

INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS  
SUPERIORES DE MONTERREY

CAMPUS MONTERREY

DIVISION DE INGENIERIA Y ARQUITECTURA  
PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERIA



TECNOLÓGICO  
DE MONTERREY.

EFICIENTIZACION DE UN ALGORITMO GENETICO  
MULTIOBJETIVO PARA LA SINTESIS DE PROCESOS

TESIS

PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL  
PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE

MAESTRO EN CIENCIAS EN SISTEMAS AMBIENTALES CON  
ESPECIALIDAD EN INGENIERIA DE PROCESOS

POR:

DAVID NAJERA BAYONA

MONTERREY, N. L.

DICIEMBRE DE 2004

**INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS  
SUPERIORES DE MONTERREY**

**CAMPUS MONTERREY**

**DIVISION DE INGENIERIA Y ARQUITECTURA  
PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERIA**



**TECNOLÓGICO  
DE MONTERREY.**

**EFICIENTIZACION DE UN ALGORITMO GENETICO  
MULTIOBJETIVO PARA LA SINTESIS DE PROCESOS**

**TESIS**

**PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL  
PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE**

**MAESTRO EN CIENCIAS EN SISTEMAS AMBIENTALES CON  
ESPECIALIDAD EN INGENIERIA DE PROCESOS**

**POR:**

**DAVID NAJERA BAYONA**

**MONTERREY, N. L.**

**DICIEMBRE DE 2004**

**INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE  
MONTERREY**

**CAMPUS MONTERREY**

**DIVISIÓN DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA  
PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERÍA**



**TECNOLÓGICO  
DE MONTERREY**

**EFICIENTIZACIÓN DE UN ALGORITMO GENÉTICO  
MULTIOBJETIVO PARA LA SÍNTESIS DE PROCESOS**

**TESIS**

**PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL PARA  
OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE MAESTRO  
EN CIENCIAS EN SISTEMAS AMBIENTALES CON  
ESPECIALIDAD EN INGENIERÍA DE PROCESOS**

**DAVID NAJERA BAYONA**

**Monterrey, N. L.**

**DICIEMBRE 2004**

INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES DE  
MONTERREY

CAMPUS MONTERREY

DIVISIÓN DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA  
PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERÍA

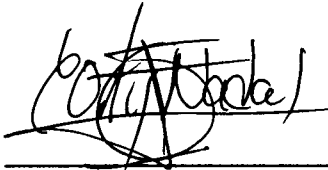
Los miembros del comité de tesis recomendamos que la presente tesis del Ing. David Najera Bayona sea aceptada como requisito parcial para obtener el grado académico de Maestro en Ciencias en Sistemas Ambientales con especialidad en:

INGENIERÍA DE PROCESOS

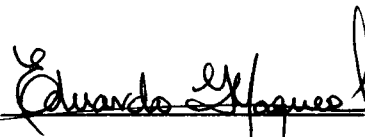
Comité de tesis



Dr. Joaquín Acevedo Mascarúa  
Asesor



Dr. Enrique Ortiz Nadal  
Sinodal



Dr. Eduardo Gómez Maqueo Aréchiga  
Sinodal

APROBADO



Dr. Federico Viramontes Brown  
Director del programa de Graduados en Ingeniería  
Diciembre 2004

## RESUMEN

El desarrollo de un modelo riguroso que pueda ser usado para la síntesis de procesos ecoeficientes es una tarea difícil que requiere un tiempo considerable para un ingeniero de procesos. En la actualidad los simuladores comerciales son herramientas ampliamente utilizadas que simplifican este problema, proporcionando modelos eficientes para la evaluación de las operaciones unitarias más comunes así como relaciones termodinámicas inherentes del proceso. Sin embargo los métodos determinísticos de optimización no son totalmente compatibles cuando se evalúan modelos continuos-discretos con funciones no convexas y discontinuidad en las variables. Se ha probado que la implementación de algoritmos evolutivos (e.g. algoritmos genéticos) en simuladores modulares elimina este problema, y además presentan ventajas adicionales con respecto a las técnicas clásicas de optimización como la basada en gradientes.

