



147
Res.
UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE MÉXICO

Facultad de Química

SÍNTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACIÓN .

TESIS

Que para obtener el Título de

INGENIERO QUÍMICO

presenta

Carlos C. Vargas Rodríguez

México, D.F.

1995

FALLA DE ORIGEN

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO

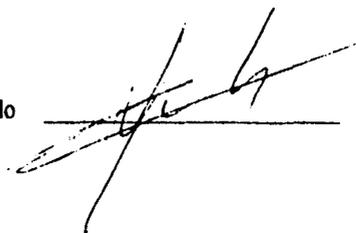
Presidente Prof. ALEJANDRO ANAYA DURAND
Vocal Prof. ENRIQUE BAZÚA RUEDA
Secretario Prof. CELESTINO MONTIEL MALDONADO
1er. Suplente Prof. JOSÉ AGUSTÍN TEXTA MENA
2do. Suplente Prof. MARIANO PÉREZ CAMACHO

Lugar donde se desarrolló el tema:

Departamento de Ingeniería Química de la Facultad de Química, UNAM.

Asesor del tema:

Ing. Celestino Montiel Maldonado



Sustentante:

Carlos Cristóbal Vargas Rodríguez



Dedicatorias.

A la memoria de mi abuelo Mariano, por su ejemplo.

A mi abuelita Tomasita, por consentirme.

A mis padres, Lucía y Cristóbal, por su apoyo incondicional y confianza en mí, siempre.

A Mariano, Mariana y Erika, mis hermanos, por todos estos años juntos.

A Beatriz, Flor, Federico, José Luis y Víctor por su amistad sincera.

Y por el simple hecho de existir y de que nuestras vidas se hayan cruzado a: Aída, Alejandro, Arturo, Carolina, Cecilia, Cuauhtémoc, Daniel, Esperanza, Eugenia, Miguel, Miriam, Moisés, Ricardo, Sabrina, Verónica y especialmente a Feguita, Manuel, Mary y Conrado.

Agradecimientos.

Al M. en I. Alejandro Anaya por todas sus enseñanzas, dentro y fuera de clase.

Al Dr. Enrique Bazúa, por su personalidad, su ejemplo y su increíble disposición para ayudar siempre.

Al M. en I. Celestino Montiel por su gentileza al compartir conmigo sus conocimientos y por haberme conducido a lo largo de todo este trabajo.

Al Ing. Alejandro Íñiguez, porque siempre que lo necesité, estaba ahí para socorrerme.

Al Ing. Agustín Texta Mena, por su paciencia y ayuda continua.

Finalmente, a la Universidad Nacional Autónoma de México, especialmente a la Facultad de Química, por haberme dado tanto.

Contenido

Introducción	1
1.1 Objetivos	2
Generalidades	4
2.1 Aspectos Creativos del Diseño de Procesos	4
Probabilidad de Éxito	6
Síntesis y Análisis	6
El Método	8
2.2 Diseño de Procesos	10
2.3 Síntesis de Procesos	12
Formulación del Problema de Síntesis de Procesos	12
Funciones Objetivo	14
Conjunto Factible de Alternativas Estructurales	16
Conjunto Factible de Diseños de Unidades de Proceso Aceptables	18
El Principio de Descomposición y la Clasificación de los Problemas	20
Síntesis de Secuencias de Reacción	25
Síntesis de Redes de Reactores	26
Localización de las Especies en un Diagrama de Proceso	27
Síntesis de Secuencias de Separación	28

Síntesis de Redes de Intercambio de Calor	29
Referencias	31
Síntesis de Procesos por Métodos Algorítmicos	33
3.1 Superestructuras	33
3.2 Métodos de Solución	37
Programación Lineal	37
Programación Lineal Mixta Entera	49
Programación No Lineal Mixta Entera	53
3.3 Solución de Problemas	59
Red de Intercambio de Calor	60
Localización del Plato de Alimentación	72
Referencias	78
Síntesis de Secuencias de Separación	80
4.1 Introducción	80
4.2 Modelos Lineales para Columnas Simples	81
Balances de Materia	81
Balances de Energía	85
Costos de Servicios	87
Costos de las Columnas	88
4.3 Ejemplo MILP para una Mezcla de 4 Componentes	90
4.4 Modelo MILP para Secuencias de Separación	95
4.5 Esquema de Discretización para la Separación con Integración Térmica	97
4.6 Modelo MILP para la Separación e Integración Térmica	105
Referencias	108
Aplicación	110
5.1 Selsec	110
5.2 Obtención de una Secuencia	112
5.3 Obtención de una Secuencia Integrada Térmicamente	116
Referencias	118
Conclusiones y Recomendaciones	120
6.1 Conclusiones	120
6.2 Recomendaciones	121
Apéndices	
A. Introducción a GAMS	123
Referencias	128
B. Problemas Resueltos y Códigos GAMS	129
B.1 Red de Intercambio de Calor	129

B.2	Localización del Plato de Alimentación	134
B.3	Secuencias de Reacción	145
B.4	Diseño de un Complejo Químico	153
B.5	Generación de Potencia	160
B.6	Optimización de un Proceso de Alquilación	165
B.7	Equilibrio Químico	170
B.8	Equilibrio de Fases Multicomponente	176
B.9	Programación de una Refinería	190
	Referencias	197
C.	Códigos de los Ejemplos de Aplicación	198
C.1	Secuencia Óptima	198
C.2	Secuencia Óptima con Integración	201

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

La tesis presenta información general y actualizada sobre el diseño, y en especial, sobre la síntesis de procesos. Revisa la formulación del problema de síntesis, las funciones objetivo, las alternativas estructurales, las unidades de proceso, el principio de descomposición y la clasificación de los problemas en función del proceso a sintetizar. Asimismo, justifica el uso de las computadoras como auxiliares en la solución de estos problemas.

Posteriormente, repasa la síntesis de procesos por métodos algorítmicos, en donde se analizan las formas de obtener las superestructuras. Mediante ejemplos, se presentan los métodos algorítmicos de solución de problemas, desde la programación lineal hasta la programación no lineal mixta entera. Se incluye una sección de problemas resueltos.

donde se ejemplifica la metodología de solución mediante este método: definición del problema, planteamiento de la solución (método de solución a utilizar) y resultados.

A continuación, se presentan el desarrollo matemático del modelo de la síntesis de secuencias de separación con integración térmica y su aplicación a una situación real. El modelo se resuelve por medio de la utilización de herramientas computacionales, una de las cuales fue desarrollada por el sustentante.

Finalmente, se agregan los apéndices que contienen información general sobre los programas utilizados, así como los códigos fuente para los mismos.

1.1 Objetivos.

Los objetivos de este trabajo son los siguientes:

- Implementar y experimentar los métodos algorítmicos de resolución mediante problemas de Ingeniería Química.
- Utilizar dichos métodos para la síntesis de secuencias de separación con y sin integración térmica.
- Cuantificar el impacto de la integración térmica en las secuencias de destilación simple.
- Desarrollar un sistema computacional que permita tener fácil acceso a la síntesis de secuencias de separación, sin requerir un profundo conocimiento del tema.

- Normalizar estas técnicas de manera que permitan su utilización y práctica en la enseñanza a nivel licenciatura.

Capítulo 2

GENERALIDADES

2.1 Aspectos Creativos del Diseño de Procesos.

En general, los ingenieros químicos se encuentran con que gran parte de su actividad profesional está orientada a los procesos, ya sea en operación de plantas, investigación y diseño o desarrollo de nuevos productos. El objetivo permanente es la obtención de nuevos procesos o el mejoramiento de los ya existentes, para satisfacer las demandas comerciales y financieras de los mercados. Es por esto que los ingenieros químicos tienen un papel muy importante en los procesos y sobre cómo está distribuida su vida útil, desde sus inicios en un diagrama de flujo de proceso o en una planta pilo-

to, hasta sus últimos días antes del cierre completo de la planta y su posterior desmantelamiento.

Como el propósito de la ingeniería es el de crear nuevos materiales abundantemente, se intenta realizarlo por medio de transformaciones químicas (o biológicas) y/o separaciones. El diseño de plantas y procesos es la actividad creativa donde se generan ideas y las trasladamos a procesos y equipos, para producir dichos materiales o para incrementar significativamente el valor de los ya existentes.

En cualquier compañía se podría intentar generar nuevas ideas para:

- **Producir materia prima que se tiene que comprar.**
- **Convertir los desechos de la planta en productos de valor.**
- **Crear un material completamente nuevo (fibras sintéticas, alimentos, bioprocesamiento)**
- **Encontrar una nueva forma de obtener un producto ya existente (un nuevo catalizador, una alternativa por bioprocesamiento)**
- **Explotar una nueva tecnología (ingeniería genética, sistemas expertos).**
- **Explotar un nuevo material de construcción (polímeros para alta presión o alta temperatura).**

Como un indicador del tremendo éxito que esto ha tenido, se puede mencionar que más del 50% de los productos comercializados por la mayoría de las compañías fueron desarrollados durante las últimas dos décadas.

Probabilidad de Éxito.

A pesar del excelente índice de éxitos, muy pocas ideas son llevadas a la práctica. En efecto, las probabilidades de comercialización de un nuevo proceso en la etapa de investigación son sólo del 1 al 3%; en la etapa de desarrollo son de 40 a 60%. Por supuesto, esperamos que la probabilidad de éxito sea mayor para modificaciones a un proceso, que para un proceso completamente nuevo. Sin embargo, las ventajas económicas asociadas a estos proyectos más seguros tendrán un menor potencial.

La experiencia indica que sólo un pequeño número de ideas siempre tendrán un desembolso. Es notorio que la evaluación es uno de los componentes más significativos de cualquier metodología de diseño.

Síntesis y Análisis.

Tal vez la característica que distingue a los problemas de diseño de otro tipo de problemas es que están subdefinidos; esto es, que sólo una fracción de la información necesaria para definir un problema de diseño está disponible en la formulación de un problema. Por ejemplo, un químico puede descubrir una forma distinta para hacer un producto existente u otro catalizador para una reacción comercial, y se quiere traducir este descubrimiento en un nuevo proceso. Por lo tanto, se comienza sólo con el conocimiento de las condiciones de reacción que se obtienen del químico, así como un poco

de información acerca de las materias primas disponibles y productos que se sacan del departamento de mercadotecnia. Es entonces cuando se debe proveer toda la información que falta para definir el problema de diseño.

Para suministrar esta información, se deben tomar decisiones acerca de los tipos de unidades de proceso que podrían ser usadas, como estarán interconectadas, y qué temperaturas, presiones y flujos se requerirán. *Esta es la actividad de la síntesis.* La síntesis es difícil debido a que existe un gran número de formas (de 10^4 a 10^9) que podemos considerar para llegar al mismo objetivo. Por lo tanto, los problemas de diseño están indefinidos.

Normalmente, se quiere encontrar la alternativa de proceso que tenga el menor costo, pero también se desea confiar en que el proceso es seguro, que satisfará las restricciones ambientales, que sea fácil de arrancar y operar, etc. En algunos casos, podemos usar reglas heurísticas ("reglas de dedo") para eliminar ciertas alternativas de una consideración posterior, pero en muchos otros es necesario obtener varias de ellas y comparar sus costos. Los diseñadores experimentados pueden minimizar el esfuerzo requerido para este tipo de evaluación porque muchas veces pueden estimar el costo de una unidad, o grupo de ellas, por analogía con otros procesos. Por otro lado, los diseñadores noveles generalmente deben diseñar y evaluar más alternativas para encontrar la mejor.

Cuando los diseñadores experimentados consideran otros tipos de problemas, en donde carecen de experiencia y donde no pueden identificar analogías, tratan de usar métodos cortos como base para comparar diversas opciones. Estos cálculos sólo son

utilizados para probar alternativas. Entonces, si el proceso parece ser rentable, se ocupan procedimientos de diseño más rigurosos para desarrollar un diseño final para la mejor, o mejores alternativas.

Debido a la naturaleza de los problemas de diseño, es útil desarrollar una estrategia para resolverlos. Sin embargo, usando métodos cortos podemos minimizar el esfuerzo requerido para realizar estos cálculos adicionales.

El Método.

Si se reflexiona sobre la naturaleza de la síntesis y el análisis de procesos, se reconocerá que actualmente el diseño de procesos es un arte, es decir, un proceso creativo. Por lo tanto, se podría tratar a los problemas de diseño de la misma manera en que un pintor desarrolla una pintura. En otras palabras, los procedimientos originales de diseño podrían corresponder al desarrollo de un bosquejo a lápiz, donde se quieren sólo los detalles más significativos del diseño, es decir, se quieren descubrir las partes más costosas de un proceso. Posteriormente el artista evalúa la pintura preliminar y hace modificaciones, usando sólo formas no muy definidas para los temas. Similarmente, se desea evaluar el primer estimado de un diseño y generar un número de alternativas de proceso que conduzcan a mejoras. De esta manera, se espera generar un diseño burdo razonablemente bueno antes de comenzar a añadir muchos detalles.

Después el artista añade color, sombras y los detalles de los distintos objetos en la pintura y reevalúa el resultado. De manera análoga, los ingenieros usan procedimientos más rigurosos para diseñar y costear los equipos más caros, incrementando la exactitud de los cálculos de los balances de materia y energía, y añadiendo detalles, como los equipos de menor costo que también son necesarios para las operaciones del proceso, pero que no tienen un gran impacto sobre el costo total de la planta, como las bombas y tanques entre otros.

Con esto, se ve que la pintura y el diseño de procesos proceden de una serie de etapas sucesivas de síntesis y análisis cada vez más refinadas. Debemos enfatizar que a medida que se va profundizando, jamás debemos perder de vista el problema global. Este es el *método de la ingeniería*.

Si se acepta esta analogía entre la ingeniería y el arte, se pueden reconocer otras interesantes características del diseño de procesos. En el arte, nunca hay una solución única a un problema; en la ingeniería de procesos es común que diferentes rutas de procesamiento puedan ser usadas para producir el mismo químico esencialmente al mismo costo. Otra similitud es que se requiere de un juicio para decidir que tanto detalle debe incluirse en cada una de las distintas etapas de una pintura, lo que también se hace en el diseño de procesos.

Por supuesto, numerosos principios científicos se usan para desarrollar un diseño, pero la actividad total es un arte. De hecho, es una combinación de ciencia y arte en una actividad creativa que convierte al diseño de un proceso en un desafío fascinante para cualquier ingeniero.

2.2. Diseño de Procesos.

Como se vió anteriormente, la síntesis es una de las etapas más importante del diseño de procesos. La gráfica 2.1 ilustra la partición formal de la etapa de diseño. Se dividió el proceso de diseño en tres etapas básicas: *síntesis*, *análisis* y *optimización*. La síntesis es la etapa donde la *estructura* es escogida, como seleccionar el equipo a ser usado así como sus interconexiones. También en la síntesis, se pueden proveer los valores para las variables que libremente pueden ser fijadas. El segundo paso es el análisis que también se divide en tres: *resolución de balances de materia y energía*, *diseño y costeo del equipo* y *evaluación del costo* (y tal vez de la seguridad, operabilidad, etc.) de la estructura analizada.

Los pasos finales son llamados optimización, y en particular, *optimización parametral* y *optimización estructural*. En el curso del análisis de una estructura dada, generalmente se descubre algún nivel particular de presión o temperatura que puede profundamente influenciar el resultado del diseño de los equipos y por lo tanto, la evaluación de la estructura. O se puede decidir alterar el equipo y/o sus interconexiones porque una mejora es obvia o la versión actual parece ser muy costosa.

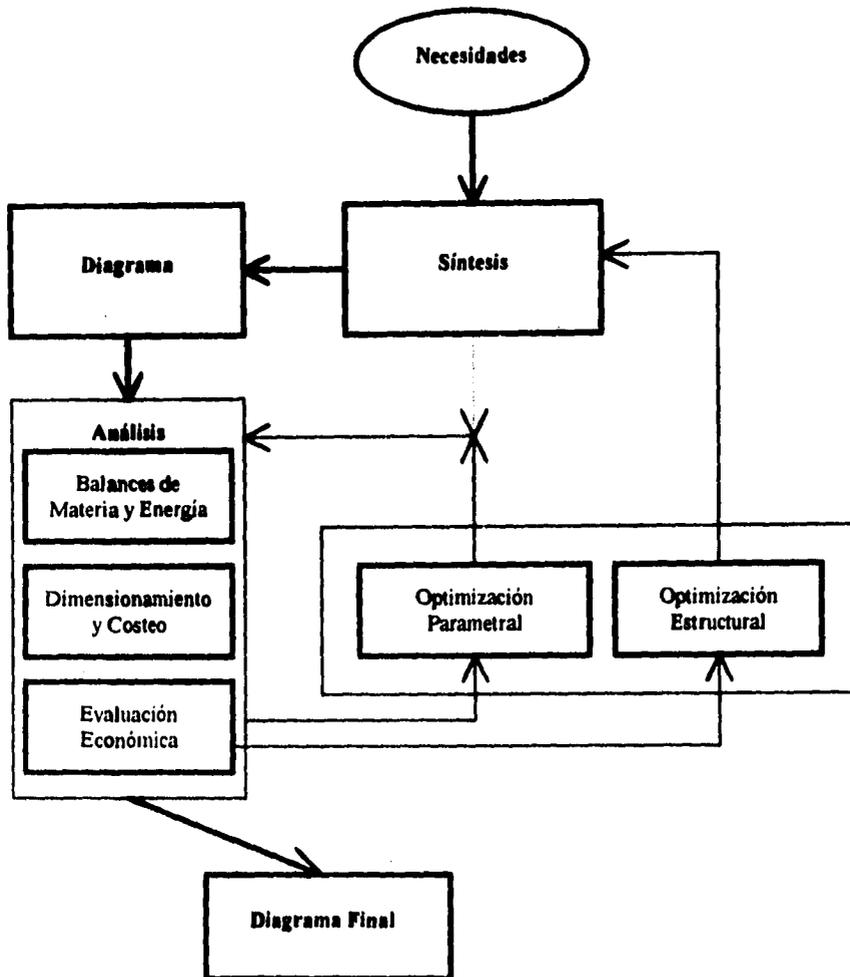


Figura 2. 1 Partición del diseño de procesos en sus distintas partes.

Cambiar el tipo de equipo y/o sus interconexiones es lo que llamamos optimización estructural, mientras que modificar los niveles de presión o temperatura concierne a la optimización parametral. La teoría de la optimización parametral está en un estado más avanzado que la teoría para la estructural..

La estructura final, con los valores de las variables de decisión y flujos resultantes, etc. representa el diseño final.

2.3 Síntesis de Procesos.

Formulación del Problema de la Síntesis de Procesos.

Como se mencionó antes, la síntesis es la etapa inventiva en el diseño de un proceso. Generalmente las salidas de un proceso están especificadas, mientras que las entradas deben ser determinadas (Fig. 2.2a) o pertenecer a un gran conjunto de posibilidades (Fig. 2.2b). En cualquier caso, el diseñador es llamado para identificar la naturaleza de la caja negra (sistema) de manera que ciertos objetivos sean optimizados. El sistema desconocido (a ser sintetizado) estará determinado si la naturaleza de las unidades que componen el sistema y sus especificaciones, junto con sus interacciones estructurales, están completamente especificadas.

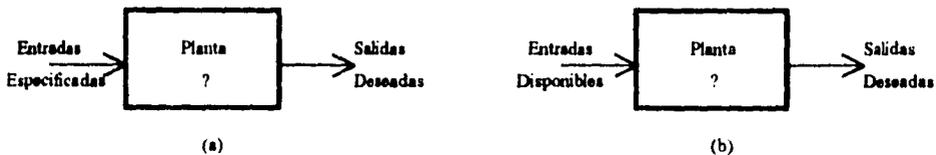


Figura 2. 1 Esquemas del problema de síntesis.

Es claro que la síntesis de un sistema operacional óptimo involucra decisiones en dos distintas áreas:

1. El área de las distintas alternativas estructurales, que son definidas por la topología y la naturaleza de las unidades interactuantes.
2. El área de los diseños alternativos para las unidades operativas que componen el sistema.

La optimización del sistema en la primer área representa un problema de programación entera, en tanto que la optimización en la segunda resulta en un problema de programación continua no lineal. Esto, combinado, genera la naturaleza entera-continua del problema de optimización, y junto con su alta dimensionalidad, crea un problema matemático abrumador.

La formulación apropiada de la síntesis es un paso crucial. Debe ser suficientemente rica para incluir todas las alternativas interesantes y suficientemente pobre para excluir todas las soluciones obsoletas y poco atractivas. El cómo el diseñador puede balancear las dos características anteriores es un arte y el procedimiento de solución que desarrolle diferenciará los acercamientos efectivos de la síntesis de los ineficaces y voluminosos.

Acerquémonos a la formulación en una manera más sistemática. Consideremos el problema de síntesis como está esquemáticamente representado en la figura 2.4. Para la completa y rigurosa formulación matemática del problema de síntesis, debemos es-

pecificar tres ingredientes principales: *funciones objetivo, el conjunto factible de alternativas estructurales y el conjunto factible de diseños aceptables para las diferentes unidades operativas.*

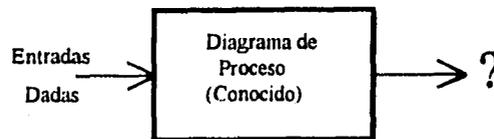


Figura 2. 3 Esquema del problema de análisis.

Funciones Objetivo.

Se debe de reconocer que el problema de síntesis corresponde a un problema de optimización multiobjetivos. El sistema operacional bajo síntesis se requiere para satisfacer varios objetivos. Un aspecto predominante en nuestras consideraciones es el de la economía del proceso. Casi todo el trabajo en síntesis de procesos ha considerado el problema como una optimización de un solo objetivo, con un único índice de rendimiento económico. Está claro que otras consideraciones se deberían de incluir. Entre ellas, las más importantes son: rango de operabilidad, controlabilidad, seguridad y confiabilidad del sistema. Así, formalmente establecido, el diagrama óptimo del proceso estará dado por la solución del problema:

Minimizar $E(X)$

X

donde $E = [F_1, F_2, \dots, F_n]$ es el vector de índices de rendimiento y X es el conjunto de diagramas alternativos del proceso. Sea $X_i \in X$ un diagrama alternativo del proceso. Entonces, está caracterizado por la estructura correspondiente M_i que convierte las entradas disponibles en los productos deseados, y los valores de diseño D_i que caracterizan a las unidades en M_i , por ejemplo:

$$X_i = \{M_i, D_i\}.$$

Existen varias técnicas para resolver el problema:

1. Considerar el objetivo dominante F_1 como el único y expresar los restantes como restricciones en forma de desigualdades. Por ejemplo:

Minimizar $F_1(X)$

X

sujeto a

$$F_i(x) \leq \alpha_i \quad i=2,3,\dots,n.$$

2. Construir una función objetivo escalar compuesta, por ejemplo:

Minimizar $f = \sum w_j F_j(X)$

X

Ambas técnicas han sido utilizadas para la síntesis óptima de diagramas de proceso, siendo la primera la más popular.

La formulación multiobjetivos es particularmente explícita en la naturaleza del problema de síntesis, ya que diagramas económicos pero inoperables serán rechazados.

al menos en el futuro previsible. También acarrea otra característica importante que una estrategia de búsqueda debe poseer, que un procedimiento de síntesis no debe procurarse sólo una solución final sino toda una familia de soluciones aceptables, dejando la decisión final al diseñador de acuerdo a la evaluación subjetiva de las alternativas.

Conjunto Factible de Alternativas Estructurales.

Como se dijo con anterioridad, una alternativa estructural está definida por la naturaleza de sus unidades de operación y sus interacciones topológicas. Para resolver el problema de optimización anterior, se desea que el conjunto X de configuraciones alternativas incluya sólo las razonables y no necesariamente a todas. Es fácil de formular de manera exhaustiva, pero su solución es agobiante. Cómo reducir el espacio de alternativas sin excluir las más atractivas es el mayor desafío del diseñador. Los ingenieros químicos han dependido enormemente de su intuición y experiencia anteriores para determinar el conjunto de alternativas posibles.

El desarrollo de todas las alternativas estructurales posibles es un problema de mapeo, definido:

¿Cómo generar todas las estructuras que transformen el material disponible en los productos deseados?. Tal mapeo debería ir sólo a través de los estados permisibles, como están definidos por el conjunto de unidades operacionales permisibles (como

reactores, separadores, etc.) y las interacciones aceptables entre ellas. Consideremos el mapeo M :

$$M_i: S_{entrada} \rightarrow S_{salida}$$

donde $S_{entrada}$ y S_{salida} son los espacios de las entradas disponibles (materia prima, energía, etc.) y de los productos deseados, respectivamente. Cada mapeo M está caracterizado por:

$$M_i = \{ U_i, T_i \}$$

donde U_i es el conjunto de unidades de operación (reactores, separadores, etc.) y T_i caracteriza la topología de dichas unidades. Así:

$U_i \subset U =$ Conjunto de todas las posibles unidades de operación.

y

$T_i \subset T =$ Conjunto de topologías operables.

Pero el concepto de mapeo para generar parcial o exhaustivamente un conjunto de alternativas estructurales, no se ha limitado a la síntesis de diagramas de proceso completos. Casi toda la literatura sobre síntesis de secuencias de reacción es otro ejemplo de la aplicación de lo anterior.

Toda la experiencia indica que el desarrollo de todas las posibles alternativas estructurales no es una tarea difícil, asumiendo que todos los equipos posibles están enumerados. Elegantes técnicas ya están disponibles y representaciones matemáticas rigurosas están prácticamente construidas. La mayor debilidad de una generación exhaustiva de todas las alternativas estructurales es que permite la consideración de un

gran número de procesos obsoletos, lo que incrementa tremendamente la dimensionalidad del problema de optimización que se quiere resolver.

Existe una amplia variedad de métodos que han sido propuestos para la reducción del espacio de alternativas estructurales. Estos métodos pueden ser clasificados en tres categorías: algorítmicos, heurísticos e híbridos de los dos anteriores.

Conjunto Factible de Diseños de Unidades de Proceso Aceptables.

Cada alternativa estructural de un diagrama de proceso contiene varias unidades de operación. En el diagrama óptimo, las unidades correspondientes han sido diseñadas óptimamente. El conjunto factible de diseños aceptables está determinado por restricciones de igualdad y desigualdad en base a las especificaciones de la unidad y al rango permisible de condiciones de operación. Los conjuntos factibles de diseños permisibles generalmente son continuos y fáciles de formular. Es la optimización estructural la que impactará con mayor énfasis en el valor de la función objetivo, mientras que la optimización continua realiza sólo mejoras marginales (comparativamente hablando). Consecuentemente, no se recomienda una optimización continua detallada de las unidades de proceso dentro de una estructura fija. El conjunto completo de diseños de unidades de proceso aceptables puede ser remplazado por unos cuantos puntos aislados del conjunto continuo. Esta estrategia ha sido utilizada extensamente para la síntesis de diagramas de procesos totales o para subproblemas particulares (secuencias de separación, cambiado-

res de calor, etc.). En suma, la instrucción formal de la síntesis de diagramas óptimos de procesos conduce a un problema de optimización multiobjetivos, con variables de decisión enteras y continuas. Las decisiones enteras están definidas en un espacio de alternativas estructurales, que son generadas por un procedimiento de mapeo (matemáticamente formal o no). Las decisiones continuas están definidas en un espacio continuo, determinado por las restricciones impuestas a las especificaciones de las unidades de las que una alternativa estructural está compuesta.

La solución de tal problema de optimización formal es una tarea arrolladora, y no existe esperanza para su desarrollo riguroso en el futuro previsible (tampoco se desea o recomienda). La complejidad y la alta dimensionalidad del problema anterior es creado por la inclusión de alternativas obsoletas. Los distintos acercamientos desarrollados en los últimos diez años intentan explotar este factor y reducir el espacio de alternativas.

Es notorio que todos los acercamientos a la síntesis constituyen variaciones del mismo tema. Pueden diferir: en la forma en que formulan los objetivos y/o en la manera que representan y generan el espacio de alternativas estructurales, y/o en el grado de saturación en el que consideran al conjunto factible de diseños de unidades permisibles. Finalmente, divergen ampliamente en las técnicas que usan para la solución del problema.

El Principio de Descomposición y la Clasificación de los Problemas.

En la sección previa, la síntesis de diagramas óptimos de proceso fue proyectada como un problema de optimización multiobjetivos con la región factible de búsqueda definida como la unión de dos espacios, a saber, el de las alternativas estructurales y el de los diseños permisibles de las unidades. El segundo de los dos espacios es fácilmente formulado dentro del marco del conocimiento actual sobre las operaciones unitarias, reactores, etc., en tanto que el primero requiere un procedimiento eficiente y creativo para desarrollar todas las alternativas estructurales. Una construcción sistemática y organizada del espacio de las alternativas estructurales factibles, acopladas o no con la búsqueda eficiente y las técnicas de evaluación, ha sido el punto central de todo el trabajo sobre síntesis de procesos. En esta sección examinaremos con más detalle la naturaleza y las características de los procedimientos de mapeo que podrían ser construidos para convertir las entradas disponibles en los productos deseados.

Como mencionamos anteriormente, cualquier diagrama de proceso que satisfaga las especificaciones de diseño es un *mapeo de las entradas sobre las salidas*. Un mapeo puede ser *estático* o *dinámico*, e intenta reconciliar las diferencias entre las entradas disponibles y las salidas deseadas, usando operadores existentes o factibles. Estas diferencias pueden estar en términos de: *las especies químicas consideradas, sus composiciones, sus cantidades, y finalmente de sus presiones y temperaturas*. En un esfuerzo para eliminar las diferencias anteriores entre *fuentes* (entradas) y *sumideros* (salidas).

varios operadores son introducidos (separadores, mezcladores, cambiadores de calor, compresores, reactores, etc.).

Aunque cada uno de los operadores pertenezca a un espacio discreto diferente, se supone que la estructura de un diagrama de proceso estará dada por un mapa que está determinado por:

- Elementos estructurales de diferentes espacios, y
- Una topología aceptable entre ellos.

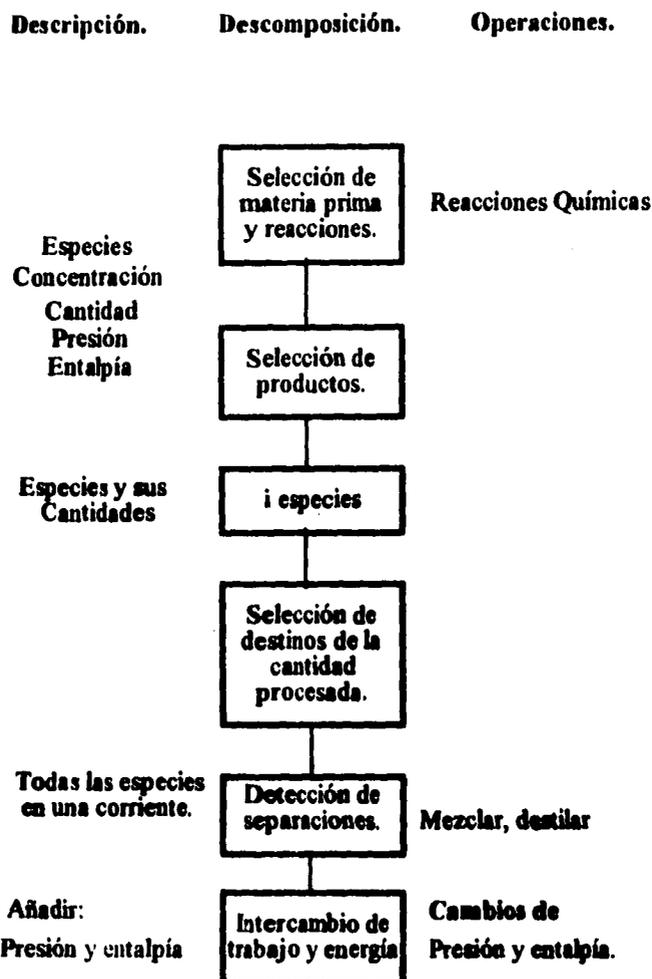


Figura 2. 4 La descomposición más común del problema de síntesis.

Esta naturaleza discreta de los mapas junto con su composición no homogénea en términos de los operadores empleados, ha conducido al *principio de descomposición*, el que intenta construir el mapa global en varios niveles, usando operadores de un es-

pacio homogéneo en cada nivel. Por lo tanto, un diagrama dado es formalmente representado por

$$S_{\text{entrada}} \xrightarrow{m_1} S_1 \xrightarrow{m_2} S_2 \dots \xrightarrow{m_N} S_N \xrightarrow{m_{N+1}} S_{\text{salida}}$$

donde

$$m_j \subset M_j, m_2 \subset M_2, \dots, m_{N+1} \subset M_{N+1}$$

y

$$M_i \cap M_j = 0 \text{ para } i \neq j$$

Es claro que una alternativa estructural dada, que está representada por el mapeo M_i tendrá

$$M_i = \{ \sum_{j=1}^{N+1} m_j; T_i \}$$

donde T_i es la topología de las interconexiones entre las unidades de procesamiento en el diagrama. Además, cualquier diagrama parcialmente desarrollado estará representado por

$$M_i' = \{ \sum_{j=1}^{k < N+1} m_j; T_i' \}$$

con

$$M_j' \subset M_j \text{ y } T_i' \cap T_j = 0 \text{ ó } \neq 0.$$

Las condiciones sobre $T_i' \cap T_j$ implican que la adición de nuevos operadores en el mapeo global pueden destruir completamente la topología estructural existente.

Las observaciones anteriores nos permiten establecer el siguiente "principio" de descomposición:

"La construcción inductiva de un mapeo usando operadores de espacios inconexos, puede proceder en varios niveles distintos, independientemente del orden en que sean considerados".

El principio anterior es posible debido a que a la estructura de interconexión T_i , la que actúa como interface entre dos niveles sucesivos, se le permite cambiar completamente. Así, ninguna decisión tomada anteriormente restringirá el número o naturaleza de las alternativas en etapas posteriores. Este principio ha conducido a numerosos investigadores a descomponer el problema de síntesis en una serie de subproblemas, los que han sido abordados separada e independientemente. Así, para la síntesis de procesos a régimen permanente, los siguientes niveles y problemas de síntesis correspondientes pueden ser identificados: síntesis de secuencias de reacción, síntesis de redes de reactores, ubicación de las especies, síntesis de secuencias de separación y síntesis de redes de intercambio de energía. Cuando la dinámica de un proceso se toma en cuenta, los problemas adicionales son: síntesis de estructuras de control de procesos y síntesis de sistemas de seguridad.

En los siguientes párrafos describiremos las principales características de varios subproblemas.

Síntesis de Secuencias de Reacción.

Aquí, las principales incógnitas son las materias primas a ser usadas y las reacciones químicas que se emplearán. La diferencia a superar es la naturaleza de las especies entre la entrada y la salida. El espacio de donde el operador será seleccionado para eliminar esta diferencia, es el conjunto de todas las reacciones factibles usando las materias primas disponibles.

La síntesis de secuencias de reacción fue iniciada por químicos orgánicos quienes estaban interesados en la sintetización de moléculas complejas, en formas más eficientes. Los ingenieros químicos se fueron interesando a medida que la escasez de energía y materia prima ocasionaron serias dudas sobre la eficiencia de la estructura de producción existente. Mientras que los químicos orgánicos se han involucrado principalmente en la síntesis de alternativas estructurales, es decir, en el mapeo del problema de síntesis, los ingenieros químicos se han mentido con la evaluación de las alternativas, esto es, la solución práctica del correspondiente problema de optimización.

Ahora identifiquemos los tres ingredientes principales de la optimización multiobjetivos que constituye al problema de síntesis para las secuencias de reacción. Los objetivos típicos son: minimizar el costo del sistema de procesamiento resultante, minimizar el número de etapas de reacción requeridas, maximizar el rendimiento, y maximizar el uso de materias primas.

Un progreso significativo ha acompañado el desarrollo de procedimientos de mapeo efectivos para la generación de alternativas estructurales. Las diversas estrate-

gias propuestas pueden ser divididas en dos categorías: los métodos basados en la lógica, que son los más recientes y emplean representaciones rigurosas para la creación de secuencias alternativas de reacción y los métodos basados en la información, que usan la experiencia acumulada e implementada en programas de computadora. Los métodos basados en la lógica permiten la creación de secuencias desconocidas e innovadoras, pero al mismo tiempo generan un gran número de secuencias obsoletas. Los métodos basados en la información generan secuencias que son atractivas al diseñador, pero carecen de "imaginación", pues simplemente organizan y sistematizan el conocimiento ya adquirido.

Con respecto al tercer elemento del problema de optimización, el espacio de secuencias de reacción factibles y permisibles, los principales factores a considerar son: las condiciones de operación para la factibilidad expresadas en presiones y temperaturas requeridas, el ΔG , y el ΔH_R de la reacción. Generalmente, las condiciones de diseño definirán el rango permisible de temperaturas. El ΔG debe ser usualmente menor a 10 kcal/mol, a menos que sea remplazado por un cúmulo de sistemas compuestos de etapas individuales con un $\Delta G \leq 10$ kcal/mol para cada etapa del cúmulo. El rango de ΔH varía de acuerdo a los requerimientos particulares.

Síntesis de Redes de Reactores.

Una vez que el conjunto de reactores ha sido seleccionado, la incógnita es: ¿Qué tipo de reactores se usarán (intermitentes, continuos de tanque agitado, tubulares, fluidizados, etc.), cuántos, y cómo estarán interconectados?

Los objetivos primarios para ese problema son los siguientes: minimizar el costo del proyecto y maximizar los rendimientos. Las reglas para el mapeo sistemático de varias alternativas estructurales se encuentran principalmente en la manipulación deliberada de patrones de mezcla locales y globales o en una enumeración exhaustiva de un número arbitrario de reactores. Finalmente, el espacio de los diseños de reactores factibles está fácilmente determinado para cada problema dado.

Es importante resaltar que en esta área se ha hecho muy poco, desde el punto de vista de la síntesis, y que la mayoría de los trabajos son más analíticos que sintéticos en sus objetivos básicos.

Localización de las Especies en un Diagrama de Proceso.

Esta es una etapa crucial en la síntesis de diagramas globales de proceso, ya que su resolución determinará una gran parte de la estructura del proceso que será diseñado. Durante esta etapa, el diseñador intenta coordinar las "fuentes" donde las especies están disponibles con los "sumideros", donde son requeridas. Es claro que el objetivo final es minimizar el costo del proceso resultante, pero debido a su complejidad y a la falta de información relevante, se han propuesto objetivos secundarios.

Síntesis de Secuencias de Separación.

Se presenta como un subproblema de la síntesis durante la localización de especies en el diagrama de proceso, ya sea para la preparación de la alimentación, la separación de los productos, el acabado del producto o el tratamiento de desechos. El problema puede ser definido como sigue:

"Dada una corriente de alimentación de condiciones conocidas (composición, gasto, temperatura, presión), sintetizar sistemáticamente un proceso que pueda separar los productos deseados de la alimentación, con un costo mínimo,

$$\text{Minimizar}_{i,x} \Phi = \sum_i C_i(x_i)$$

donde $i \in I$ denota una unidad de separación factible; C_i el costo total anual del separador i ; I es un subconjunto de S , donde S es el conjunto de todas las posibles configuraciones de separación que puedan producir los productos deseados; x_i son las variables de diseño del separador i ; y X es el espacio de diseños factibles de los separadores".

