 combinaciones fueron tomados para el desarrollo de la fase de simulación.

$$Z_{i,j} = Z_{i,j}^{min} + Aleatorio. (Z_{i,j}^{max} - Z_{i,j}^{min}) \quad \text{Ec.1}$$

El subíndice i representa la variable independiente 1, 2, o 3 (Flujo de alimentación, Relación de reflujo y Temperatura del rehervidor), mientras el subíndice j representa la columna de destilación del caso evaluado, para el caso de estudio tomará los valores de 1 y 2.

1.1.4 Simulación y diseño. Una vez se obtuvieron las 25 combinaciones de las variables de entrada se simuló cada columna con los datos obtenidos en un simulador comercial (Aspen HYSYS V7.2). La composición tanto para la alimentación y los productos requeridos, la temperatura y el flujo de alimentación fueron fijados de acuerdo al caso de estudio planteado por Floudas y Aggarwal²⁶ (Tabla 1).

Se seleccionó la ecuación de Peng Robinson³⁸ como modelo de estado para el cálculo de los valores- K , entalpías y propiedades termodinámicas asociadas al diseño de las columnas, adicionalmente, se realizan las siguientes consideraciones:

- Las columnas de destilación son de características simples, es decir, poseen una corriente de alimentación y dos corrientes de producto, destilado y fondos³⁴.
- La corriente de alimentación es asumida como un líquido saturado y las corrientes de productos son removidas a su temperatura de punto de burbuja para todas las columnas¹, por tanto, los condensadores requeridos son totales.
- La mezcla a ser separada no contiene azeotropos¹.
- Los requerimientos energéticos de las columnas son suministrados directamente por servicios industriales (agua de enfriamiento a 90°F (305K) y vapor de baja presión a 343kPa)²⁶.
- Las presiones de las columnas son fijadas de acuerdo a la literatura en 16 bares³⁹.

Tabla 1. Datos del caso de estudio

Componente	Alimentación [kgmol/hr]	Productos [kgmol/hr]	
		<i>Prod-1</i>	<i>Prod-2</i>
Propano	100	30	70
Iso-Butano	100	50	50
n-Butano	100	30	70

Los datos de diseño (número de platos, diámetro de torre y tipo de platos) para cada torre de destilación se tomaron de columnas instaladas en procesos industriales y reportados por la literatura^{23,24}. Para el caso de estudio, la columna separadora de propano/isobutano los datos corresponden a la columna de la unidad de Alquilación U-4560 de la refinería de Barrancabermeja²⁴ y la columna separadora de isobutano/nbutano tiene datos de diseño reportados en la literatura por Klemola e

Ilme²³. Para la convergencia de las columnas se fijó la eficiencia de plato en 0,8⁴ y la altura fue determinada por la herramienta “Try Sizing”⁴⁰ del simulador.

Los condensadores de cada columna corresponden a intercambiadores de calor de tubo y carcasa mientras que los rehervidores son tipo *Kettle*. Las áreas de transferencia de calor fueron calculadas usando la ecuación 2. Los requerimientos energéticos se obtuvieron de las simulaciones y los demás parámetros fueron tomados de la literatura^{41,4} y reportados en la Tabla 2.

$$Q_{ij} = U_{ij}A_{ij}LMTD_{ij} \quad \text{Ec. 2}$$

Donde *i* representa la función que desempeña el intercambiador y *j* la columna a la que corresponde.

Tabla 2. Parámetros para el diseño de los condensadores y rehervidores.

	Coefficiente de transferencia de calor⁴¹	LMTD⁴
Condensador	200	15
Rehervidor	150	15

Un resumen de los datos de diseño, condiciones y parámetros de las columnas de destilación con sus respectivos condensadores y rehervidores asociados al caso de estudio se encuentran en el ANEXO B.

La información suministrada por la simulación, es tabulada en Microsoft Excel y, posteriormente utilizada en el análisis de costos y formulación de modelos matemáticos. Esta corresponde a los requerimientos energéticos de cada condensador y rehervidor, además del valor de las recuperaciones de los componentes clave en el destilado y los fondos.

1.1.5 Cálculo de costos. El costo anual total es utilizado en este trabajo para el análisis económico pues es una medida de la rentabilidad económica que no involucra ganancias por venta de productos y es ampliamente utilizado en las etapas de síntesis y diseños preliminares para comparar diferentes diagramas de flujo¹². El costo total es la suma costos de inversión (C_{inv}) y los costos operativos ($Opex$), donde el costo de inversión es multiplicado por un factor que representa el retorno a la inversión inicial (f), el valor de este coeficiente es fijado en 0,2 de acuerdo a Douglas⁴²(Ecuación 3).

$$TAC = f \cdot C_{inv} + Opex \quad \text{Ec. 3}$$

La estimación del costo de equipos, condensadores, rehervidores y columnas, fueron realizadas usando la herramienta de software CAPCOST³² la cual está basada en la estimación de costos por el método de Gunthrie que aunque cuenta con bastante años de haberse planteado, aún presenta una buena aproximación a los costos de adquisición de los equipos y, por ejemplo, para las columnas refleja la influencia de parámetros geométricos como altura, diámetro y número de etapas el costo de adquisición. La versión de CAPCOST cuenta como año base el 2000, así que los costos fueron ajustados al 2011 usando el valor del CEPCI (*Chemical Engineering Plant Cost Index*) para ese año, el cual corresponde a 585,7⁴³.

Los costos operativos fueron calculados basados en el consumo de servicios industriales para un tiempo de operación de 8000 horas al año³⁵. El costo de agua de enfriamiento es de $\$0,159/10^6 kJ^{26}$ mientras en el costo del vapor de baja presión se fijó en $\$2,46/10^6 kJ^{26}$.

Los costos fueron tabulados en Microsoft Excel 2013 y más detalle de estos puede ser encontrado en el ANEXO C.

1.2 MODELADO MATEMÁTICO

La etapa de modelado consiste en describir la relación de las variables independientes con las dependientes mediante ecuaciones algebraicas, simultáneamente, se localizan y describen las restricciones del proceso. Para el caso de estudio, el modelo empírico propuesto relacionó las variables de entrada: flujo de alimentación [$kgmol/hr$], relación de reflujo y la temperatura del rehervidor [K] con los costos operacionales; los costos de inversión se declaran como fijos debido a que no se varió ninguna parte del diseño estructural de las columnas de destilación. Adicionalmente, se generaron modelos para las recuperaciones de los componentes clave en función de las variables operaciones con el fin de restringir la búsqueda del valor óptimo al rango establecido en la sección 2.1.2.

1.2.2 Modelos de regresión para costos y recuperaciones. Las variables independientes son expresadas como $Z_{i,j}$ donde i corresponde al parámetro de entrada (1 para el flujo de alimentación, 2 la relación de reflujo o 3 para la temperatura del rehervidor), mientras j corresponde al número de columna en la superestructura.

La ecuación que ajusta los datos por medio de una regresión corresponde a la ecuación 4.

$$C_j = \alpha_{0,j}y_j + \sum_{i=1}^3 \beta_{i,j}Z_{i,j} + \sum_{i=1}^3 \gamma_{i,j}Z_{i,j}^2 + \sum_{k=1}^3 \sum_{k<i} \delta_{i,j}Z_{i,j}Z_{k,j} \quad \text{Ec. 4}$$

Donde C puede hacer referencia al costo de operación (OPEX), recuperación del componente ligero en el destilado o recuperación del componente pesado en los fondos para cada una de las columnas. j ; α , β , γ , δ corresponden a los coeficientes de la regresión mientras y_i es la variable binaria que toma el valor de 1 si se sitúa o 0 si no se sitúa la columna de destilación en el diagrama. Se hace relevante apuntar

que para la ecuación de regresión planteada y las tres variables independientes se determinaron nueve variables regresoras.

La determinación de los modelos empíricos para costos de operación y recuperaciones fueron realizados de acuerdo al siguiente procedimiento:

1. En primer lugar, se normalizaron las variables según la ecuación 5, este procedimiento que toma los valores de las variables y los representa en el rango de 0 a 1 permite que los órdenes de magnitud de éstas no generen sesgos en el modelo de regresión.

$$z_{i,j} = \frac{Z_{i,j} - Z_{i,j}^{\min}}{Z_{i,j}^{\max} - Z_{i,j}^{\min}} \quad \text{Ec. 5}$$

Donde $z_{i,j}$ es el valor que toma la variable normalizada y, $Z_{i,j}^{\min}$ y $Z_{i,j}^{\max}$ son los límites inferior y superior de la variable $Z_{i,j}$.