En el presente trabajo se utiliza un Algoritmo Genético Multiobjetivo Elitista (NSGA-II) acoplado al simulador de procesos ASPEN Plus® 12.1 para la síntesis de procesos de separación mediante la creación de la superestructura en la interfase gráfica del simulador. Se mejora el rendimiento de un algoritmo de convergencia para eliminar el tiempo de cómputo innecesario una vez que se ha encontrado la curva óptima de Pareto. La eficiencia computacional del criterio de convergencia se demuestra a través de varios ejemplos numéricos y de problemas de síntesis y diseño de procesos de separación multicomponente tomados de la literatura. Criterios económicos y de operación son tomados como funciones independientes de optimización. Reducciones en el tiempo máquina de más del 60% son obtenidas para los problemas de estudio.

## TABLA DE CONTENIDO

<b>Cap 1. Introducción a la síntesis y diseño procesos .....</b>	<b>1</b>
INTRODUCCIÓN .....	1
EJEMPLO MOTIVADOR.....	3
OBJETIVO DE LA TESIS.....	5
OBJETIVOS PARTICULARES.....	5
DESCRIPCIÓN DE LA TESIS .....	6
<b>Cap 2. Optimización multiobjetivo y algoritmos genéticos .....</b>	<b>7</b>
INTRODUCCIÓN .....	7
COMPUTACIÓN EVOLUTIVA Y ALGORITMOS GENETICOS .....	9
OPERADORES GENETICOS .....	10
AEMO'S DE PRIMERA GENERACIÓN.....	13
AEMO'S DE SEGUNDA GENERACIÓN .....	14
OPTIMIZACION MULTIOBJETIVO DE PROCESOS QUIMICOS.....	18
<b>Cap 3. Mejora de un algoritmo genético multiobjetivo .....</b>	<b>22</b>
INTRODUCCIÓN .....	22
PARÁMETROS DEL CRITERIO DE CONVERGENCIA.....	26
APROXIMACIÓN AL PARETO ÓPTIMO.....	31
DESCRIPCIÓN DEL DISEÑO DE EXPERIMENTOS .....	37
ANÁLISIS DEL CRITERIO DE CONVERGENCIA .....	37
MODIFICACIONES AL CRITERIO DE CONVERGENCIA .....	43
CONCLUSIONES.....	45
<b>Cap 4. Síntesis y diseño óptimo de procesos de separación.....</b>	<b>46</b>
INTRODUCCIÓN .....	46
SÍNTESIS DE SECUENCIAS DE DESTILACIÓN.....	47
Ejemplo 1. Separación de mezclas multicomponente.....	47
Ejemplo 1, caso 1. Separación completa de c4 a c7.....	48
Ejemplo 1, caso 2. Separación completa del n-hexano .....	57
SÍNTESIS DE SECUENCIAS DE DESTILACIÓN CON INTEGRACIÓN DE ENERGÍA .....	64
Ejemplo 2. Separación de c4's con integración de calor.....	65
DISEÑO ÓPTIMO DE PROCESOS DE DESTILACIÓN.....	72
Ejemplo 3. Destilación extractiva de tolueno-nheptano-fenol.....	73
<b>Cap 5. Conclusiones y trabajo futuro .....</b>	<b>75</b>
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES .....	75
TRABAJO FUTURO .....	76
BIBLIOGRAFÍA Y REFERENCIAS .....	79
ANEXO A. Interfase de optimización.....	88
ANEXO B. Funcionamiento del NSGA-II.....	90
ANEXO C. Resultados de análisis de sensibilidad.....	95