La generación sistemática y formal de todas las secuencias de separación (alternativas estructurales) es bastante fácil (si todos los tipos permisibles de separadores han sido especificados). Varios acercamientos han sido recomendados en la literatura. Hendry y Hughes introdujeron la noción de listas ordenadas y demostraron una ma-

nera fácil para generar todos los posibles separadores y todas las posibles secuencias de separación. Desde entonces, dichas listas han sido usadas por un gran número de investigadores para generar todas las posibles secuencias de separación. Aunque la generación exhaustiva de todas las secuencias de separación es bastante fácil, la selección del óptimo es muy difícil y los diferentes métodos propuestos difieren principalmente en el acercamiento que usan para evaluar y representar las alternativas.

El espacio factible del diseño de los separadores es determinado fácilmente.

Síntesis de Redes de Intercambio de Calor.

Este problema se presenta cuando se tratan de conseguir las condiciones de operación de los reactores, separadores, etc., o para preparar las corrientes de alimentación, o para terminar con las corrientes de producto requeridas. El problema puede ser establecido formalmente como:

"Dado un conjunto de corrientes calientes a ser enfriadas y otro conjunto de corrientes frías a ser calentadas, más un conjunto de servicios de calentamiento y enfriamiento, desarrollar una red de cambiadores de calor que efectúen las tareas de calentamiento y enfriamiento, y simultáneamente minimizar el costo ϕ .

$$\text{Minimizar}_{1,x} \Phi = \sum_i C_i(x_i)$$

donde $y \in I$ denota un cambiador de calor factible; I es un subconjunto de S , donde S es el conjunto de todos los cambiadores posibles; C_i es el costo del i ésimo cambiador; x_i son las variables de diseño del i ésimo cambiador y X es el espacio factible de cambiadores de calor".

Aunque minimizar el costo es el principal objetivo, muchos investigadores han experimentado con otros más simples para obtener índices de rendimiento, como: el número de intercambiadores de calor, la cantidad total de calor recuperable, la cantidad de trabajo perdido, etc. Hay que señalar que hay una relación intrínseca entre el costo y los índices de rendimiento.

Para la generación de todas las alternativas estructurales (redes de intercambio de calor), varios métodos se han propuesto con diferentes grados de complejidad y eficiencia. Así, se han usado representaciones matriciales para generar todas las redes de intercambio. Otras representaciones han usado diagramas de "contenido de calor" en términos de temperatura vs. flujo o temperatura vs. entalpía. Se han usado líneas horizontales con direcciones opuestas para indicar las corrientes frías y calientes, lo que permite un desarrollo directo de todas las combinaciones, generando las posibles redes de intercambiadores de calor. Un acercamiento final para generar todas las redes posibles es la enumeración exhaustiva de las alternativas, un proceso bastante largo y sin control.

Las regiones factibles para el diseño de cambiadores de calor son fáciles de definir.

Referencias.

DOUGLAS, James M. Conceptual Design of Chemical Processes. McGraw Hill, USA, 1988.

FAIR, James R. Advanced Process Engineering. (AIChE Monograph Series, No. 13, Vol. 76), American Institute of Chemical Engineers, New York, USA, 1980.

GROSSMANN, Ignacio E. (Editor). Chemical Engineering Optimization Model with GAMS. (Cache Design Case Studies Series, Case Study No. 6), 1991.

LIU, Y.A., et al.(Editores). Recent Developments in Chemical Process and Plant Design. John Wiley and Sons, USA, 1987.

STEPHANOPOULOS, George. "Synthesis of Process Flowsheets: An Adventure in Heuristic Design or an Utopia of Mathematical Programing?" en MAH, Richard S.H. (Editor). Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design. Vol. II, Engineering Foundation, NY U.S.A., 1981.

WESTERBERG, ArthurW. et al. Process Flowsheeting. Cambridge University Press, London, 1979.

WESTERBERG, Arthur W. Process Engineering. en WEI, James (Ed.). "Advances in Chemical Engineering.", Vol. 16, Academic Press, USA, 1992.

Capítulo 3

SÍNTESIS DE PROCESOS POR MÉTODOS ALGORÍTMICOS

3.1 Superestructuras.

Como hemos mencionado, una de las tendencias en el área de la síntesis de procesos es su gradual evolución hacia la programación matemática. Esto se debe, en parte, al fundamental entendimiento que se ha ido obteniendo sobre la naturaleza de los problemas de síntesis en los últimos veinte años. No obstante, otra gran porción se debe al desarrollo de nuevos y más poderosos algoritmos de programación matemática.

Como se indicó en la sección previa, para formular un problema de síntesis como un problema de optimización, se tiene que desarrollar una representación que contenga

todos los diseños alternativos que serán considerados como candidatos a la solución óptima. Esta representación se conoce como superestructura. Desarrollar una superestructura apropiada es claramente de suma importancia, debido a que la solución óptima que se obtiene puede sólo ser tan buena como lo sea la representación utilizada.

Mientras que esto es muchas veces visto como una gran debilidad de la optimización, el conocimiento basado en acercamientos sufre también de la misma limitación ya que éstos también requieren de una representación de alternativas la que generalmente está implícita.

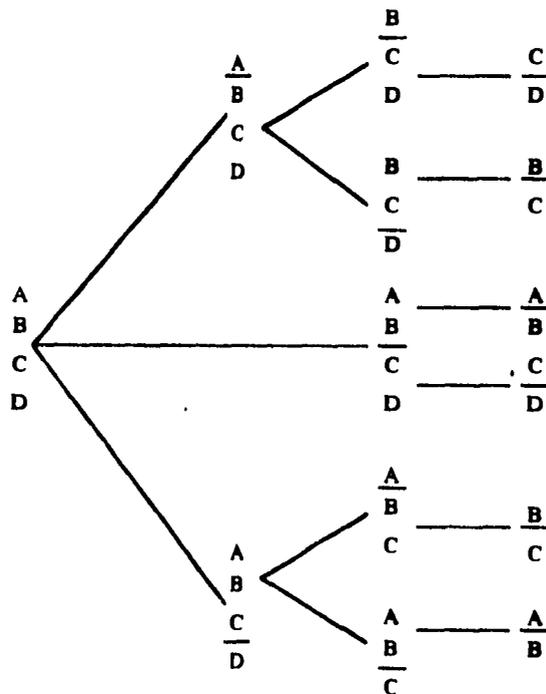


Figura 3. 1 Representación en árbol para la separación de una mezcla de 4 componentes.

Las superestructuras pueden ser, en general, explícitas o implícitas. Las primeras dan lugar a redes o matrices, mientras que las segundas desembocan en ramificaciones o "árboles".

Como un ejemplo, consideremos la separación de una corriente de cuatro componentes, A, B, C y D en productos puros. Como es bien sabido, las alternativas de secuencias de separación que consisten en separadores simples, pueden ser representadas por el árbol de la figura 3.1. Esta representación se presta para una descomposición, donde las alternativas de separación pueden ser enumeradas implícitamente a través de una búsqueda de ramificación y acotamiento.

Por otro lado, consideremos la representación matricial que se muestra en la figura 3.2. Aquí, en contraste con la representación en árbol, cada nodo corresponde a un separador distinto. Además, las secuencias alternativas se pueden representar usando el mismo subconjunto de nodos (p. ej. Secuencia 1: A/BCD, B/CD, C/D; Secuencia 2: AB/CD, A/B, C/D, que comparte el nodo C/D con la secuencia 1). Esta matriz es una representación más compacta para modelar el problema explícitamente. La ventaja es que las interacciones pueden ser computadas explícitamente en la optimización ya que las variables pueden ser optimizadas simultáneamente con la selección de la configuración. La desventaja es que se pierde la capacidad de realizar la descomposición directa que es posible en el árbol.

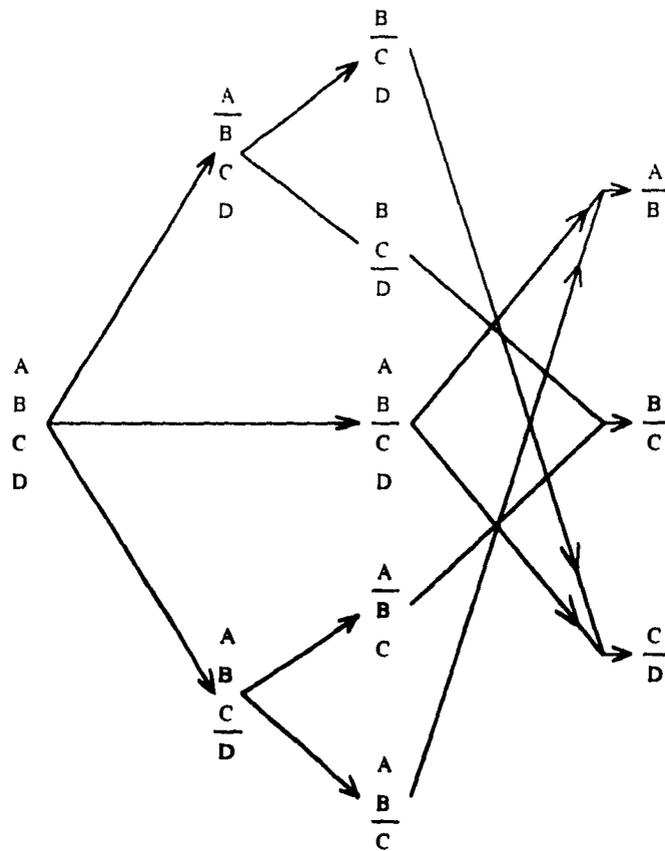


Figura 3. 2 Representación matricial para la separación de una mezcla de 4 componentes.

Aunque el concepto está implícito, no está por demás mencionarlo: una superestructura se compone de una o más estructuras. En el caso de la separación propuesta anteriormente, las Secuencias 1 y 2, así como las que no mencionamos, son estructuras. Cabe decir que el resultado de la optimización a que someteríamos cualquier superestructura, nos da por resultado una o más estructuras.

3.2 Métodos de Solución.

Existen diferentes métodos algorítmicos de solución de problemas. Su uso y utilización dependen del tipo de problema que se plantee. Los algoritmos son:

1. Programación Lineal (Linear Programming LP).
2. Programación No Lineal (NonLinear Programming NLP).
3. Programación Mixta Entera (Mixed-Integer Programming MIP) .
4. Programación Lineal Mixta Entera (Mixed-Integer Linear Programming MILP).
5. Programación No Lineal Mixta Entera (Mixed-Integer NonLinear Programming MINLP).

Programación Lineal.

Es una técnica matemática basada en la computación, ampliamente usada en las industrias de procesos químicos para investigar economías de procesos, evaluar los efectos de la inversión en una nueva planta y para optimizar la producción. Es particularmente útil donde existen interacciones complejas entre diferentes partes de una planta de procesos que tienden a oscurecer los efectos de cualquier cambio en el desempeño de la planta como un todo, o cualquier parte de ella.

En un modelo de programación lineal de una planta de proceso, las variables usualmente representan flujos que se relacionan por medio de ecuaciones y desigualdades lineales. Éstas describen la estructura del proceso y de la disponibilidad de alimentación y el patrón producto-demanda impuesto en la operación de la planta. El modelo tiene una función objetivo lineal, en la que los coeficientes de las variables toman en cuenta los costos de operación incrementales, el costo de las materias primas, y de la red de ventas. La solución óptima de un modelo lineal provee la combinación de valores para las variables que maximizan el valor total de la función objetivo (p. ej. la rentabilidad incremental excluyendo los costos fijos), dentro de los límites impuestos por las restricciones de igualdad y desigualdad.

El éxito de la programación lineal como técnica consiste en la facilidad con la que puede ser aplicada. Se pueden obtener programas para computadora comprensibles que no requieren a un matemático o a un programador. El usuario, típicamente un ingeniero químico, principalmente se preocupa primero por formular un modelo de programación lineal con su conocimiento técnico del proceso y la planta, y del ambiente económico dentro del que opera. Posteriormente, se involucra con la interpretación práctica de la solución óptima obtenida en la computadora.

El siguiente ejemplo, aunque muy simplificado, servirá para ilustrar la programación lineal.

Una planta fabrica dos productos, A y B, de tres materias primas, X, Y y Z, en dos unidades de procesamiento, como se muestra en la figura 3.3. Las capacidades má-

ximas de producción de las unidades A y B son de 4 y 5 ton/día, respectivamente. La manufactura de 1 tonelada de A requiere 0.4 ton de X y 0.6 ton de Y, y 1 ton de B necesita 0.3 ton de Y y 0.7 ton Z. Existe un límite para la cantidad de Y disponible, de 3.1 ton/día. La ganancia incremental por producir A o B, es decir, el precio de venta menos el costo incremental de manufactura, es de \$320 y \$400 por tonelada, respectivamente. Encontrar la forma óptima de producción que maximice la ganancia total.

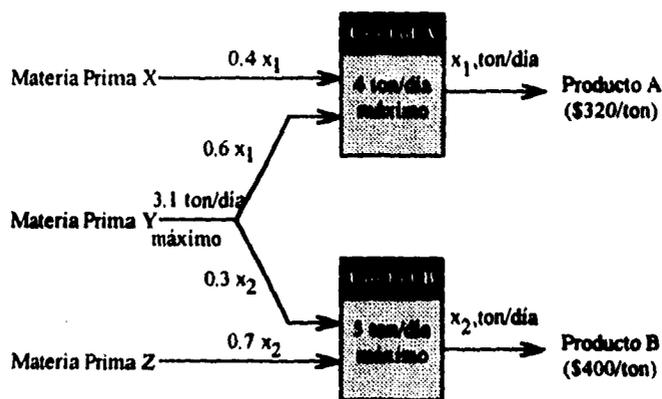


Figura 3.3 Relaciones de proceso para una planta que fabrica dos productos.

En este ejemplo bastante trivial, la forma óptima de producción de A y B que maximice la ganancia total se puede encontrar fácilmente por inspección. Sin embargo, la encontraremos por medio de la programación lineal. Tomando las producciones de A y B como las variables x_1 y x_2 respectivamente, podemos expresar la ganancia incremental diaria maximizando:

$$320x_1 + 400x_2 = z \quad (1)$$

sujeta a las siguientes restricciones:

$$x_1 \leq 4.0 \text{ (capacidad de la unidad A)} \quad (2)$$

$$x_2 \leq 5.0 \text{ (capacidad de la unidad B)} \quad (3)$$

$$0.6x_1 + 0.3x_2 \leq 3.1 \text{ (disponibilidad de Y)} \quad (4)$$

Obtenemos la solución gráfica dibujando el polígono para las desigualdades de las Eq. (2), (3) y (4), como se muestra en la figura 3.4. El valor máximo permitido para z es de \$2,854/día. Esto ocurre donde la función objetivo, la Eq. 1, apenas toca al polígono de restricciones en el punto $x_1 = 2.67$ y $x_2 = 5$.

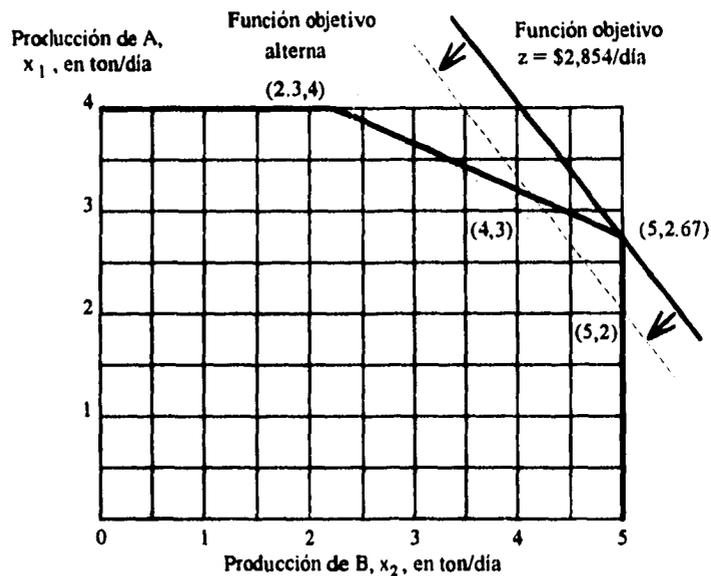


Figura 3.4 Polígono de restricciones y solución gráfica del ejemplo.

Ahora, por medio de este mismo ejemplo, nos introduciremos a la solución numérica por medio del *método simplex*. Ésta es el procedimiento general para resolver problemas de programación lineal. Es un método notablemente eficiente que se aplica en

forma rutinaria para resolver problemas inmensos en las computadoras actuales. Siempre se usa una computadora, excepto para los problemas muy pequeños, ya que se cuenta con una gran cantidad de códigos.

El método *símplex* es en realidad un algoritmo. Los algoritmos incluyen un procedimiento de arranque, iteraciones y un criterio para determinar el momento de detenerse.

Es mucho más conveniente tratar con ecuaciones que con relaciones de desigualdad. Por lo tanto, el primer paso en el establecimiento del método *símplex* es convertir las restricciones funcionales de desigualdad en restricciones equivalentes de igualdad (Las restricciones de no negatividad pueden dejarse como desigualdades porque sólo se usan en forma indirecta en el algoritmo). Se hace esto introduciendo variables de holgura. Con el fin de ilustrar el concepto, consideremos la primera restricción funcional del ejemplo

$$x_1 \leq 4$$

La variable de holgura para esta restricción es

$$x_3 = 4 - x_1,$$

que es precisamente la holgura entre los dos miembros de la desigualdad. Por tanto,

$$x_1 + x_3 = 4$$

La restricción original $x_1 \leq 4$ se cumple siempre que $x_3 \geq 0$. De donde, $x_1 \leq 4$ es completamente equivalente al conjunto de restricciones

$$x_1 + x_3 = 4$$

y

$$x_3 \geq 0$$

de modo que, en lugar de aquella, se usan estas restricciones más convenientes.

Introduciendo variables de holgura en forma idéntica para las otras restricciones funcionales, ahora puede remplazarse el modelo original de programación lineal del ejemplo, por el modelo equivalente

$$\text{Maximizar } Z = 320x_1 + 400x_2$$

sujeto a

$$(1) \quad x_1 + x_3 = 4$$

$$(2) \quad x_2 + x_4 = 5$$

$$(3) \quad 0.6x_1 + 0.3x_2 + x_5 = 3.1$$

$$\text{y } x_j \geq 0, \text{ para } j=1, 2, \dots, 5.$$

Aun cuando este problema es idéntico al original, esta forma es mucho más conveniente para la manipulación algebraica.

Nótese que el nuevo sistema de restricciones funcionales tiene dos variables más que ecuaciones. Esto nos da dos grados de libertad en la resolución del sistema, ya que se pueden elegir dos cualesquiera de las variables para hacerlas igual a cualquier valor arbitrario con el fin de resolver las tres ecuaciones en términos de las tres variables restantes (quitando redundancias). El método símplex usa el cero para este valor arbitrario. Las variables que se hacen igual a cero se llaman *variables no básicas*, y las otras son las *variables básicas*. La solución resultante se conoce como *solución básica*. Si todas las variables básicas son no negativas, es una *solución básica factible*.

Resulta conveniente considerar y manipular la ecuación de la función objetivo al mismo tiempo que las nuevas ecuaciones de restricción. Por consiguiente, antes de iniciar el método símplex, el problema se reescribe una vez más en una forma equivalente como

Maximizar Z

sujeto a

$$(0) \quad Z - 320x_1 - 400x_2 = 0$$

$$(1) \quad x_1 + x_3 = 4$$

$$(2) \quad x_2 + x_4 = 5$$

$$(3) \quad 0.6x_1 + 0.3x_2 + x_5 = 3.1$$

y $x_j \geq 0$, para $j=1, 2, \dots, 5$.

Esto es sólo como si la ecuación (0) realmente fuera una de las restricciones originales, pero en virtud de que ya se encuentra en forma de igualdad, no se necesita variable de holgura. Con esta interpretación, las soluciones básicas permanecerán inalteradas, excepto que *Z* sería concebida como una variable básica adicional (permanente).

Ahora puede resumirse con sencillez la idea básica del método símplex. Se resuelve repetidas veces el sistema de ecuaciones para una sucesión de soluciones básicas factibles, cada una mejor que su predecesora, hasta que se llega a una solución óptima (básica factible). Cada nueva solución básica factible se obtiene de la anterior, cambiando una variable no básica a variable básica (la variable básica que entra) y cambiando una variable básica a variable no básica (la variable básica que sale). Se dice que dos soluciones básicas factibles como éstas, que tan sólo difieren en un cambio de variables básicas y no

básicas, son *adyacentes*. Se sabe que una solución básica factible es óptima cuando ninguna de sus soluciones básicas factibles adyacentes son mejores.

Así, las fases del método símplex son:

Paso de inicialización. Identificar una solución básica factible inicial.

Paso iterativo. Desplazarse hacia una solución básica factible adyacente que sea mejor.

Regla de detención. Suspender el procedimiento cuando ninguna solución básica factible adyacente sea mejor.

Cada una de estas partes del algoritmo se describen e ilustran a continuación para el ejemplo.

Paso de inicialización. Se introducen las variables de holgura (x_3, x_4, x_5) como se describió con anterioridad. Entonces se seleccionan las variables originales (x_1, x_2) como las variables no básicas iniciales, se igualan a cero, y las variables de holgura como las variables básicas iniciales.

Cuando se resuelve un problema a mano, conviene usar la forma tabular del método símplex. Esto evita escribir los símbolos de las variables en cada una de las ecuaciones, pero, lo que es más importante, permite resaltar los números que intervienen en los cálculos aritméticos y registrar en forma compacta los cálculos. El cuadro símplex inicial para el ejemplo es:

Variable básica	Ec. No.	Coef.					Segundo miembro	
		Z	x_1	x_2	x_3	x_4		x_5
Z	0	1	-320	-400	0	0	0	0
x_3	1	0	1	0	1	0	0	4
x_4	2	0	0	1	0	1	0	5
x_5	3	0	0.6	0.3	0	0	1	3.1

Como cada ecuación contiene sólo una variable básica, la cual tiene un coeficiente de +1, cada variable básica es igual a la constante del segundo miembro de su ecuación. (La parte 3 del proceso iterativo desarrolla también esta misma propiedad para cada nueva solución básica factible). Así entonces, la solución básica factible inicial para el ejemplo $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = (0, 0, 4, 5, 3.1)$. Pasar a la regla de detención para determinar si la solución es óptima.

Regla de detención. La solución básica factible presente es óptima si, y sólo si, todo coeficiente de la ecuación (0) es no negativo (≥ 0). (La parte 3 del paso iterativo asegura que las variables básicas tienen coeficientes cero, y el coeficiente para cada variable no básica mide la rapidez a la que disminuiría la función objetivo si se incrementara esta variable desde cero). Si se cumple lo anterior, se detiene el procedimiento; en caso contrario es necesario volver al paso iterativo con el fin de obtener la siguiente solución básica factible lo que comprende cambiar una de las variables no básicas a básica (parte 1) y viceversa (parte 2) y resolver a continuación para la nueva solución (parte 3).

El ejemplo tiene dos coeficientes negativos en la ecuación (0), -320 para x_1 , y -400 para x_2 , por lo tanto, hay que entrar al procedimiento iterativo.

Paso iterativo.

Parte 1. Determinar la variable básica que entra seleccionando la variable (automáticamente una variable no básica) con el coeficiente negativo más grande en la ecuación (0). (Ésta es la variable no básica que incrementaría Z con la mayor rapidez al crecer a partir de cero). Se señala la columna que está abajo de este coeficiente. Esta columna se conoce como columna pivote.

En el ejemplo, el coeficiente negativo más grande es -400 para x_2 , por lo tanto debe cambiarse x_2 a variable básica.

Parte 2. Determinar la variable básica que sale, *a)* seleccionando cada coeficiente en la columna señalada que sea estrictamente positivo (>0), *b)* dividiendo el "segundo miembro" de cada renglón entre su coeficiente seleccionado correspondiente, *c)* identificando la ecuación que tenga la menor de estas razones y *d)* seleccionando la variable básica de esta ecuación. (Ésta es la variable básica que llega primero a cero a medida que se incrementa la variable básica que entra). Se señala el renglón de esta ecuación, en la tabla a la derecha de la columna Z. Este es el renglón pivote, (De aquí en adelante seguiremos usando el término "renglón" para referirnos precisamente a un renglón de números a la derecha de la columna Z). El número que se encuentra en el cruce del renglón y la columna marcados es el número pivote.

Variable básica	Ec. No.	Coef.					Segundo miembro	
		Z	x_1	x_2	x_3	x_4		x_5
Z	0	1	-320	-400	0	0	0	0
x_3	1	0	1	0	1	0	0	4
x_4	2	0	0	1	0	1	0	5
x_5	3	0	0.6	0.3	0	0	1	3.1

Parte 3. Se determina la nueva solución básica factible, construyendo un nuevo cuadro símplex debajo del presente. Las tres primeras columnas permanecen inalteradas, excepto que la variable básica que sale de la primera columna se reemplaza por la variable básica que entra. Debe cambiarse a +1 el coeficiente de la nueva variable básica, dividiendo el renglón pivote completo entre el número pivote, de modo que

$$\text{Nuevo renglón pivote} = \frac{\text{renglón pivote anterior}}{\text{número pivote}}$$

Para eliminar la nueva variable básica de las otras ecuaciones, todos los renglones, excepto el renglón pivote, se cambian para el nuevo cuadro usando la fórmula siguiente:

$$\text{Nuevo renglón} = \text{renglón anterior} - (\text{coeficiente de la columna pivote}) \times \text{nuevo renglón pivote}$$

en la que el "coeficiente de la columna pivote" es el número en este renglón que está en la columna pivote. El nuevo cuadro para el ejemplo es:

Variable básica	Ec. No.	Coef.					Segundo miembro	
		Z	x_1	x_2	x_3	x_4		x_5
Z	0	1	-320	-400	0	0	0	0
x_3	1	0	1	0	1	0	0	4
x_4	2	0	0	1	0	1	0	5
x_5	3	0	0.6	0.3	0	0	1	3.1
Z	0	1	-320	0	0	400	0	20000
x_3	1	0	1	0	1	0	0	4
x_2	2	0	0	1	0	1	0	5
x_5	3	0	0.6	0	0	-0.3	0	1.6

Como cada variable básica siempre es igual al segundo miembro de su ecuación, la nueva solución básica factible es $(0, 5, 4, 0, 1.6)$, con $Z = 20000$.

Esto completa el paso iterativo, de modo que enseguida se regresa a la regla de detención para comprobar si la nueva solución es óptima. Puesto que la nueva Ecuación (0) todavía tiene un coeficiente negativo (-320 para x_1), la regla de detención indica que la solución no es óptima y, como consecuencia, hace que el algoritmo regrese al paso iterativo para obtener la siguiente solución básica factible. Entonces el paso iterativo comienza nuevamente a partir del cuadro presente para hallar esta nueva solución. Siguiendo las instrucciones contenidas en las partes 1 y 2, se encuentran a x_1 como variable básica que entra y a x_2 como la que sale. A continuación se muestra ya el cuadro final.

Variable básica	Ec. No.	Coef.					Segundo miembro	
		Z	x_1	x_2	x_3	x_4		x_5
Z	0	1	-320	-400	0	0	0	0
x_3	1	0	1	0	1	0	0	4
x_4	2	0	0	1	0	1	0	5
x_5	3	0	0.6	0.3	0	0	1	3.1
Z	0	1	-320	0	0	400	0	20000
x_3	1	0	1	0	1	0	0	4
x_2	2	0	0	1	0	1	0	5
x_5	3	0	0.6	0	0	-0.3	0	1.6
Z	0	1	0	0	0	240	0	20840
x_3	1	0	0	0	1	0.5	0	1.333
x_2	2	0	0	1	0	1	0	5
x_1	3	0	1	0	0	-0.5	0	2.667

Por lo tanto, la nueva solución básica factible es $(2.667, 5, 1.333, 0, 0)$, con $Z = 20840$. Yendo a la regla de detención, se encuentra que esta solución es óptima porque

ninguno de los coeficientes de la Ecuación (0) son negativos, de modo que el algoritmo ha finalizado. Como consecuencia, la solución óptima para el ejemplo es de $x_1 = 2.667$ y $x_2 = 5$.

Programación Lineal Mixta Entera.

La programación lineal mixta entera representa a una clase de problemas, en los que las funciones involucradas en un problema son lineales. El procedimiento general para resolver este tipo de problemas es el método de ramificación y acotamiento. Este método consiste en la enumeración de un árbol, cuyos nodos representan diferentes combinaciones de asignamientos parciales de variables binarias con valores enteros fijos. La enumeración de los nodos en el árbol es comúnmente realizado por un procedimiento para reducir los requerimientos de almacenamiento, y para generar diferentes posibles soluciones mixtas enteras durante la búsqueda. Cada nodo en el árbol involucra la solución de un subproblema de programación lineal que tiene algunas de las variables binarias con valores enteros fijos, mientras que las restantes son tratadas como variables continuas.

Estos subproblemas lineales pueden ser actualizados muy eficientemente cuando se resuelven los diferentes nodos, y sus soluciones proveen límites a la solución del problema original. Haciendo uso de estos límites, una búsqueda inteligente se puede realizar de manera que sólo un pequeño subconjunto de los nodos en el árbol necesite ser enumerado para encontrar la solución óptima final. Programas comerciales para computadora están

disponibles para resolver problemas lineales mixtos enteros a gran escala, que pueden manejar cientos de variables y restricciones.

Para el problema de síntesis, las funciones en el problema pueden ser convertidas a la forma lineal discretizando condiciones de operación, tales como presiones, temperaturas y fracciones en una separación, con lo que las ecuaciones lineales se pueden derivar para el comportamiento de cada unidad. Para denotar la existencia o no existencia de cada condición de operación discreta en cada unidad, se pueden introducir variables 0-1 (binarias) con la restricción de que cada unidad puede operar cuando mucho en una condición.

En la práctica, un modelo que contenga variables enteras primero es resuelto como un problema LP normal, con los requerimientos enteros relajados para obtener la solución continua. Entonces, la solución óptima del problema MILP es encontrada por medio de una técnica que involucra la solución de una secuencia de subproblemas de LP, formados por la adición de las restricciones apropiadas al modelo original. Esta técnica puede ser ilustrada en base a nuestro ejemplo. Supongamos ahora que debido a la inestabilidad de los productos y las consiguientes dificultades con el almacenamiento y el transporte, la producción diaria y los envíos de A y B deben ser múltiplos de lotes completos de 1 tonelada.

Paso 1. El modelo original está representado por la función objetivo, la ecuación (1), sujeto a las restricciones de las ecuaciones (2) a (4). La solución óptima continua (la que obtuvimos en la sección anterior) es: $x_1 = 2.67$, $x_2 = 5$; y $z = \$2854/\text{día}$. Para ob-

tener una solución entera, x_1 debe o incrementarse al menos hasta 3 o disminuir cuando menos a 2.

Paso 2. Añadamos al modelo original la restricción: $x_1 \geq 3$. La nueva solución óptima (se obtiene por el procedimiento explicado en la sección anterior) es: $x_1 = 3$, $x_2 = 4.33$; y $z = \$2693/\text{día}$. Aunque ahora x_1 es un entero, x_2 ya no lo es.

Paso 3. Ahora añadamos al modelo original la restricción: $x_1 \leq 2$. La nueva solución óptima es: $x_1 = 2$, $x_2 = 5$; y $z = \$2640/\text{día}$.

Esta solución satisface los requerimientos enteros del problema, pero ¿Es la mejor solución?. Para saberlo, la búsqueda debe continuar. En la solución del paso 2, z es mayor que en la del paso 3. Por lo tanto, debemos ver ya sea que se pueda derivar una solución entera del paso 2 con un valor de z que sea mayor que el encontrado en el paso 3. Del paso 2, x_2 debe incrementarse cuando menos a 5 o disminuir al menos a 3.

Paso 4. En este momento, añadimos al modelo en el paso 2, la restricción: $x_2 \geq 5$. Ahora, el modelo a maximizar es:

$$320x_1 + 400x_2 = z$$

sujeto a las siguientes restricciones:

$$x_1 \leq 4.0$$

$$x_2 \leq 5.0$$

$$0.6x_1 + 0.3x_2 \leq 3.1$$

$$x_1 \geq 3.0$$

$$x_2 \geq 5.0$$

Este modelo no es factible, ya que no hay solución que satisfaga a todas las restricciones (examinar la Fig. 3.4).

Paso 5. Ahora, para el modelo del paso 2, tenemos esta otra restricción: $x_2 \leq 4$.

El modelo completo a maximizar es ahora:

$$320x_1 + 400x_2 = z$$

sujeito a las siguientes restricciones:

$$x_1 \leq 4.0$$

$$x_2 \leq 5.0$$

$$0.6x_1 + 0.3x_2 \leq 3.1$$

$$x_1 \geq 3.0$$

$$x_2 \leq 4.0$$

La solución óptima de este modelo es: $x_1 = 3$, $x_2 = 4$; y $z = 2560$ /día. Esta solución satisface los requerimientos enteros, pero el valor de z es menor que los \$2640/día de la solución del paso 3. La secuencia de soluciones posibles a considerar ha terminado. El paso 3 proporciona la mejor solución.

El procedimiento para encontrar la solución óptima está resumido en la figura 3.5 en la forma del famosísimo "árbol", con las "ramas" hacia los nuevos modelos y sus soluciones por la adición de restricciones o "cotas" (de allí el nombre *ramificación y acotamiento* dado a esta técnica). Cada rama termina cuando alcanza una solución no factible o una solución con un valor de z menor que una solución entera ya obtenida. Cada ramificación implica la adición de una restricción a una solución anterior. El valor de z para este nuevo modelo no puede ser mayor que el del modelo del cual se ramificó.

Programación No Lineal Mixta Entera.

Aunque la clara ventaja en el uso de la programación lineal mixta entera es que hay disponibilidad de códigos eficientes para computadora, es también claro que podría desearse manejar explícitamente no linealidades que se deben a las condiciones de operación, como presiones, temperaturas, conversiones en los reactores y fracciones en las separaciones, en vez de tener que discretizar estas condiciones. La capacidad de manejar no linealidades podría, por otro lado, expandir el campo de los problemas de síntesis pudiendo tratar a diversas variables no lineales de manera continua. Sin embargo, esta capacidad podría evitar el problema de incluir variables binarias extra en los modelos lineales mixtos enteros, para discretizar variables que dan lugar a no linealidades. De esta forma, el problema combinatorial también se podría reducir.

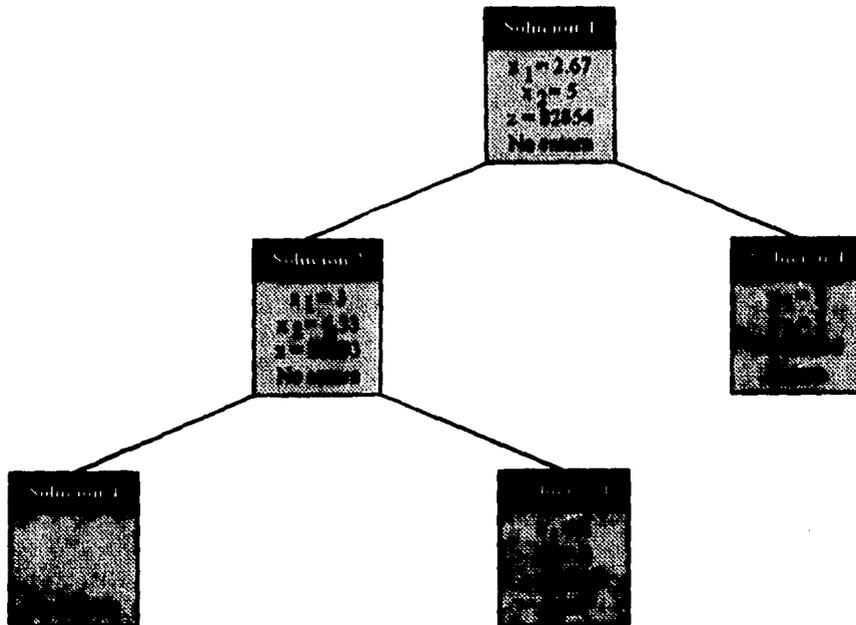


Figura 3. 5 Técnica de ramificación y acotamiento para la solución del ejemplo.

Los dos principales métodos para resolver problemas de esta clase son el procedimiento de Ramificación y Acotamiento, el método de Descomposición Generalizada de Benders (GDB) y el algoritmo por Aproximación Externa (OA). En el procedimiento de ramificación y acotamiento, la idea básica es similar al caso lineal mixto entero, en que se involucra una búsqueda en un árbol, donde cada nodo define una asignación parcial de las variables 0-1. Es esta forma, cada nodo implica un problema de programación no lineal en el que algunas de las variables del problema han sido fijadas, y las demás son tratadas como variables continuas con valores entre 0 y 1. Esta estrategia nos permite enumerar sólo un pequeño subconjunto del número total de nodos en el árbol para encontrar

trar la solución óptima. Así, el número de nodos a ser enumerados puede ser bastante grande si el tamaño del árbol es muy grande, como lo es comúnmente en el caso de los problemas de síntesis. Además, cada nodo envuelve la solución de un problema no lineal a gran escala, que no puede ser actualizado eficientemente como en los problemas lineales. Por lo tanto, los requerimientos computacionales de un procedimiento no lineal de ramificación y acotamiento son generalmente costosos.

La técnica de descomposición generalizada de Benders requiere de la solución alterna de un problema no lineal y de un problema pseudo-entero dentro de un limitado esquema iterativo. El problema no lineal se eleva para una opción entera fija de todas las variables binarias, e involucra la optimización de las variables continuas. La solución de este problema provee un límite superior al problema original de programación no lineal mixta entera. El problema pseudo-entero corresponde al problema maestro donde las variables binarias, que tienen el potencial de ser optimizadas, son seleccionadas para la solución del problema no lineal en la siguiente iteración. Este problema maestro usa niveles cortantes derivados de la teoría de la dualidad y provee un límite inferior a la solución del problema no lineal mixto entero. El principal inconveniente en el método generalizado de Benders es que el número de iteraciones que se requieren para encontrar la solución óptima es usualmente grande. La razón es que para acumular la suficiente información a través de los planos cortantes del problema maestro, así como para cerrar el claro entre los límites superior e inferior, muchas veces se tiene que resolver un número substancial de subproblemas no lineales.

El algoritmo por aproximación externa fue propuesto con el objeto de reducir el número de subproblemas NLP que deben resolverse. Aunque este algoritmo es un método eficiente para resolver problemas MINLP, su principal limitación es que sólo puede manejar restricciones de igualdad y desigualdades lineales/no lineales. Por otro lado, la formulación del problema de síntesis típicamente contendrá muchas ecuaciones no lineales que describen el comportamiento de las unidades de proceso. Por lo tanto, en este algoritmo las ecuaciones no lineales deben ser eliminadas algebraica o numéricamente, y generalmente esto no es una tarea sencilla.