2. Posteriormente, se aplicó el criterio de correlación de Pearson⁴⁴ (ρ) para ordenar las 9 variables regresoras de acuerdo al valor absoluto del coeficiente de correlación. Estos coeficientes toman valores entre -1 y 1, si el valor es igual a 1 la relación entre la variable de entrada y salida es directa y perfecta, por otro lado, si toma un valor de -1, la relación entre las variables es inversa y perfecta. Cuando el coeficiente toma el valor es 0 no existe relación alguna entre las variables.
3. Una vez ordenadas las variables de acuerdo al criterio anterior se realizó varias regresiones usando el método de mínimos cuadrados con las 9 variables y, posteriormente, se fueron eliminando una a una las variables regresoras que menos se relacionaran con la variable dependiente.
4. Finalmente, se escogió el modelo de regresión con el coeficiente de determinación múltiple ajustado⁴⁵ $\overline{R^2}$ igual o superior a 0,95.

1.3 OPTIMIZACIÓN Y VALIDACIÓN

Durante esta etapa se plantea el problema de optimización, se define la función objetivo, se esbozan las restricciones y se plantea el problema matemáticamente para, posteriormente, implementar el modelo de optimización en el software de modelado GAMS (*General Algebraic Modeling System*). Finalmente, los resultados obtenidos son evaluados en el software de simulación de procesos Aspen HYSYS V7.2.

1.3.2 Problema de optimización: Caso de estudio. El problema de optimización para el caso de estudio es planteado y descrito de la siguiente forma:

Para una corriente de alimentación compuesta por una mezcla equimolar de tres componentes (Tabla 1) y de condiciones termodinámicas conocidas (temperatura, flujo y presión) busca ser separada en un número de productos multicomponentes de composición previamente definida. Se procura encontrar la secuencia de destilación óptima y las condiciones operativas que satisfaga el criterio del costo total anual mínimo.

1.3.3 Función objetivo. La función objetivo es el costo total anual (TAC), esta corresponde a la suma de los costos de inversión y los de operación para todas las columnas seleccionadas en la superestructura y se plantea en la ecuación 6.

$$\min TAC = 0,2 \cdot \sum_J^2 C_{inv,j} y_j + \left(\sum_j^2 \alpha_{0,j} y_j + \sum_j^2 \sum_i^3 \beta_{i,j} z_{i,j} + \sum_j^2 \sum_i^3 \gamma_{i,j} z_{i,j}^2 + \sum_j^2 \sum_k^3 \sum_{k < i} \delta_{i,j} z_{i,j} z_{k,j} \right)$$

Ec. 6. Función Objetivo

Donde C_{inv} representa el costo de inversión y y la variable binaria que define la existencia de cada columna.

1.3.4 Restricciones de la función objetivo. Las restricciones planteadas para la función objetivo son:

- Modelo para la recuperación del componente (R_{CL}) ligero en el destilado de la columna j . (Ecuación 7)
- Modelo para la recuperación del componente pesado (R_{CP}) en los fondos de la columna j . (Ecuación 8)
- Balance de masa en los separadores de corrientes (divisores). (Ecuación 9)
- Balance de masa por componentes de columnas y mezcladores (Ecuaciones 10,11,12)
- Suma de fracciones molares. (Ecuación 13)
- Restricciones lógicas: Esta hace que el flujo de alimentación a una columna a ser cero si la columna no es seleccionada. (Ecuación 14)
- Límites de las recuperaciones. (Ecuación 15, 16)

1.3.5 Formulación Matemática.

Función objetivo:

$$\min TAC = 0,2 \cdot \sum_j C_{inv,j} y_j + \left(\sum_j \alpha_{0,j} y_j + \sum_j \sum_i \beta_{i,j} z_{i,j} + \sum_j \sum_i \gamma_{i,j} z_{i,j}^2 + \sum_j \sum_k \sum_{k < i} \delta_{i,j} z_{i,j} z_{k,j} \right) \text{Ec.6}$$

Sujeto a:

$$R_{CL,j} = \omega_{0,j} y_j + \sum_{i=1}^3 \mu_{i,j} z_{i,j} + \sum_{i=1}^3 \tau_{i,j} z_{i,j}^2 + \sum_{k=1}^3 \sum_{k < i} \varphi_{i,j} z_{i,j} z_{k,j} \quad \text{Ec.7}$$

$$R_{CP,j} = \omega_{0,j} y_j + \sum_{i=1}^3 \mu_{i,j} z_{i,j} + \sum_{i=1}^3 \tau_{i,j} z_{i,j}^2 + \sum_{k=1}^3 \sum_{k < i} \varphi_{i,j} z_{i,j} z_{k,j} \quad \text{Ec.8}$$

$$\sum_{k \in S_s^{en}} F_k - \sum_{k \in S_s^{sal}} F_k = 0 \quad \text{Ec.9}$$

$$\sum_{k \in M_C^{en}} F_k - \sum_{k \in M_C^{sal}} F_k = 0 \quad \text{Ec.10.}$$

$$F_{en,j} x_{c,en,j} - F_D x_{c,D,j} - F_B x_{c,B,j} = 0 \quad \text{Ec.11}$$

$$\sum_{k \in M_m^{en}} F_k x_{c,k} = x_{c,p} \quad \text{Ec.12}$$

$$\sum_k x_{c,k} = 1 \quad \text{Ec.13}$$

$$F_C - \xi y_j \leq 0 \quad \text{Ec.14}$$

$$R_{CL}^{min} \leq R_{CL,j} \leq R_{CP}^{max} \quad \text{Ec.15}$$

$$R_{CP}^{min} \leq R_{CP,j} \leq R_{CP}^{max} \quad \text{Ec.16}$$

El problema de optimización resultante es de tipo MINLP (Mixto entero no lineal) debido a que existen funciones no lineales (función objetivo y recuperaciones) y se definen variables binarias para la inclusión o no de columnas en la solución. En total cuenta con 21 Variables, 8 ecuaciones y dos variables binaria lo que resulta en 13 grados de libertad.

Una vez planteado el modelo de optimización, fue programado en GAMS y solucionado usando BARON (*Branch-And-Reduce Optimization Navigator*), un *solver* que garantiza en su solución el óptimo global⁴⁶. Aunque el problema fue programado en GAMS, las corridas para solucionarlo fueron llevadas a cabo en el servidor NEOS⁴⁷.

1.3.6 Proceso iterativo para validar el modelo de optimización. La solución determinada en GAMS genera el valor del costo total anual, columnas a usar, secuencia óptima, el valor para las variables operativas con las que se planteó el modelo, y los datos numéricos para las recuperaciones de los componentes clave.

Usando los valores para las variables operativas obtenidos en GAMS como parámetros de entrada en las simulaciones para las columnas, se obtuvieron valores de las recuperaciones de cada componente clave, los cuales se compararon con los valores arrojados por el software de modelado calculando el error relativo⁴⁵. Una vez realizada esa comparación, se procedió a simular la secuencia escogida para comparar los valores requeridos los componentes de los productos con los arrojados por la simulación.

Si el error en cualquiera de los casos superaba el 5%, criterio adoptado por recomendación en la literatura^{4,39}, se realizaban tres nuevas simulaciones con valores aleatorios entre 10% por encima y por debajo del valor obtenido para cada variable independiente, éstas simulaciones fueron adicionadas para la construcción de nuevos modelos para los costos y recuperaciones que conllevan a un nuevo modelo de optimización. Una vez el error fue inferior al criterio establecido, el proceso iterativo se detuvo y los últimos resultados arrojados por el servidor fueron tomados como óptimos.

2. RESULTADOS Y ANÁLISIS

2.1 MODELOS MATEMÁTICOS.

Los modelos obtenidos mediante regresión para el costo operacional, recuperación del componente clave liviano y clave pesado de cada columna de destilación para el caso de estudio mostraron, en todos los casos, un $\overline{R^2}$ superior a 0,98 (Ver ANEXO E), lo cual indica que los modelos matemáticos generados son una muy buena aproximación en el ajuste de los datos experimentales. Esto se refleja en las gráficas de paridad que se muestran en las figuras 3 y 4 las cuales corresponden a los modelos de costos operacionales de cada columna. Para el caso de los modelos de recuperaciones, sus gráficas se pueden encontrar en el ANEXO D.