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Superestructura de separación.....	3
Figura 2. Optimización Multiobjetivo Ideal.....	8
Figura 3. Principio de operación de un AG.....	11
Figura 4. Ubicación del criterio de convergencia en el AG.....	23
Figura 5. Secuencia del criterio de convergencia.....	25
Figura 6. Procedimiento del Parámetro $\varepsilon$ y $\varphi$ .....	26
Figura 7. Representación de los intervalos respecto a $f_1$ .....	28
Figura 8. Subdivisión del intervalo 1.....	28
Figura 9. Representación de intervalo vacío.....	28
Figura 10. Procedimiento del parámetro $\omega$ .....	29
Figura 11. Procedimiento de los parámetros $\varepsilon_2$ y $\lambda$ .....	30
Figura 12. Procedimiento del parámetro $\psi$ .....	31
Figura 13. Representación de EE.....	33
Figura 14. Ejemplificación del cálculo de errores.....	36
Figura 15. Proceso de destilación extractiva sin recirculación.....	40
Figura 16. Valores de parámetros en el análisis de sensibilidad.....	41
Figura 17. Costo Total vs Pureza.....	42
Figura 18. Pureza vs Costo Total.....	43
Figura 19. Secuencias de destilación para la separación de ejemplo1, caso1.....	49
Figura 20. Superestructura del proceso de separación.....	50
Figura 21. Mejores soluciones para ejemplo 1, caso 1.....	51
Figura 22. Secuencias dominantes en la síntesis.....	52
Figura 23. Identificación de un diseño óptimo para la separación.....	53
Figura 24. Identificación de un diseño óptimo para la separación.....	55
Figura 25. Producto C de interés, secuencias adicionales.....	58
Figura 26. Conjunto de soluciones óptimas ejemplo 1 Caso 2.....	60
Figura 27. Comparación de resultados usando estrategia EO y SM.....	63
Figura 28. Integración de energía para la separación de ABC.....	64
Figura 29. Secuencias de separación del ejemplo 2.....	66
Figura 30. Superestructura del proceso de separación sin integración de energía.....	67
Figura 31. Superestructura del proceso de separación con integración de energía.....	67
Figura 32. Soluciones óptimas de la separación de C4's.....	69
Figura 33. Proceso de extracción sin recirculación.....	73
Figura 34. Diseños óptimos para el proceso sin recirculación.....	74

# 1 | Introducción a la Síntesis y Diseño Procesos

## INTRODUCCIÓN

El diseño de procesos ecoeficientes comienza con el deseo de producir productos económicamente rentables que satisfagan las necesidades sociales sin afectar el medio ambiente. Estos incluyen la manufactura de petroquímicos, derivados del petróleo, gases industriales, alimentos, farmacéuticos, polímeros, etc. Actualmente muchos de los proyectos apuntan hacia el rediseño de un proceso industrial para solucionar problemas ambientales y estándares estrictos de seguridad o para incrementar la capacidad de producción de la planta. Casi todos los procesos químicos requieren la separación de especies (componentes). Por ejemplo, cuando el proceso incluye una o más etapas de reacción, las operaciones de separación son requeridas para (1) purificar la alimentación del reactor, (2) recuperar los componentes que no reaccionaron para luego reciclarlos al reactor y (3) para separar y purificar los productos del reactor.

Los procesos de separación a nivel industrial generalmente incluyen mezclas multicomponente las cuales tienen que ser separadas, ya sea en componentes puros o en mezclas binarias, terciarias dependiendo de los requerimientos del proceso. Normalmente en estos casos un tren de columnas de separación es más viable operacional y económicamente. En general, gran parte de los costos totales de una planta de proceso refieren a los procesos de separación y como consecuencia se ha puesto gran atención en la optimización del diseño y operación de esta operación unitaria (Seider, Seader & Lewin, 1999). Una opción para



disminuir el consumo de energía es integrar energéticamente las corrientes del proceso disminuyendo así los costos de operación. La modelación matemática y optimización de los procesos de separación es cada vez más rigurosa y la utilización de simuladores comerciales y algoritmos avanzados de optimización es una alternativa para ello. Los simuladores comerciales como el ASPEN Plus® proporcionan diferentes modelos de operaciones unitarias y relaciones termodinámicas para procesos de separación por destilación. Estos modelos utilizan métodos cortos o rigurosos para la simulación y diseño del proceso de destilación y procesos de extracción líquido-líquido. La flexibilidad que ofrece el ASPEN Plus® en la modelación y simulación de las operaciones unitarias y modelos termodinámicos hace de esta herramienta una de las más utilizadas actualmente.

Los problemas de síntesis y diseño óptimo de procesos de separación requieren la utilización de algoritmos de optimización mixtos-enteros los cuales son capaces de manejar las variables de decisión involucradas en la elección de la secuencia de destilación a evaluar y su conectividad en la superestructura del proceso. Es por ello que se necesitan métodos de optimización que manejen sin dificultad variables enteras, continuas y no-continuas, así como funciones no-convexas. Los métodos determinísticos de optimización presentan problemas con este tipo de procesos y tienen que utilizarse modelos de optimización simplificados.