Para mostrar la complejidad que conlleva la resolución de un problema MINLP, resolveremos gráficamente el siguiente problema:

$$\text{Minimizar } z = -y + 2x_1 + x_2$$

sujeto a las siguientes restricciones

$$x_1 - 2 \exp(-x_2) = 0$$

$$-x_1 + x_2 + y \leq 0$$

$$0.5 \leq x_1 \leq 1.4$$

$$y \in 0,1$$

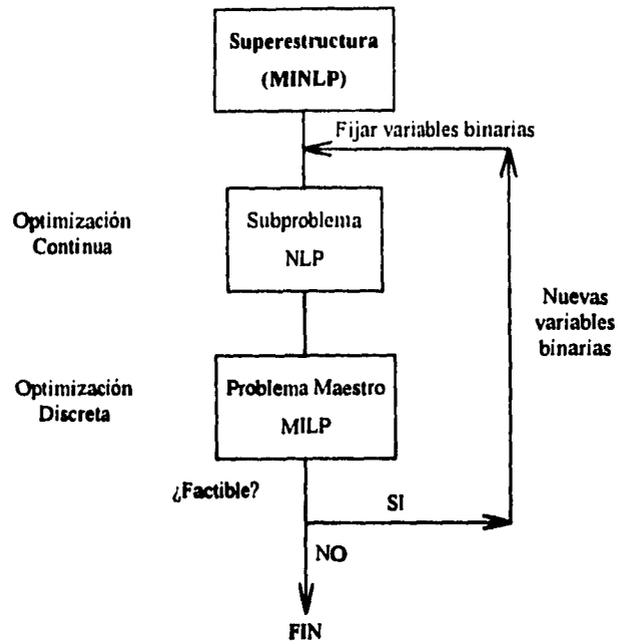


Figura 3. 6 Pasos en los tres algoritmos MINLP.

Claramente, es posible dividir el problema en los dos casos que nos plantean los valores permisibles de y . Para el caso de $y = 0$, tenemos

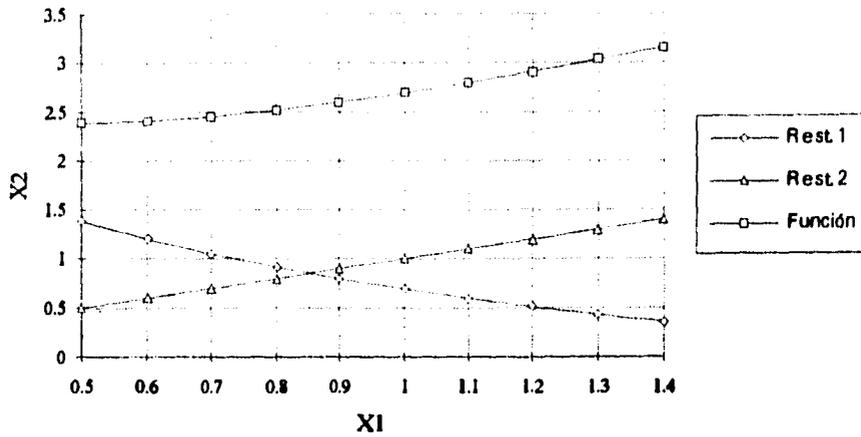


Figura 3.7 Diagrama para la solución del problema MINLP, caso $y=0$.

donde la curva de la restricción 1 muestra los puntos que la satisfacen, la línea de restricción 2 limita el área de solución de la segunda restricción y la tercera representa a la función z . La solución a este caso es: $y=0$, $Z=2.558$, $x^T=(0.853, 0.853)$.

Y para el caso de $y = 1$, tenemos

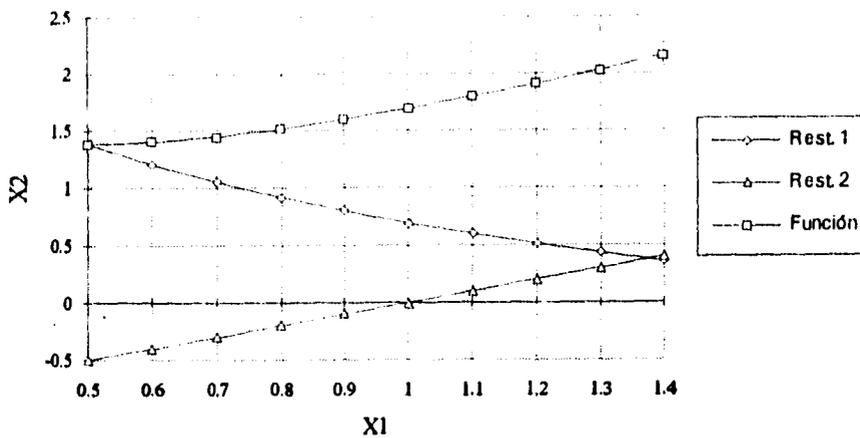


Figura 3. 8 Diagrama para la solución del problema MINLP, caso y=1.

donde las curvas tienen la misma representación que en el caso anterior. La solución de este caso es: $y=1$, $Z=2.124$, $x^T=(1.375, 0.375)$.

Por lo tanto, obtenemos que la solución óptima de este ejemplo es la desarrollada para el segundo caso, con $Z = 2.124$ y $x^T = (1.375, 0.375)$.

3.3 Solución de Problemas.

En esta sección se presentarán una serie de problemas de ingeniería química resueltos por métodos algorítmicos. Esto se hizo con la ayuda indispensable de una computadora y por medio de un programa de optimización denominado GAMS. En el apéndice

A se encuentra una breve descripción del funcionamiento y forma de programación de esta herramienta matemática. En el apéndice B se encuentran los códigos que se introdujeron para resolver los problemas, así como otras aplicaciones de los métodos algorítmicos a la ingeniería química.

Red de Intercambio de Calor.

Definición del problema.

Tenemos un proceso que involucra el siguiente conjunto de corrientes frías y calientes:

Corriente	F _{cp} (kW/K)	T _{ent} (K)	T _{sal} (K)
H1	20	700	420
H2	40	600	310
H3	70	460	310
H4	94	360	310
C1	50	350	650
C2	180	300	400

Se cuenta con los siguientes servicios para satisfacer los requerimientos de calentamiento y enfriamiento:

Servicio	Temperatura (K)	Costo (\$/kW-año)	Máximo disponible (kW)
Combustible	750	120	∞
Vapor de alta	510	90	1000
Vapor de baja	410	70	500
Agua de enfriamiento	300-325	15	∞

El objetivo es predecir el costo mínimo de servicios para una red de intercambio de calor, que tenga un acercamiento mínimo de temperaturas de 10K. No se permite el intercambio de calor de las corrientes H1 y C1.

Planteamiento de la solución.

Se nos pide encontrar una forma de intercambiar calor entre las corrientes de proceso y los servicios, de tal suerte que se satisfagan las temperaturas finales para las corrientes del proceso y el costo total de servicios sea minimizado. Los datos del problema están desplegados en la tabla 3.2, donde los contenidos caloríficos de las corrientes frías y calientes se muestran en cada uno de los intervalos de temperatura, basados en las temperaturas de entrada, máxima y mínima.

Los flujos de los contenidos caloríficos se pueden representar en un diagrama de cascada de calor como en la Fig. 3.10. Aquí, los contenidos caloríficos de las corrientes frías y calientes se acomodan en los intervalos correspondientes. Las variables R_1 a R_5 representan los calores residuales, mientras que Q_{comb} , Q_{AP} , Q_{BP} , $Q_{A.E}$ representan las cargas de calentamiento y enfriamiento, respectivamente.

Intervalo	Tcal	Tfrío	Contenidos caloríficos					
			H1	H2	H3	H4	C1	C2
	700	690						
1			2000	-	-	-	3000	-
	600	590						
2			1800	3600	-	-	4500	-
	510	500						
3			1000	2000	-	-	2500	-
	460	450						
4			800	2000	3500	-	2500	-
	410	400						
5			-	2000	3500	-	2500	9000
	360	350						
6			-	2000	3500	4700	-	9000
	310	300						

Tabla 3. 1 Contenidos caloríficos de las corrientes de proceso.

La utilidad del diagrama en cascada en la Fig. 3.10 radica en que se puede modelar como un problema de transbordo, el que podemos formular como un problema de programación lineal. En términos del modelo de transbordo, las corrientes calientes son tratadas como "nodos origen", y las corrientes frías como "nodos destino". El calor puede ser manejado como un servicio que puede ser transferido de los orígenes a los destinos a través de algunos "almacenes" intermediarios que corresponden a los intervalos de temperatura. Esto garantiza la posibilidad de intercambio de calor. Cuando no todo el calor puede ser absorbido en los destinos (corrientes frías) en un intervalo de temperatura, el exceso es transportado cascada abajo a un intervalo de temperatura menor a través de calores residuales.

El modelo de transbordo para predecir el costo mínimo de servicios, dado un número arbitrario de servicios de calentamiento y enfriamiento y corrientes calientes y frías, se puede formular de la siguiente manera. Primero, consideremos que tenemos k intervalos de temperatura, basados en las temperaturas de entrada de las corrientes del proceso y en los servicios intermedios cuyas temperaturas caen dentro del rango de temperaturas de las corrientes de proceso. Asumimos que los intervalos están numerados de arriba a abajo. Así, podemos definir el siguiente conjunto de índices:

$$H_k = \{i \mid \text{corriente caliente } i \text{ suministra calor al intervalo } k\} \quad (1)$$

$$C_k = \{j \mid \text{corriente fría } j \text{ demanda calor del intervalo } k\} \quad (2)$$

$$S_k = \{m \mid \text{servicio de cal. } m \text{ suministra calor al intervalo } k\} \quad (3)$$

$$W_k = \{n \mid \text{servicio de enfriamiento } n \text{ extrae calor del intervalo } k\} \quad (4)$$

$$S = \text{Conjunto de servicios de calentamiento} \quad (5)$$

$$W = \text{Conjunto de servicios de enfriamiento} \quad (6)$$

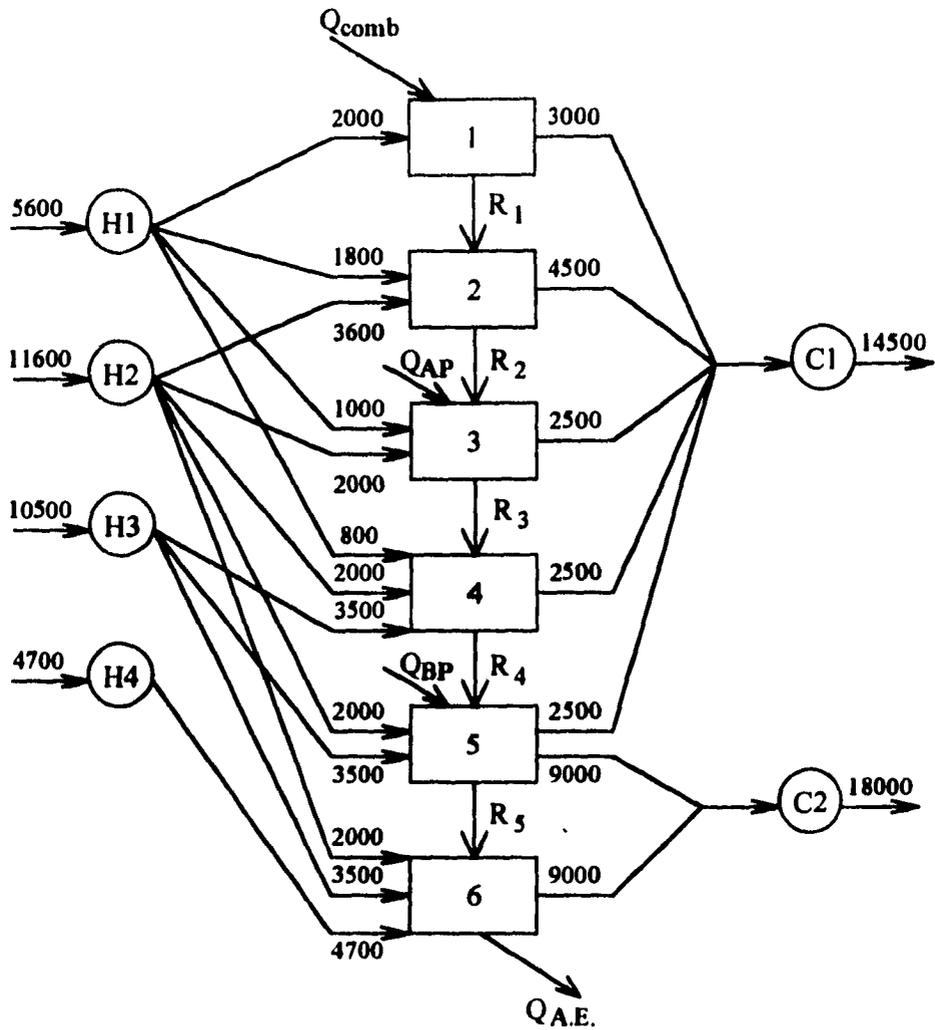


Figura 3. 9 Modelo de transbordo para flujos de calor.

Cuando consideramos un intervalo dado de temperaturas k , tenemos las siguientes variables y parámetros conocidos:

Parámetros conocidos:

Q_{ik}^H, Q_{jk}^C Contenidos caloríficos de la corriente caliente i y la corriente fría j en el intervalo k .

c_m, c_n Costos unitarios de servicios de calentamiento m y enfriamiento n .

Variables:

Q_m^S, Q_n^H Cargas caloríficas de los servicios de calentamiento m y enfriamiento n .

R_k Calor residual de salida del intervalo k .

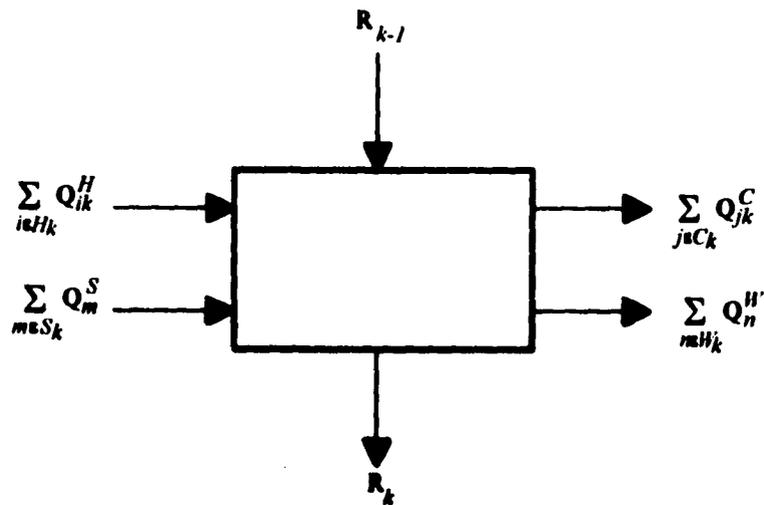


Figura 3. 10 Flujos de calor en el intervalo k .

Así, el costo mínimo de servicios para un conjunto dado de corrientes frías y calientes puede ser formulado en forma lineal de la siguiente manera:

$$\text{Min } \sum_{m \in S} c_m Q_m^S + \sum_{n \in H} c_n Q_n^H \quad (7)$$

sujeto a

$$R_k - R_{k-1} - \sum_{m \in S_k} Q_m^S + \sum_{n \in H_k} Q_n^H = \sum_{i \in I_k} Q_{i1}^H - \sum_{j \in C_k} Q_{j1}^C \quad k = 1, \dots, K \quad (8)$$

$$Q_m^S \geq 0, Q_n^H \geq 0 \quad (9)$$

$$R_k \geq 0 \quad k = 1, \dots, K - \quad (10)$$

$$R_0 = R_K = 0 \quad (11)$$

El modelo anterior es conocido en la literatura como *modelo de transbordo condensado*. Su función objetivo representa el costo total de servicios, mientras que las k ecuaciones representan los balances de calor alrededor de cada intervalo de temperatura k . Si $R_k=0$ en la solución óptima, entonces la temperatura del intervalo k corresponde al *punto de pliegue* ("pinch point").

En la formulación anterior es fácil imponer límites superiores a las cargas de calor que están disponibles en algunos de los servicios (p. ej. el calor máximo a partir del vapor de alta presión). Por otro lado, no es posible usarlo en el estado en que está para excluir intercambios entre líneas. En la práctica, no siempre es posible o deseable intercambiar calor entre un par de corrientes. Esto puede ser causado por el hecho de que encontrarse muy alejadas o por otras consideraciones operacionales, tales como control, seguridad o arranque. Por esta razón, se ha formulado el *modelo de transbordo expandido*, que se presenta a continuación.

El modelo de transbordo condensado en las ecuaciones 7 a 11 asume implícitamente que cualquier par de corrientes fría y caliente pueden intercambiar calor, ya que no

hay información que justifique lo contrario. Para desarrollar una formulación lineal donde tengamos esa información, podemos considerar, dentro de un intervalo de temperatura, un vínculo para el intercambio entre un par de corrientes fría y caliente, donde la corriente fría está presente en ese intervalo, lo mismo que la corriente caliente, o ésta se encuentre en un intervalo a mayor temperatura. Por esta razón, dentro de un intervalo k , definimos la variable Q_{ijk} para denotar el intercambio de calor entre la corriente caliente i y la corriente fría j . Asimismo, podemos definir variables similares para el intercambio entre corrientes de proceso y servicios. Mientras que en el modelo condensado asignamos una sola variable para el calor total residual R_k para cada intervalo, en el modelo expandido asignaremos calores residuales individuales R_{ik} , R_{mk} para cada corriente caliente i y cada servicio de calentamiento m que está presentes en o arriba de la temperatura del intervalo k . La figura 3.12 ilustra los conceptos anteriores para un intervalos k , donde consideramos una corriente caliente i y una fría j .

Nótese que utilizando esta representación permitimos a una corriente fría j intercambiar calor en el intervalo k no sólo intercambiar calor con una corriente caliente que esté disponible en ese intervalo, sino también con una corriente caliente i que se encuentre en un intervalo superior, ya que la corriente caliente i transfiere su calor al intervalo k a través de su residual R_{ik} .

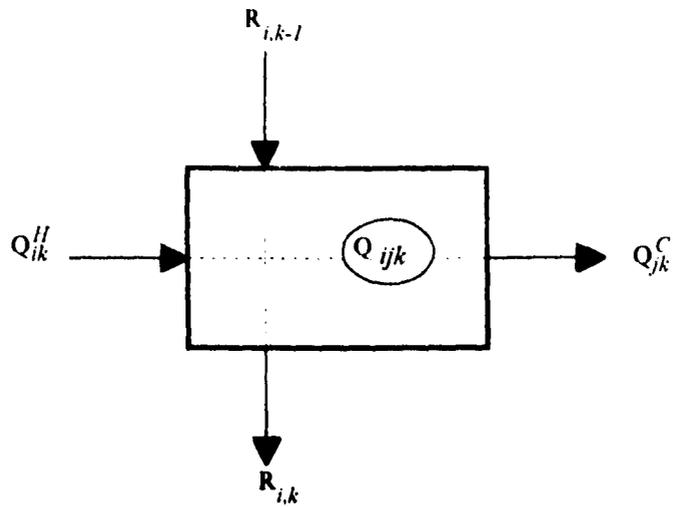


Figura 3. 11 Intercambio de calor entre las corrientes fría y caliente para el modelo expandido.

Ahora, algunas notaciones:

$$H'_k = \{i \mid \text{corriente caliente } i \text{ suministra calor al intervalo } k \text{ o superior}\} \quad (12)$$

$$S'_k = \{m \mid \text{servicio de calent. } m \text{ suministra calor al intervalo } k \text{ o sup.}\} \quad (13)$$

Los conjuntos de índices C_k , W_k están definidos como en (2) y (4) respectivamente. Tenemos también las siguientes variables nuevas (ver la Fig. 3. 14):

$$Q_{ijk} \quad \text{intercambio de calor de la corriente caliente } i \text{ y la fría } j \text{ en el intervalo } k \quad (14)$$

$$Q_{mjk} \quad \text{int. de calor entre el serv. de cal. } m \text{ y la corriente fría } j \text{ en el intervalo } k \quad (15)$$

$$Q_{ink} \quad \text{int. de calor de la corriente caliente } i \text{ y el serv. de enf. } n \text{ en el intervalo } k \quad (16)$$

R_{ik} calor residual de la corriente caliente i saliendo del intervalo k (17)

R_{mk} calor residual del servicio de calentamiento m saliendo del intervalo k

(18)

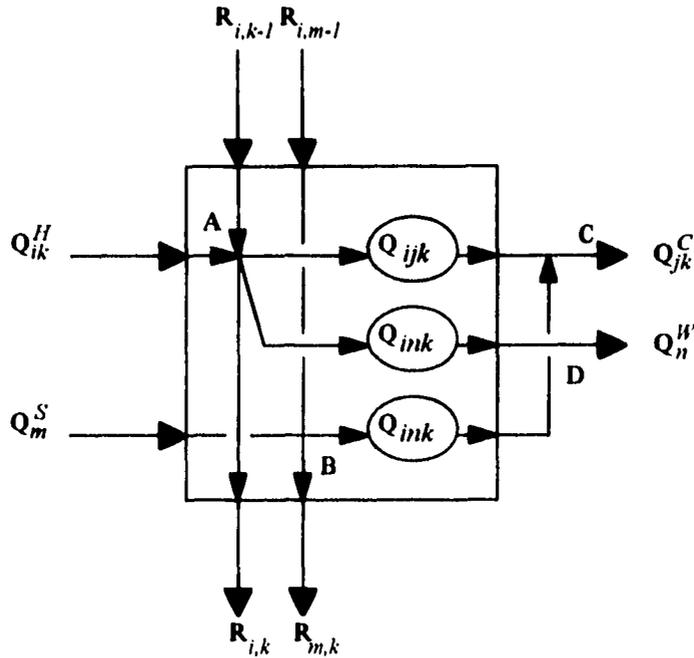


Figura 3. 12 Flujos de calor en el intervalo k para el modelo expandido.

Las variables Q_m^S , Q_n^W y los parámetros $Q_{ik}^H, Q_{jk}^C, c_m, c_n$ son idénticos a los del modelo condensado. En contraste con el modelo compacto de (7) a (11) donde simplemente hicimos un balance de calor alrededor de cada nivel de temperatura, en este caso tenemos que considerar los balances en los siguientes puntos dentro de cada intervalo de temperatura (puntos A, B, C y D de la Fig. 3.13): a) para el proceso caliente y las corrientes de

servicio en los nodos internos que relacionan el contenido calorífico, los residuales y los intercambios de calor, y b) para el proceso frío y las corrientes de servicio en los nodos destino que relacionan al contenido calorífico y los intercambios de calor. En esta forma, el modelo lineal de transbordo expandido es el siguiente:

$$\text{Min} \sum_{n \in S} c_n Q_n^S + \sum_{n \in H'} c_n Q_n^H \quad (19)$$

sujeto a

$$R_{i,k} - R_{i,k-1} + \sum_{j \in C_i} Q_{ij,k} + \sum_{n \in H'_i} Q_{ni,k} = Q_{i,k}^H \quad k = 1, \dots, K \quad i \in H'_k \quad (20)$$

$$R_{m,k} - R_{m,k-1} + \sum_{j \in C'_i} Q_{mj,k} = Q_m^S \quad k = 1, \dots, K \quad m \in S'_k \quad (21)$$

$$\sum_{i \in H'_i} Q_{ij,k} + \sum_{m \in S'_i} Q_{mj,k} = Q_{j,k}^C \quad k = 1, \dots, K \quad j \in C_k \quad (22)$$

$$\sum_{i \in H'_i} Q_{ni,k} = Q_n^W \quad k = 1, \dots, K \quad n \in W_k \quad (23)$$

$$R_{i,k}, R_{m,k}, Q_{ij,k}, Q_{mj,k}, Q_{ni,k}, Q_m^S, Q_n^W \geq 0 \quad (24)$$

$$R_{i,0} = R_{i,K} = 0 \quad (25)$$

Obviamente el tamaño de este problema es mayor que el que teníamos inicialmente. La importancia de la formulación expandida es el hecho de que podemos especificar fácilmente las restricciones sobre las combinaciones:

a) Para prohibir una combinación entre una corriente caliente i y una fría j , necesitamos especificar $Q_{ijk} = 0$ para todos los intervalos k . Alternativamente, simplemente borramos estas variables de la formulación.

b) Para imponer una combinación entre una corriente caliente i y una corriente fría j , podemos especificar que el intercambio total de calor, que es la suma de Q_{ijk} sobre todos los intervalos, se encuentre dentro de unos límites superior e inferior:

$$Q_{ij}^l \leq \sum_{k=1}^K Q_{ijk} \leq Q_{ij}^u \quad (26)$$

También podemos especificar un valor fijo para la suma en (26)

Resultados.

El programa fuente en GAMS consiste de tres partes. Los datos son introducidos en la primera sección del programa. Nótese que los intervalos de temperatura no necesitan ser introducidos, ya que son calculados en la segunda parte junto con los contenidos caloríficos de las corrientes. Aquí, hacemos uso de la instrucción LOOP de GAMS para ejecutar repetidamente un conjunto de comandos. Finalmente, la tercera parte del programa define y resuelve el modelo.

La solución óptima mostrada en el programa de salida de GAMS indica que invirtiendo el intercambio entre las corrientes H1 y C1, el costo mínimo por servicios es de \$570,000 por año, que puede ser realizado con las siguientes cargas para los servicios:

Combustible	3900 kW
Vapor de alta presión	500 kW
Servicio de enfriamiento	3800 kW

También, de la solución podemos ver que no hay punto de pliegue para este problema, ya que no hay residuales iguales a cero en ninguno de los intervalos de temperatura.

Localización del Plato de Alimentación Óptimo.

Definición del problema.

Se tiene una columna de destilación con 7 etapas ideales, un condensador total y un rehervidor tipo kettle. La alimentación consiste de una mezcla de 70% mol de benceno y 30% mol de tolueno, entrando en su punto de burbuja a 1.12 bar. El producto en el domo debe tener una pureza de al menos 95% mol de benceno. El objetivo es maximizar la utilidad, que es proporcional al flujo del producto menos el costo de la energía utilizada, que se expresa en términos de la relación de reflujo. Los demás datos se dan en la tabla 3.10.

El problema es determinar la localización óptima del plato de alimentación; es decir, la mejor locación para introducir la mezcla para maximizar la utilidad. Formularemos y resolveremos este problema como uno de programación mixta entera no lineal.

Sistema	Benceno-Tolueno
Modelo termodinámico	Líquido - ideal vapor - ideal
Tipo de condensador	Total
Número de etapas (N)	9
(incluyendo al rehervidor y al condensador)	
Candidatos al plato de alimentación:	{2, 3, ..., 8}
Especificaciones:	
$F = 100$, $p_f = 1.12$ bar, $T_f = 359.6$ K, $z_f = (0.70, 0.30)$	

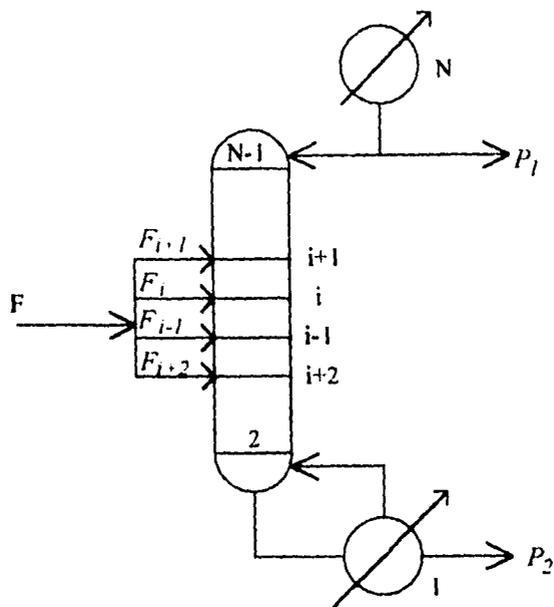


Figura 3. 13 Superestructura para la localización del plato de alimentación.

Sean L_i , x_i , h_i^L y f_{ij}^L las que denoten el flujo molar, el vector de fracciones molares, la entalpía específica molar y la fugacidad del componente j , respectivamente, del líquido en el plato i . Similarmente, sean V_i , y_i , h_i^V y f_{ij}^V las cantidades correspondientes del vapor en el plato i . Teniendo a la temperatura del plato i como T_i , tenemos

$$\begin{aligned}
 f_{ij}^L &= f_{ij}^L(T_i, p_i, x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ic}) \\
 f_{ij}^V &= f_{ij}^V(T_i, p_i, y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{ic}) \\
 h_{ij}^L &= h_{ij}^L(T_i, p_i, x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ic}) \\
 h_{ij}^V &= h_{ij}^V(T_i, p_i, y_{i1}, y_{i2}, \dots, y_{ic})
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

donde las funciones del lado derecho dependen del modelo termodinámico usado. La forma explícita de estas ecuaciones, en el caso ideal, están dadas en el programa empleado, listado en el apéndice B.

Sean P_1 y P_2 las que denoten los flujos de los productos en el fondo y en el domo, respectivamente.

El subconjunto de platos candidatos para la alimentación está especificado por el índice LOC , donde $LOC \subset COL \subset I$. Sea $z_i, i \in LOC$, la que denote a la *variable binaria* asociada con la selección de i como el plato de alimentación; es decir, $z_i = 1$ si i es el plato de alimentación. Sea $F_i, i \in LOC$, la que denote la cantidad de entrada al plato i .

Las ecuaciones del modelo son como sigue:

$$(a) \text{ equilibrio de fases: } f_y^L = f_y^V \quad j = 1, \dots, c, i \in I \quad (2)$$

$$(b) \text{ error en el equilibrio } \sum_j x_{ij} - \sum_j y_{ij} = 0 \quad i \in I \quad (3)$$

(c) balances de materia totales:

$$\begin{aligned} L_{i-1} - (L_i + P_1) &= 0 \quad i \in C \\ L_i + V_i - L_{i+1} - V_{i-1} &= 0 \quad i \in COL - LOC \\ L_i + V_i - L_{i+1} - V_{i-1} - F_i &= 0 \quad i \in LOC \\ i + P_2 - L_{i+1} &= 0 \quad i \in R \end{aligned} \quad (4)$$

(d) balances de materia por componente:

$$\begin{aligned} L_{i-1} y_{i-1,j} - (L_i + P_1) x_{ij} &= 0 \quad j = 1, \dots, c, i \in C \\ L_i x_{ij} + V_i y_{ij} - L_{i+1} x_{i+1,j} - V_{i-1} y_{i-1,j} &= 0 \quad j = 1, \dots, c, i \in COL - LOC \\ L_i x_{ij} + V_i y_{ij} - L_{i+1} x_{i+1,j} - V_{i-1} y_{i-1,j} - F_i z_{ij} &= 0 \quad j = 1, \dots, c, i \in LOC \\ i y_{ij} + P_2 x_{ij} - L_{i+1} x_{i+1,j} &= 0 \quad j = 1, \dots, c, i \in R \end{aligned} \quad (5)$$

(e) balances de entalpía:

$$\begin{aligned} L_i h_i^L + V_i h_i^V - L_{i+1} h_{i+1}^L - V_{i-1} h_{i-1}^V - F_i h_f &= 0 \quad i \in LOC \\ L_i h_i^L + V_i h_i^V - L_{i+1} h_{i+1}^L - V_{i-1} h_{i-1}^V &= 0 \quad i \in COL - LOC \end{aligned} \quad (6)$$

(f) restricciones sobre la localización del plato de alimentación:

$$\begin{aligned}
\sum_{i \in LOC} z_i &= 1 \\
\sum_{i \in LOC} F_i &= F \\
F_i - Fz_i &\leq 0, i \in LOC
\end{aligned}
\tag{7}$$

La última restricción en (7) expresa el hecho de que si el plato $i \in LOC$ es seleccionado como el plato de alimentación, entonces la cantidad que entra a otros platos es cero. Esto sigue del hecho de que $z_j = 0, j \neq i, j \in LOC$. En adición, puede haber restricciones sobre la pureza, recuperación, relación de reflujo, etc. El problema MINLP, entonces, es minimizar (o maximizar) una función objetivo sujeta a las restricciones de igualdad y desigualdad (1) a (7). Nótese que en este modelo, las variables z_j son binarias, en tanto que el resto de ellas son continuas.

Resultados.

En la primera parte del archivo están tabulados los datos termodinámicos básicos (temperatura crítica, presión crítica, punto de ebullición normal, constantes de la ecuación de presión de vapor, capacidad calorífica como gas ideal, etc.). Los datos de referencia de entalpía son seleccionados y las constantes de integración computadas.

Claramente, los puntos de ebullición de los componentes más ligero y más pesado (en este caso, benceno y tolueno, respectivamente) a la presión prevaleciente proveen unos buenos estimados para las temperaturas del condensador y del rehedidor. También sirven para fijar los límites superior e inferior sobre las temperaturas de todos los platos. También podemos proveer de valores iniciales razonables para las temperaturas de fondo

y domo y podemos asumir una variación lineal de la temperatura para los valores iniciales de las temperaturas de los platos.

El siguiente punto es la condición térmica de la alimentación. Se asume normalmente que la alimentación entra como líquido saturado (o sea, a su punto de burbuja) a la presión prevaleciente en el plato al cual se alimenta. Una vez que la temperatura de burbuja es computada, podemos calcular la entalpía específica molar del líquido saturado.

Los valores iniciales para los flujos de líquido y vapor se introducen asumiendo un desbordamiento molar constante (una suposición razonable en las mezclas de hidrocarburos de miembros homólogos de una familia). Una vez más, se provee una variación lineal de las fracciones molares de los componentes como valores iniciales.

La función objetivo seleccionada ($PI-50*r$) indica las interacciones entre el incremento en la salida (objetivo primario) y el correspondiente incremento de la carga del rehervidor (medida toscamente por el valor de la relación de reflujo):

La solución óptima obtenida con DICOPT++ está dada por:

Función objetivo =	13.144
r =	0.925
P_1 =	59.396
P_2 =	40.604
Plato de alimentación =	4

Nótese que la solución se encontró en el primer paso en el NLP relajado, donde las variables binarias son variables continuas con valores entre cero y uno.

y domo y podemos asumir una variación lineal de la temperatura para los valores iniciales de las temperaturas de los platos.

El siguiente punto es la condición térmica de la alimentación. Se asume normalmente que la alimentación entra como líquido saturado (o sea, a su punto de burbuja) a la presión prevaleciente en el plato al cual se alimenta. Una vez que la temperatura de burbuja es computada, podemos calcular la entalpía específica molar del líquido saturado.

Los valores iniciales para los flujos de líquido y vapor se introducen asumiendo un desbordamiento molar constante (una suposición razonable en las mezclas de hidrocarburos de miembros homólogos de una familia). Una vez más, se provee una variación lineal de las fracciones molares de los componentes como valores iniciales.

La función objetivo seleccionada ($P1-50*r$) indica las interacciones entre el incremento en la salida (objetivo primario) y el correspondiente incremento de la carga del rehervidor (medida toscamente por el valor de la relación de reflujo):

La solución óptima obtenida con DICOPT++ está dada por:

Función objetivo =	13.144
r =	0.925
P_1 =	59.396
P_2 =	40.604
Plato de alimentación =	4

Nótese que la solución se encontró en el primer paso en el NLP relajado, donde las variables binarias son variables continuas con valores entre cero y uno.

Referencias.

ALLEN, Derek H. "How to Use Mixed-Integer Programming". *Chemical Engineering*, March 29, 1976.

BROOKE, Anthony, KENDRICK, David & MEERAUS, Alexander. GAMS. A user's guide. Scientific Press, U.S.A., 1988.

DIWEKAR, U.M., GROSSMANN, I.E. and RUBIN, E.S. "An MINLP Process Synthesizer for a Sequential Modular Simulator". *American Chemical Society*, 1992.

GROSSMANN, Ignacio E. MINLP Optimization Strategies and Algorithms for Process Synthesis. Process Synthesis.

GROSSMANN, Ignacio E. "Mixed-Integer Programming Approach for the Synthesis of Integrated Process Flowsheets". *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 8, No. 1, pp.463-482, 1985, U.K.

GROSSMANN, Ignacio E. and SANTIBAÑEZ, Jorge. "Applications of Mixed-Integer Linear Programming in Process Synthesis". *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 4, pp.205-214, 1980, U.K.

KOCIS, Gary Robert. A Mixed-Integer Nonlinear Programming Approach to Structural Flowsheet Optimization. (Doctoral Thesis), Carnegie Mellon University, Pittsburg, PA, USA, 1988.

KOCIS, Gary R. and GROSSMANN, I. E. "Global Optimization of Nonconvex Mixed-Integer Programming (MINLP) Problems in Process Synthesis". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1988, Vol. 27, pp. 1407-1421.

MORARI, Manfred & GROSSMANN, Ignacio E. CACHE Process Design Case Studies. (Vol. 6: Chemical Engineering Optimization Models with GAMS), Oct. 1991.

SALCEDO, R.L. "Solving Nonconvex Nonlinear Programming and Mixed-Integer Nonlinear Programming Problems with Adaptive Random Search". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1992, Vol. 31, pp. 262-273.

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

Capítulo 4

SÍNTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACIÓN

4.1 Introducción.

El problema de la síntesis de secuencias de separación es generalmente de grandes dimensiones. Es por esto que la utilización de las computadoras como medio de solución eficiente y rápido, se ha ido acrecentando en los últimos años. Como estas máquinas sólo pueden procesar números, se hacen necesarios el desarrollo y la implementación de modelos matemáticos que permitan su solución. Aquí desarrollaremos uno de ellos para poder sintetizar secuencias de separación.

El desarrollo del modelo consta de tres partes principales:

- Generación de la superestructura.
- Simulación y análisis de datos.
- Desarrollo del modelo de costos.

4.2 Modelos Lineales para Columnas Simples.

Balances de Materia.

Aun cuando se puede diseñar un separador complejo para obtener todos los productos deseados, generalmente se utiliza una secuencia de separadores simples, debido a que frecuentemente resulta más económico que un separador complejo, por lo que consideraremos columnas de destilación con una sola alimentación y alta recuperación, en las que la separación se realiza para los componentes clave ligero y clave pesado que son adyacentes, como se ilustra en la figura 4.1.

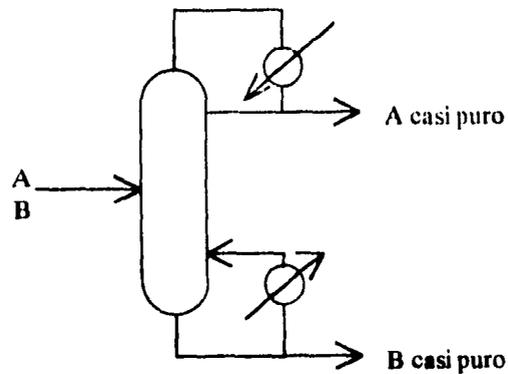


Figura 4.1 Separación casi completa.

Si consideramos una presión y una relación de reflujo fijas, podemos obtener relaciones lineales del balance de materia en términos de los flujos de alimentación, como está dado por: (Ver Fig. 4.2)

$$\begin{aligned} d_i &= \gamma_i f_i \\ b_i &= (1 - \gamma_i) f_i \end{aligned} \quad (1)$$

donde d_i y b_i representan los flujos másicos del componente i en el destilado y en los fondos, y γ_i son las fracciones de recuperación correspondientes que se obtienen del balance de masa en el método corto para una composición de alimentación seleccionada. Asumiendo que las fracciones γ_i sean constantes, es claro que las ecuaciones en (1) son ecuaciones lineales.