Figura 3. Gráfica de paridad. Modelo de costos operacionales para la columna I. C_3/iC_4

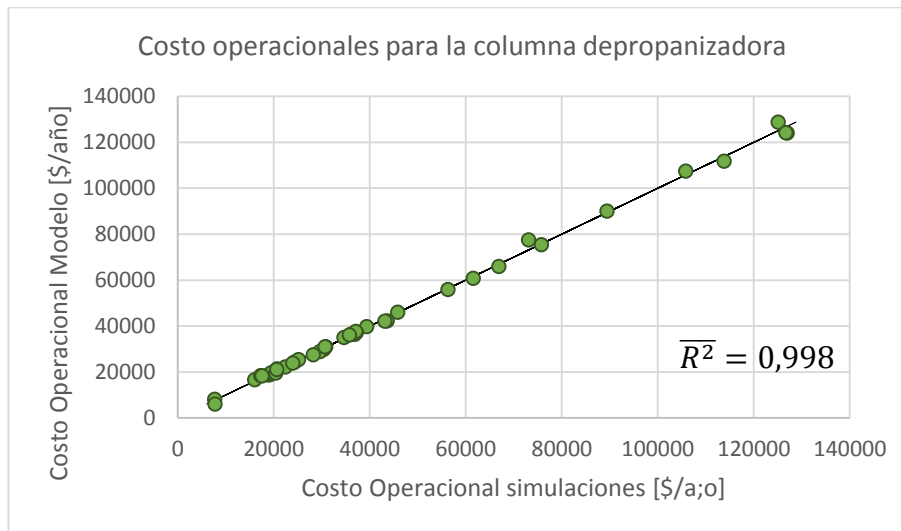
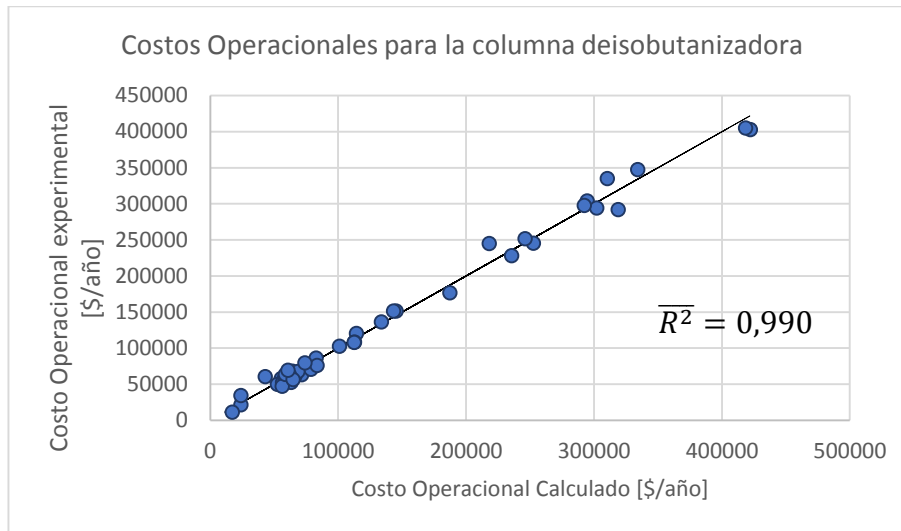


Figura 4. Gráfica de paridad. Modelo de costos operacionales para la columna II. iC_4/nC_4



Aunque los modelos para cada columna fueron validados (error relativo <5%) en 4 iteraciones, se hizo necesario realizar 2 iteraciones adicionales para validar los valores de los productos deseados en la estructura obtenida, por consecuente, un total de seis iteraciones fueron realizadas y 18 simulaciones adicionales al conjunto base de 25.

Durante esta etapa se determinó que la variable que ejerce una mayor influencia en los modelo de costos operacionales de acuerdo al coeficiente de correlación de Pearson (ρ), corresponde al flujo de alimentación de la columna, mientras que para la recuperación de los componentes claves ligero y pesado las variables temperatura del rehervidor y relación de reflujo en su forma cuadrática respectivamente. Las gráficas que muestran la influencia de cada una de estas variables independientes sobre las dependientes se reportan en el ANEXO D.

Tabla 3. Resultados para las recuperaciones de los componentes clave en cada columna.

Componente	Column I. C_3/iC_4			Columna II. iC_4/nC_4		
	GAMS	Aspen HYSYS	Error relativo %	GAMS	Aspen HYSYS	Error relativo %
Propano C_3	0,94	0,946	0,63	-	-	-
Isobutano iC_4	0,97	0,971	0,15	0,959	0,957	0,12
nButano nC_4	-	-	-	0,947	0,988	4,25

El grado de separación en cada columna, representado por la recuperación de cada componente clave en el destilado y en los fondos, y cuyos valores para la secuencia óptima se encuentran en la Tabla 3 mostraron en cada iteración que el costo total anual está fuertemente influenciado por la recuperación, esto debido al consumo energético que aumenta en la columna a medida que el grado de separación es más alto.

2.3 CONDICIONES OPERATIVAS ÓPTIMAS

Los valores para las variables operativas escogidas como variables de entrada fueron determinadas y se muestran en la Tabla 4. En esta se puede observar que para la primera columna el valor de reflujo se expresa como 1,32 veces el reflujo mínimo, lo cual coincide con la literatura que ubica un reflujo óptimo entre el 1,2 a 1,5 veces el reflujo mínimo¹². Aunque para la segunda columna el valor del reflujo no se encuentra en el intervalo recomendado, los valores de las variables independientes permitieron alcanzar el valor deseado de los productos con un porcentaje del error relativo menor a 3,5% para el producto 1 y 1,6% para el producto 2 (Ver Tabla 5).

Tabla 4. Condiciones óptimas de operación.

	Column I. C_3/iC_4	Columna II. iC_4/nC_4
Relación de reflujo	4,11	10,33
Temperatura del rehervidor <i>Kelvin</i>	367,12	375,87
Flujo de alimentación [<i>Kgmol/hr</i>]	68,07	46,01

Es importante resaltar la compensación en el costo operacional del flujo de alimentación y los resultados de las recuperaciones, esto se hace importante dado que en la optimización es fundamental encontrar el punto de equilibrio donde la disminución del nivel de separación compense los gastos que genera aumentar el flujo de alimentación de la columna o que los gastos por aumentar el nivel de separación sea compensado por una menor carga a las columnas. Por ejemplo, para el último escenario se presenta un mayor flujo por los *bypasses* y por ende, una menor carga a las columnas, sin embargo, para alcanzar las especificaciones de los productos en este escenario, un aumento del grado de pureza es requerido.

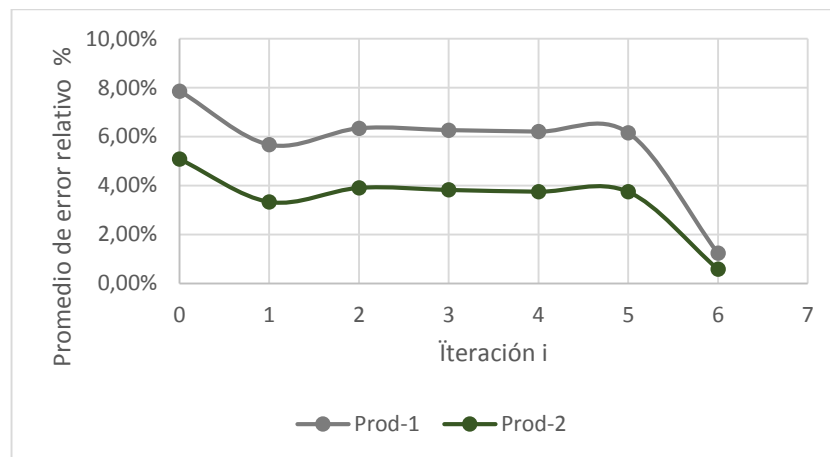
Tabla 5. Resultados para los productos deseados en el caso de estudio

	Flujo deseado	Flujo obtenido HYSYS	Error relativo
Componente	[<i>Kgmol/hr</i>]	[<i>Kgmol/hr</i>]	%
Producto 1			
Propano C_3	30	30,018	0,06
Isobutano iC_4	50	49,939	0,12
nButano nC_4	30	31,094	3,52
Producto 2			
Propano C_3	70	69,982	0,03
Isobutano iC_4	50	50,061	0,12
nButano nC_4	70	68,906	1,59

2.4 VALIDACIÓN DEL MODELO DE OPTIMIZACIÓN

Las especificaciones de los productos del caso de estudio y los valores obtenidos del modelo de optimización se presentan en la Tabla 5. El error relativo que se muestra presenta un comportamiento decreciente a medida que se fueron adicionando simulaciones (Ver figura 6), esto se debe a que el conjunto de tres simulaciones adicionadas en cada iteración se ubica en una zona cercana al óptimo global, lo cual genera una mayor robustez y facilidad para la convergencia del modelo.