La alternativa de utilizar algoritmos evolutivos tales como algoritmos genéticos (AGs) aplicados al área de optimización de procesos ha alcanzado gran importancia ya que cubren las deficiencias de los métodos tradicionales. La optimización rigurosa de procesos puede ser llevada a cabo con los AGs haciendo uso del simulador ASPEN Plus® mediante una interfase de optimización algo que con los métodos tradicionales no se pueden lograr. La razón por la cual los AGs no han sido aceptados de manera contundente es debido al tiempo computacional requerido para la optimización y esto representa una desventaja respecto a los modelos determinísticos.

## EJEMPLO MOTIVADOR

El primer paso para la síntesis de procesos es la creación de la superestructura que represente todas las configuraciones posibles para llevar a cabo un proceso de transformación. En la Figura 1 se presenta la superestructura para la síntesis de un proceso de destilación multicomponente en el cual se pueden evaluar cada una de las secuencias para llevar a cabo el proceso. Así, para una mezcla de cuatro componentes ( $n=4$ ) se tendrán  $n-1$  secuencias posibles para la separación completa de los compuestos. Esta superestructura puede representar varios casos de estudio, por ejemplo (i) la separación completa de los componentes de una mezcla, (ii) la recuperación de un compuesto de importancia, o (iii) la integración energética entre corrientes de proceso. La flexibilidad del ASPEN Plus® permite modelar diferentes operaciones unitarias (absorción, destilación ordinaria, destilación extractiva y azeotrópica) con el mismo bloque de la interfase gráfica, RADFRAC.

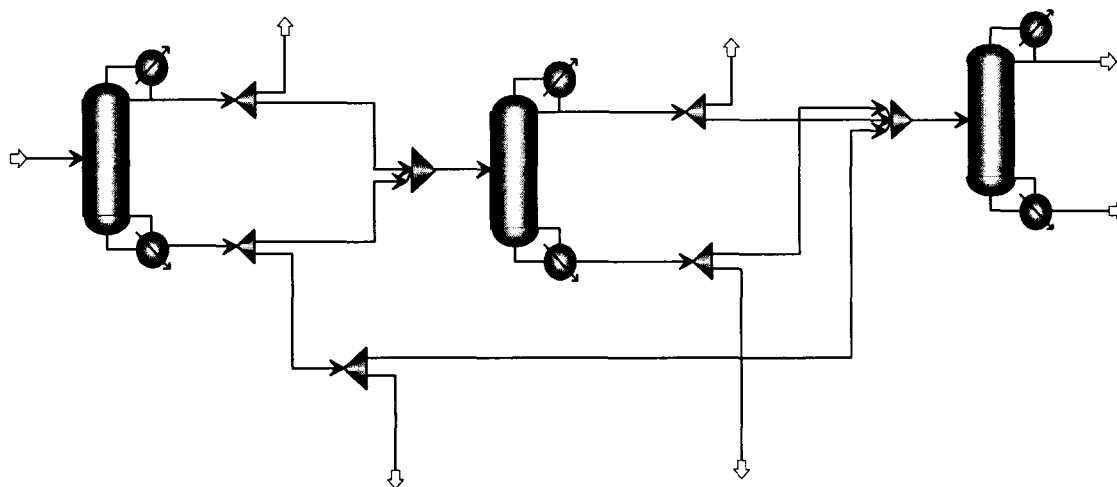


Figura 1. Superestructura de separación

Idealmente se pretenden alcanzar múltiples objetivos independientes cuando se realiza la optimización de este tipo de procesos. Obviamente entre estos objetivos está la minimización de costo de capital y operación, maximización de ganancias totales, maximización de la pureza y/o recuperación de algún(os) compuesto(s), y por supuesto el mínimo impacto ambiental del proceso. El objetivo de realizar la optimización multiobjetivo obedece a la necesidad de conocer el proceso en varios escenarios óptimos de diseño y operación y analizar la sensibilidad que éste tiene con respecto a los grados de libertad establecidos.

Por otro lado, es de gran importancia el contar con un criterio de convergencia apropiado en los AGs con la finalidad de minimizar el tiempo de cómputo para problemas de optimización complejos. La idea central de este criterio de convergencia es que evitará evaluaciones innecesarias una vez que el conjunto de soluciones óptimas es encontrado.

## OBJETIVO DE LA TESIS

- Desarrollo de un modelo automatizado para la síntesis y diseño de procesos mediante un Algoritmo Genético de Optimización Multiobjetivo eficiente y el simulador de procesos APEN Plus<sup>®</sup>.