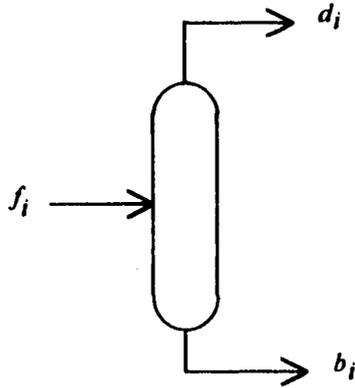


Figura 4.2 Balance de masa para columna multicomponente.

Aunque en un principio podamos usar las ecuaciones del balance de materia como están dadas en la Ec. 1, más adelante consideraremos una simplificación con la que tendremos a nuestro modelo sólo en términos de los flujos de alimentación para cada columna. Si asumimos recuperaciones del 100%, entonces para cada columna k , podemos determinar *a priori* las fracciones de la alimentación total que son recuperadas en el domo y en el fondo mediante las siguientes ecuaciones: (Ver Fig. 4.3)

$$\begin{aligned} \xi_{S_L}^{\text{domo}} &= \frac{\sum_{i \in C_k^{\text{domo}}} x_i^F}{\sum_{i \in C_k} x_i^F} \\ \xi_{S_L}^{\text{fondo}} &= \frac{\sum_{i \in C_k^{\text{fondo}}} x_i^F}{\sum_{i \in C_k} x_i^F} \end{aligned} \quad (2)$$

donde x_i^F es la fracción molar del componente i en la mezcla inicial, C_k , C_k^{domo} , C_k^{fondo} son los componentes que están involucrados en la alimentación, domo y fondo de la columna k , respectivamente.

Como ejemplo, consideremos la columna en la figura 4.4, que tiene como alimentación la mezcla multicomponente inicial. Aplicando la Ec. 2 es claro que

$\xi^{\text{domo}} = .2 + 0.4 = 0.6$, y $\xi^{\text{fondo}} = 0.3 + 0.1 = 0.4$. Para la columna en la figura 4.5, que sólo tiene los componentes C y D en la alimentación, tenemos que $\xi^{\text{domo}} = 0.3 / (0.1 + 0.3) = 0.75$, y $\xi^{\text{fondo}} = 0.1 / (0.1 + 0.3) = 0.25$. Con estas fracciones podemos expresar los flujos de las dos corrientes de salida de la columna en términos del flujo total de alimentación F , como se ve en las figuras 4.4 y 4.5.

Ahora, podemos modelar el balance de materia mediante los flujos totales de alimentación para cada columna.

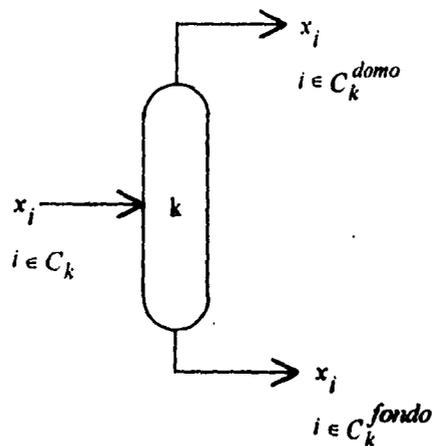


Figura 4.3 Módulo para el modelo de flujo total.

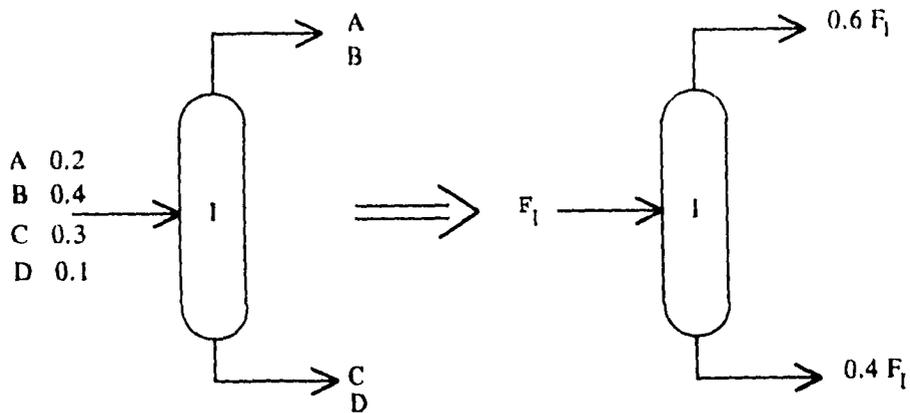


Figura 4.4 Ejemplo de separación inicial para la mezcla de 4 componentes.

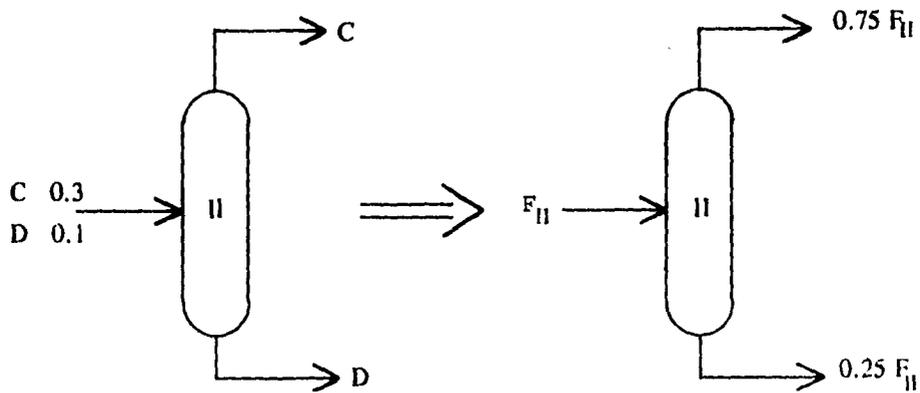


Figura 4.5 Ejemplo de separación intermedia para 2 componentes de la mezcla.

Balances de Energía.

También es conveniente modelar las cargas térmicas del condensador y el rehervidor como funciones lineales del flujo de alimentación. Asumiendo las mismas cargas en

el rehervidor y en el condensador, las cargas térmicas de la columna k se pueden expresar como funciones lineales:

$$Q_k = K_k F_k \quad (3)$$

donde K_k es una constante que se obtiene a partir de un cálculo para un flujo dado.

Finalmente, el costo anualizado de la columna, que incluye el costo fijo por inversión y los costos por servicios, estará dado por:

$$\text{Costo}_k = \alpha_k Y_k + \beta_k F_k + (C_{cal} + C_{enf}) Q_k \quad (4)$$

donde α_k es el costo fijo anualizado en términos de la variable binaria Y_k , β_k es el factor de dimensión para la columna, y C_{cal} y C_{enf} son los costos unitarios de calentamiento y enfriamiento en el rehervidor y el condensador, respectivamente.

El calor que es necesario proporcionar o remover de cada torre Q_k se obtiene del siguiente balance alrededor del condensador de la torre k (Ver Fig. 4.6):

$$Q_C = H_V - H_R - H_D \quad (5)$$

donde las H 's son las entalpías totales de las corrientes correspondientes. De aquí:

$$Q_C = Vh_V - Vh_D$$

$$Q_C = (l+r)D[h_V - h_D] \quad (6)$$

siendo r la relación de reflujo, D el flujo molar total de esa corriente y las h 's son las entalpías molares de cada corriente. En base a la suposición arriba mencionada, hacemos:

$$Q_C = Q_k \quad (7)$$

Así, despejamos de la Ec. 3 para obtener la constante K_k . Cabe mencionar que las constante utilizadas en este trabajo fueron calculadas en base al flujo total de entrada a cada columna.

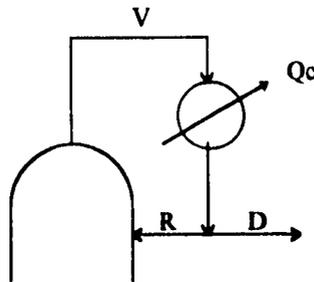


Figura 4. 6 Balance de energía alrededor del condensador.

Costo de Servicios.

Los costos de los servicios se obtienen fácilmente, ya que C_{cat} y C_{enf} poseen las unidades necesarias para que al multiplicarse por determinada carga térmica nos de por resultado un valor en nuevos pesos por año. Es decir, los costos de los servicios ya incluyen la conversión dimensional de masa de servicio a energía utilizada.

Para la obtención de los costos de las columnas de destilación, utilizamos el Método de Guthrie, que se basa en ciertas características de la torre y en el empleo de índices económicos para el cálculo.

Para ello es necesario conocer dichas características. Entre ellas, la más importante es el número de platos de separación. Para obtenerlo, utilizamos un método corto, comenzando con la ecuación:

$$N_{min} = \log [(d_i/d_j)(b_j/b_i)] / \log \alpha_m \quad (8)$$

que es la *ecuación de Fenske* para el número mínimo de etapas de equilibrio, en donde i = componente clave ligero, j = componente clave pesado, d y b son los flujos de componente en el destilado y en el fondo, respectivamente, y α_m es la volatilidad relativa media, dada por

$$\alpha_m = [(\alpha_{i,j})_N(\alpha_{i,j})_1]^{1/2} \quad (9)$$

Posteriormente, se determina el reflujo mínimo mediante la *ecuación de Underwood*:

$$(L_{\infty})_{min} = \frac{\frac{L_F}{F} \left[\frac{DX_{CL,D} - (\alpha_{CL,CP})_F DX_{CP,D}}{L_F X_{CL,F}} - \frac{DX_{CP,D}}{L_F X_{CP,F}} \right]}{(\alpha_{CL,CP})_F - 1} \quad (10)$$

donde el reflujo mínimo es

$$R_{min} = (L_{\infty})_{min} / D \quad (11)$$

Con esto y una relación de reflujo dada es posible determinar el número de etapas teóricas por medio de la *ecuación de Molokanov*:

$$Y = (N - N_{min}) / (N + 1)$$

$$Y = 1 - \exp [(1+54.4X) / (11 + 117.2X) (X - 1) / (X^{0.5})] \quad (12)$$

donde

$$X = (R - R_{min}) / (R + 1) \quad (13)$$

Así, y con la eficiencia global de los platos, se determina el número de platos reales de la torre.

4.3 Ejemplo MILP para una Mezcla de 4 Componentes.

Antes de presentar la forma general del modelo MILP que está basado en los modelos lineales de la sección previa, consideremos como un ejemplo el caso en el que tenemos una mezcla de 4 componentes A, B, C y D, que queremos separar en productos esencialmente puros. Los datos de la composición de esta mezcla, las constantes del balance de calor y los datos de los costos están dados en la tabla 4.1.

$F_{tot} = 1000$ kgmol/hr	
Composición (fracción mol)	
A	0.15
B	0.30
C	0.35
D	0.20
Costo de servicios:	
Agua de enfriamiento:	$C_{enf} = 1.3 (10^3 \$hr/10^6 kJ\text{año})$
Vapor:	$C_{cal} = 34 (10^3 \$hr/10^6 kJ\text{año})$

k	Separador	α_k , Costo fijo	β_k , Costo variable	Coefficientes caloríficos, K_k
1	A/BCD	145	0.42	0.028
2	AB/CD	52	0.12	0.042
3	ABC/D	76	0.25	0.054
4	A/BC	125	0.78	0.024
5	AB/C	44	0.11	0.039
6	B/CD	38	0.14	0.040
7	BC/D	66	0.21	0.047
8	A/B	112	0.39	0.022
9	B/C	37	0.08	0.036
10	C/D	58	0.19	0.044

Tabla 4.1 Datos para el problema de ejemplo.

Inicialmente, necesitamos desarrollar la superestructura para este problema. La representación matricial correspondiente, que discutimos en el capítulo anterior, se muestra en la figura 3.2. A cada una de las 10 columnas en esta red, podemos asignarle una variable binaria Y para denotar su existencia potencial, y una variable F para su flujo de alimentación.

Para derivar las ecuaciones del balance de masa, primero necesitamos computar las fracciones de recuperación como están dadas en la ecuación 2. Basados en la composición de la alimentación, las fracciones de recuperación correspondientes se muestran en la tabla 4.2. Entonces, los balances de masa son como sigue.

Para el nodo inicial en la red, tenemos:

$$F_1 + F_2 + F_3 = 1000 \quad (14)$$

$\xi_1^A =$	0.15	$\xi_6^A =$	0.188
$\xi_{HCD}^A =$	0.85	$\xi_{HC}^A =$	0.812
$\xi_2^{AB} =$	0.45	$\xi_7^{AB} =$	0.5625
$\xi_{CD}^A =$	0.55	$\xi_7^C =$	0.44
$\xi_3^{ABC} =$	0.8	$\xi_8^C =$	0.636
$\xi_3^D =$	0.2	$\xi_8^D =$	0.364
$\xi_4^B =$	0.353	$\xi_9^B =$	0.462
$\xi_{CD}^B =$	0.647	$\xi_9^C =$	0.538
$\xi_5^{BC} =$	0.765	$\xi_{10}^A =$	0.333
$\xi_5^D =$	0.235	$\xi_{10}^B =$	0.667

Tabla 4.2 Fracciones en la superestructura.

Para los nodos restantes en la red, en vez de considerar los balances de masa alrededor de cada columna, los consideraremos para cada producto intermedio. La razón para esto es que en la superestructura de la figura 3.2, tenemos flujos asociados sólo a la alimentación de la columna, de manera que las corrientes de salida no necesariamente tienen asociado un flujo, como es el caso de las columnas 2, 4, 5, 6 y 7.

Basados en las fracciones de recuperación dadas en la tabla 4.2, los balances de masa para cada producto intermedio son:

- a) Int.(BCD) producido en la columna 1 y dirigido a las columnas 4 y 5,

$$F_4 + F_5 - 0.85 F_1 = 0 \quad (15)$$

- b) Int. (ABC) producido en la columna 3 y dirigido a las columnas 6 y 7,

$$F_6 + F_7 - 0.8 F_3 = 0 \quad (16)$$

- c) Int. (AB) producido en las columnas 2 y 7 y dirigido a la columna 10,

$$F_{10} - 0.45 F_2 - 0.563 F_7 = 0 \quad (17)$$

d) Int. (BC) producido en las columnas 5 y 6 y dirigido a la columna 9,

$$F_9 - 0.765 F_5 - 0.812 F_6 = 0 \quad (18)$$

e) Int.(CD) producido en las columnas 2 y 4 y dirigido a la columna 8,

$$F_8 - 0.55 F_2 - 0.647 F_4 = 0 \quad (19)$$

Los 10 flujos en las ecuaciones 5 a 10 están relacionados a las variables binarias Y mediante las siguientes desigualdades para cada columna:

$$F_k - 1000 Y_k \leq 0, \quad F_k \geq 0, \quad Y_k = 0,1, \quad k = 1, \dots, 10 \quad (20)$$

donde hemos seleccionado a 1000 como un límite superior, ya que corresponde al flujo de alimentación de la mezcla inicial. Recordemos que las desigualdades en la ecuación 11 tienen el efecto de poner un flujo a cero si su correspondiente variable binaria es igual a cero. Si, por otro lado, la variable binaria vale 1, el flujo tiene un límite superior de 1000.

A las cargas térmicas de los condensadores y rehervidores las podemos representar por variables continuas Q_k , $k=1, \dots, 10$ y de la ecuación 3, están dadas por las ecuaciones:

$$Q_k = K_k F_k, \quad k = 1, \dots, 10 \quad (21)$$

Finalmente, la función objetivo estará dada por la minimización de la suma de los costos dados en la ecuación 4 para las 10 columnas. Esto es:

$$\min C = \sum (\alpha_k Y_k + \beta_k F_k) + (34 + 1.3) \sum Q_k \quad (22)$$

donde los coeficientes para los costos están en la tabla 4.1.

Esta función objetivo, junto con las restricciones (14) a (21), corresponde al modelo MILP para determinar la secuencia óptima de destilación en la superestructura de la

figura 3.2. Nótese que tenemos 20 variables continuas ($F_k, Q_k, k=1, \dots, 10$) y 16 ecuaciones (de la 14 a la 19 y las 10 implícitas en la Ec. 21). Por lo tanto, este problema tiene 4 grados de libertad. También tenemos 10 variables binarias y las 10 desigualdades lógicas en (20) que relacionan a los flujos con las variables binarias.

Resolviendo el problema anterior, obtenemos la secuencia óptima de la figura 4.8, la que conlleva un costo anualizado de \$3,308,000. También podemos obtener la segunda y tercer mejor soluciones del problema, resolviéndolo con el uso de *cortes enteros*, que se explican a continuación.

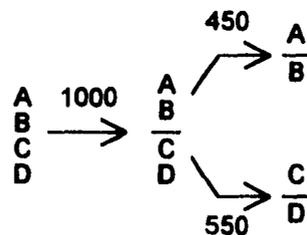


Figura 4.8 Solución óptima del ejemplo.

Ya que la solución óptima en la figura 4.8 está dada por: $Y_2 = Y_8 = Y_{10} = 1$, podemos hacer imposible esta selección de variables añadiendo la desigualdad:

$$Y_2 + Y_8 + Y_{10} \leq 2 \tag{23}$$

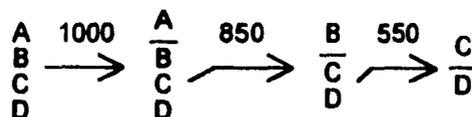


Figura 4.9 Segunda mejor solución.

Resolviendo el problema con esta desigualdad adicional, obtenemos la segunda mejor solución, que se muestra en la figura 4.9, y que corresponde a la secuencia directa, con un costo anualizado de \$3,927,000. Para obtener la tercer mejor solución, hacemos esta combinación no factible, añadiendo la restricción:

$$Y_1 + Y_4 + Y_8 \leq 2 \quad (24)$$

Obteniendo nuevamente una solución, tenemos la secuencia indirecta de la figura 4.10, con un costo anual de \$4,102,000.

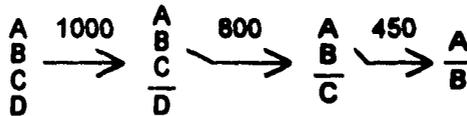


Figura 4.10 Tercer mejor solución.

Es interesante notar que la secuencia óptima en la figura 4.8 es la que tiene el menor flujo total de masa (2000 kgmol/hr), lo que es consistente con las reglas heurísticas aplicables a este caso. No obstante, nótese que la tercer mejor solución tiene un menor flujo de masa total (2250 kgmol/hr) que la segunda mejor (2400 kgmol/hr).

4.4 Modelo MILP para Secuencias de Separación.

Basándonos en el ejemplo de la sección previa, ahora podemos generalizar fácilmente el modelo MILP para la síntesis de secuencias de separación para cualquier mezcla de n componentes que va a separarse en sus integrantes puros.

Inicialmente, necesitamos definir los siguientes índices, que ilustraremos con el ejemplo de la sección anterior:

a) $IP = \{m \mid m \text{ es un producto intermedio}\}$

Ejem. $IP = \{(ABC), (BCD), (AB), (BC), (CD)\}$

b) $COL = \{k \mid k \text{ es una columna en la superestructura}\}$

Ejem. $COL = \{1, 2, \dots, 9, 10\}$

c) $FS_F = \{\text{columnas } k \text{ que se alimenten con la mezcla inicial}\}$

Ejem. $FS_F = \{1, 2, 3\}$

d) $FS_m = \{\text{columnas } k \text{ que tienen como alimentación al intermedio } m\}$

Ejem., para $m = (BCD)$, $FS_m = \{4, 5\}$

$PS_m = \{\text{columnas } k \text{ que producen el intermedio } m\}$

Ejem., para $m = (CD)$, $PS_m = \{2, 4\}$

Por medio de estos índices, la función objetivo en (13) y las restricciones (5) - (12) pueden escribirse como el modelo MILP siguiente:

$$\min C = \sum_{k \in COL} [\alpha_k Y_k + \beta_k F_k + (C_{cat} + C_{inv}) Q_k]$$

sujeta a

$$\sum_{k \in FS_F} F_k = F_{TOT}$$

$$\sum F_k - \sum_{k \in PS_m} \xi_k F_k = 0 \quad m \in IP$$

$$\begin{aligned}
& \lambda \in PS \quad k \in PS \\
& Q_k - K_k F_k^m = 0 \\
& F_k - UY_k \leq 0 \quad k \in COL. \\
& F_k, Q_k \geq 0, Y_k = 0,1 \quad k \in COL.
\end{aligned} \tag{16}$$

donde F_{TOT} es el flujo de la mezcla inicial, ξ_m^k son las recuperaciones del intermedio m en la columna k , y U es el límite superior para los flujos, que por simplicidad seleccionamos como F_{TOT} .

Nótese que el tamaño del modelo anterior es función del número de separadores en la superestructura, y no una función del número de secuencias. También debe resaltar-se que el modelo anterior se puede extender fácilmente de manera que pueda manejar flujos de componentes individuales con fracciones individuales de recuperación como se planteó en la Ec. 1. Por razones de tamaño, es conveniente mantener la forma del modelo como en (16), ya que en la siguiente sección la integración térmica se incorpora al problema.

4.5 Esquema de Discretización para la Separación con Integración Térmica.

En el modelo MILP que se presentó en la sección anterior, se asumió que el enfriamiento en los condensadores y el calentamiento en los rehedidores podría llevarse a cabo por medio de servicios (como agua de enfriamiento y vapor, respectivamente).

Por lo tanto, es deseable llevar a cabo la integración térmica en las secuencias de destilación, ya que la energía, más que el capital, tiende a ser el costo dominante.

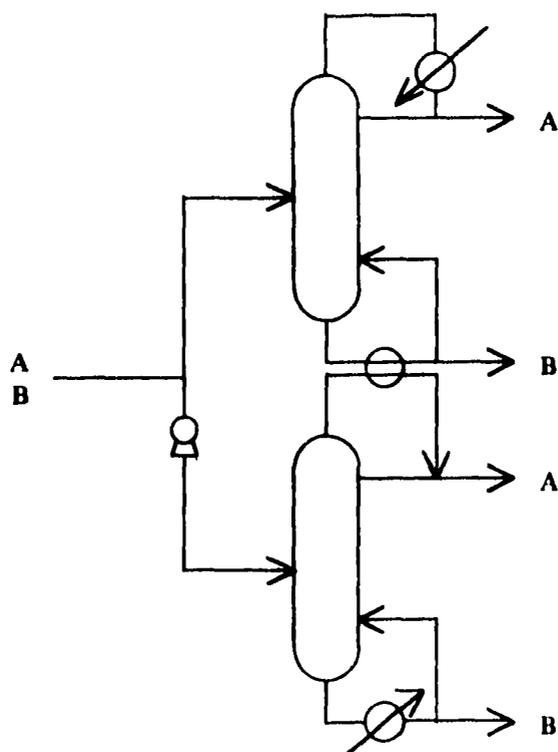


Figura 4. 11 Integración térmica multicolumna.

Las dos mayores alternativas que podemos considerar para la integración térmica en las columnas de destilación se muestran en las Figs. 4.9 y 4.10. En la Fig. 4.9, la separación de A y B se realiza mediante 2 columnas; una a baja presión y la otra a alta presión, de manera que el condensador de la última se pueda utilizar como fuente de calor para el reboilidor de la primera.

En la Fig. 4.10 tenemos una secuencia indirecta para la separación de (ABC). Aquí, la primera columna opera a alta presión, de tal suerte que su condensador se puede usar como fuente de calor para el rehervidor de la segunda columna, que opera a baja presión. En otras palabras, la Fig. 4.9 representa una alternativa para la integración térmica mediante multiefectos, en tanto que la Fig. 4.10 representa una alternativa de intercambio de calor entre columnas que realizan distintas separaciones. En ambos casos, es claro que la selección de la presión de la columna es de vital importancia.

Inicialmente, podemos postular un número de columnas candidatas para cada separación en la red de la Fig. 3.2. Este número puede ser típicamente el número máximo de columnas que queremos tener para la separación multiefecto. Los condensadores podrían ser tratados como corrientes calientes y los rehervidores como corrientes frías. Sus flujos y temperaturas podrían ser incógnitas, ya que los primeros dependen de la selección de la secuencia, y las segundas de la selección de la presión de las columnas.

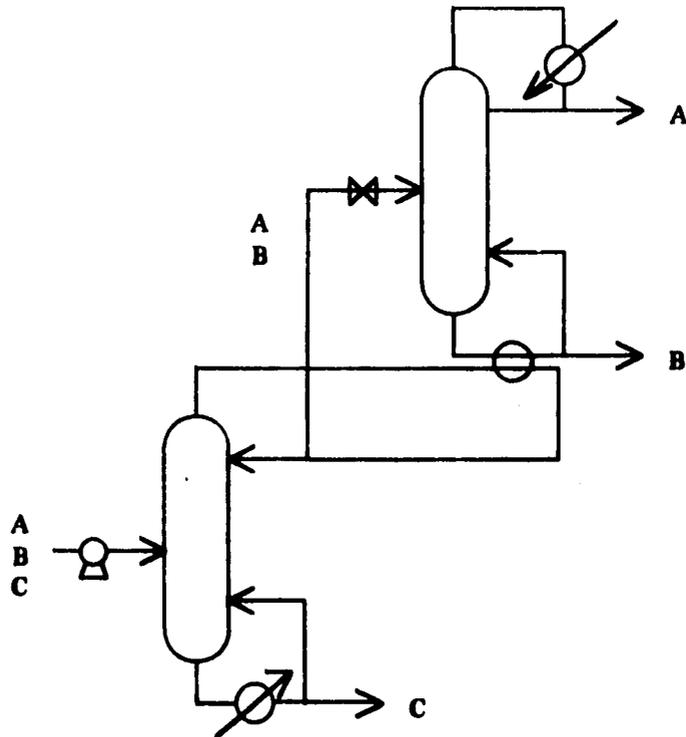


Figura 4. 12 Intercambio de calor entre diferentes separadores.

Así, podemos considerar la integración térmica mediante el conjunto de desigualdades dadas en la sección 3.3 para la integración térmica. En estas desigualdades, los flujos y las temperaturas de las corrientes de proceso son tratadas como variables de decisión en la optimización. Las desigualdades no son lineales.

Adicionalmente, podríamos necesitar incorporar explícitamente las ecuaciones de puntos de burbuja y rocío para tener las temperaturas como una función de la presión. En esta forma, nuestro modelo resultante correspondería a un MINLP. Aunque poseemos herramientas para resolver tales problemas, consideraremos un esquema de discretización

para las temperaturas que dará un modelo MILP, donde las ecuaciones en (16) están combinadas simplemente con las ecuaciones lineales del modelo de transbordo del Capítulo 3.

Para realizar la discretización de temperaturas, asumiremos que ΔT_{RC} , la diferencia de temperaturas entre el rehervidor (punto de rocío) y el condensador (punto de burbuja) es una constante que es independiente de la presión de la columna. Esta constante podría ser computada mediante un método corto a una presión nominal. Determinando ΔT_{RC} para cada separación, un procedimiento para seleccionar columnas candidatas operando a niveles discretos de temperatura, podría definirse como:

- a) **Define el rango permisible de temperaturas para la integración térmica:**

Temperatura más alta = Servicio de calentamiento a mayor T - ΔT_{\min} .

Temperatura más baja = Servicio de enfriamiento a menor T +

ΔT_{\min} .

- B) **Dentro del rango permisible, para cada separación crear un conjunto de columnas de abajo hacia arriba con un cambio de temperatura de ΔT_{RC} y con una diferencia de ΔT_{\min} entre columnas sucesivas; si el conjunto no alcanza el tope por más de ΔT_{\min} , crear un segundo conjunto de columnas de arriba hacia abajo.**

Para ilustrar más claramente este procedimiento, consideremos el ejemplo de tres componentes de la tabla 4.3. Como se ve en la Fig. 4.11, el rango permisible de temperaturas está dado desde 330K hasta 540K. El 330K se obtiene de añadir 10K a la tempera-

tura de salida del agua de enfriamiento, y los 540K restando 10K a la temperatura del vapor de alta presión.

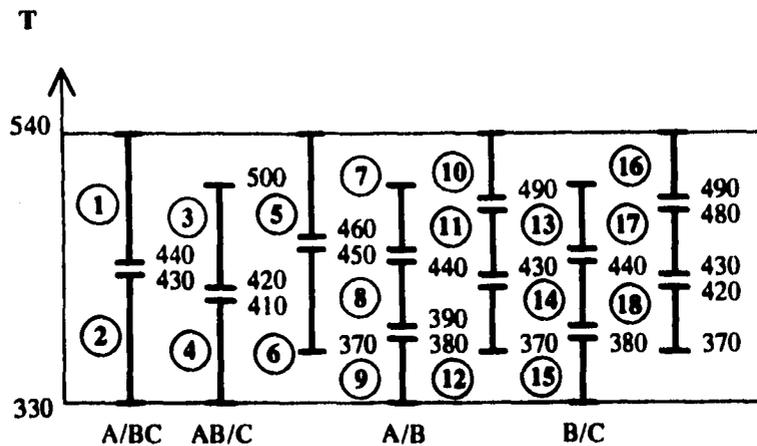


Figura 4. 13 Columnas potenciales para la integración térmica.

Consideremos la separación A/BC, que tiene un ΔT_{RC} de 100K como se ve en la Fig. 4.11. Empezando a 330K, consideramos primero una columna con una temperatura en el condensador a 330K y una temperatura en el rehervidor a 430K. Con un ΔT_{min} de 10K, ponemos arriba de esta columna una cuyo condensador esté a 440K y cuyo rehervidor esté a 540K. En este caso, hay dos columnas que podemos acomodar exactamente dentro del rango 330-540K como se ve en la Fig. 4.11. En estas dos columnas, el condensador de la columna 1 a 440K puede potencialmente intercambiar calor con el rehervidor de la columna 2 a 430K.

Para la separación AB/C, tenemos un ΔT_{RC} de 80K. En este caso, la primera columna tiene el condensador a 330K y el rehervidor a 410K. Con el ΔT_{min} de 10K, pone-

mos arriba de esta columna una cuyo condensador esté a 420K y su rehervidor a 500K. Ya que no alcanzamos el límite superior del rango por 40K, creamos un segundo conjunto de arriba hacia abajo. La primer columna en el segundo conjunto tiene el rehervidor a 540K y el condensador a 460K; la segunda columna tiene el rehervidor a 450K y el condensador a 370K. Por lo tanto, postularemos cuatro columnas para esta separación como se ve en la Fig. 4.11.

De la Fig. 4.11 podemos ver entonces que mediante el esquema de discretización consideraremos un total de 18 columnas potenciales. La presión de operación de estas columnas podría ser obtenida mediante el cálculo de punto de burbuja para conocer las temperaturas de los condensadores.

Asumiendo que hemos determinado el conjunto discreto de columnas potenciales como en la Fig. 4.11, consideremos cómo podemos representar la integración térmica entre estas columnas. En vez de considerar todos los intercambios de calor individuales que son posibles entre todos los condensadores y rehervidores, podemos enclavar la integración de calor en el modelo MILP a través de una cascada de calor.

Calientes (Condensador)		Q_{AP}		Frías (Rehervidor)
	< 550	↓	540	> Q_1, Q_5, Q_{10}, Q_{16}
	< 510	↓	500	> Q_3, Q_7, Q_{13}
Q_{10}, Q_{16}	< 490	↓	480	> Q_{11}, Q_{17}
Q_{BP}, Q_5	< 460	↓	450	> Q_6
Q_7, Q_{13}	< 450	↓	440	> Q_8, Q_{14}
Q_1	< 440	↓	430	> Q_2
Q_{11}, Q_{17}	< 430	↓	420	> Q_{12}, Q_{18}
Q_3	< 420	↓	410	> Q_4
Q_8, Q_{14}	< 390	↓	380	> Q_9, Q_{15}
Q_6, Q_{12}, Q_{18}	< 370	↓	360	>
$Q_2, Q_4, Q_9,$ Q_{15}	< 330	↓	320	>
		↓		
		Q_{AE}		

Figura 4. 14 Flujos de calor para las columnas potenciales en la Fig. 4. 11.

Esto es, tratando a los condensadores como corrientes calientes y a los rehervidores como corrientes frías, podemos construir una cascada de calor que esté basada en las temperaturas de estas corrientes. Ya que estas temperaturas pueden considerarse constantes, es conveniente representar los intervalos a temperaturas constantes.

En esta forma, basados en las temperaturas de los rehervidores y condensadores en la Fig. 4.11, y en los diferentes servicios, podemos construir la cascada de calor mostrada en la Fig. 4.12. Del lado izquierdo tenemos como entradas el calor de los condensadores, Q_k , y el calor del vapor de baja presión, Q_{BP} . Del lado derecho, tenemos como salidas los calores de los rehervidores, Q_k . En la parte superior de la cascada tenemos como entrada el calor del vapor de alta presión, Q_{AP} , y en la parte inferior la salida del calor del agua de enfriamiento, Q_{AE} .

Nótese que todas las cargas térmicas en la Fig. 4.12 son desconocidas. Sin embargo, esto no supone ninguna dificultad ya que podemos realizar los balances de calor alrededor de cada intervalo de temperatura en una forma similar a la que usamos en el modelo de transbordo. Esto es, para cada intervalo l , $l=1,2,\dots,L$ podemos escribir la ecuación,

$$R_l - R_{l-1} - \sum_{i \in SC^l} Q_{SC}^i + \sum_{j \in SE^l} Q_{SE}^j - \sum_{k \in I_C^l} Q_k + \sum_{k \in I_R^l} Q_k = 0 \quad (17)$$

donde R_l es el calor residual saliente del intervalo l ; Q_{SC}^i , Q_{SE}^j son las cargas térmicas de los servicios de calentamiento y enfriamiento en el intervalo l , y Q_k son las cargas de calor de las columnas. I_C^l , I_R^l son los conjuntos de columnas cuyas temperaturas de condensador y rehedidor coinciden con las del intervalo de temperatura l (por ejemplo, $I_C^l = \{10, 16\}$, $I_R^l = \{11, 17\}$ para el intervalo (490-480K) en la Fig. 4.12). De esta forma, incluyendo a la Ec. 17 en nuestro modelo MILP, podemos asegurar una máxima integración térmica en las columnas, ya que las cargas de los servicios de calentamiento y enfriamiento serán incluidas como costos de operación en la función objetivo.

4.6 Modelo MILP para la Separación e Integración Térmica.

Basados en el esquema de discretización de la sección previa, podemos desarrollar una superestructura que es similar a la de la Fig. 3.2. Como un ejemplo, asumamos que tenemos una mezcla ternaria (ABC), para la cual la discretización podría dar dos colum-

nas para cada separación: (A/BC), (AB/C), (A/B), (B/C). Entonces, podríamos simplemente duplicar columnas en la superestructura como se ve en la Fig. 4.13. Nótese que aquí, seguimos asignando a cada columna una alimentación, y una variable 0-1 correspondiente. A tal superestructura podemos asignar índices similares a los de la sección 4.4.

Reemplazando las cargas de los servicios en la función objetivo en (16), y añadiendo las ecuaciones de transbordo para la integración térmica en (17), el modelo MILP queda:

$$\begin{aligned} \min C &= \sum_{k \in COL} [\alpha_k Y_k + \beta_k F_k] + \sum_{i \in SC} C^i Q^i_{SC} + \sum_{j \in SE} C^j Q^j_{SE} \\ \text{sujeta a} \\ \sum_{k \in FS} F_k &= F_{TOT} \\ \sum_{k \in FS} F_k - \sum_{k \in PS} \xi^m_k F_k &= 0 \quad m \leq IP \\ Q_k - K_k F_k &= 0 \\ F_k - UY_k &\leq 0 \quad k \in COL \\ R_l - R_{l-1} - \sum_{i \in SC} Q^i_{SC} + \sum_{j \in SC} Q^j_{SC} - \sum_{k \in l} Q_k + \sum_{k \in l} Q_k &= 0 \quad l=1,2,\dots,L \\ F_k, Q_k &\geq 0, Y_k = 0,1 \quad k \leq COL \\ Q^i_{SC} &\geq 0 \quad i \in SC, \quad Q^j_{SE} \geq 0 \quad j \in SE \end{aligned}$$

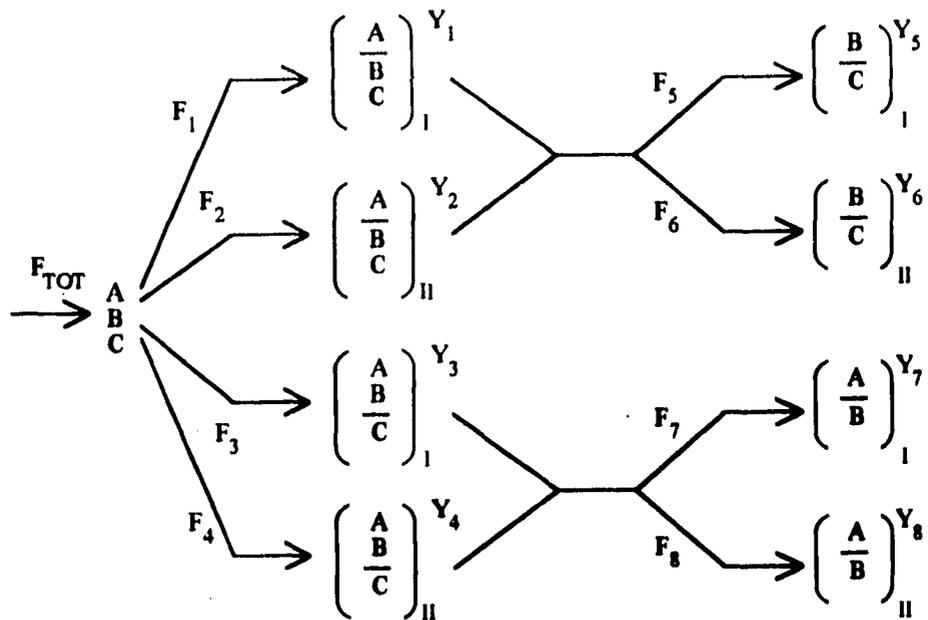


Figura 4. 15 Superestructura y variables para la mezcla de 3 componentes con dos columnas por separación.

La solución de este modelo podría indicar las columnas que son seleccionadas de la superestructura, y las cargas térmicas de los condensadores, rehervidores y servicios. Estas cargas caracterizarán una integración térmica máxima debido a la inclusión de las ecuaciones del modelo de transbordo. Por lo tanto, una vez que la solución MILP se obtiene, la estructura detallada de recuperación de calor puede ser derivada manualmente, o mediante modelos MILP y NLP.

De manera similar a la sección previa, podemos determinar la segunda y tercer mejor soluciones resolviendo el modelo con cortes enteros. También, si no se permiten

columnas multiefecto, uno puede simplemente excluir esta opción especificando la restricción de que no más de una columna pueden seleccionarse para una sola separación. Por ejemplo, para la separación (A/BC) en la Fig. 4.13, podemos especificar la restricción:

$$Y_1 + Y_2 \leq 1 \quad (19)$$

Como punto final, aunque el esquema de discretización para la integración térmica tiene la ventaja de mantener nuestro problema de síntesis como un MILP, tiene dos limitaciones. Primero, las temperaturas no pueden ser tratadas como variables continuas para la optimización. Segundo, el tamaño del problema en términos de variables binarias a menudo es incrementado enormemente debido a las diferentes columnas que deben ser incluidas en la superestructura. Aún así, el modelo en (18) puede ser resuelto con un gasto computacional razonable, y por lo tanto es bastante útil para sintetizar secuencias de destilación integradas térmicamente.