Figura 6. Comportamiento del error relativo en función de las iteraciones



Finalmente, los resultados obtenidos son comparados con los otros trabajos reportados en la literatura que trabajan con el mismo caso de estudio (Ver **Tabla 6**).

Tabla 6. Comparación de resultados.

	Hostrup et al³⁹. (2001)	Henrich et al⁴. (2010)	Este trabajo
Secuencia	A/B-B/C	A/B-B/C	A/B-B/C
TAC [\$/año]	398000	447800	426440

3. CONCLUSIONES

- Una metodología para el modelado y la síntesis de secuencias de destilación haciendo uso de una superestructura y representada en un conjunto de modelos no lineales y variables binarias que resultan un problema de optimización de tipo MINLP fue probada y comprobada en un caso de estudio para la obtención de un número de productos con composiciones especificadas partiendo de una mezcla equimolar de tres componente.
- Los resultados obtenidos permiten implementar esta metodología como una alternativa que facilita el análisis técnico-económico con un conjunto pequeño de simulaciones que consigue alcanzar las tolerancias impuestas en poco tiempo y gasto computacional.
- Aplicando la metodología para el caso de estudio compuesto por una mezcla equimolar compuesta por propano, isobutano y normal butano que se separa en dos productos con composiciones específicas se encontró que la mejor secuencia de destilación corresponde a la columna separadora de propano/isobutano seguida por la columna separadora de los isómeros isobutano/nbutano con un costo total anual de \$426340.
- La variable de regresión que ejercen un mayor impacto en el costo total anual de acuerdo a los coeficientes de Pearson fue el flujo de alimentación de las columnas. Sin embargo, se debe tener presente que este flujo no se puede reducir sin tener en cuenta la implicación que se tiene sobre el grado de separación requerido para cumplir las especificaciones deseadas en los productos.

- Incluir condiciones de diseño de columnas industriales reportadas en la literatura en una simulación rigurosa resulta en modelos mejor ajustados a condiciones reales, más robustos y que, finalmente, generan más confiabilidad en análisis económicos que lleven a toma de decisiones en la industria de procesos químicos.

4. RECOMENDACIONES

- Se planteó y comprobó una metodología que permite realizar un análisis técnico-económico de la síntesis de secuencias de destilación simples en función de algunas variables operacionales, lo que hace de ésta una opción para que en futuros trabajos se aborde la evaluación de sistemas de integración energética interna o externa entre columnas de destilación lo cual implicaría la inclusión de la presión de cada columna como variable de decisión.
- El caso de estudio determinó una solución óptima para columnas de destilación simple (una alimentación y dos corrientes de producto) lo que abre el camino para realizar estudios para determinar secuencias óptimas con columnas complejas o del tipo Petlyuk.

Nomenclatura

MINLP	Programación mixta entera no lineal
TAC	Costo Total anual [\$/año]
<i>Opex</i>	Costo Operacional [\$/año]
<i>Cinv</i>	Costo de inversión [\$/]
<i>f</i>	Retorno de inversión
U	Coefficiente de transferencia de calor
LMTD	Diferencia Temperatura media logarítmica [K]
Q	Requerimiento energético [kJ/h]
A	Área de transferencia de calor [m ²]
<i>x</i>	Fracción molar del componente c
c	Índice para componentes
$Z_{1,j}$	Flujo a la columna <i>j</i> [kmol/h]
$Z_{2,j}$	Relación de reflujo de la columna <i>j</i>
$Z_{3,j}$	Temperatura del rehervidor de la columna <i>j</i> [kJ/h]
$Z_{i,j}^{min}$	Límite superior de la variable independiente <i>i</i> en columna <i>j</i>
$Z_{i,j}^{max}$	Límite inferior de la variable independiente <i>i</i> en columna <i>j</i>
k	Índice para las corrientes
R_{CL}	Recuperación del componente clave liviano
R_{CP}	Recuperación del componente clave pesado
S_s^{en}	Conjunto de corrientes en la entrada del <i>Splitter</i>
S_s^{sal}	Conjunto de corrientes en la salida del <i>Splitter</i>
M_C^{en}	Conjunto de corrientes en la entrada del mezclador
M_C^{sal}	Conjunto de corrientes en la salida del mezclador
ξ	Límite superior para el flujo a las columnas

CITAS BIBLIOGRÁFICAS

1. WEI-ZHONG A., XI-GANG Y. A simulated annealing-based approach to the optimal synthesis of heat-integrated distillation sequences. En: Computers & Chemical Engineering. Vol.33 (2009); 199–212.
2. SINNOT R. Coulson and Richardson's Chemical Engineering Series. Cuarta Edición. Vol. 6. Sevier E. 2001.
3. CHUNSHAN L., ZHANG X., ZHANG S., SUZUKI K. Environmentally conscious design of chemical processes and products: Multi-optimization method. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol 87 (2009); 233-243.
4. HENRICH F., BOUVY C., KAUSCH C., LUCAS K., PREUB M., RUDOLPH G. ROOSEN P. Economic optimization of non-sharp separation sequences by means of evolutionary algorithms. En: Computers and Chemical Engineering. Vol. 32 (2008); 1411-1432.
5. ZHI-YONG L. Matrix-based heuristic synthesis of distillation sequences with several feed streams and multicomponent products. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol.76 (1998); 302-307.
6. ZHANG L., LINNINGER A. Towards computer-aided separation synthesis. AIChE Journal. Vol.52 (2006). 1392-1408.
7. LEBOREIRO J., ACEVEDO J. Processes synthesis and design of distillation sequences using modular simulators: a genetic algorithm framework. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.28 (2004):1223–1236.
8. GIRIDHAR A., AGRAWAL R. Synthesis of distillation configurations: I. Characteristics of a good search space. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.34 (2010); 73-83.
9. JAIN S., SMITH R., KIM J-K. Synthesis of heat-integrated distillation sequence systems. En: Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers. Vol. 43 (2012); 525-534.
10. ALCÁNTARA-AVILA J. New synthesis procedure to find the optimal distillation sequence with internal and external heat integrations. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. Vol.52 (2013); 4851-4862.

11. MCCARTHY E., FRAGA E., PONTON J. An automated procedure for multicomponent product separation synthesis. En: Computers and Chemical Engineering. Vol. 22 (1998); S77-S84.
12. SEIDER W., SEADER J., LEWIN D., Widagdo S. Product and Process design principles: synthesis, analysis and evaluation. Tercera Edición. John Wiley & Sons. 2009.
13. PILAVACHI, P.A., SCHENK M., BEK-PEDERSEN E., GANI R. Design and analysis of separation by distillation: Role of Property Models. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol. 78 (2000); 217–230.
14. SEADER J., WESTERBERG A. A combined heuristic and evolutionary strategy for synthesis of simple separation sequences. En: AIChE Journal. Vol.23 (1977); 951–954.
15. STEPHANOPOULOS G., WESTERBERG AW. Studies in process synthesis-II: Evolutionary synthesis of optimal process flowsheets. En:Chemical Engineering Science. Vol. 31 (1976); 195–204.
16. ANDRECOVICH M.J., WESTERBERG A.W. An MILP formulation for heat-integrated distillation sequence synthesis. En: AIChE Journal. Vol.31 (1985); 1461–1474.
17. FRAGA E., MATIAS T.S. Synthesis and optimization of a nonideal distillation system using a parallel genetic algorithm. En: Computers and Chemical Engineering. Vol. 20. Suplemeto1. (1996). S79-S84.
18. WANG X-H., LI Y-G. Stochastic GP synthesis of heat integrated nonsharp distillation sequences. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol.88 (2010); 45–54.
19. FLOQUET P., PIBOULEAU L., DOMENECH S. Separation sequence synthesis: How to use simulated annealing procedure?. En: Computers and Chemical Engineering. Vol. 18 (1994); 1141–1148.
20. MARCOULAKI E., LINKE P., KOKOSSIS A. Design of separation trains and reaction-separation networks using stochastic optimization methods. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol.79 (2001); 25-32.
21. HAUAN S., LIEN K.M. A phenomena based design approach to reactive distillation. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol.76 (1998). 396-406.