## OBJETIVOS PARTICULARES

- Definición de un Criterio de Convergencia para el Algoritmo Genético Multiobjetivo con la finalidad de reducir el tiempo de cómputo.
- Aplicación de múltiples criterios de optimización en la síntesis de secuencias de destilación multicomponente por medio de la evaluación de la superestructura en ASPEN Plus<sup>®</sup>.
- Evaluación de la convergencia del algoritmo de optimización mediante un análisis de sensibilidad sobre los parámetros del criterio propuesto.

## DESCRIPCIÓN DE LA TESIS

En el capítulo 2 se describen los conceptos teóricos sobre computación evolutiva, algoritmos genéticos y optimización multiobjetivo. Se describe el funcionamiento de algunos algoritmos de optimización multiobjetivo prestando especial atención sobre el NSGA-II (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm v.2) desarrollado por Deb K. et al. (2000). Se presentan aplicaciones de optimización multiobjetivo en el área de ingeniería química con y sin la utilización de algoritmos genéticos.

En el capítulo 3 se proponen estrategias para mejorar el desempeño del NSGA-II mediante la definición de un Criterio de Convergencia. La primera propuesta del Criterio de Convergencia (Barcena, 2003) consta de seis parámetros los cuales reducen el tiempo de optimización de manera importante -comenta el autor. Se presenta un análisis de sensibilidad sobre cada uno de los parámetros que conforman el Criterio de Convergencia aplicándolo a cuatro problemas numéricos y a un problema de destilación extractiva con la finalidad de analizar el impacto que cada parámetro tiene sobre los problemas analizados. Al final del capítulo se presentan conclusiones del análisis de sensibilidad y se dan algunas recomendaciones para implementar el Criterio de Convergencia.

En el capítulo 4 se aplica el NSGAII-Criterio de Convergencia para la síntesis y diseño de algunos procesos de separación presentados en la literatura. Se realiza la síntesis de procesos de separación de mezclas multicomponente con y sin integración de energía entre corrientes de proceso. Se obtiene el diseño óptimo de un proceso de destilación extractiva con y sin recirculación de solvente.

Finalmente en el capítulo 5 se presentan las conclusiones y recomendaciones. Se proponen aplicaciones de la interfase de optimización para diseño y síntesis de procesos reales y se da una perspectiva en esta línea de investigación.

# 2 | Optimización Multiobjetivo y Algoritmos Genéticos

## INTRODUCCIÓN

Una gran diversidad de problemas en el diseño, construcción, planeación, operación, y análisis de plantas químicas así como muchos otros procesos industriales pueden ser resueltos mediante modelos de optimización matemática. La optimización implica la selección de la mejor solución de un conjunto de candidatos disponibles, la cual es cuantificada usando una función objetivo (e.g., costo, ganancias, impacto ambiental) los cuales deben ser minimizados o maximizados (Himmelblau & Ladson, 2001).

En muchos casos son evidentes múltiples criterios u objetivos de evaluación. Debido a la falta de metodologías adecuadas, en el pasado los problemas de optimización eran tomados y resueltos como problemas con una sola función objetivo, es decir encontrar la mejor solución al problema de optimización (óptimo global), en cambio un problema multiobjetivo tiene un número de funciones objetivo a satisfacer las cuales tienen que ser maximizadas o minimizadas simultáneamente. Como en el caso de la optimización simple, aquí también el problema tiene un número de restricciones las cuales cualquier solución (incluyendo la solución óptima) debe cumplir. El modelo más general de un algoritmo multiobjetivo se presenta a continuación tomado de Deb (2001).

$$\text{Min/Max } f_m(x), \quad m=1,2,\dots,M; \quad \text{Ec. 1}$$

$$\text{Sujeto a } g_j(x) \geq 0, \quad j=1,2,\dots,J; \quad \text{Ec. 2}$$

$$h_k(x) = 0, \quad k=1,2,\dots,K; \quad \text{Ec. 3}$$

$$x_i^{(L)} \leq x_i \leq x_i^{(U)}, \quad i=1,2,\dots,n \quad \text{Ec. 4}$$

La solución  $x$  es un vector de  $n$  variables de decisión:  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ . Las restricciones descritas (Ec. 4) son llamadas variables de frontera, las cuales restringen cada una de las variables de decisión  $x_i$  a tomar un valor entre el límite mínimo  $x_i^{(L)}$  y el máximo  $x_i^{(U)}$ . Esos límites constituyen un espacio de decisión de la variable. Asociados al problema están las  $J$  restricciones de desigualdad  $g$  (Ec. 2), y las  $K$  restricciones de igualdad  $h$  (Ec. 3). La solución  $x$  que satisface el conjunto de restricciones ( $J + K$ ) y que está dentro de los límites es llamada solución factible, en caso contrario tenemos una solución no factible.