Referencias:

- ANDRECOVICH, Mark James. Synthesis of Heat Integrated Distillation Sequences. (Ph. D. Dissertation), Carnegie-Mellon University, U.S.A., 1983
- BROOKE, Anthony, KENDRICK, David & MEERAUS, Alexander. GAMS. A User's Guide. Scientific Press, U.S.A., 1988.

HENLEY, Ernest J. Y SEADER J.D. Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química. (Trad. Fidel Mato Vázquez), Ediciones Repla, México, 1990.

HINES, Anthony L. Y MADDIX, Robert N. Transferencia de Masa. Fundamentos y Aplicaciones. (Trad. José Luis Rodríguez Herrera), Prentice-Hall, México, 1987.

MORARI, Manfred & GROSSMAN, Ignacio E. CACHE Process Design Case Studies. (Vol. 6: Chemical Engineering Optimization Models with GAMS), Oct. 1991

PAULES, Granville Edward. Synthesis and Analysis of Flexible and Complex Heat-Integrated Distillation Sequences. (Ph. D. Dissertation), Princeton University, U.S.A., 1990

TREYBAL, Robert E. Mass-Transfer Operations. 3rd Edition, McGraw-Hill, Singapore, 1980.

Capítulo 5

APLICACIÓN

5.1 SELSEC.

Para el desarrollo de esta sección, fue necesaria la creación de todo un sistema computacional denominado SELSEC (Selector de Secuencias) para generar y obtener los datos necesarios para la resolución de problemas.

Dicho sistema recibe los componentes y sus flujos respectivos para, a continuación, generar la superestructura, calcular los balances de materia y energía, las constantes térmicas y los factores de costo de cada una de las columnas que contenga (entre muchas otras determinaciones que realiza). Por último, se encarga de crear el archivo fuente para el programa de optimización GAMS.

El cálculo de las constantes térmicas se hace realizando un balance de energía en el condensador de cada columna como se vió en la sección 4.3.

Una vez obtenida la carga térmica, se divide entre el flujo de entrada de la torre, para tener la energía requerida específica, es decir, la energía necesaria por cada mol/hr de alimentación.

El costo de las columnas de destilación se incrementa con el aumento en el flujo de alimentación si las demás variables se mantienen constantes. Este incremento es no lineal como lo demuestra la ecuación:

$$\text{Costo}_2 = (\text{Capacidad}_2 / \text{Capacidad}_1)^{0.6} \times \text{Costo}_1 \quad (1)$$

que se utiliza comúnmente para el escalamiento de costos. En este problema se requiere una aproximación lineal a este comportamiento, ya que se requiere mantenerlo como MILP. Por lo tanto, se utiliza una función de la forma:

$$\text{Costo} = CF + V \times F \quad (2)$$

donde CF es el costo fijo asociado con la columna, y V es la pendiente de la línea que relaciona el costo de la columna con el flujo de alimentación. Se pueden utilizar muchos pares de números, pero en este estudio se usaron los costos a 100 y a 50% del flujo total. Cabe resaltar que los cálculos se realizaron con los datos económicos actualizados hasta la fecha de realización de este estudio, mediante el Método de Gutrie.

En su caso, el programa se encarga de aumentar la superestructura mediante el algoritmo de temperatura de rehervidor/condensador para la determinación de columnas a incluir en la síntesis.

5.2 Obtención de una Secuencia.

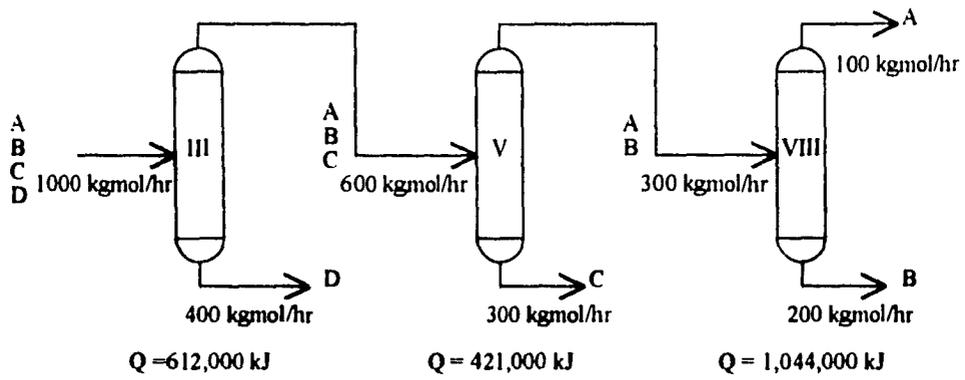
A manera de ilustración, se generó mediante el programa arriba citado una secuencia para la mezcla siguiente:

Clave	Componente	Flujo (kgmol/hr)
A	Etano	100
B	Propano	200
C	n-Butano	300
D	n-Pentano	400

Se generaron 10 columnas diferentes. Debido a que se detectó la necesidad de refrigeración, se supuso que la temperatura mínima sería de 240K y el costo sería del doble que el del servicio de calentamiento más caro (se hizo esta suposición ya que el costo por servicio de enfriamiento depende de muchos factores que salen del alcance de este trabajo).

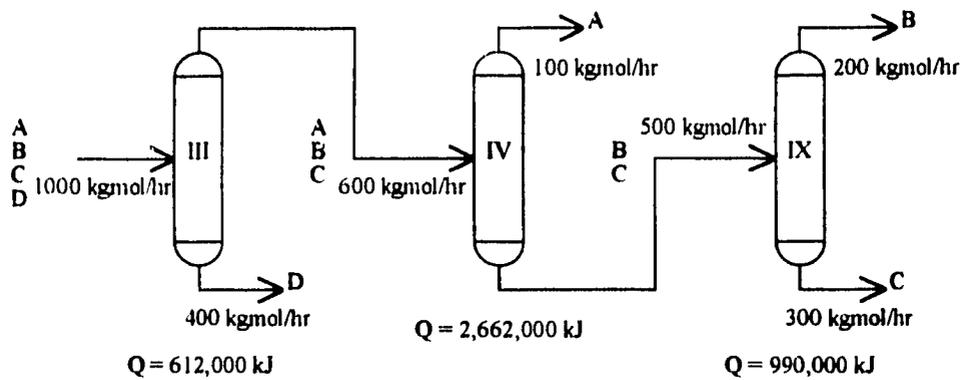
Así, se encontraron 28 ecuaciones, 31 variables, 99 elementos no cero y 10 variables discretas. La secuencia y los resultados se ilustran en la Fig. 5.1. El costo total de esta secuencia es de \$513.458 millones de nuevos pesos por año.

De la misma manera, se encontraron la segunda y tercer mejor soluciones. La segunda se ve en la Fig. 5.2 y tiene un costo total de \$1,048 millones de nuevos pesos por año, lo que representa un incremento del 104.1% con respecto a la primera.



Costo = N\$513,458,000 por año
 Suma de Calores = 2,077,000 kJ
 Suma de Flujos de Entrada = 1,900 kgmol/hr

Figura 5. 1 Secuencia óptima.



Costo = N\$1,048,000,000 por año
 Suma de Calores = 4,264,000 kJ
 Suma de Flujos de Entrada = 2,100 kgmol/hr

Figura 5.2 Secuencia secundaria.

Por último, la tercer mejor solución se encuentra en la Fig. 5.3, con un costo total de \$1,070.168 millones de nuevos pesos por año, que indica un aumento del 108.4% en base a la primer secuencia.

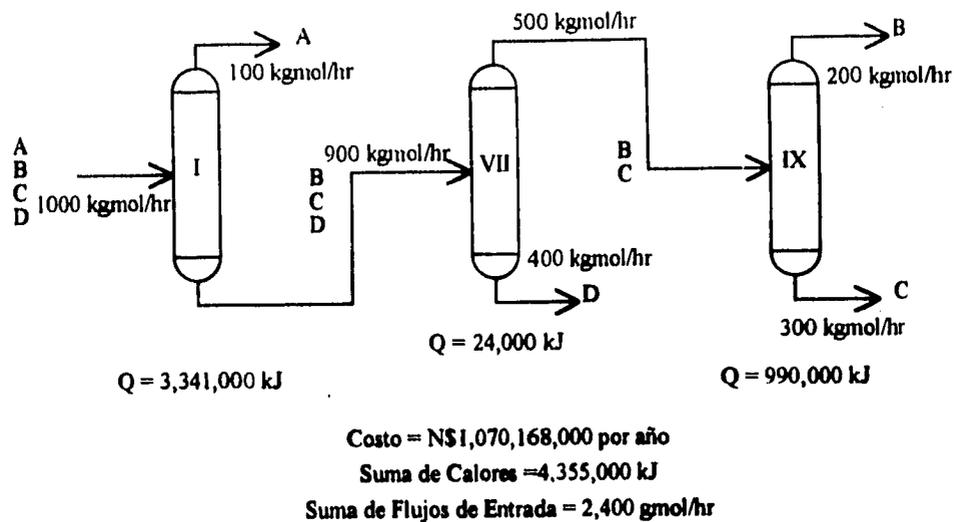


Figura 5. 3 Secuencia terciaria.

Podemos apreciar que, en general, las secuencias obtenidas siguen la regla heurística de separar primero los componentes más abundantes, lo que se refleja en que la suma de los flujos manejados por las secuencias va incrementándose de la primera a la última.

Por otro lado, la suma de los calores de las columnas en cada secuencia va incrementándose desde la óptima a la terciaria.

Con lo anterior, podemos decir que el mayor impacto en la selección de estas secuencias se debe a los costos por concepto de servicios de calentamiento y enfriamiento.

Los resultados de este problema pueden verse en el Apéndice C.

5.3 Obtención de una Secuencia Integrada Térmicamente.

Como ejemplo, se obtuvo una secuencia integrada térmicamente para la mezcla siguiente:

Clave	Componente	Flujo (kgmol/hr)
A	Etano	100
B	Propano	200
C	n-Butano	300

Se generaron 4 columnas diferentes. Nuevamente se detectó la necesidad de refrigeración, así que realizaron las mismas suposiciones anteriores.

Así, se encontraron 58 ecuaciones, 61 variables, 183 elementos no cero y 20 variables discretas. La secuencia y los resultados se ilustran en la Fig. 5.4. El costo total de esta secuencia es de N\$258,630,000 por año.

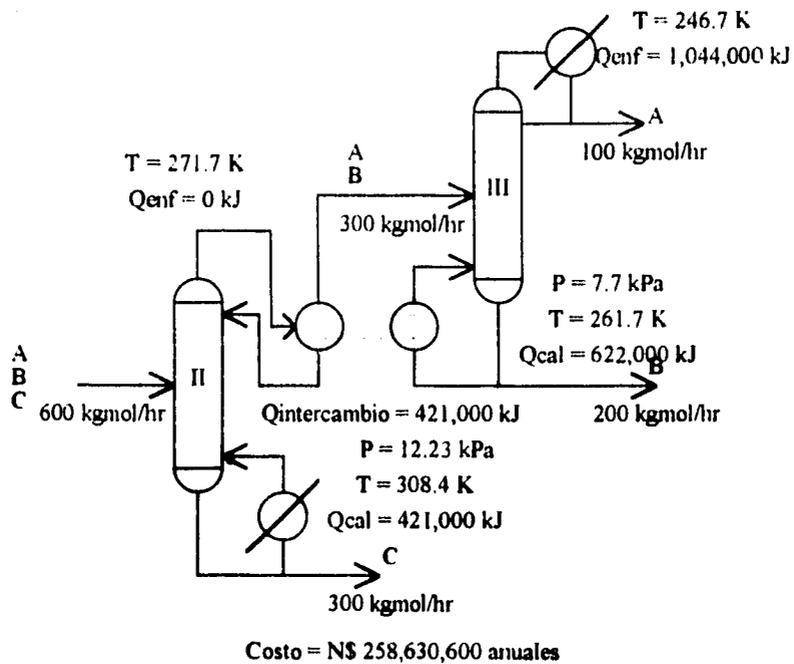


Figura 5. 4 Secuencia óptima integrada térmicamente.

Como punto de comparación, el mismo problema sin integración térmica produce la misma secuencia, pero con un costo de N\$361,506,000 anuales, lo que equivale a un gasto extra del 39.8%. Hay que notar que estamos hablando de alrededor de 102 millones de nuevos pesos por año, lo que es una suma bastante considerable.

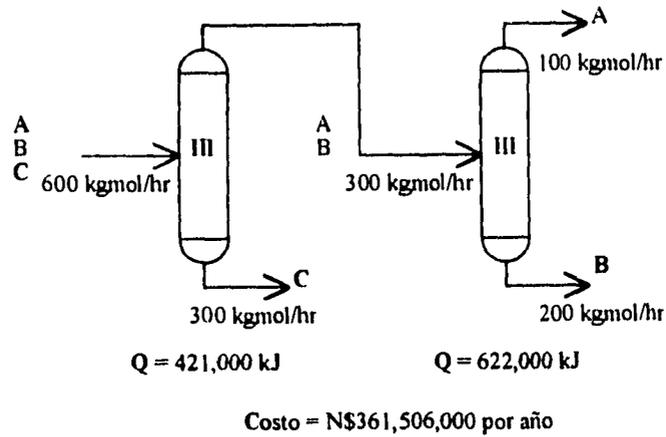


Figura 5. 5 Secuencia óptima sin integración térmica.

Los resultados de este problema pueden verse en el Apéndice C.

Referencias:

ANDRECOVICH, Mark James. Synthesis of Heat Integrated Distillation Sequences. (Ph. D. Dissertation), Carnegie-Mellon University, U.S.A., 1983

BROOKE, Anthony, KENDRICK, David & MEERAUS, Alexander. GAMS. A User's Guide. Scientific Press, U.S.A., 1988.

GUTHRIE, K. M. "Capital Cost Estimating.", Chemical Engineering, pp. 114-124, March 24, 1969

HENLEY, Ernest J. Y SEADER J.D. Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química. (Trad. Fidel Mato Vázquez), De Repla, México, 1990.

MORARI, Manfred & GROSSMAN, Ignacio E. CACHE Process Design Case Studies. (Vol. 6: Chemical Engineering Optimization Models with GAMS), Oct. 1991

PAULES, Granville Edward. Synthesis and Analysis of Flexible and Complex Heat-Integrated Distillation Sequences. (Ph. D. Dissertation), Princeton University, U.S.A., 1990

PERRY, Robert H. et al. Biblioteca del Ingeniero Químico. (Vol. 1), 5a. Edición, McGraw-Hill, México D.F., 1987

TREYBAL, Robert E. Mass-Transfer Operations. 3rd Edition, McGraw-Hill, Singapore, 1980.

Capítulo 6

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

6.1 Conclusiones.

Al término del presente trabajo, se llegó a las siguientes conclusiones:

1. Los métodos algorítmicos de optimización son una herramienta muy útil para la síntesis de procesos.
2. La integración térmica de procesos puede desembocar en ahorros substanciales de energía, y por lo tanto, en ahorros económicos importantes.

3. Aunque estos métodos pueden ser el primer paso para la generación de un proceso (de hecho se recomienda), sólo proporciona una idea burda y muy general, que puede ser modificada o desechada cuando se toman en cuenta otros factores ajenos al económico.

4. Estos métodos son sólo una herramienta de ayuda, no la solución final a un problema. Es decir, la decisión y responsabilidad finales siguen, y seguirán siendo del Ingeniero de Proceso.

5. Como los resultados anteriores se basan fundamentalmente en los costos anualizados, una secuencia óptima en este momento, puede no serlo posteriormente, ya que los costos fijos y variables fluctúan con el tiempo, y no necesariamente lo hacen con la misma intensidad.

6. Las síntesis antes mostradas requirieron un gran volumen de datos, lo que nos indica que a mayor grado de control sobre la selección del proceso, mayor es la cantidad de información necesaria.

6.2 Recomendaciones.

Como producto de lo anteriormente expuesto, se recomienda:

1. **Implantar el manejo de la optimización a la par con la enseñanza de la síntesis de procesos en la formación de los alumnos.** Esto permitiría un mejor aprendizaje, ya que se obtendría un conocimiento integrado, más profundo y más real.

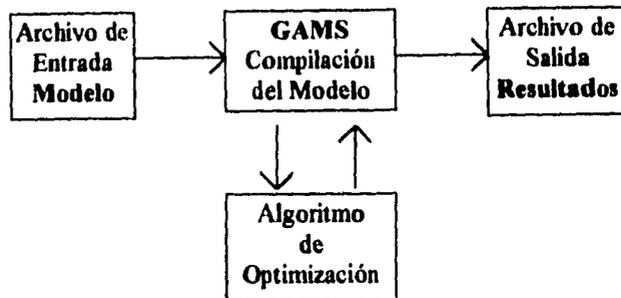
2. Crear una cultura de optimización en todos los niveles, ya que la optimización de procesos nos lleva a ahorros en los ámbitos energético y económico.

3. Extender el presente trabajo a sistemas más complejos de secuencias de separación, como sistemas multiefecto, columnas complejas y operación multiperiodo.

Apéndice A

INTRODUCCIÓN A GAMS

GAMS es un sistema de modelado para optimización, que provee una interfase hacia una gran variedad de algoritmos de solución. Los modelos son suministrados a GAMS por el usuario mediante un archivo, en forma de ecuaciones algebraicas y utilizando un lenguaje de programación de alto nivel. Posteriormente, GAMS compila el modelo y lo enlaza automáticamente con un "solver", es decir, un algoritmo de optimización. Finalmente, el modelo compilado, así como la solución encontrada, son reportadas por GAMS y volcadas en un archivo de salida. El siguiente diagrama ilustra este proceso:



Las convenciones para las extensiones de los archivos son:

Archivo de entrada: Nombre.GMS

Archivo de salida: Nombre.LST

Para compilar un modelo, el comando es simplemente:

GAMS Nombre

Los programas en GAMS consisten en una o más instrucciones que definen estructuras de datos y sus modificaciones, valores iniciales, y relaciones simbólicas (ecuaciones). Debido a que no hay un orden fijo en el que las instrucciones deben aparecer, el momento en el que las modificaciones de los datos son llevadas a cabo es importante. Los símbolos deben ser declarados antes de que se utilicen, y deben tener valores asignados antes de que puedan ser referidos en instrucciones de asignamiento. La estructura de un programa de GAMS se ilustra a continuación.

```

Instrucción;
Instrucción;
Programa GAMS .....;
.....;
.....;
Instrucción

```

Cada instrucción finaliza con un punto y coma, excepto la última, donde el signo de puntuación es opcional.

GAMS permite el uso de formato libre, esto es, que una instrucción puede aparecer en cualquier lugar de una línea, múltiples instrucciones pueden aparecer en una línea o una instrucción puede abarcar cualquier número de líneas.

GAMS no es sensible al uso de mayúsculas y minúsculas, por lo que pueden usarse en cualquier combinación. Una línea permite hasta 120 caracteres, y líneas en blanco pueden insertarse libremente para una mejor lectura y comprensión del modelo.

No todas las líneas son parte del lenguaje GAMS: Existen dos símbolos especiales, el asterisco "*" y el signo de pesos "\$", que pueden utilizarse en la primera posición de la línea para indicar que no es del lenguaje. Un asterisco indica que la línea no será procesada, pero será tratada como comentario. El signo de pesos indica que el resto de la línea contiene opciones del compilador.

Cada instrucción en GAMS está clasificada dentro de dos grupos:

1. Instrucciones de declaración y definición.

2. Instrucciones de ejecución.

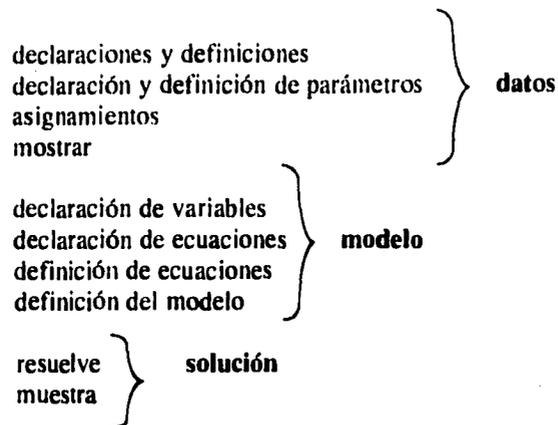
Las instrucciones de declaración describen la clase de símbolos. Con frecuencia, los valores iniciales se dan en una declaración, y entonces se convierte en definición. La especificación de relaciones simbólicas para una ecuación es una definición. Las instrucciones de declaración y definición son:

acrónimo	parámetro	declaración de ecuación
variable	escalar	definición de ecuación
alias	tabla	modelo

Las instrucciones de ejecución son las que llevan a cabo acciones tales como transformación de datos, solución del modelo y generación del reporte. Las instrucciones de ejecución son:

opción	muestra	aborta
asignamiento	ciclo	resuelve

Aunque existe una gran libertad sobre el orden en el que las instrucciones son posicionadas en un programa GAMS, ciertos órdenes son normalmente utilizados. El más común es el siguiente:



En este estilo de organización las declaraciones y definiciones aparecen primero. Después se especifican los datos por medio de las instrucciones parámetro, escalar y tabla. Entonces se define el modelo con las instrucciones variable, declaración de ecuaciones, definición de ecuaciones y modelo. Finalmente, el modelo se resuelve y los resultados se despliegan.

Esta sección tiene como único objetivo el de mostrar las principales características del programa GAMS, para una mejor comprensión de los listados que aparecen en la siguiente sección de este apéndice. No obstante, para un conocimiento más profundo es necesario consultar el manual del usuario de dicho programa (Ver referencias).

Referencias.

BROOKE, Anthony, KENDRICK, David & MEERAUS, Alexander. GAMS. A user's guide. Scientific Press, U.S.A., 1988.

MORARI, Manfred & GROSSMANN, Ignacio E. CACHE Process Design Case Studies. (Vol. 6: Chemical Engineering Optimization Models with GAMS), Oct. 1991.

Apéndice B

PROBLEMAS RESUELTOS Y CÓDIGOS GAMS

B.1 Red de Intercambio de Calor.

A continuación se presenta el listado correspondiente al problema del mismo nombre de la sección 3.3.

```
$offsymxref offsymlist
* archivo: TRANS.gms
* Modelo LP de transbordo para combinaciones restringidas
* Referencia: Papoulias, S.A. and I.E. Grossmann, "A Structural Optimization
Approach in Process Synthesis. II: Heat Recovery Networks", Computers
and
Chemical Engineering, 7, 707 (1983)

option limrow=0, limcol=0, solprint=off;

***** Datos de entrada

SETS H corrientes calientes          /1*4/
      C corrientes frias              /1*2/
      S servicios de calentamiento    /1*3/
```

W servicios de enfriamiento /1*1/
K intervalos de temperatura (necesario solo limite superior) /1*50/;

PARAMETER FCPH(H) FCp de corrientes calientes
/ 1 20
2 40
3 70
4 94 /;

PARAMETER FCPC(C) FCp de corrientes frías
/ 1 50
2 180 /;

PARAMETER TINH(H) T de entrada de corrientes calientes
/ 1 700
2 600
3 460
4 360 /;

PARAMETER TOUTH(H) T de salida de corrientes calientes
/ 1 420
2 310
3 310
4 310 /;

PARAMETER TINC(C) T de entrada de corrientes frías
/ 1 350
2 300 /;

PARAMETER TOUTC(C) T de salida de corrientes frías
/ 1 650
2 400 /;

PARAMETER TINS(S) T de servicios de calentamiento
/ 1 750
2 510
3 410 /;

PARAMETER TINW(W) T del servicio de enfriamiento
/ 1 300 /;

PARAMETER DT acercamiento minimo de T's ;
DT=10;

PARAMETER CS(S) costos de servicios de calentamiento
/ 1 120
2 90
3 70 /;

PARAMETER CW(W) costo del servicio de calentamiento
/ 1 15 /;

PARAMETER AS(S) disponibilidad de servicios de calentamiento
/ 1 INF
2 1000
3 500 /;

PARAMETER AW(W) disponibilidad del servicio de enfriamiento
/ 1 INF /;

*==== limites para el intercambio de calor
*==== (combinaciones impuestas y restringidas)
PARAMETER QLHC(H,C) Limite inferior entre corrientes fria y caliente ;
PARAMETER QUHC(H,C) Limite superior entre corrientes fria y caliente ;
PARAMETER QLHW(H,W) Limite inferior entre servicios de enf. y cal. ;
PARAMETER QUHW(H,W) Limite superior entre servicios de enf. y cal. ;
PARAMETER QLCS(C,S) Limite inferior entre corriente fria y serv.de cal. ;

PARAMETER QUCS(C,S) Limite superior entre corriente fria y serv.de cal. ;

QLHC(H,C) = 0 ;
QUHC(H,C) = INF ; QUHC('1','1') = 0 ;
QLHW(H,w) = 0 ;
QUHW(H,W) = INF ;
QLCS(C,S) = 0 ;
OUCS(C,S) = INF ;

* esto tambien podria haber sido insertado en forma de tabla ...
* combinaciones impuestas

* table QLHC(H,C)

* 1 2 3 4

* 1

* 2

* 3

* 4

* 5

*evaluacion de parametros, definicion de modelo y solucion

*----- evaluacion de parametros

*--- intervalos de temperatura

PARAMETERS HK(H,K)

HKP(H,K)

CK(C,K)

SK(S,K)

SKP(S,K)

WK(W,K)

QH(H,K) contenidos calorificos de corrientes calientes

QC(C,K) contenidos calorificos de corrientes frias

QHT(H) contenido calorifico total de corriente caliente

QCT(C) contenido calorifico total de corriente fria

TH(K) intervalo de temperatura (caliente)

TC(K) intervalo de temperatura (frio) ;

PARAMETERS IS(S),IW(W),IH(H),IC(C) ;

* cuando estas se convierten en 1, la T correspondiente de entrada

* ha sido considerada para la evaluacion de intervalos

IS(S)=0;IW(W)=0;IH(H)=0;IC(C)=0;

PARAMETER KM intervalos de temperatura actuales ;

PARAMETERS END,AUX;

KM=0;END=0;

*encuentra las T max y min de entrada

PARAMETERS HMAX, HMIN, CMAX, CMIN, TMAX, TMIN;

HMAX = SMAX(H,TINH(H)); CMAX = SMAX(C,TOUTC(C)) + DT ;

HMIN = SMIN(H,TOUTH(H)); CMIN = SMIN(C,TINC(C)) + DT ;

TMAX = MAX(HMAX, CMAX) ; TMIN = MIN(HMIN, CMIN) ;

*servicios encima de Tmax o bajo Tmin no definen intervalo

IS(S) \$(TINS(S) GE TMAX) = 1; IW(W) \$(TINW(W)+DT LE TMIN)=1;

LOOP (K \$(NOT END),

```

AUX=MAX( SMAX ( S $(NOT IS(S)), TINS(S)),
        SMAX ( H $(NOT IH(H)), TINH(H)),
        SMAX ( W $(NOT IW(W)), TINW(W)+DT),
        SMAX ( C $(NOT IC(C)), TINC(C)+DT),
        TMAX, TMIN
        );
TMAX=0;
TH(K)=AUX;
TC(K)=TH(K)-DT;
IS(S) $(TINS(S) EQ AUX)=1;
IW(W) $(TINW(W) EQ TC(K))=1;
IH(H) $(TINH(H) EQ AUX)=1;
IC(C) $(TINC(C) EQ TC(K))=1;
IF ( (AUX EQ TMIN),
    END=1; KM=ORD(K)-1;
);
);
);

*=== contenidos calorificos de las corrientes
LOOP ( K $ (ORD(K) LE KM),
  HK(H,K)=1 $((TINH(H) GE TH(K)) AND (TOUTH(H) LT TH(K)));
  HKP(H,K)=1 $(TINH(H) GE TH(K));
  CK(C,K)=1 $(((TINC(C) LE TC(K+1)) AND (TOUTC(C) GT TC(K+1))) OR
    ((TINC(C) EQ TMIN-DT) AND (ORD(K) EQ KM)));
  SK(S,K)=1 $((TINS(S) EQ TH(K)) OR
    ((TINS(S) GT TH(K)) AND (ORD(K) EQ 1)));
  SKP(S,K)=1 $(TINS(S) GE TH(K));
  WK(W,K)=1 $((TINW(W) EQ TC(K+1)) OR
    ((TINW(W) LE TMIN-DT) AND (ORD(K) EQ KM)));
);
LOOP ( K,
  LOOP ( H $ HK(H,K),
    QH(H,K)=FCPH(H) * (TH(K) - TH(K+1));
    IF ( ((TOUTH(H) GT TH(K+1)) OR
      ((TOUTH(H) GT TMIN) AND (ORD(K) EQ KM))),
      QH(H,K)=FCPH(H) * (TH(K) - TOUTH(H));
    );
  );
  LOOP ( C $ CK(C,K),
    QC(C,K)=FCPC(C) * (TC(K) - TC(K+1));
    IF ((TOUTC(C) LT TC(K)), QC(C,K)=FCPC(C) * (TOUTC(C) - TC(K+1)));
    IF ( ((TOUTC(C) LT TC(K)) AND (ORD(K) EQ KM)),
      QC(C,K)=FCPC(C) * (TOUTC(C) - (TMIN-DT));
    );
  );
);
);
QHT(H) = FCPH(H) * ( TINH(H) - TOUTH(H) );
QCT(C) = FCPC(C) * ( TOUTC(C) - TINC(C) );

* ===== model
POSITIVE VARIABLES
  RH(H,K)      calor residual de corr. cal. H saliendo del intervalo
K

```

RS(S,K) calor residual de serv. de cal. S saliendo del inter-
 valo K
 QHC(H,C,K) intercambio de calor entre cal. H y fria C en inter-
 valo K
 QHW(H,W,K) intercambio entre ca. H y serv. frio W en intervalo K
 QSC(S,C,K) intercambio entre serv. cal. S y fria C en intervalo
 K
 QS(S) carga del servicio de calentamiento S
 QW(W) carga del servicio de enfriamiento W ;

VARIABLE UTILITY costo total de servicios ;

EQUATIONS

OBJ1 funcion objetivo para el consumo minimo de servicios
 HBAL(H,K) BALANCES DE CALOR corriente caliente
 CBAL(C,K) BALANCES DE CALOR corriente fria
 SBAL(S,K) BALANCES DE CALOR servicios de calentamiento
 WBAL(W,K) BALANCES DE CALOR servicios de enfriamiento
 hcIMPUES(H,C) combinacion impuesta entre corr. fria y caliente
 hcRESTRING(H,C) restriccion entre corr. fria y caliente
 hwIMPUES(H,W) combinacion impuesta entre corr. caliente y serv.
 enf.
 hwRESTRING(H,W) restriccion entre corr. caliente y serv.enf.
 csIMPUES(C,S) combinacion impuesta entre corr. fria y serv. cal.
 csRESTRING(C,S) restriccion entre corr. fria y serv. cal. ;

OBJ1 .. UTILITY =E= SUM (S, CS(S)*QS(S)) + SUM (W, CW(W)*QW(W)) ;

HBAL(H,K) \$ ((TINH(H) GE TH(K)) AND (ORD(K) LE KM)) ..
 RH(H,K) - (RH(H,K-1) \$ HKP(H,K-1))
 + SUM (C \$ CK(C,K), QHC(H,C,K))
 + SUM (W \$ WK(W,K), QHW(H,W,K)) =E= QH(H,K);

RH.FX(H,K) \$ (ORD(K) EQ KM) = 0;

SBAL(S,K) \$ ((TINS(S) GE TH(K)) AND (ORD(K) LE KM)) ..
 RS(S,K) - (RS(S,K-1) \$ SKP(S,K-1))
 + SUM (C \$ CK(C,K), QSC(S,C,K))
 - (QS(S) \$ SK(S,K)) =E= 0 ;

RS.FX(S,K) \$ (ORD(K) EQ KM) = 0;

CBAL(C,K) \$ CK(C,K) ..
 SUM (H \$ HKP(H,K), QHC(H,C,K)) +
 SUM (S \$ SKP(S,K), QSC(S,C,K)) =E= QC(C,K) ;

WBAL(W,K) \$ WK(W,K) .. SUM (H \$ HKP(H,K), QHW(H,W,K)) =E= QW(W) ;

QS.UP(S) \$ (AS(S) LT INF)=AS(S);

QW.UP(W) \$ (AW(W) LT INF)=AW(W);

hcIMPUES(H,C) \$ QLHC(H,C) ..
 QLHC(H,C) =L=

```

SUM ( K $ ( (ORD(K) LE KM) AND CK(C,K) ), QHC(H,C,K) ) ;

hcRESTRING(H,C) $ (QUHC(H,C) LT INF) ..
SUM ( K $ ( (ORD(K) LE KM) AND CK(C,K) ), QHC(H,C,K) )
=L= QUHC(H,C) ;

hwIMPUES(H,W) $ QLHW(H,W) ..
QLHW(H,W) =L=
SUM ( K $ ( (ORD(K) LE KM) AND WK(W,K) ), QHW(H,W,K) ) ;

hwRESTRING(H,W) $ (QUHW(H,W) LT INF) ..
SUM ( K $ ( (ORD(K) LE KM) AND WK(W,K) ), QHW(H,W,K) )
=L= QUHW(H,W) ;

csIMPUES(C,S) $ QLCS(C,S) ..
QLCS(C,S) =L=
SUM ( K $ ( (ORD(K) LE KM) AND CK(C,K) ), QSC(S,C,K) ) ;

csRESTRING(C,S) $ (QUCS(C,S) LT INF) ..
SUM ( K $ ( (ORD(K) LE KM) AND CK(C,K) ), QSC(S,C,K) )
=L= QUCS(C,S) ;

MODEL TRANS / ALL /;

SOLVE TRANS MINIMIZING UTILITY USING LP;

```

B.2 Localización del Plato de Alimentación Óptimo.