22. YEOMANS H., GROSSMANN I.E. Nonlinear disjunctive programming models for the synthesis of heat integrated distillation sequences. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.23 (1999); 1135–1151.
23. KLEMOLA K.T., ILME J.K. Distillation efficiencies of an industrial-scale i-butane/n-butane fractionator. En: Industrial and Engineering Chemistry Research. Vol.96 (1996); 4579–4586.
24. ECOPETROL S.A. Manual de Descripción del Proceso: Unidad de Alquiler. Ecopetrol S.A. Barrancabermeja, 2009.
25. RODRÍGUEZ S., GRANDA A. Simulación y Optimización Avanzadas en la Industria Química y de Processos: HYSYS. Tercera Edición. Universidad de Oviedo. 2005.
26. AGGARWAL A., FLOUDAS C.A. Synthesis of general distillation sequences-nonsharp separations. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.14 (1990); 631–653.
27. AGGARWAL A. Synthesis and analysis of general distillation sequences. Princeton. 1991. Tesis (Doctorado en Ingeniería Química). Universidad de Princeton. Departamento de Ingeniería Química.
28. AGGARWAL A., FLOUDAST C.A. Synthesis of heat integrated nonsharp distillation sequences. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.16 (1992):89-108.
29. SHAH P.B. Squeeze more out of complex columns. En: Chemical Engineering Progress. ProQuest. Vol.98 (2002); 46-55.
30. AGRAWAL R. Synthesis of distillation column configurations for a multicomponent separation. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. Vol.35 (1996); 1059-1071.
31. AGRAWAL R. Synthesis of multicomponent distillation column configurations. En: AIChE Journal. Vol.49 (2003); 379-401.
32. TURTON R., BAILIE R., WHITING W., SHAEIWITZ J., Bhattacharyya D. Analysis, synthesis and design of chemical processes. Cuarta Edición. Pearson Education, Inc. 2008.
33. ECOPETROL S.A. Manual de Descripción del Proceso: Unidades de Tratamientos UOP 2. Ecopetrol S.A. Barrancabermeja, 2009.

34. TOWLER G., SINNOTT R. Chemical Engineering Design: Principles, Practice, and Economics of Plant and Process Design. El Sevier. 2012.
35. FLOUDAS C.A., PAULES IV G.P. A mixed-integer nonlinear programming formulation for the synthesis of heat-integrated distillation sequences. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.12 (1988); 531-546.
36. GUERRA O.J., LE ROUX C. GALO A. Improvements in Petroleum Refinery Planning: 1. Formulation of Process Models. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. Vol. 50 (2011); 13403-13418.
37. GUERRA O.J., LE ROUX C., GALO C. Improvements in Petroleum Refinery Planning: 2. Case Studies. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. Vol. 50 (2011);13419-13426.
38. ASPENTECH. HYSYS 2004.2: Simulation Basis. Aspen Technology, Inc. Cambridge, 2005.
39. HOSTRUP M., GANI R., KRAVANJA Z., SORSAK A., GROSSMANN I. Integration of thermodynamic insights and MINLP optimization for the synthesis, design and analysis of process flowsheets. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.25 (2001); 73-83.
40. ASPENTECH. HYSYS 2004.2: Operation Guide. Aspen Technology, Inc. Cambridge, 2005.
41. STANLEY M.W. Chemical Proces Equipment selection and design: Heuristic in Chemical Engineering. Butterworth-Heinemann. 1990.
42. DOUGLAS J.M. Conceptual design of chemical processes.University of Massachusetts. MacGraw-Hill. 1988.
43. CHEMICAL ENGINEERING. Economic Indicators: Chemical Engineering Plant Cost Index. Enero, 2013. Pág. 64 [Consultado en Junio, 2013]. Disponible en www.che.com/pci
44. CARLBERG C. Predictive Analytics: Microsoft Excel. Indianápolis , Indiana USA. 2012; 35-41
45. MONTGOMERY D.C., RUNGER G.C. Probabilidad y Estadística aplicadas a la Ingeniería. Mexico. McGraw-Hill. 1996; 471-610.
46. SAHINIDIS N. GAMS solvers manual: BARON. 2013. Pág. 39-54. [Consultado en Agosto 2013] Disponible en www.gams.com/dd/docs/solvers/baron.pdf

47. The NEOS Server. [Consultado de Junio-Septiembre]. Disponible en [<www.neos-server.org/neos/>](http://www.neos-server.org/neos/)

48. Perry R., Green D., Maloney J. Perry's Chemical Engineers' Handbook: Distillation. United State of America. Eight edition. 2008; 13.4-13.58

BIBLIOGRAFÍA

AGGARWAL A. Synthesis and analysis of general distillation sequences. Princeton. 1991. Tesis (Doctorado en Ingeniería Química). Universidad de Princeton. Departamento de Ingeniería Química.

AGGARWAL A., FLOUDAST C.A. Synthesis of heat integrated nonsharp distillation sequences. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.16 (1992):89-108.

AGGARWAL A., FLOUDAS C.A. Synthesis of general distillation sequences-nonsharp separations. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.14 (1990); 631-653.

AGRAWAL R. Synthesis of distillation column configurations for a multicomponent separation. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. Vol.35 (1996); 1059-1071.

AGRAWAL R. Synthesis of multicomponent distillation column configurations. En: AIChE Journal. Vol.49 (2003); 379-401.

ALCÁNTARA-AVILA J. New synthesis procedure to find the optimal distillation sequence with internal and external heat integrations. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. Vol.52 (2013); 4851-4862.

ANDRECOVICH M.J., WESTERBERG A.W. An MILP formulation for heat-integrated distillation sequence synthesis. En: AIChE Journal. Vol.31 (1985); 1461-1474.

ASPENTECH. HYSYS 2004.2: Operation Guide. Aspen Technology, Inc. Cambridge, 2005.

ASPENTECH. HYSYS 2004.2: Simulation Basis. Aspen Technology, Inc. Cambridge, 2005.

CARLBERG C. Predictive Analytics: Microsoft Excel. Indianápolis , Indiana USA. 2012; 35-41

CHEMICAL ENGINEERING. Economic Indicators: Chemical Engineering Plant Cost Index. Enero, 2013. Pág. 64 [Consultado en Junio, 2013]. Disponible en www.che.com/pci

CHUNSHAN L., ZHANG X., ZHANG S., SUZUKI K. Environmentally conscious design of chemical processes and products: Multi-optimization method. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol 87 (2009); 233-243.

DOUGLAS J.M. Conceptual design of chemical processes. University of Massachusetts. MacGraw-Hill. 1988.

ECOPETROL S.A. Manual de Descripción del Proceso: Unidad de Alquiler. Ecopetrol S.A. Barrancabermeja, 2009.

ECOPETROL S.A. Manual de Descripción del Proceso: Unidades de Tratamientos UOP 2. Ecopetrol S.A. Barrancabermeja, 2009.

GIRIDHAR A., AGRAWAL R. Synthesis of distillation configurations: I. Characteristics of a good search space. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.34 (2010); 73-83.

GUERRA O.J., LE ROUX C. GALO A. Improvements in Petroleum Refinery Planning: 1. Formulation of Process Models. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. Vol. 50 (2011); 13403-13418.

GUERRA O.J., LE ROUX C., GALO C. Improvements in Petroleum Refinery Planning: 2. Case Studies. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. Vol. 50 (2011);13419-13426.

HAUAN S., LIEN K.M. A phenomena based design approach to reactive distillation. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol.76 (1998). 396-406.

HENRICH F., BOUVY C., KAUSCH C., LUCAS K., PREUB M., RUDOLPH G. ROOSEN P. Economic optimization of non-sharp separation sequences by means of evolutionary algorithms. En: Computers and Chemical Engineering. Vol. 32 (2008); 1411-1432.

HOSTRUP M., GANI R., KRAVANJA Z., SORSAK A., GROSSMANN I. Integration of thermodynamic insights and MINLP optimization for the synthesis, design and analysis of process flowsheets. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.25 (2001); 73-83.

FLOQUET P., PIBOULEAU L., DOMENECH S. Separation sequence synthesis: How to use simulated annealing procedure?. En: Computers and Chemical Engineering. Vol. 18 (1994); 1141–1148.

FLOUDAS C.A., PAULES IV G.P. A mixed-integer nonlinear programming formulation for the synthesis of heat-integrated distillation sequences. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.12 (1988); 531-546.