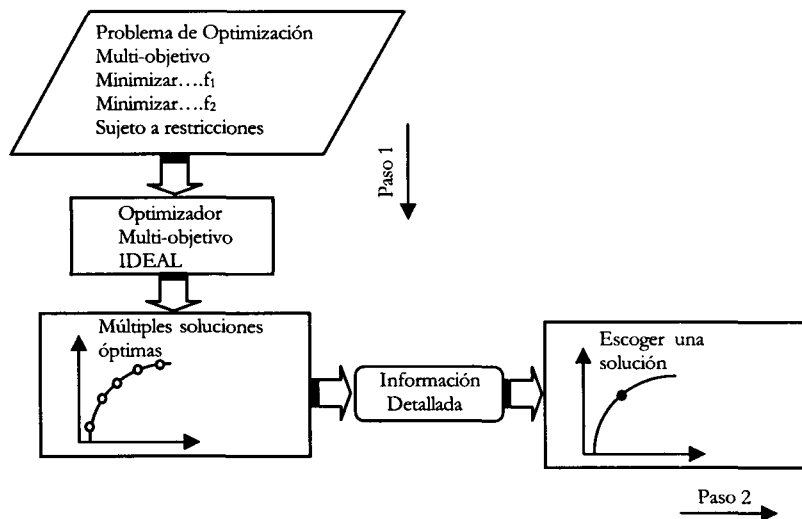


Figura 2. Optimización Multiobjetivo Ideal.

En un problema típico de optimización multiobjetivo, existe un conjunto de soluciones las cuales son *relativamente mejores* al resto dentro del espacio de búsqueda, estas soluciones obtenidas son conocidas como *Soluciones de Pareto* o soluciones no dominadas; el resto de las soluciones son conocidas como soluciones dominadas. Ninguna de las soluciones del conjunto de las no dominadas es absolutamente mejor que otra, cualquiera de ellas es aceptable. La elección de alguna de ellas requiere conocimiento e interpretación del problema.

Después de que se ha obtenido el conjunto de soluciones óptimas, el usuario debe seleccionar una de ellas. En la Figura 2 se presentan esquemáticamente los principios de una optimización multiobjetivo ideal. En el paso 1, se encuentra múltiples soluciones (curva de Pareto), en seguida en el paso 2 se usa información detallada del problema de optimización para seleccionar uno de los puntos de la curva.

## COMPUTACIÓN EVOLUTIVA Y ALGORITMOS GENÉTICOS

Los algoritmos genéticos, son probablemente el tipo más conocido de algoritmos evolutivos. La computación evolutiva se fundamenta en la tesis de la selección natural como uno de los mecanismos impulsores de la evolución de las especies. Los algoritmos genéticos (introducidos por John Holland) buscan dentro de un espacio de hipótesis candidatas la mejor, la que optimice las características del sistema en que fueron formuladas. Con los algoritmos genéticos se busca evolucionar una población de individuos para intercambiar su material genético y eventualmente llegar a una población de individuos con una alta aptitud. Algunas de las ideas fundamentales de genética son usadas artificialmente para construir algoritmos de búsqueda que son robustos y requieren el mínimo de información del problema a resolver. El principio de operación de los AGs es muy diferente de las técnicas clásicas de optimización, una diferencia fundamental es que los AGs trabajan con una población de soluciones en lugar de una única solución. Debido a que se evalúan un número de individuos en cada paso de la evolución, en cada generación se obtiene el óptimo global. Aunado a esta discusión, no se ha mencionado nada aún de los gradientes o cualquier otra información detallada del problema lo



cual daría un buen punto de inicialización para el problema de optimización. Los AGs no requieren ninguna información auxiliar excepto los valores de la función objetivo.