A continuación se presenta el listado correspondiente al problema del mismo nombre de la sección 3.3.

```

$offupper offsymxref offsymlist
$title Localizacion del Plato Optimo de Alimentacion
$$title Sistema --- Benceno - Tolueno a 1 bar

Set J Componentes / Benceno , Tolueno /;

Table PRCON (J,*) Propiedades Fisicas Basicas
mm Tb Tc Pc Omega Liq-den Tden
Benceno 78.114 353.2 562.2 48.9 0.212 0.885
289

```

Tolueno 92.141 383.8 591.8 41.0 0.263 0.867
293

Table VPCON(J,*) Presion de vapor y restricciones

	A	B	C	D	TMIN
Benceno	-6.98273	1.33213	-2.62863	-3.33399	288
Tolueno	-7.28607	1.38091	-2.83433	-2.79168	309

Table CPCON(J,*) Constantes del Cp

	A	B	C	D
Benceno	-3.392e+1	4.739e-1	-3.017e-4	7.130e-8
Tolueno	-2.435e+1	5.125e-1	-2.765e-4	4.911e-8

Scalars Treb T del rehervidor
Tbot T del ultimo plato
Ttop T del primer plato
Tcon T del condensador ;
treb = 380; tbot = 375; ttop = 360; tcon = 355;
Scalar rg Constante universal de los gases /8.314/ ;
Parameters h0(j) Constante de integracion para la entalpia ;

$$h0(j) = tcon * (cpcn(j,'a') + tcon * (cpcn(j,'b')/2 + tcon*(cpcn(j,'c')/3 + tcon *cpcn(j,'d')/4))) ;$$

\$ontext

Seccion 2

Condicion Termica de la Alimentacion

\$offtext

Scalars F Moles totales de la alimentacion
tf T de la alimentacion (en kelvins)
pf P de la alimentacion
vf Fraccion de vapor en la alimentacion(antes de la expansion)
Shf Entalpia especifica de la alimentacion
preb P en el rehervidor
pbot P en el fondo
ptop P en el domo
pcon P en el condensador ;
f = 100 ; preb = 1.2 ; pbot = 1.12 ; ptop = 1.08; pcon = 1.05;
pf = 1.12 ; vf = 0.0 ;

Parameters xf(j) fracciones molares en la alimentacion
/ Benceno 0.70
Tolueno 0.30 / ;

\$ontext

- * Asume que la alimentacion esta en su punto de burbuja
- * Determinacion de la T de burbuja

```

Variable tbub, z1 ;
Equation bubble , obj1 ;

bubble..      sum ( j, xf(j)* prcon(j,'pc')* exp ( prcon(j,'tc')/tbub
*
      ( vpcon(j,'a') * (1-tbub/prcon(j,'tc') )
+ vpcon(j,'b')*(1-tbub/prcon(j,'tc'))**1.5
+ vpcon(j,'c')*(1-tbub/prcon(j,'tc'))**3
+ vpcon(j,'d')*(1-tbub/prcon(j,'tc'))**6 ) ) / pf ) =e= 1 ;

obj1..          z1 =e= 1;

tbub.lo = prcon('Benceno','tb') ;
      tbub.up = prcon('Tolueno','tb') ;
      tbub.l = 0.5 *(tbub.lo +tbub.up) ;

model bubt /all/ ;
      solve bubt minimizing z1 using nlp ;

$offtext

*$ontext
* Nota : La solucion del paso anterior indica tbub = 363.368

      tf = 363.368 ;

      shf = sum ( j, xf(j) *
( tf * ( cpcon(j,'a') + tf * ( cpcon(j,'b')/2
+ tf*( cpcon(j,'c')/3 + tf *cpcon(j,'d')/4 ))) - h0(j)
+ rg * prcon(j,'tc') *
      ( vpcon(j,'a') * (1-tf/prcon(j,'tc') )
+ vpcon(j,'b')*(1-tf/prcon(j,'tc'))**1.5
+ vpcon(j,'c')*(1-tf/prcon(j,'tc'))**3
+ vpcon(j,'d')*(1-tf/prcon(j,'tc'))**6 )
+ rg * tf * ( vpcon(j,'a')
+ 1.5 * vpcon(j,'b')*(1-tf/prcon(j,'tc'))**0.5
+ 3 * vpcon(j,'c')*(1-tf/prcon(j,'tc'))**2

```

```
+ 6 * vpcon(j,'d')*(1-tf/prcon(j,'tc'))**5 ) ) ) ;
```

```
display shf ;
```

```
*$offtext
```

```
$ontext
```

Seccion 3

Ecuaciones del Modelo

Descripcion de la columna

Nota: Las etapas estan numeradas de abajo hacia arriba.
El rehervidor es la etapa 1 y el condensador la ultima

```
$offtext
```

```
sets      i      etapas  /1*9 /
reb(i)    rehervidor
con(i)    condensador
col(i)    etapas en la col
floc(i)   posible localizacion del plato de alimentacion / 2*8 /
abovef(i) etapas sobre la alimentacion
belowf(i) etapas abajo ;
reb(i) = yes$(ord(i) eq 1) ;
con(i) = yes$(ord(i) eq card(i)) ;
col(i) = yes - (reb(i)+con(i)) ;
```

```
Parameter p(i)   presion prevaleciente en el plato i ;
p(i)$reb(i) = preb ;
p(i)$con(i) = pcon ;
p(i)$col(i) =
pbot - ((pbot-ptop)/(card(i)-1-2)) * (ord(i)-2) ;
```

Scalars

h1lo,hlhi,hv1o,hvhi,hscale limites en la entalpia y escala ;

```
h1lo =  
tcon * ( cpcon('Benceno','a') + tcon * ( cpcon('Benceno','b')/2  
+ tcon*( cpcon('Benceno','c')/3 + tcon *cpcon('Benceno','d')/4 )))  
- h0('Benceno')  
+ rg * prcon('Benceno','tc') *  
( vpcon('Benceno','a') * (1-tcon/prcon('Benceno','tc')) )  
+ vpcon('Benceno','b')*(1-tcon/prcon('Benceno','tc'))**1.5  
+ vpcon('Benceno','c')*(1-tcon/prcon('Benceno','tc'))**3  
+ vpcon('Benceno','d')*(1-tcon/prcon('Benceno','tc'))**6 )  
+ rg * tcon * ( vpcon('Benceno','a')  
+ 1.5 * vpcon('Benceno','b')*(1-tcon/prcon('Benceno','tc'))**0.5  
+ 3 * vpcon('Benceno','c')*(1-tcon/prcon('Benceno','tc'))**2  
+ 6 * vpcon('Benceno','d')*(1-tcon/prcon('Benceno','tc'))**5 ) ;
```

```
hlhi =  
treb * ( cpcon('Tolueno','a') + treb * ( cpcon('Tolueno','b')/2  
+ treb*( cpcon('Tolueno','c')/3 + treb *cpcon('Tolueno','d')/4 )))  
- h0('Tolueno')  
+ rg * prcon('Tolueno','tc') *  
( vpcon('Tolueno','a') * (1-treb/prcon('Tolueno','tc')) )  
+ vpcon('Tolueno','b')*(1-treb/prcon('Tolueno','tc'))**1.5  
+ vpcon('Tolueno','c')*(1-treb/prcon('Tolueno','tc'))**3  
+ vpcon('Tolueno','d')*(1-treb/prcon('Tolueno','tc'))**6 )  
+ rg * treb * ( vpcon('Tolueno','a')
```

```

+ 1.5 * vpcon('Tolueno','b')*(1-treb/prcon('Tolueno','tc'))**0.5
+ 3 * vpcon('Tolueno','c')*(1-treb/prcon('Tolueno','tc'))**2
+ 6 * vpcon('Tolueno','d')*(1-treb/prcon('Tolueno','tc'))**5 ) ;

```

hvlo =

```

tcon * ( cpcon('Benceno','a') + tcon * ( cpcon('Benceno','b')/2
+ tcon*( cpcon('Benceno','c')/3 + tcon *cpcon('Benceno','d')/4 ))
- h0('Benceno') ;

```

hvhi =

```

treb * ( cpcon('Tolueno','a') + treb * ( cpcon('Tolueno','b')/2
+ treb*( cpcon('Tolueno','c')/3 + treb *cpcon('Tolueno','d')/4 ))
- h0('Tolueno') ;

```

```

hscale = max( abs(hllo), abs(hlhi), abs(hvlo), abs(hvhi) ) ;

```

Positive Variables

```

x(i,j)  fraccion mol del componente j en el liquido en el
plato i.

y(i,j)  fraccion mol del componente j en el vapor en el plato
i.

l(i)    flujo molar de liquido dejando el plato i

v(i)    flujo molar de vapor dejando el plato i

t(i)    Temperatura del plato i

feed(i) corriente de entrada al plato i

r       relacion de reflujo

p1      flujo de producto de domo

p2      flujo de producto de fondo;

```

variables

hl(i) entalpia molar de liquido en el plato i.
 hv(i) entalpia molar de liquido en el plato i. ;

Equations

phe(i,j) relacion en la fase de equilibrio
 errk(i) funcion error
 cmb(i,j) balance de masa del componente(1<i<n)
 cmb1(i,j) balance de masa del componente(i=1)
 cmbn(i,j) balance de masa del componente(i=n)
 tmb(i) balance de masa total en la columna
 tmb1(i) balance de masa total en el rehervidor
 tmbn(i) balance de masa total en el condensador
 defln(i) definicion de l(n)
 defp2(i) definicion de p2

 defhl(i) definicion de hl(i)
 defhv(i) definicion de hv(i)
 eb(i) balance de entalpia

 purcon restriccion de pureza
 sumf suma de alimentaciones ;

$$\begin{aligned}
 & \text{phe}(i,j) \dots y(i,j) * p(i) - x(i,j) * \text{prcon}(j, 'pc') * \\
 & \quad \exp (\text{prcon}(j, 'tc') / t(i) * \\
 & \quad (\text{vpcon}(j, 'a') * (1-t(i) / \text{prcon}(j, 'tc'))) \\
 & + \text{vpcon}(j, 'b') * (1-t(i) / \text{prcon}(j, 'tc')) ** 1.5 \\
 & + \text{vpcon}(j, 'c') * (1-t(i) / \text{prcon}(j, 'tc')) ** 3 \\
 & + \text{vpcon}(j, 'd') * (1-t(i) / \text{prcon}(j, 'tc')) ** 6)) \quad =e= 0 ;
 \end{aligned}$$

```

errk(i)..    sum(j,y(i,j)) - sum(j,x(i,j))  =e= 0.0 ;

cmb(i,j)$col(i)..
    l(i)*x(i,j) + v(i) *y(i,j) - l(i+1)*x(i+1,j) -v(i-1)*y(i-1,j)
    - (Feed(i)*xf(j))$floc(i)  =e= 0 ;

cmb1(i,j)$reb(i)..
    l(i)*x(i,j) +v(i)*y(i,j) - l(i+1)*x(i+1,j) =e= 0 ;

cmbn(i,j)$con(i)..
    (l(i)+ p1) * x(i,j) - v(i-1)*y(i-1,j)  =e= 0 ;

tmb(i)$col(i)..
    l(i) +v(i) - l(i+1) -v(i-1) - feed(i)$floc(i)  =e= 0 ;

tmb1(i)$reb(i)..          l(i)+v(i)- l(i+1) =e= 0 ;

tmbn(i)$con(i)..          (l(i) +p1) - v(i-1) =e= 0 ;

defln(i)$con(i)..    l(i)=e= r * p1 ;

defp2(i)$reb(i)..    l(i)- p2 =e= 0 ;

defhl(i).. h1(i)-sum( j, x(i,j) *
( t(i) * ( cpcon(j,'a') + t(i) * ( cpcon(j,'b')/2
+ t(i)*( cpcon(j,'c')/3 + t(i) *cpcon(j,'d')/4 )) - h0(j)
+ rg * prcon(j,'tc') *
    ( vpcon(j,'a') * (1-t(i)/prcon(j,'tc') )
+ vpcon(j,'b')*(1-t(i)/prcon(j,'tc'))**1.5
+ vpcon(j,'c')*(1-t(i)/prcon(j,'tc'))**3
+ vpcon(j,'d')*(1-t(i)/prcon(j,'tc'))**6 )
+ rg * t(i) * ( vpcon(j,'a')
+ 1.5 * vpcon(j,'b')*(1-t(i)/prcon(j,'tc'))**0.5

```

```

+ 3 * vpcon(j,'c')*(1-t(i)/prcon(j,'tc'))**2
+ 6 * vpcon(j,'d')*(1-t(i)/prcon(j,'tc'))**5 ) ) / hscale =e= 0
;

```

```

defhv(i).. hv(i) - sum( j, y(i,j)*
( t(i) * ( cpcon(j,'a') + t(i) * ( cpcon(j,'b')/2
+ t(i)*( cpcon(j,'c')/3 + t(i) *cpcon(j,'d')/4 )))-h0(j)) ) / hscale =e=
0 ;

```

```

eb(i)$col(i)..
l(i)*hl(i) +v(i)*hv(i) - l(i+1)*hl(i+1) - v(i-1)*hv(i-1)
- ( Feed(i) * shf/hscale) $floc(i) =e= 0 ;

```

```

purcon.. x('9','Benceno') =g= 0.95 ;

```

```

sumf.. sum(i$floc(i), feed(i)) =e= f ;

```

* Initialization de variables

```

r.l = 0.45 ; r.up = 0.95 ; r.lo = 0.1 ;
p1.l = 60 ; p1.up = 80; p1.lo = 50 ;
p2.l = 40 ; p2.up =50 ; p2.lo = 20 ;
x.up(i,j) = 1.0 ; y.up(i,j) = 1.0 ;
set ifeed(i) /6/ ;
feed.l(i)$ifeed(i) = f ;
belowf(i) = yes $ (ord(i) le 6 ) ;
abovef(i) = yes -belowf(i) ;
v.l(i) = ((r.l + 1) * p1.l) ;
l.l(i)$reb(i) = p2.l ;

```

```

l.l(i)$belowf(i)-reb(i) = p1.l * r.l + (1-vf)*F ;
l.l(i)$abovef(i) = p1.l * r.l ;

t.l(i)$reb(i) = treb ;
t.l(i)$con(i) = tcon ;
t.l(i)$col(i) = tbot + (ttop -tbot) *(ord(i)-2)/(card(i)-1-2) ;

t.lo(i) = tcon - 10 ; t.up(i) = treb + 10 ;
x.l(i,'Benceno') =0.90 - 0.5 * (ord(i)- card(i))/(1-card(i));
x.l(i,'Tolueno') = 1 - x.l(i,'Benceno') ;
y.l(i,'Benceno') =1.0 - 0.8*(ord(i) -card(i))/(1-card(i)) ;
y.l(i,'Tolueno') = 1 - y.l(i,'Benceno') ;

h1.l(i) =
sum( j, x.l(i,j) *
( t.l(i) * ( cpcon(j,'a') + t.l(i) * ( cpcon(j,'b')/2
+ t.l(i)*( cpcon(j,'c')/3 + t.l(i) *cpcon(j,'d')/4 ))) - h0(j)
+ rg * prcon(j,'tc') *
( vpcon(j,'a') * (1-t.l(i)/prcon(j,'tc')) )
+ vpcon(j,'b')*(1-t.l(i)/prcon(j,'tc'))**1.5
+ vpcon(j,'c')*(1-t.l(i)/prcon(j,'tc'))**3
+ vpcon(j,'d')*(1-t.l(i)/prcon(j,'tc'))**6 )
+ rg * t.l(i) * ( vpcon(j,'a')
+ 1.5 * vpcon(j,'b')*(1-t.l(i)/prcon(j,'tc'))**0.5
+ 3 * vpcon(j,'c')*(1-t.l(i)/prcon(j,'tc'))**2
+ 6 * vpcon(j,'d')*(1-t.l(i)/prcon(j,'tc'))**5 ) ) / hscale ;

hv.l(i) =

```

```

sum( j, y.l(i,j)*
( t.l(i) * ( cpcon(j,'a') + t.l(i) * ( cpcon(j,'b')/2
+ t.l(i)*( cpcon(j,'c')/3 + t.l(i) *cpcon(j,'d')/4 ))) - h0(j)))/ hscale
;

hl.lo(i) = ( 1 - 0.5*sign(hllo))*hllo/ hscale ;
hv.lo(i) = ( 1 - 0.5*sign(hvlo))*hvlo/ hscale ;
hl.up(i) = ( 1 + 0.5*sign(hlhi))* hlhi/ hscale ;
hv.up(i)= ( 1 + 0.5*sign(hvhi))* hvhi/ hscale ;

* variables adicionales y ecuaciones para el problema;

Binary variables  yf(i)  ;
Variable  zf  ;
Equations  sumb          suma de variables binarias
           confeed(i)   restriccion de la alimentacion
           obj2         segunda funcion objetivo  ;

sumb..      sum(i$floc(i),yf(i)) =e= 1 ;
confeed(i)$floc(i)..  feed(i) - f*yf(i) =l= 0 ;
obj2..      zf =e= p1 - 50 * r ;
zf.up = 100 ;

yf.l(i)$floc(i) = 1.0/7.0 ;
feed.l(i)$floc(i) = f/7.0 ;
feed.up(i)$floc(i) = f ;

Model  column  optimization case /all/ ;

```

B.3 Secuencias de Reacción.

Definición del problema.

Asumamos que se necesita producir acetona. Las materias primas disponibles son etanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) y metano (CH_4). La Tabla B.3 contiene las reacciones químicas candidatas a ser utilizadas. Asumiendo que el catalizador requerido para todas las reacciones y que todos los químicos inorgánicos requeridos están disponibles, con excepción del CrO_3 y el O_3 , determinar si es posible manufacturar acetona a partir de los materiales propuestos. Si es posible, especificar la secuencia de reacción.

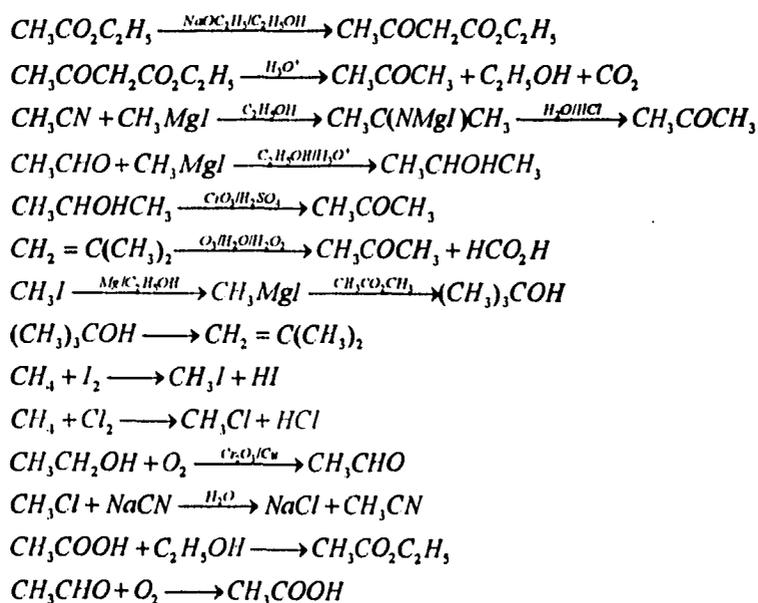


Tabla B. 1 Base de datos de reacciones candidatas.

Planteamiento de la solución.

Dada la lista anterior de posibles reacciones químicas, debemos verificar si la acetona puede ser sintetizada a partir del conjunto dado de catalizadores y materias primas. Para poder desarrollar este procedimiento de inferencia usando programación matemática, primero se deben expresar todas las reacciones en la forma de proposiciones lógicas, donde los operadores básicos son \vee (o), \wedge (y), \Rightarrow (implicación) y \neg (negación).

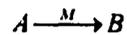
Por ejemplo:



se expresa como

$$A \wedge B \Rightarrow C \wedge D$$

Similarmente, para una reacción con catalizador, decimos



y se expresa como

$$A \wedge M \Rightarrow B$$

Cada una de estas expresiones en lógica proposicional son convertidas en su *forma normal de conjuntos* correspondiente, mediante el procedimiento de Clocksin y Mellish:

1. Remover implicaciones, basados en el hecho de que

$$A \Rightarrow B \text{ es equivalente a } \neg A \vee B$$

2. Mover la negación hacia adentro, utilizando las leyes de DeMorgan:

$$\neg(A \wedge B) \Leftrightarrow (\neg A) \vee (\neg B)$$

$$\neg(A \vee B) \Leftrightarrow (\neg A) \wedge (\neg B)$$

3. Recursivamente, distribuir el "O" sobre el "Y":

$$(A \wedge B) \vee C \Leftrightarrow (A \vee C) \wedge (B \vee C)$$

Como ejemplo, consideremos la siguiente expresión:

$$A \wedge B \Rightarrow C \wedge D$$

que puede ser convertida a su forma normal de conjuntos correspondiente a través de los siguientes pasos intermedios

$$\begin{aligned} & \neg(A \wedge B) \vee (C \wedge D) \\ & \neg A \vee \neg B \vee (C \wedge D) \\ & (\neg A \vee \neg B \vee C) \wedge (\neg A \vee \neg B \vee D) \end{aligned}$$

Esta es la forma normal de conjuntos. Cada término entre paréntesis es llamado *cláusula*.

Ahora, asociamos un variable binaria con cada variable booleana, de manera que los valores de "cierto" y "falso" de la variable booleana correspondan a los valores de 1 y 0 respectivamente, para la variable binaria.

Cada cláusula es representada como una desigualdad matemática lineal y el conjunto de desigualdades que representa a todas las cláusulas en la forma normal de conjuntos define la relación lógica. La conversión de cada cláusula a su forma lineal correspondiente se lleva a cabo mediante la suma de todas las variables en la cláusula (en caso de negación, usamos $1-y$, donde y es la variable binaria correspondiente) y especificando el resultado de la suma mayor o igual a uno.

Por ejemplo:

$$(\neg A \vee \neg B \vee C) \wedge (\neg A \vee \neg B \vee D)$$

se representa mediante las siguientes dos desigualdades lineales:

$$-y_A + 1 - y_B + y_C \geq 1$$

$$-y_A + 1 - y_B + y_D \geq 1$$

las que simplificamos a

$$y_A + y_B - y_C \leq 1$$

$$y_A + y_B - y_D \leq 1$$

Asignando una variable binaria y a cada químico, y convirtiendo todas las reacciones en conjuntos de desigualdades lineales por medio del procedimiento anterior, llegaremos a un conjunto de desigualdades lineales enteras. La inferencia es entonces desarrollada en la construcción del siguiente modelo MILP:

$$Z = \text{Min } y_u$$

sujeto a

$$Ay \geq a$$

$$y \in \{0, 1\}^n$$

$$\text{para } y_r \text{ fijas, } r = 1, \dots, R$$

donde $Ay \geq a$ es el conjunto de desigualdades obtenido por la representación de todas las reacciones posibles en forma de desigualdades matemáticas lineales, y_u representa la variable binaria para el químico a ser sintetizado y y_r representa a las variables binarias para las materias primas y catalizadores disponibles (1 si lo están, 0 si no). El químico siempre puede ser sintetizado si $Z = 1$ después de resolver el problema de programación entera, ya que esto indica la existencia de ese químico. Por otro lado, consideremos el problema como "relajado", donde y ya no es una variable binaria, sino que es continua y varía entre 0 y 1. Es posible obtener conclusiones del problema relajado si la solución

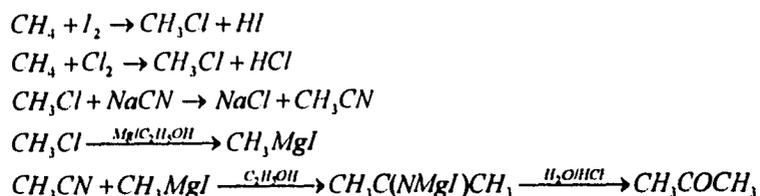
corresponde a alguno de los siguientes tipos, donde $Z_{relajada}$ es la solución óptima al problema con relajamiento:

1. $Z_{relajada} > 0$ El producto siempre puede ser sintetizado.

2. $Z_{relajada} = 0$ Si la solución es fraccional pero única, entonces el producto puede ser sintetizado. De otra forma, no podemos llegar a ninguna conclusión en base al problema relajado y es necesario resolver el problema MILP.

Resultados.

La formulación MILP fue implementada en un programa para GAMS, que contiene las desigualdades lógicas de las 16 reacciones de la Tabla B.3. La función objetivo involucra la minimización de la variable binaria para la acetona. Nótese que un total de 34 químicos, incluyendo catalizadores, están envueltos en el programa. También nótese que las reacciones con catalizadores han sido modeladas como si éstos fueran materias primas. El código ZOOM fue utilizado para resolver el problema como uno LP relajado. Esto se logró utilizando la instrucción RMIP en GAMS. El problema involucra 23 restricciones y 35 variables, de las que 15 están fijas (13 químicos están disponibles y 2 no). Ya que $Z_{relajada} = 1$, la acetona puede sintetizarse a partir de los reactantes disponibles. Salta a la vista que todas las variables y toman valores 0-1 en la solución. A partir de las variables binarias que toman valor de 1 en la solución, podemos determinar la existencia de los químicos, y de ahí, las posibles reacciones. Esto implica que la posible secuencia de reacción es como sigue:



Es interesante descubrir que en la secuencia anterior de reacciones no se requiere el uso de alcohol etílico (sólo su presencia), que es la otra materia prima disponible.

\$offsymxref

* filename: REACTION.GMS

* Referencia: Raman R. and I.E. Grossmann, "Relation Between Logical

* Inference and MILP Modeling for Chemical Process Synthesis"

* Autores: R.Raman y I.E. Grossmann

*Definicion de la existencia de quimicos

VARIABLES

Y01	ch3co2c2h5
Y02	naoc2h5
Y03	c2h5oh
Y04	ch3coch2co2c2h5
Y05	h3o-ion hidronio
Y06	ch3coch3
Y07	co2
Y08	ch3cn
Y09	ch3mgi
Y10	c2h5oc2h5
Y11	ch3c(nmgi)ch3
Y12	h2o
Y13	hcl
Y14	ch3cho
Y15	ch3ch(oh)ch3
Y16	cro3
Y17	h2so4
Y18	ch2=c(ch3)2
Y19	o3
Y20	hco2h
Y21	ch3i
Y22	mg
Y23	ch3co2ch3
Y24	hoc(ch3)3
Y25	ch4
Y26	i2
Y27	hi
Y28	o2
Y29	cr2o3

Y30	ch3cl
Y31	nacn
Y32	nacl
Y33	c12
Y34	ch3cooh
TOTSUM	;

BINARY VARIABLES Y01 , Y02 , Y03 , Y04 , Y05 , Y06 , Y07 , Y08 , Y09 ,
 Y10 ;
 BINARY VARIABLES Y11 , Y12 , Y13 , Y14 , Y15 , Y16 , Y17 , Y18 , Y19 ,
 Y20 ;
 BINARY VARIABLES Y21 , Y22 , Y23 , Y24 , Y25 , Y26 , Y27 , Y28 , Y29 ,
 Y30 ;
 BINARY VARIABLES Y31 , Y32 , Y33 , Y34 ;

EQUATIONS

RXN01
 RXN02
 RXN03
 RXN04
 RXN05
 RXN06
 RXN07
 RXN08
 RXN09
 RXN10
 RXN11
 RXN12
 RXN13
 RXN14
 RXN15
 RXN16
 RXN17
 RXN18
 RXN19
 RXN20
 RXN21
 RXN22
 OBJFN ;

* Representacion matematica de la reacciones
 * en la Tabla B.3.

RXN01..1-Y01+1-Y02+1-Y03+Y04 =G= 1 ;
 RXN02..1-Y04+1-Y05+Y06 =G= 1 ;
 RXN03..1-Y04+1-Y05+Y07 =G= 1 ;
 RXN04..1-Y04+1-Y05+Y03 =G= 1 ;
 RXN05..1-Y08+1-Y09+1-Y10+Y11 =G= 1 ;
 RXN06..1-Y11+1-Y12+1-Y13+Y06 =G= 1 ;
 RXN07..1-Y14+1-Y09+1-Y10+1-Y05+Y15 =G= 1 ;
 RXN08..1-Y15+1-Y16+1-Y17+Y06 =G= 1 ;
 RXN09..1-Y18+1-Y19+1-Y12+Y06 =G= 1 ;
 RXN10..1-Y18+1-Y19+1-Y12+Y20 =G= 1 ;
 RXN11..1-Y21+1-Y22+Y09 =G= 1 ;

RXN12..1-Y09+1-Y23+Y24 =G= 1 ;
RXN13..1-Y24+1-Y17+Y18 =G= 1 ;
RXN14..1-Y25+1-Y26+Y21 =G= 1 ;
RXN15..1-Y25+1-Y26+Y27 =G= 1 ;
RXN16..1-Y03+1-Y28+1-Y29+Y14 =G= 1 ;
RXN17..1-Y30+1-Y31+1-Y12+Y32 =G= 1 ;
RXN18..1-Y30+1-Y31+1-Y12+Y08 =G= 1 ;
RXN19..1-Y25+1-Y33+Y30 =G= 1 ;
RXN20..1-Y25+1-Y33+Y13 =G= 1 ;
RXN21..1-Y34+1-Y03+Y01 =G= 1 ;
RXN22..1-Y14+1-Y28+Y34 =G= 1 ;

* Minimizar Y06 para determinar si la acetona puede ser producida

OBJFN..TOTSUM =E= Y06 ;

* Catalizadores y materias primas disponibles

Y02.FX = 1 ;
Y03.FX = 1 ;
Y05.FX = 1 ;
Y10.FX = 1 ;
Y12.FX = 1 ;
Y13.FX = 1 ;
Y17.FX = 1 ;
Y22.FX = 1 ;
Y25.FX = 1 ;
Y26.FX = 1 ;
Y28.FX = 1 ;
Y31.FX = 1 ;
Y33.FX = 1 ;

* Catalizadores y materias primas NO disponibles

Y16.FX = 0 ;
Y19.FX = 0 ;

MODEL RULEBASE/ALL/;

OPTION LIMCOL = 0 ;
OPTION LIMROW = 0 ;
OPTION SOLPRINT = OFF ;

* Resuelva el modelo MILP como LP relajado

SOLVE RULEBASE MINIMIZING TOTSUM USING RMIP ;

* Usa la instrucción DISPLAY para mostrar el valor de todas las variables

DISPLAY Y01.L , Y02.L , Y03.L , Y04.L , Y05.L , Y06.L , Y07.L ;
DISPLAY Y08.L , Y09.L , Y10.L , Y11.L , Y12.L , Y13.L , Y14.L ;

DISPLAY Y15.L , Y16.L , Y17.L , Y18.L , Y19.L , Y20.L , Y21.L ;
DISPLAY Y22.L , Y23.L , Y24.L , Y25.L , Y26.L , Y27.L , Y28.L ;
DISPLAY Y29.L , Y30.L , Y31.L , Y32.L , Y33.L , Y34.L ;

B.4 Diseño de un Complejo Químico.

Definición del problema.

Una compañía está considerando producir un químico C, que puede ser manufacturado con los procesos II o III, que utilizan como materia prima al químico B. B se puede comprar a otra compañía o producirse con el proceso I, que utiliza a A como materia prima. En base a las especificaciones siguientes, decidir:

- a) ¿Se debería producir el químico C? Si es así, ¿cuánto?
- b) ¿Cuál proceso construir (II y III son mutuamente excluyentes)?
- c) ¿Cómo obtener B?

El objetivo es maximizar la ganancia.

Planteamiento de la solución.

Las alternativas propuestas para el complejo químico se muestran en la Fig. 3.14. El principal problema es el de seleccionar entre los procesos I, II y III es más conveniente para producir C. En ese caso, debemos encontrar las condiciones de operación óptimas de los procesos seleccionados, y decidir los niveles apropiados de compras de las materias primas A y B, y de ventas de C.

	Costos Fijos (\$/hr)	Costos Variables (\$/ton materia prima)
Proceso I	1000	250
Proceso II	1500	400
Proceso III	2000	550
Precios:		
A	\$500/ton	
B	\$950/ton	
C	\$1800/ton	
Conversiones:		
Proceso I	90% de A a B	
Proceso II	82% de B a C	
Proceso III	95% de B a C	
Restricciones del mercado:		
Abastecimiento máximo de A:	16 ton/hr	
Demanda máxima de C:	10 ton/hr	

Tabla B. 2 Datos del problema.

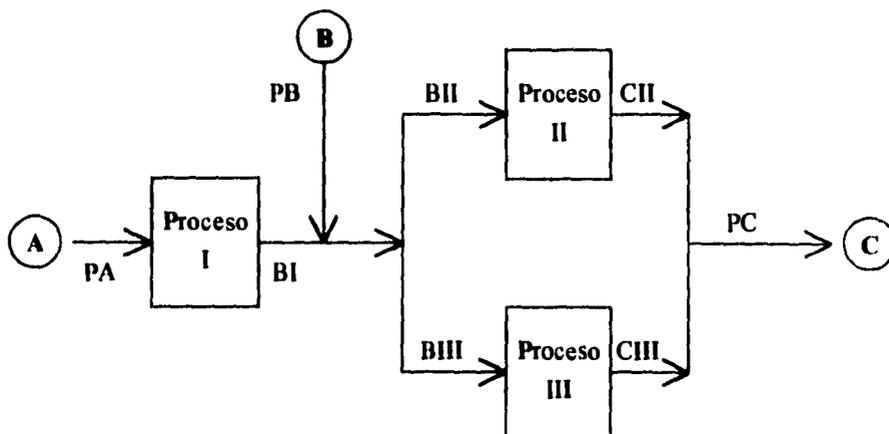


Figura B. I Complejo químico propuesto.

Existen varias decisiones discretas involucradas en este problema:

a) Para cada uno de los tres procesos: construirlo o no.

b) Los procesos II y III son mutuamente excluyentes. Esto crea la necesidad de modelar una restricción lógica de manera que si el proceso II es seleccionado, entonces el III no lo sea y viceversa.

c) En adición a un costo que es proporcional al tamaño del proceso instalado, se debe pagar un cargo fijo debido a la inversión. Este costo fijo es incluido si el proceso se selecciona y es independiente de que tan grande o pequeño sea el proceso.

El marco natural para el modelado de alternativas discretas, restricciones lógicas y costos fijos es provisto a través de la programación entera. Definamos las siguientes variables (binarias) enteras para denotar la selección de los procesos:

YI = 1 si el proceso I es seleccionado y 0 si no lo es;

YII = 1 si el proceso II es seleccionado y 0 si no lo es;

$YIII$ = 1 si el proceso III es seleccionado y 0 si no lo es;

La condición lógica de que al menos uno de los procesos II y III se seleccione puede ser expresada a través de la siguiente restricción:

$$YII + YIII \leq 1 \quad (1)$$

También hay una parte continua del problema que necesita ser modelada: niveles de producción, balances de materia, compras y ventas. Por esta razón, definimos las siguientes variables continuas:

PA compras de A (ton/hr)

PB compras de B (ton/hr)

SC ventas de C (ton/hr)

BI rapidez de producción de B en el proceso I (ton/hr)

BII rapidez de consumo de B en el proceso II (ton/hr)

BIII rapidez de consumo de B en el proceso III (ton/hr)

CII rapidez de producción de C en el proceso II (ton/hr)

CIII rapidez de producción de C en el proceso III (ton/hr)

Ahora podemos proceder con el resto del modelo:

Balances de materia para los químicos B y C:

$$BI + PB = BII + BIII \quad (2)$$

$$CII + CIII = SC \quad (3)$$

Balances en los procesos I, II y III (usando los factores de conversión):

$$BI = 0.9 PA \quad (4)$$

$$CII = 0.82 BII \quad (5)$$

$$CIII = 0.95 BIII \quad (6)$$

Para expresar la condición de que el proceso no puede operar a menos que esté construido, usamos las siguientes restricciones:

$$PA \leq 16 YI \quad (7)$$

$$BII \leq (10/0.82) YII \quad (8)$$

$$BIII \leq (10/0.95) YIII \quad (9)$$

El nivel de operación del proceso I se expresa por medio de *PA*, que es la rapidez de consumo (= rapidez de compra) de su materia prima A. La restricción (7) asegura que el proceso I no opere a menos que se construya (es decir, a menos que $YI = 1$). También, si el proceso se construye ($YI = 1$), entonces *PA* puede no exceder la disponibilidad

máxima de A, que es de 16 ton/hr. Similarmente, las restricciones (8) y (9) forzarán a las rapidezces de consumo de B en los procesos II y III a igualarse a cero si estos procesos no se seleccionan (caso de $YII = 0$ o $YIII = 0$). Por otro lado, si las variables binarias del lado derecho de (8) y (9) se hacen 1, los niveles de operación pueden no exceder los límites superiores que están determinados por el límite superior sobre la producción del producto final C (10 ton/hr) y los factores de conversión para los procesos (82% y 95%).

Ya que las ventas de C no pueden exceder 10 ton/hr:

$$SC \leq 10 \quad (10)$$

Finalmente, la función objetivo a ser maximizada es la ganancia total, que consiste de tres términos:

$ \begin{aligned} \text{UTILIDAD} = & -(1000 YI + 250 PA + 1500 YII + \\ & 400 BII + 2000 YIII + 550 BIII) \\ & -500 PA + 950 PB \\ & + 1800 SC \end{aligned} $	<p>Inversión y costos de operación</p> <p>Costo por compra de materia prima</p> <p>Ingreso por ventas</p>
--	---

El modelo consiste en maximizar UTILIDAD sujeta a las restricciones (1) a (10). También, las variables YI , YII y $YIII$ deben ser declaradas como binarias, en tanto que las variables continuas remanentes no pueden ser negativas. Ya que el modelo es lineal e involucra variables discretas y continuas, es un programa MILP.

Resultados.

El modelo MILP para este problema involucra 3 variables binarias, 8 variables continuas (sin incluir la objetivo) y 9 restricciones. El archivo de entrada a GAMS es bastante simple. La opción OPTCR = 0 se usa para asegurar que el óptimo global en el

programa entero se encuentre. Las ecuaciones definidas como E1 a E9 corresponden a las restricciones (1) a (9) anteriores, mientras que la restricción (10) se da como límite superior para SC ($SC.UP = 10$).

La solución óptima obtenida por GAMS indica que una utilidad de 459.3 \$/hr se puede obtener seleccionando los procesos I y II, comprando 13.55 ton/hr de químico A, y produciendo 10 ton/hr de químico C. El químico intermedio B debe ser exclusivamente producido por el proceso I a una rapidez de 12.195 ton/hr y después alimentado al proceso II. La configuración óptima se muestra en la Fig. 3.15:

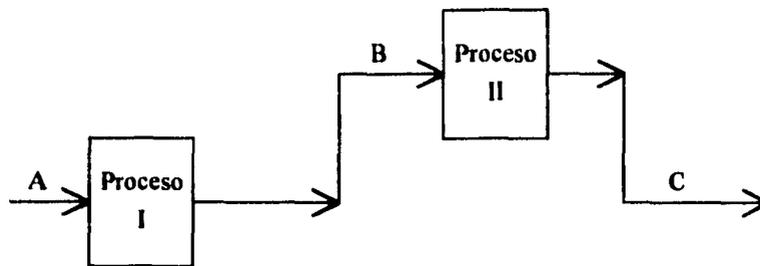


Figura B. 2 Configuración óptima.

Es interesante notar que la configuración óptima puede cambiar (por ejemplo, involucrar al proceso III en vez del II) si los precios cambian. En general, los precios y los costos pueden cambiar con el tiempo.

```
STITLE Equilibrio Quimico
$OFFUPPER
$OFFSYMXREF OFFSYMLIST

OPTION SOLPRINT = OFF;
```

```

* Define indices
SET I Indice de los elementos atomicos y especies quimicas /1*20/;
ALIAS (I,S);

* Define e introduce los datos del problema
SCALAR N Numero de especies quimicas o componentes en el sistema /10/;
SCALAR M Numero de elementos atomicos componentes de las especies /3/;
SCALAR P Presion del sistema al equilibrio /750/;
PARAMETER A(I,S) Moles de Atomos de Elementos I por mol de especies S/
    1.1 1, 1.2 2, 1.3 2, 1.6 1, 1.10 1
    2.4 1, 2.5 2, 2.6 1, 2.7 1
    3.3 1, 3.7 1, 3.8 1, 3.9 2, 3.10 1/;
PARAMETER W(S) Constantes en las Ecuaciones de Potencial Quimico/
    1 -10.021, 2 -21.096, 3 -37.986, 4 -9.846, 5 -28.653
    6 -18.918, 7 -28.032, 8 -14.640, 9 -30.594, 10 -26.111/;
PARAMETER X0(I) Moles Totales de Atomos de Elementos en el sistema/
    1 2, 2 1, 3 1/;
PARAMETER YSTAR(S) Fracciones Molares de especies al equilibrio;

* Define las variables de optimizacion
VARIABLES X(S) Moles del Componente s en el Sistema en cualquier momento
    GTOTAL Energia Libre de Gibbs Total del Sistema
    F Moles Totales de las Especies en el Sistema;
POSITIVE VARIABLES X, F;

* Define Funcion Objetivo y Restricciones
EQUATIONS OBJFUN Energia Libre de Gibbs Total a ser minimizada
    MB(I) Balances de Masa para los Elementos Atomicos
    TMOLS Moles Totales de las Especies en el Sistema;
OBJFUN.. GTOTAL =E= SUM(S $(ORD(S) LE N), X(S)*(W(S)+ LOG(P*X(S)/F)));
TMOLS.. F =E= SUM(S $(ORD(S) LE N), X(S));
MB(I) $(ORD(I) LE M).. X0(I) =E= SUM(S $(ORD(S) LE N), A(I,S)*X(S));

* Introduce limites inferiores y valores iniciales
F.LO = 1.0;
X.LO(S) = .00001;
X.L("2") = 1.0;
X.L("4") = 1.0;
X.L("8") = 1.0;

* Define el modelo y resuelve
MODEL CHEEQU /all/;
SOLVE CHEEQU USING NLP MINIMIZING GTOTAL;

YSTAR(S) = X.L(S)/F.L;

```

B.5 Generación de Potencia.

Definición del problema.

Una combinación de dos turbinas y dos generadores acoplados (Fig. 3.16) se utiliza para obtener una potencia de salida de 50 MW. Puede utilizar cualquier combinación de combustóleo y gas (BFG). Por otro lado, sólo 10.0 unidades de gas por hora están disponibles. Ya que el suministro de gas puede no ser suficiente para cubrir la demanda de generación de potencia, es necesario comprar combustóleo y usarlo. Se desea que la cantidad total de combustóleo usado sea la mínima en los dos generadores. Para este propósito, los requerimientos de combustible para los dos generadores están expresados como una función cuadrática de los MW producidos, obtenida del ajuste de curvas no lineales. Así, si x (en MW) es la potencia producida y f (en ton/hr de combustóleo y en unidades de combustible/hr para el gas) es la cantidad de combustible utilizado, entonces $f = a_0 + a_1x + a_2x^2$.

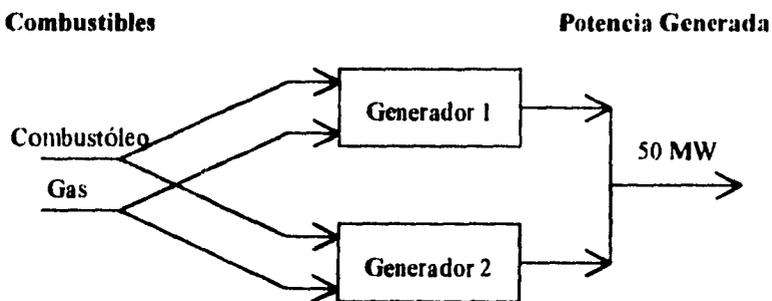


Figura B. 3 Combinación de turbina-generador.

Generador	Tipo de Combustible	a_0	a_1	a_2
1	Combustóleo	1.4609	0.15186	0.001450
1	Gas	1.5742	0.16310	0.001358
2	Combustóleo	0.8008	0.20310	0.000916
2	Gas	0.7266	0.22560	0.000778

Tabla B. 3 Constantes de las ecuaciones de consumo de combustible.

Las constantes a_i ($i = 0$ a 2) dependen del generador y el tipo de combustible usado, y están dadas en la Tabla B.5.

Asumamos que cuando se utiliza una combinación de combustóleo y gas, la potencia total generada es dada por la suma de las potencias generadas por cada combustible. Los rangos de operación de los dos generadores son [18, 30] MW y [14, 25] MW respectivamente. Formular un problema de optimización para minimizar la cantidad de combustóleo adquirido y determinar las cantidades usadas por cada generador.

Planteamiento de la solución.