FRAGA E., MATIAS T.S. Synthesis and optimization of a nonideal distillation system using a parallel genetic algorithm. En: Computers and Chemical Engineering. Vol. 20. Suplemeto1. (1996). S79-S84.

JAIN S., SMITH R., KIM J-K. Synthesis of heat-integrated distillation sequence systems. En: Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers. Vol. 43 (2012); 525-534.

KLEMOLA K.T., ILME J.K. Distillation efficiencies of an industrial-scale i-butane/n-butane fractionator. En: Industrial and Engineering Chemistry Research. Vol.96 (1996); 4579–4586.

LEBOREIRO J., ACEVEDO J. Processes synthesis and design of distillation sequences using modular simulators: a genetic algorithm framework. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.28 (2004):1223–1236.

MARCOULAKI E., LINKE P., KOKOSSIS A. Design of separation trains and reaction-separation networks using stochastic optimization methods. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol.79 (2001); 25-32.

MCCARTHY E., FRAGA E., PONTON J. An automated procedure for multicomponent product separation synthesis. En: Computers and Chemical Engineering. Vol. 22 (1998); S77-S84.

MONTGOMERY D.C., RUNGER G.C. Probabilidad y Estadística aplicadas a la Ingeniería. Mexico. McGraw-Hill. 1996; 471-610.

Perry R., Green D., Maloney J. Perry's Chemical Engineers' Handbook: Distillation. United State of America. Eight edition. 2008; 13.4-13.58

PILAVACHI, P.A., SCHENK M., BEK-PEDERSEN E., GANI R. Design and analysis of separation by distillation: Role of Property Models. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol. 78 (2000); 217–230.

RODRÍGUEZ S., GRANDA A. Simulación y Optimización Avanzadas en la Industria Química y de Processos: HYSYS. Tercera Edición. Universidad de Oviedo. 2005.

SAHINIDIS N. GAMS solvers manual: BARON. 2013. Pág. 39-54. [Consultado en Agosto 2013] Disponible en www.gams.com/dd/docs/solvers/baron.pdf

SEADER J., WESTERBERG A. A combined heuristic and evolutionary strategy for synthesis of simple separation sequences. En: AIChE Journal. Vol.23 (1977); 951–954.

SEIDER W., SEADER J., LEWIN D., Widagdo S. Product and Process design principles: synthesis, analysis and evaluation. Tercera Edición. John Wiley & Sons. 2009.

SINNOT R. Coulson and Richardson's Chemical Engineering Series. Cuarta Edición. Vol. 6. Sevier E. 2001.

SHAH P.B. Squeeze more out of complex columns. En: Chemical Engineering Progress. ProQuest. Vol.98 (2002); 46-55.

STANLEY M.W. Chemical Proces Equipment selection and design: Heuristic in Chemical Engineering. Butterworth-Heinemann. 1990.

STEPHANOPOULOS G., WESTERBERG AW. Studies in process synthesis-II: Evolutionary synthesis of optimal process flowsheets. En:Chemical Engineering Science. Vol. 31 (1976); 195–204.

The NEOS Server. [Consultado de Junio-Septiembre]. Disponible en www.neos-server.org/neos/

TOWLER G., SINNOTT R. Chemical Engineering Design: Principles, Practice, and Economics of Plant and Process Design. El Sevier. 2012.

TURTON R., BAILIE R., WHITING W., SHAEIWITZ J., Bhattacharyya D. Analysis, synthesis and design of chemical processes. Cuarta Edición. Pearson Education, Inc. 2008.

WANG X-H., LI Y-G. Stochastic GP synthesis of heat integrated nonsharp distillation sequences. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol.88 (2010); 45–54.

WEI-ZHONG A., XI-GANG Y. A simulated annealing-based approach to the optimal synthesis of heat-integrated distillation sequences. En: Computers & Chemical Engineering. Vol.33 (2009); 199–212.

YEOMANS H., GROSSMANN I.E. Nonlinear disjunctive programming models for the synthesis of heat integrated distillation sequences. En: Computers and Chemical Engineering. Vol.23 (1999); 1135–1151.

ZHANG L., LINNINGER A. Towards computer-aided separation synthesis. AIChE Journal. Vol.52 (2006). 1392-1408.

ZHI-YONG L. Matrix-based heuristic synthesis of distillation sequences with several feed streams and multicomponent products. En: Chemical and Engineering Research and Design. Vol.76 (1998); 302-307.

ANEXOS

ANEXO A. Límites de las variables de entrada para el caso de estudio

	Variable	Unidades	Límite inferior	Límite superior
	Flujo de alimentación	<i>Kgmol/hr</i>	0	300
Columna I.	Relación de reflujo	-	3,11	6,85
Depropanizadora	Temperatura rehervidor	<i>Kelvin</i>	339	375,2
	Flujo de alimentación	<i>Kgmol/hr</i>	0	300
Columna II.	Relación de reflujo	-	4,70	10,34
Deisobutanizadora	Temperatura rehervidor	<i>Kelvin</i>	340	376,4

ANEXO B. Datos de diseño para cada columna de destilación del caso de estudio.

	Columna I. Depropanizadora	Columna II Deisobutanizadora
Número de platos	31 ²⁴	77 ²³
Eficiencia de plato	0,8	0,8
Tipo de plato	Sieve	Sieve
Altura entre platos <i>[m]</i> ²³	0,61	0,61
Diámetro [m]	1,06 ²⁴	2,9 ²³
Material	Acero al Carbono	Acero al carbono
Presión en el fondo [kPa]	1614 ³⁹	1635 ³⁹
ΔP por plato [kPa] ⁴⁸	0,47	0,47

ANEXO C. Cálculo del costo total anual (TAC)

Tabla C. 1. Costo de inversión para la columna I

CAPCOST	
CEPCI 2012 ⁴³	585,7
Costo Total de inversión	622829,9492
Rata de retorno i^{42}	0,2
Años del proyecto	20

Tabla C. 2. Costo de operación para la columna I

<i>s</i>	<i>Alimentación a la Columna</i>	<i>Relación de Reflujo</i>	<i>Temperatura del rehervidor</i>	<i>Duty del condensador</i>	<i>Duty del Rehervidor</i>	<i>OPEX</i>
	[Kgmol/hr]		[K]	[kJ/h]	[kJ/h]	\$/year
1	137,65	3,68	361,49	-2136748,19	2197177,67	45782,63
2	68,06	3,54	359,04	-885520,33	905718,61	18878,47
3	186,89	3,60	360,05	-2630409,67	2699246,69	56251,12
4	18,98	4,07	364,16	-356853,81	367856,98	7663,91
5	61,97	3,58	360,53	-898618,32	922543,96	19224,90
6	180,51	3,58	357,36	-2045757,99	2089717,26	43560,66
7	156,99	4,28	364,63	-3113589,36	3209119,49	66859,23
8	263,45	3,73	361,72	-4169005,48	4288351,43	89354,66
9	40,23	4,10	363,79	-747226,39	769441,42	16031,52
10	85,60	3,22	363,53	-1415524,29	1458369,37	30384,59
11	29,52	3,19	358,74	-364275,55	371665,80	7748,01
12	256,86	3,28	357,57	-2891046,60	2952871,12	61553,69
13	254,32	4,51	367,43	-5902050,18	6092146,92	126913,49
14	198,50	3,42	363,87	-3401275,55	3506688,21	73057,51
15	270,64	4,08	367,02	-5813181,60	6003733,61	125067,55

16	116,59	3,30	358,22	-1390948,55	1418540,71	29572,68
17	205,82	3,94	362,65	-3527511,58	3633677,97	75707,08
18	74,37	4,51	366,83	-1678166,86	1732429,07	36090,24
19	228,62	4,47	367,48	-5290041,38	5460354,33	113751,88
20	119,97	3,78	360,03	-1722186,65	1767399,24	36831,65
21	91,68	3,44	366,86	-1826560,19	1886334,37	39295,54
22	256,30	4,02	364,77	-4916414,61	5077937,27	105781,25
23	59,79	3,98	358,80	-808107,24	827393,80	17244,83
24	267,34	4,43	366,54	-5887867,74	6078569,38	126629,33
25	77,72	3,32	363,76	-1311548,07	1351840,99	28164,37
26	51,01	3,84	363,47	-896978,44	924623,36	19263,57
27	45,69	4,05	365,39	-904995,62	935480,06	19486,56
28	45,86	3,87	366,73	-946650,17	977885,16	20370,69
29	61,62	5,51	368,32	-1737585,59	1785989,88	37215,61
30	71,92	5,53	368,22	-2013844,22	2070797,67	43149,24
31	62,34	5,38	368,20	-1709160,88	1758235,48	36635,47
32	77,34	3,87	358,11	-969938,91	992676,71	20690,23
33	89,81	3,67	358,60	-1144490,32	1171072,93	24408,82
34	90,66	3,83	365,13	-1723928,22	1779832,31	37077,55
35	75,62	3,73	356,78	-822687,56	839453,11	17499,74
36	84,18	3,87	362,76	-1435169,84	1478114,56	30796,58
37	76,66	3,60	359,63	-1048948,56	1073568,58	22376,21
38	79,23	3,86	363,91	-1427192,45	1471867,30	30663,99
39	78,28	4,02	366,28	-1607889,06	1660963,12	34600,11
40	86,40	3,97	358,94	-1177533,98	1205842,54	25132,34
41	85,81	3,66	358,93	-1121165,48	1147540,89	23917,92
42	82,00	4,10	365,71	-1659948,01	1716537,42	35755,59
43	83,93	3,74	357,36	-968654,07	989557,74	20627,46

*s corresponde al número de simulaciones mientras que líneas separan las simulaciones adicionadas en cada iteración

Tabla C. 3. Costo de Inversión para la columna II.