Primero, identifiquemos las variables de interés y sus interrelaciones (restricciones) en este problema. Para operar los generadores, debemos saber qué tanto combustible y de qué tipo debería ser utilizado por cada uno, así que definamos f_{ij} como la cantidad de combustible tipo j ($j = 1$ a 2) usado por el generador i ($i = 1$ a 2), y x_{ij} como los correspondientes MW generados. Del ajuste de la curva, sabemos que

$$f_{ij} = a_{i0} + a_{i1}x_{ij} + a_{i2}x_{ij}^2 \quad i=1,2 \quad j=1,2 \quad (1)$$

donde a_{ijk} ($k = 0$ a 2) son las constantes para el generador i y el combustible j ($1 =$ combustóleo, $2 =$ gas) de la Tabla B.5. Debido a que las potencias generadas por los dos combustibles son aditivas, la potencia generada p_i por el generador i será dada por

$$p_i = x_{i1} + x_{i2} \quad i=1,2 \quad (2)$$

Para que los generadores estén en el rango de operación, debemos tener $18 \leq p_1 \leq 30$ y $14 \leq p_2 \leq 25$. Para obtener al menos 50 MW de potencia, debemos tener

$$p_1 + p_2 \geq 50 \quad (3)$$

Si definimos z_j como la cantidad total de combustible j comprado, entonces

$$z_j \geq \sum_{i=1}^2 f_{ij} = \sum_{i=1}^2 a_{ij0} + a_{ij1}x_{ij} + a_{ij2}x_{ij}^2 \quad j=1,2 \quad (4)$$

de la Ec. 1. Ya que el suministro de gas es limitado, debemos tener $z_2 \leq 10$. Finalmente, debemos minimizar z_2 . Nótese que p_i , x_{ij} , y z_j deben ser todas no negativas. Con esto, nuestra formulación final se puede establecer como

Minimizar z_1

sujeto a

$$p_1 = x_{11} + x_{12}$$

$$p_1 + p_2 \geq 50$$

$$z_j \geq \sum_{i=1}^2 a_{ij0} + a_{ij1}x_{ij} + a_{ij2}x_{ij}^2 \quad j=1,2 \quad (5)$$

$$x_{ij} \geq 0, 0 \leq z_2 \leq 10, 18 \leq p_1 \leq 30, 14 \leq p_2 \leq 25 \quad (6)$$

No fue necesario usar la p_i en la formulación anterior. Pero en este caso, los límites $18 \leq p_1 \leq 30$ y $14 \leq p_2 \leq 25$ deberían ser expresados como restricciones *explícitas* en términos de las x_{ij} como $18 \leq x_{i1} + x_{i2} \leq 30$ y $14 \leq x_{i1} + x_{i2} \leq 25$. La mayoría de los algoritmos de optimización dan un tratamiento especial a los límites y no los tratan como restricciones *explícitas*. Las satisfacen como restricciones implícitas en una forma mucho más simple que con las restricciones *explícitas*. Y debido a que es mejor minimizar el número de restricciones *explícitas* en una formulación, usamos p_i .

Todas las variables de decisión en la formulación anterior son continuas. Aunque todas las funciones involucradas en su objetivo y sus restricciones son lineales, la Ec. 5 involucra funciones cuadráticas, por lo que el problema se torna a uno NLP. También nótese que ya que las a_{ij2} son todas positivas, $a_{ij2}x_{ij}^2$ es una función convexa. Las otras funciones en la Ec. 5 son lineales, por lo que la formulación satisface las condiciones de suficiencia del teorema de Kuhn-Tucker. En otras palabras, el problema anterior es un NLP convexo, y su mínimo local también es global.

Para modelar este problema en GAMS, definimos los conjuntos $G = \{\text{gen1}, \text{gen2}\}$, $F = \{\text{combustóleo}, \text{gas}\}$ y $K = \{0, 1, 2\}$ para denotar respectivamente a los generadores ($i = 1$ a 2), combustibles ($j = 1$ a 2) y las constantes ($k = 0$ a 2). Las a_{ijk} son inicializadas usando la instrucción TABLE; los rangos de operación de los generadores

están especificados usando los parámetros P_{MIN} y P_{MAX}, mientras que el suministro máximo de gas y la potencia requerida lo son usando los escalares GASSUP y PREQ. Debido a que la función objetivo tiene que ser una variable escalar en GAMS, usamos la variable OILPUR en el modelo y lo igualamos a Z("combustóleo") usando la restricción OILUSE. Las ecuaciones TPOWER, PWR(G) y FUELUSE(G) en el modelo GAMS se refieren a las Ecs. 3, 2 y 5 respectivamente. La no negatividad de X y Z se garantiza declarándolas positivas y los límites superiores e inferiores están implementados usando .UP y :LO en el algoritmo NLP. Los valores iniciales de las otras variables son asumidos como cero por GAMS. Aunque no es necesario especificar los valores iniciales para las variables en un problema NLP simple como este, puede ser esencial hacerlo para problemas más largos o más complejos para que el algoritmo converja. Un buen punto inicial también ayuda a los algoritmos NLP a converger más rápido.

Resultados.

GAMS utiliza los algoritmos NLP para resolver este problema. Para un problema NLP general no es posible decir si la solución es globalmente óptima, por lo que GAMS siempre indica que lo es localmente. Sin embargo, en este problema ya hemos probado que una solución óptima local también lo será globalmente.

Las potencias de salida de los generadores 1 y 2 son 30 MW y 20 MW respectivamente y se compran 4.681 ton/h de combustóleo. Debido a que el uso de gas BFG no afecta a la función objetivo, el optimizador usa todo el gas que puede. Pero esto sólo produce 36.325 MW de potencia total, por lo que se utiliza combustóleo para generar la potencia remanente de 13.675 MW. De los valores P, vemos que el generador 1 está operando a la máxima capacidad de su rango de operación, lo que no ocurre con el generador 2. Por lo tanto, la solución óptima está controlada por el suministro de gas y el rango de operación del generador 1. En otras palabras, la cantidad de combustóleo adquirido puede ser reducido incrementando el suministro de gas o incrementando la capacidad máxima de operación del generador 1.

```

$TITLE Generacion de Potencia mediante Combustoleo
$OFFUPPER
$OFFSYMXREF OFFSYMLIST

OPTION SOLPRINT = OFF;

* Define index sets
SETS G Generadores /gen1*gen2/
     F Combustibles /oil, gas/
     K Constantes en Ecuaciones de Consumo de Combustible /0*2/;

* Define e Introduce los Datos del Problema
TABLE A(G,F,K) Coeficientes en las ecuaciones de consumo de combustible
      0      1      2
gen1.oil  1.4609  .15186  .00145
gen1.gas  1.5742  .16310  .001358
gen2.oil  0.8008  .20310  .000916
gen2.gas  0.7266  .22560  .000778;
PARAMETER PMAX(G) Capacidad maxima de los generadores /
GEN1 30.0, GEN2 25.0/;
PARAMETER PMIN(G) Capacidad minima de los generadores /
GEN1 18.0, GEN2 14.0/;
SCALAR GASSUP Suministro maximo de gas en units por h /10.0/
PREQ Potencia requerida total en MW /50.0/;

* Define las variables de optimizacion
VARIABLES P(G) Potencia total de salida de los generadores en MW
          X(G, F) Potencias de salida especificas por combustible
          Z(F) Cantidades totales de combustible comprado
          OILPUR Cantidad total de combustoleo comprado;
POSITIVE VARIABLES P, X, Z;

* Define la Funcion Objectivo y las Restricciones
EQUATIONS TPOWER Potencia requerida a ser generada
          PWR(G) Potencia generada por cada generador
          OILUSE Cantidad de combustoleo a ser minimizada
          FUELUSE(F) Consumo de combustible no debe exceder la compra;
TPOWER.. SUM(G, P(G)) =G= PREQ;
PWR(G).. P(G) =E= SUM(F, X(G,F));
FUELUSE(F).. Z(F) =G= SUM((K,G), a(G,F,K)*X(G,F)**(ORD(K)-1));
OILUSE.. OILPUR =E= Z("OIL");

* Impone limites e inicializa las variables de optimizacion
* Limites superiores e inferiores de Pde los rangos de operacion
P.UP(G) = PMAX(G);
P.LO(G) = PMIN(G);
* Limite superior de consumo de gas de GASSUP
Z.UP("gas") = GASSUP;
* Valores iniciales especificos para potencias de salida
P.L(G) = .5*(PMAX(G)+PMIN(G));

* Define el modelo y resuleve
MODEL FUELOIL /all/;
SOLVE FUELOIL USING NLP MINIMIZING OILPUR;

```

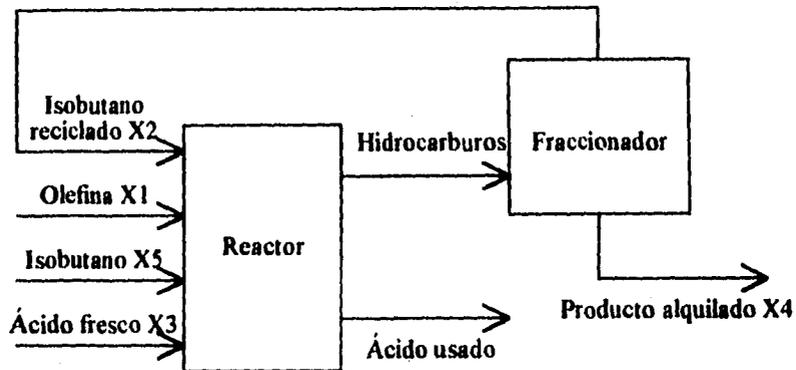
B.6 Optimización de un Proceso de Alquilación.

Definición del problema.

Este problema representa un modelo simplificado del proceso de alquilación. El modelo involucra un sistema con un reactor y un fraccionador como se ilustra en la Fig. 3.17. La alimentación al reactor consiste en olefinas ($X1$), isobutano fresco ($X5$), isobutano reciclado ($X2$) y ácido fresco ($X3$). El ácido ya usado es removido del reactor y los hidrocarburos se mandan al fraccionador donde se separan en isobutano reciclado y producto alquilado ($X4$). Para simplificar el modelo, se hicieron las siguientes consideraciones:

- La olefina alimentada es butileno puro.
- El isobutano de entrada y el reciclado son isobutano puro.
- El ácido fresco es de 98% en peso.
- El ácido utilizado no es reciclado.

Una explicación detallada de las variables remanentes se da en la Fig. 3.17. Las primeras tres variables ($X1$, $X2$, $X3$) son consideradas manipulables por el operador (variables de decisión) mientras que las demás pueden ser calculadas del modelo una vez que las decisiones han sido tomadas. El objetivo de este problema es maximizar la utilidad. Una descripción cuantitativa del modelo se da en la siguiente sección.



- X_1 = Alimentación de olefina (barriles/día)
- X_2 = Reflujo de isobutano (barriles/día)
- X_3 = Rapidez de adición de ácido (1000 lb/día)
- X_4 = Rendimiento de alquilado (barriles/día)
- X_5 = Alimentación de isobutano (barriles/día)
- X_6 = Fortaleza ácida (por ciento en peso)
- X_7 = Octanaje del alquilado
- X_8 = Relación externa de isobutano a olefina
- X_9 = Factor de dilución del ácido
- X_{10} = Número de comportamiento F-4 del alquilado

Figura B. 4 Diagrama del proceso de alquilación.

Planteamiento de la solución.

La alquilación se deriva de simples relaciones de balances de materia y regresiones determinadas de los datos de operación. Las primeras cuatro relaciones representan características del reactor de alquilación y fueron obtenidas empíricamente.

El rendimiento de alquilado, X_4 , es una función de la alimentación de olefina, X_1 , y la relación externa isobutano a olefina, X_8 . La siguiente relación está desarrollada de una regresión no lineal para temperaturas entre 80 y 90°F y una fortaleza ácida entre 85 y 93% en peso:

$$X_4 = X_1(1.12 + 0.13167 X_8 - 0.0067 X_8^2)$$

El octanaje del alquilado, $X7$, es una función de $X8$ y de la fortaleza ácida, $X6$. La regresión no lineal bajo las mismas condiciones que $X4$ da:

$$X7 = 86.35 + 1.098 X8 - 0.038 X8^2 + 0.325(X6-89)$$

El factor de dilución del ácido, $X9$, se puede expresar como una función lineal del número F-4, $X10$ y está dado por:

$$X9 = 35.82 - 0.222 X10$$

También $X10$ está expresada como una función lineal del número de octano, $X7$.

$$X10 = 3 X7 - 133$$

Las tres restricciones remanentes representan definiciones exactas de las demás variables. La relación externa isobutano a olefina está dada por:

$$X8 = (X2 + X5)/X1$$

Para prevenir posibles divisiones entre cero, para GAMS se reescribe como:

$$X8 X1 = X2 + X5$$

La alimentación de isobutano, $X5$, está determinada por un balance de volumen en el sistema. Aquí, las olefinas están relacionadas al producto alquilado y hay una pérdida constante de volumen de 22%, que nos da $X4 = X1 + X5 - 0.22 X4$ o:

$$X5 = 1.22 X4 - X1$$

Finalmente, la dilución del ácido ($X6$) está relacionada con la rapidez de adición ($X3$), el factor de dilución ($X9$) y el rendimiento de alquilado ($X4$) por la ecuación: $1000 X3 = X4 X6 X9 / (98 - X6)$. Nuevamente, reformulamos esta ecuación para eliminar la división y obtener:

$$X6(X4 X9 + 1000 X3) = 98000 X3$$

La función objetivo es el cálculo directo de la utilidad basado en los siguientes datos:

- Valor del producto alquilado = \$0.063/octano-barril
- Costo de la olefina alimentada = \$5.04/barril
- Costo del isobutano alimentado = \$3.36/barril
- Costo del isobutano reciclado = \$0.035/barril
- Costo de la adición de ácido = \$10.00/barril

Esto nos conduce a que la función objetivo a ser maximizada es la utilidad (\$/día):

$$OBJ = 0.063 X4 X7 - 5.04 X1 - 0.035 X2 - 10 X3 - 3.36 X5$$

Resultados.

La formulación contiene 10 variables y 7 desigualdades restrictivas. El valor de la función objetivo es de 1154.4 \$/día. De los tres grados de libertad, $X2$ llega a su límite superior y $X5$ se va a su límite inferior. Esto es consistente con la maximización del objetivo, así como el incremento del condensado compensa la escasa alimentación de isobutano fresco. Adicionalmente, los valores marginales de $X1$, $X4$, $X6$, $X7$, $X8$, $X9$ y $X10$ son exactamente cero. Estas variables son tratadas como básicas o dependientes por MINOS. La variable restante y la única variable superbásica en este problema (es decir, el grado de libertad que no se encuentra en ninguno de sus límites) es $X3$. Su valor intermedio se puede interpretar como un trato entre una menor adición de ácido fresco y un mayor número de octano ($X7$) debido a un incremento en la concentración del ácido ($X6$ y $X7$); que resulta de una mayor alimentación de ácido fresco.

```

$ TITLE Problema de Alquileracion
$ OFFSYMXREF
$ OFFSYMLIST

OPTION LIMROW=0;
OPTION LIMCOL=0;

POSITIVE VARIABLES X1,X2,X3,X4,X5,X6,X7,X8,X9,X10;

VARIABLE OBJ;

EQUATIONS E1,E2,E3,E4,E5,E6,E7,E8;

E1..X4=E=X1*(1.12+.13167*X8-0.0067*X8**2);
E2..X7=E=86.35+1.098*X8-0.038*X8**2+0.325*(X6-89.);
E3..X9=E=35.82-0.222*X10;
E4..X10=E=3*X7-133;
E5..X8*X1=E=X2+X5;
E6..X5=E=1.22*X4-X1;
E7..X6*(X4*X9+1000*X3)=E=98000*X3;

E8.. OBJ =E= 0.063*X4*X7-5.04*X1-0.035*X2-10*X3-3.36*X5;

X1.LO = 0.;
X1.UP = 2000.;
X2.LO = 0.;
X2.UP = 16000.;
X3.LO = 0.;
X3.UP = 120.;
X4.LO = 0.;
X4.UP = 5000.;
X5.LO = 0.;
X5.UP = 2000.;
X6.LO = 85.;
X6.UP = 93.;
X7.LO = 90;
X7.UP = 95;
X8.LO = 3.;
X8.UP = 12.;
X9.LO = 1.2;
X9.UP = 4.;
X10.LO = 145.;
X10.UP = 162.;

X1.L =1745;
X2.L =12000;
X3.L =110;
X4.L =3048;
X5.L =1974;
X6.L =89.2;
X7.L =92.8;
X8.L =8;
X9.L =3.6;
X10.L =145;

```

B.7 Equilibrio Químico.

Definición del problema.

De la termodinámica de equilibrio de una reacción química, sabemos que el estado de equilibrio de un sistema cerrado a T y P constantes es el estado al cual su energía de Gibbs total es la mínima. Este criterio puede ser utilizado para obtener la composición de equilibrio de una mezcla dada minimizando su energía con respecto a su composición. Un gas ideal de diez especies químicas ($s=1,10$) se mantiene a $T=298$ K y a $P=750$ mm Hg. Las especies se componen de tres elementos atómicos ($i=1,3$; por ej. H, O y C). Si denotamos a los tres elementos como A, B y C, entonces las fórmulas de las especies en términos de A, B y C son A, A₂, A₂C, B, B₂, AB, BC, C, C₂ y AC respectivamente para $s=1,10$. Siendo un gas ideal, la energía de Gibbs por mol de especie s está dada por $G_s = G_s^0 + RT \ln(Py_s)$, donde y_s es su fracción mol en la mezcla. Las G_{0s} están dadas en términos de $w_s = G_s^0/RT$ en la Tabla B.6. La mezcla contiene 2 moles de A, 1 mol de B y 1 mol de C. Formular y resolver un problema de optimización para determinar la composición de equilibrio de la mezcla. ¿Cuál es la energía de Gibbs total de la mezcla al equilibrio?

s	w _s	s	w _s						
1	-10.021	3	-37.986	5	-28.653	7	-28.032	9	-30.594
2	-21.096	4	-9.846	6	-18.918	8	-14.640	10	-26.111

Tabla B. 1 Constantes w_s de energía de Gibbs.

Planteamiento de la solución.

Sea N ($N=10$) la que denote el número total de especies, M ($M=3$) la que denote el número total de elementos atómicos en la mezcla, y que G_T denote la energía de Gibbs

total de la mezcla. Ya que deseamos minimizar G_f con respecto a la composición de la mezcla, debemos definir variables de optimización para describir la composición de la mezcla y entonces expresar G_f como una función de estas variables. Además debemos imponer ciertas restricciones sobre las posibles composiciones de la mezcla de manera que conservemos los elementos atómicos, ya que en una reacción química, aunque las especies no se conservan, los elementos atómicos sí lo hacen. En este punto, definamos x_s como las moles de las especies s y a F como las moles totales de todas las especies en la mezcla. Claramente debemos tener:

$$F = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + \dots + x_{N-1} + x_N \quad (1)$$

Debido a que la mezcla es ideal, G_f es la suma de las energías de Gibbs molares parciales en la mezcla:

$$G_f = x_1 G_1 + x_2 G_2 + x_3 G_3 + \dots + x_N G_N \quad (2)$$

Substituyendo G_s en la Ec. 2, dividiendo entre RT y tomando las fracciones molares como $y_s = x_s/F$, tenemos:

$$G (= G_f/RT) = \sum_{s=1}^N x_s [w_s + \ln(Px_s/F)] \quad (3)$$

Para anotar las ecuaciones de conservación de masa, sea a_{is} la que denote a las moles del elemento i en una mol de la especie s . Los valores de a_{is} se obtienen fácilmente de las fórmulas de las especies. En primera instancia, $a_{11} = 1$ ya que la especie A ($s=1$) tiene sólo un elemento atómico A ($i=1$), $a_{21} = 0$, $a_{13} = 2$, $a_{33} = 1$, etc. Con esto, X_{0i} , el número total de moles del elemento i en la mezcla está dada por:

$$X_{0i} = a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + a_{i3}x_3 + \dots + a_{i,N-1}x_{N-1} + a_{iN}x_N \quad i=1, M \quad (4)$$

De los datos del problema, sabemos que $X_{01} = 2$ (2 moles de A), $X_{02} = 1$ (1 mol de B) y $X_{03} = 1$ (1 mol de C). Debido a que la T de la mezcla se mantiene constante, minimizar G_T es equivalente a minimizar G . Así, la formulación de la optimización para este problema puede ser establecido como sigue:

Minimizar G

$$G(= G_T/RT) = \sum_{i=1}^N x_i [w_i + \ln(Px_i/F)]$$

sujeto a

$$F = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + \dots + x_{N-1} + x_N$$

$$X_{0i} = a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + a_{i3}x_3 + \dots + a_{i,N-1}x_{N-1} + a_{iN}x_N$$

$$F \geq 0 \text{ y } x_i \geq 0$$

La formulación anterior tiene variables continuas, una función objetivo lineal y restricciones no lineales (Ec. 3), por lo que es un problema de programación no lineal. Sin embargo es un tipo especial de problema NLP, ya que si eliminamos la Ec. 3 sustituyendo G en la función objetivo, obtenemos una formulación con sólo restricciones lineales (Ecs. 1 y 4) y una función objetivo no lineal. Tales problemas son conocidos como *problemas de programación no lineal linealmente restringidos*. Éstos son más fáciles de resolver que los problemas con restricciones no lineales.

Aunque los algoritmos NLP de uso general se pueden usar para resolverlos, existen algoritmos especiales. GAMS posee la capacidad de reconocimiento y explotación de su estructura especial, si están escritos de la manera indicada en el manual de GAMS. Escritos en la forma de problema NLP linealmente restringido, tenemos un problema con

una región factible convexa porque todas las restricciones son lineales. Por otro lado, la presencia de la función $x_S \ln(Px_S/F)$ en la función objetivo hace a la función objetivo no convexa. Ya que esto viola las condiciones de suficiencia del teorema de Kuhn-Tucker, una solución óptima local no puede ser garantizada como óptima global. Una estrategia heurística para tales problemas es resolver el problema usando un número de puntos iniciales. Si una solución se repite constantemente, entonces existe una buena oportunidad de que sea la solución óptima global. De otra forma, la mejor solución debe ser usada como una buena aproximación a la solución óptima global.

Para el modelo GAMS, definimos un conjunto de índices común I . Por claridad, hicimos I alias S para usar I para referir elementos y S para especies. Usamos la instrucción `PARAMETER` para especificar la a_{iS} ya que no necesitamos introducir valores de cero. Definimos el parámetro `YSTAR` en el que calculamos las fracciones mol de las especies al equilibrio después de que el problema está resuelto. Especificamos los datos remanentes del problema usando las instrucciones `SCALAR` y `PARAMETER`. Las ecuaciones `GTOTAL`, `MB(I)` y `TMOLS` en el modelo GAMS se refieren a las Ecs. 3, 4 y 1 respectivamente. Nótese que aunque este problema es un NLP linealmente restringido, debido a la convención de GAMS, la función objetivo tiene que ser definida usando la restricción `GTOTAL`. En las ecuaciones, usamos la función `ORD()` para limitar las sumas sobre los índices I y S a M y N respectivamente. Esto hace fácil cambiar el modelo para otro problema diferente. Finalmente aseguramos la no negatividad de X y F declarándolas positivas.

En un principio, lo anterior debe de ser suficiente para resolver el problema, pero no funciona. El problema se debe a la presencia de la función \ln y a la división entre F en la formulación. En GAMS, las funciones no lineales son evaluadas sólo si la variable satisface los límites superior e inferior. Ya que los límites inferiores son cero (definidas positivas), la división entre cero y un argumento de cero en la función \ln son posibles. En efecto, si un valor inicial para una variable no se especifica, GAMS asume que es cero. Obviamente esto no puede ser permitido, por lo que debemos especificar límites inferiores positivos para F y X en el modelo GAMS. Conociendo las X_{0i} y las fórmulas de las especies, podemos asegurar que $F > 1$, por lo que lo especificamos usando $F.LO = 1.0$. Pero, ¿qué tan pequeña puede ser $X(S)$? Inicialmente no tenemos ni idea, así que comenzamos especificando algunos límites inferiores pequeños y resolvemos el problema. Si la solución óptima es tal que una de las $X(S)$ es igual a su límite inferior, disminuimos su límite inferior y volvemos a resolver el problema. Repetimos este procedimiento hasta que ninguna de las $X(S)$ esté en su límite inferior en la solución óptima. Por supuesto, es posible iniciar con límites inferiores suficientemente pequeños para que no sea necesaria una nueva ejecución. Ahora usamos $.L$ para especificar valores iniciales para algunas variables. Aunque no es necesario para un problema NLP simple como este, puede ser esencial hacerlo para un problema mayor o más complejo. Un buen punto inicial también ayuda a los algoritmos NLP a converger más rápido.

Resultados.

GAMS usa MINOS 5.2 para este problema. La solución indica terminación completa, así como una solución óptima local. En este problema sabemos que no tenemos garantía de obtener la solución óptima global debido a su no convexidad.

Nótese que los valores X son todos mayores a sus límite inferiores, por lo que no hay necesidad de repetir la solución. Obtenemos que GTOTAL = -43.495, y multiplicándola por RT obtenemos G_f . Recordemos que las X(S) son las moles de las especies en la mezcla y YSTAR(S) son sus fracciones molares al equilibrio. Éstas últimas son:

1.-	0.005	6.-	3.05×10^{-4}
2.-	0.044	7.-	0.011
3.-	0.585	8.-	0.002
4.-	2.32×10^{-4}	9.-	0.010
5.-	0.316	10.-	0.027

```
$TITLE Equilibrio Quimico
$OFFUPPER
$OFFSYMXREF OFFSYMLIST

OPTION SOLPRINT = OFF;

* Define indices
SET I Indice de los elementos atomicos y especies quimicas /1*20/;
ALIAS (I,S);

* Define e introduce los datos del problema
SCALAR N Numero de especies quimicas o componentes en el sistema /10/;
SCALAR M Numero de elementos atomicos componentes de las especies /3/;
SCALAR P Presion del sistema al equilibrio /750/;
PARAMETER A(I,S) Moles de Atomos de Elementos I por mol de especies S/
    1.1 1, 1.2 2, 1.3 2, 1.6 1, 1.10 1
    2.4 1, 2.5 2, 2.6 1, 2.7 1
    3.3 1, 3.7 1, 3.8 1, 3.9 2, 3.10 1/;
PARAMETER W(S) Constantes en las Ecuaciones de Potencial Quimico/
    1 -10.021, 2 -21.096, 3 -37.986, 4 -9.846, 5 -28.653
    6 -18.918, 7 -28.032, 8 -14.640, 9 -30.594, 10 -26.111/;
PARAMETER X0(I) Moles Totales de Atomos de Elementos en el sistema/
    1 2, 2 1, 3 1/;
PARAMETER YSTAR(S) Fracciones Molares de especies al equilibrio;
```

```

* Define las variables de optimizacion
VARIABLES X(S) Moles del Componente s en el Sistema en cualquier momento
          GTOTAL Energia Libre de Gibbs Total del Sistema
          F Moles Totales de las Especies en el Sistema;
POSITIVE VARIABLES X, F;

* Define Funcion Objectivo y Restricciones
EQUATIONS OBJFUN Energia Libre de Gibbs Total a ser minimizada
          MB(I) Balances de Masa para los Elementos Atomicos
          TMOLS Moles Totales de las Especies en el Sistema;
OBJFUN.. GTOTAL =E= SUM(S $(ORD(S) LE N), X(S)*{W(S)+ LOG(P*X(S)/F)});
TMOLS.. F =E= SUM(S $(ORD(S) LE N), X(S));
MB(I) $(ORD(I) LE M).. X0(I) =E= SUM(S $(ORD(S) LE N), A(I,S)*X(S));

* Introduce limites inferiores y valores iniciales
F.LO = 1.0;
X.LO(S) = .00001;
X.L("2") = 1.0;
X.L("4") = 1.0;
X.L("8") = 1.0;

* Define el modelo y resuelve
MODEL CHEEQU /all/;
SOLVE CHEEQU USING NLP MINIMIZING GTOTAL;

YSTAR(S) = X.L(S)/F.L;

```

B.8 Equilibrio de Fases Multicomponente.

Definición del problema.

Se da un conjunto de condiciones de alimentación para un sistema multicomponente no reaccionante a una temperatura y presión conocidas. El objetivo es determinar el número y estado de las fases existentes al equilibrio, así como la composición y la cantidad de cada una. Este es el clásico cálculo del flash a unas T y P fijas. Debido a la significación de este problema en el reino de las aplicaciones industriales, una investigación extensiva ha proporcionado muchos métodos propuestos para su solución. Un acercamien-

to es formular el problema como una minimización no lineal restringida de la energía de Gibbs. El problema involucra a un sistema de tres componentes: benceno, acetonitrilo y agua. Las condiciones de temperatura y presión están especificadas. La fase vapor es tratada como ideal. A unas condiciones intermedias (333K, 0.769 atm), se obtienen tres fases. Si la presión se incrementa (333K, 1 atm) la fase vapor se elimina y resulta un sistema de dos fases líquidas. Finalmente, si la temperatura y la presión disminuyen (300K, 0.1 atm), se obtiene un sistema de dos fases, con una fase vapor y otra líquida. Los datos de la alimentación y la solución para los tres conjuntos de condiciones se encuentran en las tablas 3.7 a 3.9.

Componente	Fase vapor (Fracción mol)	Fase líquida 1 (Fracción mol)	Fase líquida 2 (Fracción mol)	Alimentación (Fracción mol)
C ₆ H ₆ :	0.4785	0.0026	0.4788	0.3436
CH ₃ CN :	0.2818	0.0762	0.4539	0.3092
H ₂ O :	0.2397	0.9212	0.0673	0.3472
Moles Totales	28.478	50.015	21.867	100.36

Tabla B. 5 Datos y solución para el equilibrio vapor-líquido-líquido @333K, 0.769 atm.

Componente	Fase vapor (Fracción mol)	Fase líquida 1 (Fracción mol)	Fase líquida 2 (Fracción mol)	Alimentación (Fracción mol)
C ₆ H ₆ :	-----	0.0024	0.5147	0.3436
CH ₃ CN :	-----	0.0711	0.4287	0.3092
H ₂ O :	-----	0.9265	0.0566	0.3472
Moles Totales	-----	33.522	66.838	100.36

Tabla B. 6 Datos y solución para el equilibrio líquido-líquido @333K,, 1 atm.

Componente	Fase vapor (Fracción mol)	Fase líquida 1 (Fracción mol)	Fase líquida 2 (Fracción mol)	Alimentación (Fracción mol)
C ₆ H ₆ :	0.3494	0.0006	-----	0.3436
CH ₃ CN :	0.3139	0.0303	-----	0.3092
H ₂ O :	0.3367	0.9691	-----	0.3472
Moles Totales	98.701	1.659	-----	100.36

Tabla B. 7 Datos y solución para el equilibrio vapor-líquido @300K, 0.1 atm.

Planteamiento de la solución.

Paules y Floudas presentaron dos nuevos acercamientos para el problema de la minimización de la energía de Gibbs que utilizaba variables discretas para modelar la existencia o no existencia de fases al equilibrio en combinación con nuevas transformaciones de la formulación no lineal original. La formulación original contenía restricciones lineales y, dependiendo de la complejidad de las relaciones de actividad y fugacidad usadas, una función objetivo no lineal altamente no convexa. Paules y Floudas transformaron el problema a una forma equivalente incluyendo variables de transformación adicionales y restricciones no lineales. La transformación del problema implica una estructura especial en los términos no lineales del modelo que puede ser explotada usando la técnica de descomposición de la Búsqueda del Óptimo Global de Floudas. Para este ejemplo, la formulación matemática de la representación transformada del problema general para el que la correlación NRTL ha sido utilizada para modelar las actividades de la fase líquida.

El modelo propuesto es una formulación matemática de uno de los problemas principales en la descomposición para el caso de un número fijo de fases. Las transformaciones de los términos NRTL de la actividad del líquido fueron dejadas intactas, pero todas las variables de transformación son relajadas y resueltas explícitamente en el modelo original, en vez de usar la descomposición en un subproblema primario y un problema maestro. Por lo tanto, el modelo a resolver es una representación no lineal no convexa del problema de equilibrio de fases y puede conducir a múltiples óptimos locales. El modelo demuestra cómo la formulación original, con todos los términos no lineales en el

objetivo se pueden transformar a uno que consiste de términos no lineales de estructura especial.

Se definen los siguientes índices y variables para ser utilizados en el modelo matemático:

ΔG_s^{k0} = Estado estándar de la energía de Gibbs del componente i a la temperatura del sistema.

G_{ij}^k = Parámetros de interacción binaria NRTL fase k .

G_{ij} = Parámetros de interacción binaria NRTL.

i = Índice para el conjunto de compuestos únicos en el sistema I_C .

I_C = Conjunto de compuestos únicos en el sistema.

I_P = Conjunto de fases potenciales en un sistema.

k = Índice para el conjunto de fases potenciales en un sistema.

n_i^k = Número de moles del componente i en la fase k .

\underline{n}_i^k = Valor fijo de n_i^k en un subproblema primario.

n_i^T = Cantidad total de compuesto i alimentado a un sistema.

NC = Número total de compuestos únicos en un sistema.

NP = Número total de fases potenciales en un sistema.

RT = Producto de la constante de los gases R y la temperatura del sistema.

\underline{T}_i^k = Valor fijo de T_i^k en un subproblema primario.

\underline{Z}_i^k = Valor fijo de Z_i^k en un subproblema primario.

α_{ij} = Parámetro ajustable para NRTL.

γ_i^k = Coeficiente de fugacidad de la fase líquida para el componente i .

$\tau_{ij}^k =$ Parámetros de interacción binaria para NRTL.

$\tau_{ij} =$ Parámetros de interacción binaria para NRTL y UNIQUAC.

Si se usa n_i^k para denotar a las variables de decisión que representan el número de moles del componente i en la fase k , entonces la formulación matemática de la representación primaria del problema transformado en el que las variables proyectadas son relajadas como variables de decisión, se convierte en:

$$\min_{n_i^k} G_s = \sum_{i \in I_c} \sum_{k \in I_p} (n_i^k \Delta G_i^{A0} + RT \{ n_i^k \underline{I}_i^k + \sum_{j \in I_c} (G_{ij}^k \tau_{ij}^k n_i^k \underline{Z}_j^k - G_{ij}^k n_i^k \underline{I}_j^k \underline{Z}_j^k) \} + RT(n_i^k \ln n_i^k + n_i^k \ln \underline{n}_T^k))$$

sujeto a

sólo equilibrio de fases

$$\sum_{k \in I_p} n_i^k = n_i^T \quad i \in I_c$$

reformulación de términos del objetivo

$$\underline{I}_i^k (\sum_{i \in I_c} G_{ii}^k n_i^k) = \sum_{i \in I_c} \tau_{ii}^k G_{ii}^k n_i^k \quad i \in I_c \quad k \in I_p$$

$$\underline{Z}_i^k (\sum_{i \in I_c} G_{ii}^k n_i^k) = n_i^k \quad i \in I_c \quad k \in I_p$$

sumas de número de moles

$$\underline{n}_T^k = \sum_{i \in I_c} n_i^k$$

no negatividad

$$n_i^k \geq 0 \quad i \in I_c \quad k \in I_p$$

donde I_i^k , Z_i^k y u_i^k son las variables de transformación artificiales, γ_i^k es el coeficiente de actividad de la fase líquida, i, j, l son todos índices del conjunto de índices de componentes I_C , τ_{ij} son los parámetros de interacción binaria basados en la energía de Gibbs de exceso y tiene la propiedad de que $\tau_{ij} \neq \tau_{ji}$, y G_{ij} , otro parámetro de interacción binaria definido en términos del parámetro τ_{ij} y otro parámetro ajustable, α_{ij} , ($\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$ y $\alpha_{ii} = 0$) mediante la siguiente relación: $G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij}\tau_{ij})$.

Resultados.