CAPCOST	
CEPCI 2012 ⁴³	585,7
Total Costo de inversión	1483068,02
Rata de retorno ⁱ⁴²	0,2
Años del proyecto	20

Tabla C. 4. Costo de operación y TAC para la columna II

s	Alimentación a la Columna	Relación de Reflujo	Temperatura del rehervidor	Duty del condensador	Duty del Rehervidor	OPEX
	<i>[Kgmol/hr]</i>		<i>[K]</i>	<i>[kJ/h]</i>	<i>[kJ/h]</i>	<i>\$/year</i>
1	206,78	6,83	374,37	-14039163,92	14118033,62	294571,28
2	153,72	7,44	375,77	-12054106,83	12103823,00	252567,75
3	175,96	5,00	373,54	-8900996,57	8969403,78	187122,38
4	184,83	6,24	374,39	-11695998,69	11795995,17	246078,82
5	19,50	6,30	373,09	-1137240,58	1146376,22	23915,54
6	196,33	6,79	375,86	-14413339,11	14475804,25	302059,53
7	131,39	5,37	372,41	-6347212,31	6409443,02	133698,74
8	230,78	7,04	374,21	-15914834,67	16004993,83	333941,55
9	98,15	6,26	372,53	-5423316,69	5469566,09	114101,95
10	100,08	6,76	374,81	-6919627,84	6959501,73	145208,00
11	11,36	7,38	374,18	-815534,59	818950,49	17088,79
12	74,47	6,79	373,55	-4776299,65	4833539,85	100812,83
13	178,75	8,31	375,56	-15215262,31	15277291,13	318788,72
14	245,52	7,87	375,73	-20132366,83	20226523,37	422048,23
15	298,42	6,20	375,46	-19946795,86	20047246,18	418298,35

16	20,52	5,25	374,41	-1141627,85	1148671,57	23966,11
17	60,77	6,71	373,84	-3934355,05	3958975,96	82600,43
18	106,48	5,23	373,06	-5354596,61	5399380,06	112638,90
19	270,04	5,23	373,35	-13902403,06	14015165,61	292381,10
20	32,38	6,01	374,86	-2041253,10	2050300,55	42782,36
21	142,10	7,48	375,84	-11247656,74	11289696,61	235585,07
22	186,77	6,26	372,56	-10356041,96	10443520,99	217865,90
23	231,66	6,74	373,54	-14768305,35	14865945,74	310157,82
24	73,09	7,46	374,41	-5354550,44	5383080,12	112319,36
25	98,68	6,67	375,09	-6832543,74	6864988,57	143244,77
26	66,25	4,81	374,05	-3392362,83	3416288,21	71274,33
27	75,23	5,07	373,19	-3736921,37	3768590,45	78617,74
28	74,72	4,74	374,75	-3978236,03	4001172,99	83483,31
29	48,54	4,96	374,63	-2636249,84	2652319,20	55338,77
30	54,80	4,89	375,16	-3058511,57	3075228,64	64164,91
31	47,85	5,03	373,86	-2487332,87	2505110,11	52264,05
32	60,87	4,78	373,62	-3007061,67	3030256,92	63218,02
33	61,92	5,15	373,29	-3135865,98	3161227,37	65948,88
34	58,86	4,90	374,09	-3058481,56	3078849,40	64235,84
35	60,99	5,11	374,07	-3256320,30	3278857,03	68407,64
36	51,93	4,99	373,85	-2686133,11	2705644,24	56447,39
37	61,59	5,08	375,17	-3521561,15	3541983,69	73902,31
38	51,35	5,04	374,38	-2772369,30	2790436,05	58219,00
39	53,53	4,81	373,70	-2672081,79	2692315,66	56168,27
40	54,28	4,89	374,75	-2946500,57	2963794,02	61838,31
41	50,26	4,92	375,05	-2792851,75	2809699,51	58622,62
42	61,09	4,86	373,74	-3080314,25	3103368,50	64744,18
43	50,69	5,13	375,07	-2894459,53	2910904,48	60735,48

*s corresponde al número de simulaciones mientras las líneas separan las simulaciones adicionadas en cada iteración

ANEXO D. Estimación de coeficientes de regresión y gráficas de paridad de los modelos matemáticos

El método de reducción de mínimos cuadrados fue adoptado para el ajuste de los datos y consiste en minimizar la suma de los errores cuadráticos medios entre las predicciones arrojadas por el modelo matemático y los datos empíricos obtenidos de las simulaciones⁴⁵. La suma de los errores cuadráticos medios se representa en la ecuación D1.

$$\min S(\theta) = \sum_{l=1}^r (y_l^{cal} - y_l^{emp})^2 = (Y - X\theta)'(Y - X\theta) \quad \text{Ec.D3}$$

$S(\theta)$ Suma de errores cuadráticos medios

y_l^{cal} Valor de la variable dependiente calculada.

y_l^{emp} Valor empírico de la variable dependiente.

Y Vector de datos experimentales para la variable dependiente y

X Matriz de variables independientes

θ Vector de parámetros.

Para la obtención de los parámetros se desarrolla la ecuación D2.

$$\theta = (X' \cdot X)^{-1} \cdot X' \cdot Y \quad \text{Ec.D2}$$

El coeficiente de determinación ajustado $\overline{R^2}$ que se usó para escoger los modelos matemáticos se define en la ecuación D3⁴⁵.

$$\overline{R^2} = 1 - \frac{\frac{SS_E}{(n-p)}}{\frac{SS_T}{(n-1)}} \quad \text{Ec.D4}$$

Donde:

n Número de observaciones tomadas.

p Número de parámetros del modelo.

SS_E Suma de los errores cuadráticos.

SS_T Suma de los cuadrados de los residuos y SS_E

D.1. Coeficientes de regresión para los modelos óptimos de cada columna.

Los coeficientes obtenidos para los modelos de costos y recuperaciones para la columna depropanizadora se muestran en las tablas D1.a, b y c.

OPEX	
<i>Intersección</i>	203568,633
<i>Variable z1</i>	191919,769
<i>Variable z1z2</i>	23961,4615
<i>Variable z1^2</i>	557,16334
<i>Variable z1z3</i>	179731,404
<i>Variable z3</i>	167157,783

(a)

Recuperación del componente clave ligero	
<i>Intersección</i>	1,14308603
<i>Variable x3^2</i>	0,44340125
<i>Variable x3</i>	0,38783389
<i>Variable x2x3</i>	0,00285607
<i>Variable x1x3</i>	0,00047886

(b)

Recuperación del componente clave pesado	
<i>Intersección</i>	0,8872603
<i>Variable x2^2</i>	0,42580089
<i>Variable x2</i>	0,32468091
<i>Variable x1x2</i>	0,02614763
<i>Variable x2x3</i>	0,35388347
<i>Variable x3</i>	0,03235782
<i>Variable x1</i>	0,02249125
<i>Variable x1x3</i>	0,00104933
<i>Variable x3^2</i>	0,22177108

(c)

Tabla D. 1. Coeficientes de regresión. Columna I. (b) Recuperación del componente clave ligero (propano). (c). Recuperación del componente clave pesado (isobutano).

Para la columna deisobutanizadora los parámetros obtenidos se muestran en la tabla D2 a, b y c.