Las condiciones de temperatura y presión seleccionadas resulta en una solución de tres fases y una distribución de todos los componentes en todas las fases. La distribución al equilibrio de la mezcla de 100.36 moles alimentadas dentro de las fases existentes está dada por la variable de decisión *MolsInPhas*. La composición al equilibrio de cada fase se calcula de la solución y se reporta en el parámetro *equicomp*. Así, la composición al equilibrio de las tres fases resultantes es:

Componente	Fase Líquida 1	Fase Líquida 2	Fase Vapor
C ₆ H ₆	0.0026	0.4788	0.4785
CH ₃ CN	0.0762	0.4539	0.2818
H ₂ O	0.9212	0.0673	0.2397

```

$TITLE Equilibrio Quimico Complejo mediante MINLP
$offsymxref
$inlinecom { } offnest.com
$offupper
$ontext
=====

```

```

=====
$offtext

{ Global Options }
OPTIONS
  LIMROW = 30,
  LIMCOL = 0,
  ITERLIM = 50000,
  RESLIM = 10000,
  MIP = ZOOM;

{ Declare Sets }

SETS

{ Indices fundamentales }
i elementos en los compuestos / C, H, N, O /
j compuestos en la mezcla / C6H6, CH3CN, H2O /
ij compuestos y elementos / C, H, N, O, C6H6, CH3CN, H2O /
k fases potenciales al equilibrio / Liq1, Liq2, Vap /
p indice de expansion de capacidad calorifica / aa,bb,cc,dd /

{ Indices derivados }
{ actualizados durante el algoritmo MINLP }
  exphase(k)      fases existentes
  condphase(k)    fases condensadas puras
  cmpnd2phas(j,k) compuesto j aparece en fase k
  cmp2phas(j,k)   duplica mapa cmpnd2phas
{ no actualizados durante el algoritmo MINLP }
  phasmod1(k)     conjunto de k fases que usan el modelo de fugacidad 1
  phasmod2(k)     conjunto de k fases que usan el modelo de fugacidad 2
  reform(k)       reformula la fase liquida en terminos del estado ga-
seoso;

ALIAS (jp,jpp,jppp,j);

SCALARS
  presion          presion del sistema (atm) /0.769/
  temp             temperatura del sistema (K) /333.0/
  stmp             temperatura absoluta estandar (K) /298.0/
  gasconst         constante de los gases (Kcal/mol-K) /1.9872E-3/
  RT              constante de los gases T veces
  * trace         tolerancia /1.0E-8/
  trace           tolerancia /1.0E-3/
  totfeed         total de moles alimentadas al sistema /100.36/ { por
100 }
  U1             limite superior en restricciones logicas
  U2             limite superior en restricciones solo enteros;

U1 = totfeed;
U2 = CARD(k)*CARD(j);
RT = gasconst*temp;

```

```

{ Parametros de descripcion del sistema }
PARAMETERS
  b(i)          total de atomos de i en el sistema
  totmolsfed(j) total de moles de j alimentadas
  psat(j)       presion de vapor del componente puro j a temp
  gibbsref(j,k) Energia de Gibbs parcial al estado de referencia
  equilcomp(j,k) composicion de cada fase al equilibrio;

```

```

PARAMETER feedmix(j)  composicion de la alimentacion al sistema
(fraction mol)
  / C6H6    0.34359
    CH3CN   0.30923
    H2O     0.34718 /;

```

TABLE a(i,j) atomos del elemento i en el compuesto j

	C6H6	CH3CN	H2O
C	6	2	
H	6	3	2
O			1
N		1	

TABLE ant(j,p) Coeficientes de la ecuacion de Antoine

```

{ ln(psat) = ant(aa) - ant(b)/(T+ant(c)) }
{ psat in mmHg T in K }

```

	aa	bb	cc
C6H6	15.9008	2788.51	-52.36
CH3CN	16.2874	2945.47	-49.15
H2O	18.3036	3816.44	-46.13 ;

{ In Atm }

```

psat(j) = EXP( ant(j,"aa") - ant(j,"bb")/(temp + ant(j,"cc")) )/760.0;

```

TABLE cvap(ij,p) Coeficientes de Cp ideal (Prausnitz)

C { solid }	aa	bb	cc	dd
H { H2 }	6.483	2.215E-3	-3.298E-6	1.826E-9
N { N2 }	7.440	-0.324E-2	6.400E-6	-2.790E-9
O { O2 }	6.713	-0.879E-6	4.170E-6	-2.544E-9
C6H6	-8.101	1.133E-1	-7.206E-5	1.703E-8
CH3CN	4.892	2.857E-2	-1.073E-5	0.765E-9
H2O	7.701	4.595E-4	2.521E-6	-0.859E-9 ;

{ Moles totales del elemento i en el sistema }

```

b(i) = SUM(j, totfeed*feedmix(j)*a(i,j));
totmolsfed(j) = totfeed*feedmix(j);

```

```

{ Ajustar la Energia de Gibbs de formacion a 298K }
{ a la temperatura del sistema }

{ 333K }
PARAMETER gibbsform(j,k) Energia de Gibbs de formacion @333K
* kcal/mol
/ C6H6.Vap          32.363
  CH3CN.Vap         25.735
  H2O.Vap           -54.257 /;

{ 300K }
PARAMETER gibbsform(j,k) Energia de Gibbs de formacion @300K
* kcal/mol
/ C6H6.Vap          31.060
  CH3CN.Vap         25.270
  H2O.Vap           -54.620 /; }

reform("Liq1") = YES;
phasmod1("Vap") = YES;
phasmod2(k)$(NOT phasmod1(k)) = YES;

gibbsref(j,k) = gibbsform(j,k);

{ Ajusta estados estandar de la fase liquidas basados en la relacion }
{  $G(l)^* = G(v)^* + RT \ln(\text{psat}(T))$  }
gibbsref(j,phasmod2(k)) = gibbsref(j,"Vap") + RT*LOG(psat(j));

{ Reformula una de las fases liquidas en terminos del estado gaseoso }
gibbsref(j,reform(k)) = gibbsref(j,"Vap");

DISPLAY RT, gibbsform, gibbsref, psat;

PARAMETER tau(j,jp) Parametros de interaccion binarios NRTL (Kcal/mol)
{ 333K }
/ C6H6.CH3CN        998.20E-3
  CH3CN.C6H6         65.74E-3
  C6H6.H2O           3883.20E-3
  H2O.C6H6           3849.57E-3
  CH3CN.H2O          363.57E-3
  H2O.CH3CN          1262.40E-3 /;

{ 300K }
/ C6H6.CH3CN        693.61E-3
  CH3CN.C6H6         92.47E-3
  C6H6.H2O           3892.44E-3
  H2O.C6H6           3952.20E-3
  CH3CN.H2O          415.38E-3
  H2O.CH3CN          1016.28E-3 /; }

PARAMETER alpha(j,jp) Parametros de interaccion binarios NRTL
{ 333K }
/ C6H6.CH3CN        0.88577

```

```

C6H6.H2O      0.24698
H2O.CH3CN     0.35650 /;

{ 300K
  / C6H6.CH3CN  0.67094
    C6H6.H2O   0.23906
    H2O.CH3CN  0.20202 /; }

alpha(jp,j)$alpha(j,jp) = alpha(j,jp);

{ Divide entre RT de acuerdo a Latagne }
tau(j,jp) = tau(j,jp)/RT;

PARAMETER gnrtl(j,jp)  Calcula coeficientes NRTL del par binario;
gnrtl(j,jp) = EXP(-alpha(j,jp)*tau(j,jp));

DISPLAY gnrtl, tau, alpha;

{ Declara las variables del modelo }
VARIABLES
  FreeEnergy      Suma de la Energia Libre de Gibbs a ser minimizada
  SumInf          Suma de imposibilidades;

POSITIVE VARIABLES
  MolsInPhas(k,j) moles de j en la fase k
  GComp(j,k)      valor de sumas expandidas Gnrtl
  TauGComp(j,k)   valor de sumas expandidas tau
  ZComp1(j,k)     variable reformulada 1
  ZComp2(j,k)     variable reformulada 2
  Tmols(k)        moles totales en la fase k;

NEGATIVE VARIABLES
  LnTmols(k)      contribucion of Tmols;

BINARY VARIABLES
  Phase(k)        existencia de la fase k
  InPhase(j,k)    presencia del compuesto j en la fase k;

{ Declara ecuaciones }
EQUATIONS
{ trata de mantener todas las no linearidades en el objetivo }
  GibbsInit      funcion objetivo simplificada para inicializaciones
  GibbsFree      objectivp - expresion para la energia libre total del
sistema
  Initobj        objetivo para inicializacion

  MolBalance(j)  solo para las moles conservadas de la fase al equili-
briio (lineal)
  MolSums(k)     restricciones de moles totales para cada fase (lineal)
  CompSum(j,k)   sumas de interaccion NRTL expandidas (lineal)

```

```

TauCompSum(j,k) sumas de interaccion tau NRTL expandidas (lineal)
NRTLrefrm1(j,k) reformula parte de NRTL (no lineal)
NRTLrefrm2(j,k) reformula parte de NRTL (no lineal)
PhaseLog(j,k) restricciones logicas para la fase k (lineal)
Tmolsum suma de moles totales (lineal)
LOGTmols(k)

{ restricciones binarias puras }
PhaseCut(k)     Pune variables InPhase a cero si la fase es cero;

{ Parametros para el algoritmo de control MINLP }
PARAMETERS
s1(j,k)         valor para las singularidades de moles cuando no es-
ta activo
s2(k)          valor para las singularidades de fases cuando no es-
ta activ;

SCALAR scalefac  factor de escala /1000/;

{ Define ecuaciones }

GibbsFree..
FreeEnergy =E=

{ Fase Vapor }
scalefac*(
SUM(cmpnd2phas(j,phasmod1(k)),
MolsInPhas(k,j)*
(gibbsref(j,k)/RT + LOG(presion)
+ LOG(MolsInPhas(k,j)+s1(j,k)) - LOG(Tmols(k)+s2(k))) ) )

{ Fase Liquida 1 }
{ Reformulada en terminos de estado estandar gaseoso }
* + SUM(cmpnd2phas(j,reform(k)), MolsInPhas(k,j)*LOG(psat(j)))

{ Ambas Fases Liquidas }
{ Liq1 con el estado de referencia gaseoso }
+ scalefac*(
SUM(cmpnd2phas(j,phasmod2(k)),
MolsInPhas(k,j)*
( gibbsref(j,k)/RT
+ ZComp1(j,k)
+ SUM(jp, gnrtl(j,jp)*tau(j,jp)*ZComp2(jp,k)
- gnrtl(j,jp)*ZComp1(jp,k)*ZComp2(jp,k))
+ LOG(MolsInPhas(k,j)*psat(j)+s1(j,k))$reform(k)
+ LOG(MolsInPhas(k,j)+s1(j,k))$(NOT reform(k))
- LOG(Tmols(k)+s2(k)) ) ) );

{ solo equilibrio de fases }
MolBalance(j)..
SUM(exphase(k), MolsInPhas(k,j)) =E= totmolsfed(j);

```

```

MolSums(exphase(k))..
  SUM(j, MolsInPhas(k,j)) =E= Tmols(k);

CompSum(j,phasmod2(exphase(k)))..
  GComp(j,k) =E= SUM(jp, gnrtl(jp,j)*MolsInPhas(k,jp));

TauCompSum(j,phasmod2(exphase(k)))..
  TauGComp(j,k) =E= SUM(jp, tau(jp,j)*gnrtl(jp,j)*MolsInPhas(k,jp));

NRTLrefrm1(j,phasmod2(exphase(k)))..
  ZComp1(j,k)*SUM(jp, gnrtl(jp,j)*MolsInPhas(k,jp))
    =E= SUM(jp,
tau(jp,j)*gnrtl(jp,j)*MolsInPhas(k,jp));

NRTLrefrm2(j,phasmod2(exphase(k)))..
  ZComp2(j,k)*SUM(jp, gnrtl(jp,j)*MolsInPhas(k,jp))
    =E= MolsInPhas(k,j);

LOGTmols(k)..
  LNTmols(k) =E= LOG(Tmols(k)+s2(k));

Tmolsum..
  SUM(k, Tmols(k)) =E= totfeed;

{ Usado por el algoritmo MINLP para la representacion del problema }
PhaseLog(j,exphase(k))..
  MolsInPhas(k,j) - U1*InPhase.l(j,k) =L= 0;

PhaseCut(k)..
  SUM(j, InPhase(j,k)) - U2*Phase(k) =L= 0;

{ Modelo del Subproblema Primario }
MODEL PhasEquil phase equilibrium only
  / GibbsFree, MolBalance, MolSums, {TauCompSum, CompSum, }
  NRTLrefrm1, NRTLrefrm2, PhaseLog /;

PhasEquil.limrow = 0;

OPTION equilcomp:6, MolsInPhas:6, Tmols:6;

{***** Inicio - Instrucciones de Mapeo de Fases
*****}

{ Redefine mapeos existentes }
exphase(k) = YES;
*exphase("Liq2") = NO;
cmpnd2phas(j,k) = YES;
*cmpnd2phas(j,"Liq2") = NO;
cmp2phas(cmpnd2phas(j,k)) = YES;

{ Inicializa variables binarias para primera combinacion }
InPhase.l(cmpnd2phas(j,k)) = 1;

```

```

*InPhase.1(j,"Vap") = 0;
Phase.1(exphase(k)) = 1;
*Phase.1("Vap") = 0;

{ Punto inicial para el numero de moles }
PARAMETER tguess(k) estimado inicial para moles totales en la fase k
{ Solucion de Grossmann
/Vap 0.342530
Liq1 0.256610
Liq2 0.404460 /; }

{ Case LLV - P.I. #1
/Vap 0.40
Liq1 0.20
Liq2 0.40 /; }

{ Case LLV - P.I. #2
/Vap 0.05
Liq1 0.10
Liq2 0.85 /; }

{ Case LLV - P.I. #3 }
/Vap 0.333
Liq1 0.333
Liq2 0.333 /;

{ Case LLV - P.I. #X
/Vap 0.992130
Liq1 0.011465
Liq2 0.0 /; }

tguess(k) = 100*tguess(k);

PARAMETER iguess(j,k) estimado inicial del numero de moles
{ Solucion de Grossmann
/C6H6.Vap 0.46937
CH3CN.Vap 0.28997
H2O.Vap 0.24066
C6H6.Liq1 0.00268
CH3CN.Liq1 0.08008
H2O.Liq1 0.91724
C6H6.Liq2 0.45336
CH3CN.Liq2 0.47092
H2O.Liq2 0.07572 /; }

{ Case LLV - P.I. #1
/C6H6.Vap 0.50
CH3CN.Vap 0.30
H2O.Vap 0.20
C6H6.Liq1 0.01
CH3CN.Liq1 0.09
H2O.Liq1 0.90
C6H6.Liq2 0.40
CH3CN.Liq2 0.45

```

```

      H2O.Liq2      0.15 /; }

{ Case LLV - P.I. #2
  /C6H6.Vap      0.20
  CH3CN.Vap     0.10
  H2O.Vap       0.70
  C6H6.Liq1     0.20
  CH3CN.Liq1    0.20
  H2O.Liq1     0.60
  C6H6.Liq2     0.15
  CH3CN.Liq2    0.50
  H2O.Liq2     0.35 /; }

{ Case LLV - P.I. #3 }
  /C6H6.Vap     0.333
  CH3CN.Vap     0.333
  H2O.Vap       0.333

  C6H6.Liq1     0.333
  CH3CN.Liq1    0.333
  H2O.Liq1     0.333

  C6H6.Liq2     0.333
  CH3CN.Liq2    0.333
  H2O.Liq2     0.333 /;

{ Case LLV - P.I. #X
  /C6H6.Vap     0.3491
  CH3CN.Vap     0.3137
  H2O.Vap       0.3371
  C6H6.Liq1     0.00020
  CH3CN.Liq1    0.0300
  H2O.Liq1     0.9698
  C6H6.Liq2     0.0
  CH3CN.Liq2    0.0
  H2O.Liq2     0.0 /; }

MolsInPhas.l(k,j) = iguess(j,k)*tguess(k);
MolsInPhas.up(k,j) = totfeed;
MolsInPhas.lo(k,j) = trace$Inphase.l(j,k);
GComp.l(j,phasmod2(k)) = SUM(jp, gnrtl(jp,j)*MolsInPhas.l(k,jp));
GComp.lo(j,phasmod2(k)) = SUM(jp, gnrtl(jp,j)*MolsInPhas.lo(k,jp));
GComp.up(j,phasmod2(k)) = SUM(jp, gnrtl(jp,j)*MolsInPhas.up(k,jp));
TauGComp.l(j,phasmod2(k)) = SUM(jp,
tau(jp,j)*gnrtl(jp,j)*MolsInPhas.l(k,jp));
TauGComp.lo(j,phasmod2(k)) = SUM(jp,
tau(jp,j)*gnrtl(jp,j)*MolsInPhas.lo(k,jp));
TauGComp.up(j,phasmod2(k)) = SUM(jp,
tau(jp,j)*gnrtl(jp,j)*MolsInPhas.up(k,jp));
ZComp1.lo(j,phasmod2(k)) = trace;
ZComp2.lo(j,phasmod2(k)) = trace;
Tmols.up(k) = totfeed;
Tmols.lo(k) = trace;
Tmols.l(k) = SUM(j, MolsInPhas.l(k,j)) + Tmols.lo(k);

```

```

s1(cmpnd2phas(j,k)) = 1$(1-InPhase.1(j,k));
s2(k) = 1$(NOT (SUM(cmpnd2phas(j,k), InPhase.1(j,k))));

*MolsInPhas.fx(phasmod2(k),j) = iguess(j,k)*tguess(k);
*MolsInPhas.fx("Liq1",j) = iguess(j,"Liq1")*tguess("Liq1");

SOLVE PhasEquil USING RMINLP MINIMIZING FreeEnergy;

{ calcula composiciones }
  equilcomp(cmpnd2phas(j,exphase(k))) =
    (MolsInPhas.1(k,j)/SUM(cmp2phas(jp,k),
MolsInPhas.1(k,jp)))$Phase.1(k);

  DISPLAY equilcomp;

```

B.9 Programación de una Refinería.

Definición del problema.

Una refinería puede usar cuatro tipos de crudo diferentes para producir gasolina, combustóleo, gasavión y aceite lubricante. Los suministros de crudo están limitados y las demandas máximas de los productos están dadas. Un esquema de la operación de la planta se aprecia en la Fig. 3.9.

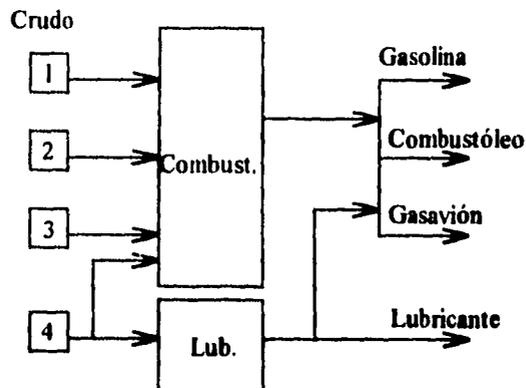


Figura B. 1 Operaciones del proceso.

La obtención de productos depende de los rendimientos de cada crudo y del proceso utilizado. Los costos de operación y de compra de crudo, junto con los precios de venta de los productos se dan en la Tabla B.1.

Productos/Crudos	Rendimiento bbl/bbl de crudo					Valor del Prod. \$/bbl	Dem. máx. kbbl/s
	1	Combustibles			Lub. 4		
Gasolina	0.6	0.5	0.3	0.4	0.4	45.00	170
Combustóleo	0.2	0.2	0.3	0.3	0.1	30.00	85
Gasavión	0.1	0.2	0.3	0.2	0.2	15.00	85
Ac. Lubricante	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2	60.00	20
Pérdidas por operación	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	-	-
Costo del Crudo \$/bbl	15.00	15.00	15.00	25.00	25.00		
Costos de Operación \$/bbl	5.00	8.50	7.50	3.00	2.50		
Suministro de Crudo kbbl/semana	100	100	100	200			

Tabla B. 8 Datos del problema.

Formular el problema para programar la refinería de manera que maximicen las ganancias.

Planteamiento de la Solución.

En este problema, deseamos saber la cantidad de los crudos 1, 2 y 3 que deberán usarse en el proceso para combustible, y la cantidad del crudo 4 que deberá ser usado en los procesos para combustible y para lubricante, de tal manera que se maximicen las ganancias. Consideremos la optimización en un período de una semana. Claramente, tenemos una variable de decisión para cada una de las cantidades (en centenas de barriles por semana) de los crudos 1, 2 y 3 utilizados en el proceso para combustible y dos variables

para las cantidades de crudo 4 (una para el combustible y la otra para lubricante). Llamemos a estas variables x_c ($c=1$ a 5), donde de x_1 a x_3 son las cantidades para los crudos del 1 al 3, x_4 para el crudo 4 en el proceso de combustible y x_5 para el crudo 4 en el proceso para obtener lubricante. Debido a que los suministros de crudo están limitados, las variables x_c estarán restringidas por

$$\begin{aligned} x_c &\leq S_c \text{ y} \\ x_4 + x_5 &\leq S_4 \end{aligned} \quad (1)$$

donde S_c es el suministro (kbbbl/semana) de crudo c ($c=1$ a 4 , por ejemplo: $S_1=100$) como están dados en la Tabla B.1.

Ahora encontremos las cantidades de los diferentes productos obtenidos para una utilización dada x_c de los crudos. Definamos como Q_p ($p=1$ a 4) a la cantidad total (kbbbl) de producto p obtenido, y sea a_{pc} la que denote el rendimiento (bbl/bbl de crudo; por ejemplo: $a_{23}=0.3$) de producto p para el crudo c . Aquí, $p=1$ a 4 se refiere a la gasolina, aceite para calentamiento, gasavión y aceite lubricante respectivamente. Usando los a_{pc} de la Tabla B.1, podemos escribir

$$Q_p = a_{p1}x_1 + a_{p2}x_2 + a_{p3}x_3 + a_{p4}x_4 + a_{p5}x_5 \quad p=1,4 \quad (2)$$

Las demandas máximas D_p ($p=1$ a 4 ; por ejemplo: $D_1=170$, etc.) nos proporcionan los límites superiores sobre Q_p . Utilizando las cantidades de producción Q_p y las utilidades de crudo x_c , podemos calcular las ganancias como el ingreso total por ventas menos el costo total de producción. Si v_p ($p=1$ a 4) es el valor del producto p , entonces el ingreso total (k\$) por la venta de los productos es

$$v_1Q_1 + v_2Q_2 + v_3Q_3 + v_4Q_4$$

Los costos de producción consisten en los costos de los crudos y los de operación. Sea C_c ($c=1$ a 5 ; por ejemplo: $C_1=20.0$) la que denote la suma de los costos por compra de materia prima y los de operación (\$/bbl) para el consumo de crudo x_c , entonces el costo total de producción es simplemente

$$C_1x_1 + C_2x_2 + C_3x_3 + C_4x_4 + C_5x_5$$

Por lo tanto, la formulación completa para este problema puede ser escrita como sigue:

$$\text{Maximizar } \sum_{p=1}^4 v_p Q_p - \sum_{c=1}^5 C_c x_c$$

sujeto a

$$x_4 + x_5 \leq S_1$$

$$Q_p = a_{p1}x_1 + a_{p2}x_2 + a_{p3}x_3 + a_{p4}x_4 + a_{p5}x_5 \quad p=1,4$$

$$Q_p \leq D_p x_c \geq 0, x_c \leq S_c, Q_p \geq 0$$

Hay nueve variables de optimización (x_c , $c=1$ a 5 ; Q_p , $p=1$ a 4) en la formulación anterior. Todas las variables son continuas. La función objetivo es una función lineal de estas variables, lo mismo que las ecuaciones 1 y 2; por lo tanto, esta es una formulación de programación lineal.

Para el modelo GAMS, definimos los conjuntos C para los crudos y P para los productos. Denotamos los datos del problema S_c , D_p , v_p , C_c y a_{pc} como $CALIMEN(C)$, $PDEMANDA(P)$, $PVALOR(P)$, $COSTOT(C)$ y $RENDIM(P,C)$. Calculamos $COSTOT(C)$ como la suma de $CCOSTO(C)$ y $OCOSTO(C)$ en el modelo GAMS, donde $CCOSTO(C)$ es el costo del crudo c y $OCOSTO(C)$ es su costo de operación. En GAMS, tuvimos que

definir una variable adicional (*GANANCIA*) para la función objetivo. Utilizamos X_4 para denotar gasio total de crudo 4 e impusimos un límite superior sobre él usando $X_4.UP=CALIMEN("4-avion")$. Las ecuaciones *PRODUCCION(P)* corresponden a la Ec. 2, las restricciones del suministro sobre x_c están dadas utilizando $X.UP(C)$, y los límites superiores sobre Q_p están impuestos por la utilización de $Q.UP(P)=PDEMANDA(P)$. Todas las variables, con excepción de la objetivo, están declaradas como positivas.

Resultados.

GAMS utiliza el módulo LP para resolver este problema. La terminación es normal y se obtiene una solución óptima. Como tenemos un problema lineal, la solución es óptima globalmente. De la solución óptima, vemos que se emplean 100, 100, 66.667 y 100 kbbbl/semana de los crudos 1, 2, 3 y 4 respectivamente, y que se producen 170, 70, 70 y 20 kbbbl/semana de gasolina, combustóleo, gasavión y aceite lubricante. La ganancia máxima obtenida es de 3400 k\$/semana (\$3,400,000/sem).

Los resultados de este problema se pueden obtener muy fácilmente considerando las ganancias por kbbbl para cada crudo. En primera instancia, consideremos el crudo 1. Para 1 kbbbl/sem de crudo 1, podemos producir 0.6 kbbbl/sem de gasolina, 0.2 de aceite y 0.1 de gasavión. Su costo de producción es 20 k\$ por bbl/semana. El valor de los productos obtenidos es $45 \times 0.6 + 30 \times 0.2 + 15 \times 0.1 = 34.5$ k\$. Entonces, si usamos 1 kbbbl/sem de crudo 1, obtenemos una ganancia de 14.5 k\$. Podemos realizar un análisis similar para otros los crudos, para obtener 8.0 k\$, 4.5 k\$, 2 k\$ y 8.5 k\$ para los crudos 2, 3, 4 y 5 respectivamente. Esto sugiere que la preferencia de utilización para las opcio-

nes de crudos debería ser 1, 5, 2, 3 y 4. Las únicas restricciones que deberíamos satisfacer ahora son las restricciones del suministro y las de demanda máxima. Es claro que primero debemos utilizar el crudo 1 tanto como podamos; de esta manera, todo el suministro de crudo 1 se utiliza en la solución óptima. Usando 100 kbbbl/semana de crudo 1 producimos 60 kbbbl/semana de gasolina, 20 de combustóleo y 10 de gasavión. Como no hemos excedido la demanda de ninguno de los productos, podemos usar el siguiente crudo más rentable. Así, podemos ocupar el crudo 4 en el proceso de lubricante. Con esto, la producción total es de 100, 30, 30 y 20 kbbbl/semana de gasolina, combustóleo, gasavión y lubricante respectivamente. En este momento, podemos usar el crudo 2, ya que no produce lubricante. Si lo usamos todo (100 kbbbl/demana), nuestra producción es entonces de 150, 50, 50 y 20 kbbbl/semana respectivamente. Podemos continuar obteniendo más productos. Ahora, tenemos que usar el crudo 3, pero no todo, ya que de otra manera podemos exceder las demandas de algunos productos. Fácilmente, podemos observar que la cantidad máxima de crudo 3 que podemos utilizar sin exceder ninguna demanda es de 66.667 kbbbl/semana, que es cuando cubrimos la demanda de gasolina. Por último, no podemos usar crudo 4 en el proceso de combustible, porque también produce gasolina y ya no necesitamos más.

Por supuesto, este problema es bastante simple, de manera que lo podemos resolver analíticamente. En general, esto no es posible, debido a que las consideraciones como las que nos dieron una pista sobre la naturaleza de la solución óptima y los factores que controlan, pueden ser relajadas para incrementar o decrementar la función objetivo.

```

$TITLE Programacion de una Refineria
$OFFUPPER
$OFFSYMXREF OFFSYMLIST

OPTION SOLPRINT = OFF;

* Define conjuntos de indices
SETS C Crudos /1*3, 4-avion, 4-lubri/
    P Productos /gasolina, acecal, gasavion, lubricante/

*Define e inicializa los datos del problema
PARAMETER CALIMEN(C) Disponibilidad de petroleo crudo en kbbl por semana
/
    1 100.0, 2 100.0, 3 100.0, 4-avion 200.0, 4-lubri 200.0/
CCOSTO(C) Costos del crudo en $ por bbl /
    1 15.0, 2 15.0, 3 15.0, 4-avion 25.0, 4-lubri 25.0/
PDEMANDA(P) Demandas maximas de los productos en kbbl por
semana /
    gasolina 170.0, acecal 85.0, gasavion 85.0, lubricante
20.0/
PVALOR(P) Valor de los productos en $ por bbl /
    gasolina 45.0, acecal 30.0, gasavion 15.0, lubricante 60.0/
OCOSTO(C) Costos de operacion en $ por bbl /
    1 5.0, 2 8.5, 3 7.5, 4-avion 3.0, 4-lubri 2.50/
COSTOT(C) Costo total: crudo mas operacion;
COSTOT(C) = CCOSTO(C) + OCOSTO(C);
TABLE RENDIM(P, C) Rendimientos de los crudos
    1      2      3      4-avion 4-lubri
gasolina 0.6  0.5  0.3  0.4  0.4
acecal   0.2  0.2  0.3  0.3  0.1
gasavion 0.1  0.2  0.3  0.2  0.2
lubricante 0.0  0.0  0.0  0.0  0.2;

* Define las variables de optimizacion
VARIABLES X(C) Crudos usados en kbbl por semana
    Q(P) Cantidades de producto obtenido en kbbl
    X4 Cantidad total de crudo 4 usado en kbbl
    GANANCIA Ganancia total por venta de productos en k$;
POSITIVE VARIABLES X, X4, Q;

* Define las restricciones y la funcion objetivo
EQUATIONS FUNOBJ Funcion objetivo a ser maximizada
    CRUDO4 Total de crudo 4 usado
    PRODUCCION(P) Cantidades de productos obtenidos;
FUNOBJ.. GANANCIA =E= SUM(P, Q(P)*PVALOR(P)) -
    SUM(C, COSTOT(C)*X(C));
PRODUCCION(P).. Q(P) =E= SUM(C, RENDIM(P,C)*X(C));
CRUDO4.. X4 =E= X("4-avion") + X("4-lubri");

* Define los limites superiores e inferiores
* Limites superiores sobre productos con base en demandas maximas
    Q.UP(P) = PDEMANDA(P);
* Limites superiores sobre para crudos en base a su disponibilidad

```

```
X.UP(C) = CALIMEN(C);  
X4.UP = CALIMEN("4-avion");
```

```
* Define el modelo y lo resuelve  
MODEL SCHEDULE /ALL/;  
SOLVE SCHEDULE USING LP MAXIMIZING GANANCIA;
```

Referencias.

BROOKE, Anthony, KENDRICK, David & MEERAUS, Alexander. GAMS. A user's guide. Scientific Press, U.S.A., 1988.

MORARI, Manfred & GROSSMANN, Ignacio E. CACHE Process Design Case Studies. (Vol. 6: Chemical Engineering Optimization Models with GAMS), Oct. 1991.

Apéndice C

CÓDIGOS DE LOS EJEMPLOS DE APLICACIÓN

A continuación se presentan los códigos GAMS creados por el programa SELSEC y utilizados para obtener las soluciones presentadas en los ejemplos de aplicación del capítulo 5.

C.1 Secuencia Óptima sin Integración.

\$ONTEXT

SELSEC. Sintesis de Secuencias de Separacion
Por: Carlos C. Vargas R.

Universidad Nacional Autonoma de Mexico
Facultad de Quimica
Departamento de Ingenieria Quimica

\$OFFTEXT

\$TITLE Sintesis de Secuencias de Separacion: TESIS1
 \$\$TITLE Carlos C. Vargas R., 1994, UNAM
 \$OFFUPPER OFFSYMLIST OFFSYMREF OFFUELLIST OFFUELXREF OFFDIGIT

SETS

k	Columnas en la superestructura	/ 1*10 /
FSf(k)	Columnas con alim. original	/ 1,2,3 /
FSmABC(k)	Cols. alimentadas con ABC	/ 4,5 /
FSmBCD(k)	Cols. alimentadas con BCD	/ 6,7 /
FSmAB(k)	Cols. alimentadas con AB	/ 8 /
FSmBC(k)	Cols. alimentadas con BC	/ 9 /
FSmCD(k)	Cols. alimentadas con CD	/ 10 /
PSmABC(k)	Cols. que producen ABC	/ 3 /
PSmBCD(k)	Cols. que producen BCD	/ 1 /
PSmAB(k)	Cols. que producen AB	/ 2,5 /
PSmBC(k)	Cols. que producen BC	/ 4,7 /
PSmCD(k)	Cols. que producen CD	/ 2,6 /

;

PARAMETERS

HK(k)	Constantes calorificas para corriente k	
/ 1	3.3405518556815E-03	
2	3.31113113300471E-03	
3	6.12345556968427E-04	
4	4.43728421430772E-03	
5	7.01795814253521E-04	
6	1.99542172597229E-03	
7	2.68416570579469E-05	
8	3.47852194332031E-03	
9	1.97962502423322E-03	
10	3.22325419169B44E-04 /	

ALFA(k)	Factor de costo fijo de la columna k	
---------	--------------------------------------	--

/ 1	1.33617976508782
2	1.64230877897397
3	1.66143058838135
4	1.33793566346106
5	1.56905616467735
6	1.65224967968399
7	1.7689040468854
8	1.32405604287477
9	1.60955763290395
10	3.29463664611249 /

BETA(k)	Factor de costo variable de la columna k	
---------	--	--

/ 1	2.86549091365891E-04
2	6.33216376069084E-04
3	6.86200529720928E-04
4	4.8176105392872E-04
5	6.65903737319057E-04
6	6.63235362620093E-04
7	6.4971375B918885E-04

8 8.69750759539441E-04
 9 1.05456537558172E-03
 10 3.26737562516543E-03 /

CHIKABC(k) Recuperacion en columnas produciendo ABC
 / 3 .6 /

CHIKBCD(k) Recuperacion en columnas produciendo BCD
 / 1 .9 /

CHIKAB(k) Recuperacion en columnas produciendo AB
 / 2 .3
 5 .5 /

CHIKBC(k) Recuperacion en columnas produciendo BC
 / 4 .8333333
 7 .5555556 /

CHIKCD(k) Recuperacion en columnas produciendo CD
 / 2 .7
 6 .7777778 /

;
 SCALARS

Ftot Flujo de la alimentacion inicial / 1000 /
 Ccal Costo de calentamiento / 82.105 /
 Cenf Costo de enfriamiento / 162.21 /
 LS Limite superior / 1000 /;

VARIABLES

Y(K) Existencia potencial de la columna
 F(K) Flujo de alimentacion a la columna
 Q(K) Calor en la columna
 MONTO Costo total;

BINARY VARIABLE Y(K);
 POSITIVE VARIABLES F(K),Q(K);

EQUATIONS

FLUJOS Verifica el flujo total
 CALOR1(k) Balances de calor
 BALANCE1 Balance de masa del intermedio ABC
 BALANCE2 Balance de masa del intermedio BCD
 BALANCE3 Balance de masa del intermedio AB
 BALANCE4 Balance de masa del intermedio BC
 BALANCE5 Balance de masa del intermedio CD
 LOGICA1(k) Limite superior de los flujos
 REST Restringe el numero de columnas
 COSTO Define la funcion objetivo;

FLUJOS.. SUM(k\$FSf(k),F(k)) =E= Ftot;

```

BALANCE1..  SUM(k$FSmABC(k), F(k)) - SUM(k$PSmABC(k), CHIKABC(k) * F(k)) =E=
0;
BALANCE2..  SUM(k$FSmBCD(k), F(k)) - SUM(k$PSmBCD(k), CHIKBCD(k) * F(k)) =E=
0;
BALANCE3..  SUM(k$FSmAB(k), F(k)) - SUM(k$PSmAB(k), CHIKAB(k) * F(k)) =E= 0;
BALANCE4..  SUM(k$FSmBC(k), F(k)) - SUM(k$PSmBC(k), CHIKBC(k) * F(k)) =E= 0;
BALANCE5..  SUM(k$FSmCD(k), F(k)) - SUM(k$PSmCD(k), CHIKCD(k) * F(k)) =E= 0;
CALOR1(k).. Q(k) - F(k) * HK(k) =E= 0;
LOGICAL1(k).. F(k) - LS * Y(k) =L= 0;
REST..      SUM(k, Y(k)) =E= 3 ;
COSTO..     MONTO =E=
SUM(k, BETA(k) * F(k) + (Ccal+Cenf) * Q(k)) + SUM(k, ALFA(k) * Y(k));

OPTION LIMROW = 0;
OPTION LIMCOL = 0;
OPTION SYSOUT = OFF;
OPTION SOLPRINT = OFF;

MODEL SECUENCIA /ALL/;

SOLVE SECUENCIA USING MIP MINIMIZING MONTO;

DISPLAY MONTO.L, Y.L, F.L, Q.L;

```

C.2 Secuencia Óptima con Integración.

```

$ONTEXT
      SELSEC. Sintesis de Secuencias de Separacion
              con integracion termica
              Por: Carlos C. Vargas R.

              Universidad Nacional Autonoma de Mexico
              Facultad de Quimica
              Departamento de Ingenieria Quimica
$OFFTEXT

$TITLE Sintesis de Secuencias de Separacion: TESIS2
$STITLE Carlos C. Vargas R., 1994, UNAM (GAMS Restringido)
$OFFUPPER OFFSYMLIST OFFSYMREF OFFFUELLIST OFFFUELKREF OFFDIGIT

SETS
  k  Columnas en la superestructura / 1*4 /
  FSf(k)  Columnas con alim. original / 1,2 /
  FSmAB(k)  Cols. alimentadas con AB / 3 /
  FSmBC(k)  Cols. alimentadas con BC / 4 /
  PSmAB(k)  Cols. que producen AB / 2 /
  PSmBC(k)  Cols. que producen BC / 1 /

```

ALIAS (i,k);
ALIAS (j,k);

PARAMETERS

HK(k) Constantes calorificas para corriente k
/ 1 4.43728421430772E-03
2 7.01795814253521E-04
3 3.47852194332031E-03
4 1.97962502423322E-03 /

ALFA(k) Factor de costo fijo de la columna k
/ 1 1.33793566346106
2 1.56905616467735
3 1.32405604287477
4 1.60955763290395 /

BETA(k) Factor de costo variable de la columna k
/ 1 4.8176105392872E-04
2 8.65903737319057E-04
3 8.69750759539441E-04
4 1.05456537558172E-03 /

CHIKAB(k) Recuperacion en columnas produciendo AB
/ 2 .5 /

CHIKBC(k) Recuperacion en columnas produciendo BC
/ 1 .833333333333333 /

DELT(k) Dif. de Temperaturas en la columna k
/ 1 36.69473
2 36.69473
3 14.96604
4 15.99244
/;

PARAMETER UP(i,j) Limite superior en el intercambio entre i y j;
PARAMETER UBO(i,j) Limite superior Trebi-Tcondj-DTMIN;

UP(i,j) = 220;
UBO(i,j) = 225;

SCALARS

Ftot Flujo de la alimentacion inicial / 600 /
Ccal Costo de calentamiento / 82.105 /
Cenf Costo de enfriamiento / 162.21 /
DTMIN Acercamiento minimo / 10 /
LS Limite superior / 600 /;

VARIABLES

Y(K) Existencia potencial de la columna

F(K) Flujo de alimentacion a la columna
 Q(K) Calor en la columna
 MONTO Costo total;

BINARY VARIABLE Y(K),Z(i,j);
 POSITIVE VARIABLES F(K),Q(K),TREB(j),TCOND(i);
 POSITIVE VARIABLES QHEAT(i,j),QSTEAM(k),QCW(k);

EQUATIONS

FLUJOS Verifica el flujo total
 CALOR1(k) Balances de calor
 CALOR2(k) Balances de calor
 CALOR3(k) Balances de calor
 CALOR4(k) Balances de calor
 BALANCE1 Balance de masa del intermedio AB
 BALANCE2 Balance de masa del intermedio BC
 LOGICA1(k) Limite superior de los flujos
 LOGICA2(i,j)
 LOGICA3(i,j)
 REST Restringe el numero de columnas
 COSTO Define la funcion objetivo;

FLUJOS.. SUM(k\$FSf(k),F(k)) =E= Ftot;
 BALANCE1.. SUM(k\$FSmAB(k),F(k)) -SUM(k\$PSmAB(k),CHIKAB(k)*F(k)) =E= 0;
 BALANCE2.. SUM(k\$FSmBC(k),F(k)) -SUM(k\$PSmBC(k),CHIKBC(k)*F(k)) =E= 0;
 CALOR1(k).. Q(k) - F(k)*HK(k) =E= 0;
 CALOR2(k).. SUM(j\$(ORD(j) NE ORD(k)),QHEAT(k,j))+QCW(k) =E= Q(k);
 CALOR3(k).. SUM(i\$(ORD(i) NE ORD(k)),QHEAT(i,k))+QSTEAM(k) =E= Q(k);
 CALOR4(k).. TREB(k) -TCOND(k) =E= DELT(k);
 LOGICA1(k).. F(k) -LS*Y(k) =L= 0;
 LOGICA2(i,j)\$ (ORD(i) NE ORD(j)).. QHEAT(i,j) - UBO(i,j) * Z(i,j) =L= 0;
 LOGICA3(i,j)\$ (ORD(i) NE ORD(j)).. TCOND(i) -TREB(j) -DTMIN+UP(i,j)*(1-Z(i,j)) =G= 0;
 REST.. SUM(k,Y(k)) =E= 2 ;
 COSTO.. MONTO =E= SUM(k,BETA(k)*F(k)+Ccal*QSTEAM(k)+Cenf*QCW(k))+SUM(k,ALFA(k)*Y(k));

OPTION LIMROW = 0;
 OPTION LIMCOL = 0;
 OPTION SYSOUT = OFF;
 OPTION SOLPRINT = OFF;

TCOND.LO(k) = 200;
 TREB.UP(k) = 500;

MODEL SECUENCIA /ALL/;

SOLVE SECUENCIA USING MIP MINIMIZING MONTO;

DISPLAY MONTO.L, Y.L, F.L, Q.L;
 DISPLAY Z.L,TCOND.L,TREB.L,QSTEAM.L,QCW.L,QHEAT.L;