OPEX	
<i>Intersección</i>	546323,618
<i>Variable x1</i>	693293,188
<i>Variable x1^2</i>	28241,9438
<i>Variable x1x2</i>	413537,621
<i>Variable x1x3</i>	379517,402
<i>Variable x2^2</i>	258887,464

(a)

Recuperación del componente clave ligero	
<i>Intersección</i>	0,992230784
<i>Variable x3²</i>	7,101991743
<i>Variable x3</i>	1,571074765
<i>Variable x2x3</i>	0,213820066
<i>Variable x1x3</i>	0,016034603

(b)

Recuperación del componente clave pesado	
<i>Intersección</i>	0,954002686
<i>Variable x2²</i>	0,275226135
<i>Variable x2</i>	0,160075938
<i>Variable x1x2</i>	0,008368482
<i>Variable x1²</i>	0,015936958
<i>Variable x3²</i>	3,056912167
<i>Variable x1</i>	0,015140334
<i>Variable x3</i>	0,234819642
<i>Variable x1x3</i>	0,076125895
<i>Variable x2x3</i>	1,583232824

(c)

Tabla D. 2. Coeficientes de regresión. Columna II. (a) Coeficientes para el modelo costos de operación. (b) Recuperación del componente clave ligero (isobutano). (c). Recuperación del componente clave pesado (nbutano).

Figura D.1. Recuperación de C_3 vs C_3 experimental para la columna I

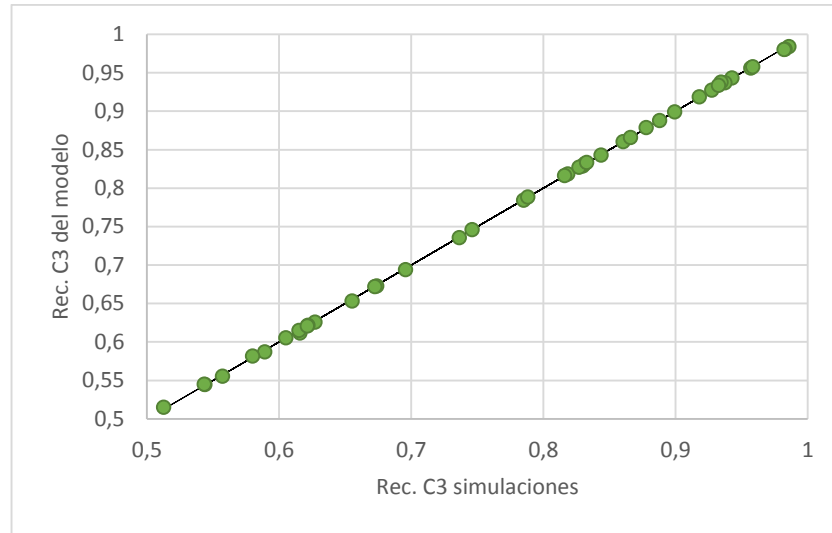


Figura D.2. Recuperación de iC_4 vs iC_4 experimental para la columna I.

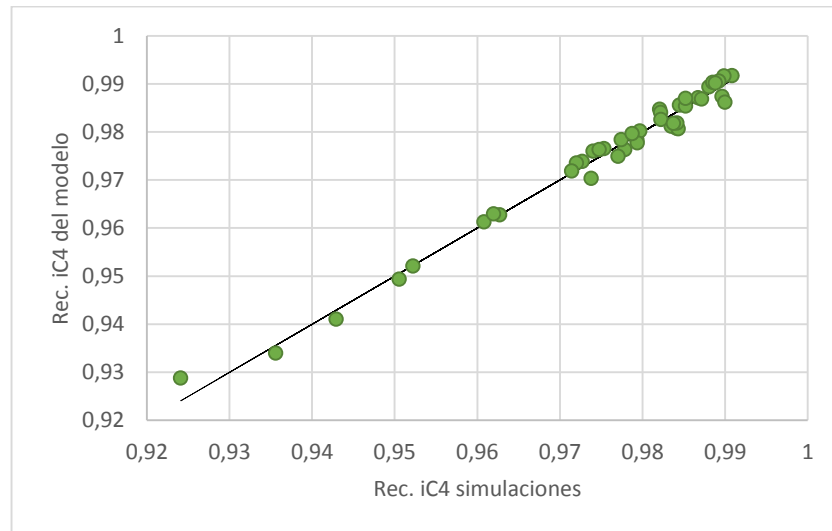


Figura D.3. Recuperación de iC_4 vs iC_4 experimental para la columna II.

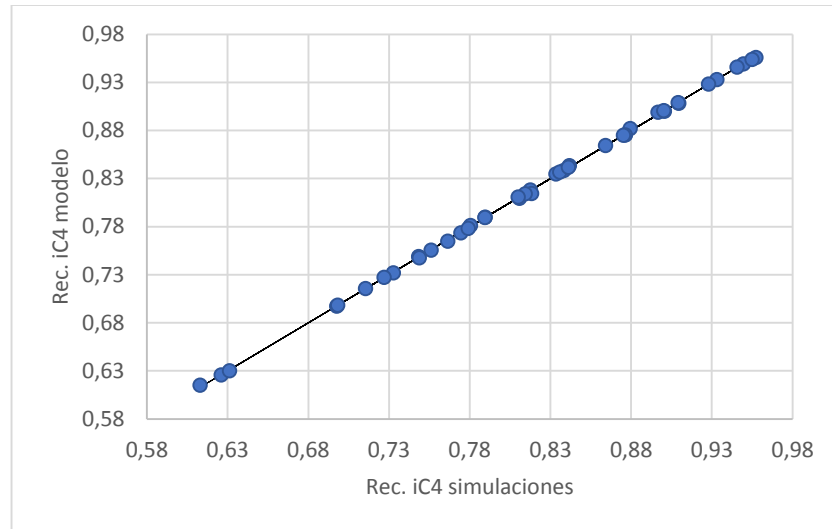
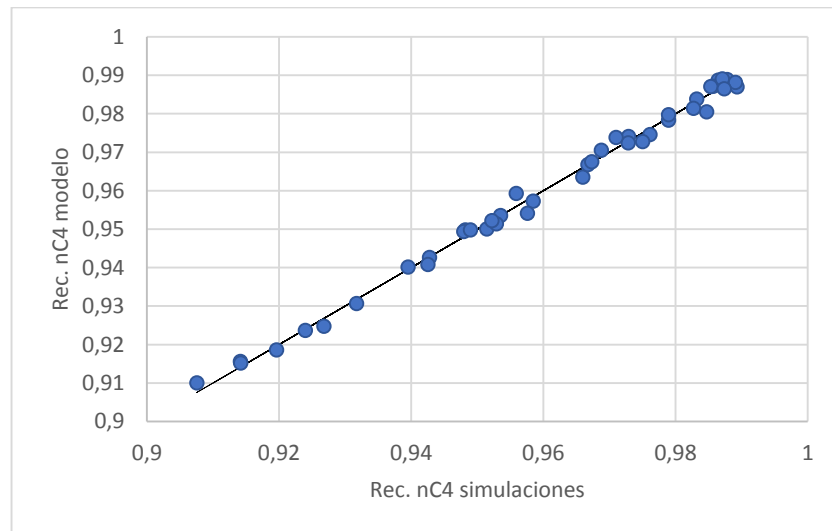


Figura D.4. Recuperación de nC_4 vs nC_4 experimental para la columna II.



ANEXO E. Detalle de las iteraciones

Tabla E. 1. Valores de los coeficientes de regresión ajustados para cada columna en cada iteración. (a) depropanizadora. (b) deisobutanizadora.

Columna I. C_3/iC_4			
i	$\overline{R^2}$ OPEX	$\overline{R^2}$ Recuperación propano	$\overline{R^2}$ Recuperación ibutano
0	0,997	0,999	0,991
1	0,996	0,999	0,988
2	0,998	0,999	0,987
3	0,998	0,999	0,985
4	0,998	0,999	0,982
5	0,998	0,999	0,981
6	0,998	0,999	0,981

(a)

Columna II. iC_4/nC_4			
i	$\overline{R^2}$ OPEX	$\overline{R^2}$ Recuperación ibutano	$\overline{R^2}$ Recuperación nbutano
0	0,999	0,999	0,968
1	0,999	0,999	0,982
2	0,994	0,999	0,989
3	0,994	0,999	0,990
4	0,995	0,999	0,991
5	0,995	0,999	0,992
6	0,990	0,999	0,993

(b)