## OPERADORES GENÉTICOS

Cuando la codificación binaria o real de las variables en el algoritmo de optimización se lleva a cabo, el primer paso para el desarrollo de un AG es definir dicha codificación para los elementos de la población. Esta codificación definirá el cromosoma de cada uno de los individuos. Una vez definida la codificación, es necesaria una función de aptitud que evalúe la adaptación de cada uno de los individuos. Durante la ejecución del AG algunos individuos son seleccionados de acuerdo con un cierto criterio y sus cromosomas son combinados para generar los cromosomas de los elementos de la nueva población. Para lograr una codificación de los individuos, suponemos que la solución al problema se puede representar en un conjunto de parámetros. Estos parámetros se codifican con un determinado alfabeto y sus codificaciones se colocan juntas en una misma cadena de símbolos, a esta cadena se le llama *cromosoma*.

A diferencia de los métodos clásicos de optimización, un AG comienza con un conjunto de individuos aleatorios en lugar de un solo punto inicial (ver Figura 3). Cada individuo de la población inicial es evaluado y se le asigna un valor de aptitud. El conjunto de soluciones es modificado por tres operadores (Selección, Cruce y Mutación) y una nueva y mejor población es creada. El contador de generaciones es entonces activado para indicar que una generación del AG es completada.

El operador de SELECCIÓN es el operador que simula el proceso de selección natural del más apto. Las técnicas más usadas en los AGs pueden ser:

- *Probabilísticas* – de acuerdo a la aptitud del individuo-.

- *Mediante Torneo* – comparaciones directas de los individuos-.
- *De estado uniforme* – se usa cuando unos cuantos individuos son reemplazados en cada generación.

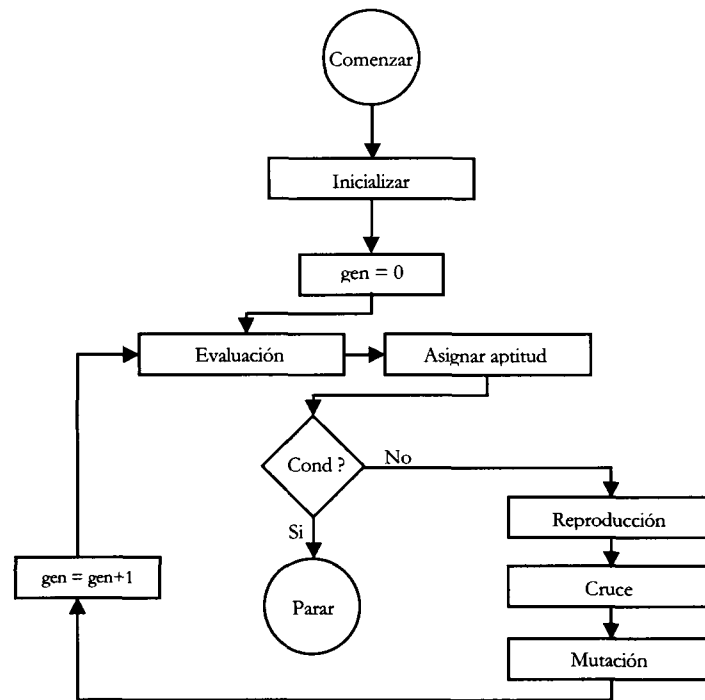


Figura 3. Principio de operación de un AG.

En concordancia con la selección natural de los más aptos, en los Algoritmos Evolutivos existe un mecanismo que permite que los individuos con mejor aptitud pasen intactos durante el proceso de generación de una nueva población; este mecanismo recibe el nombre de *elitismo*.

El operador de CRUCE trabaja con un par de individuos previamente seleccionados cuyo fin es el intercambio de información entre estos. Por ejemplo, considerando las cadenas  $A_1$  y  $A_2$  como población inicial, suponer que se elige un número de manera aleatoria entre los primeros

cuatro lugares de la cadena (como se indica por el símbolo separador |). Al realizar el cruce obtenemos dos nuevas cadenas donde el símbolo (') indica que la cadena forma parte de la nueva generación:

$$A_1 = 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ | \ 1 \quad A_2 = 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ | \ 0$$

$$A'_1 = 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0$$

$$A'_2 = 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1$$

El operador de MUTACIÓN, usualmente aplicado a cada individuo después del cruce consiste en modificar en forma aleatoria el contenido genético de un individuo, esto con la finalidad de mantener la diversidad de la población.

Los Algoritmos Genéticos difieren de los métodos de Optimización tradicionales y de los métodos de búsqueda en las siguientes formas:

- Los AGs trabajan mediante codificación del grupo de parámetros (cuando se utiliza codificación binaria), no con los parámetros directamente.
- Los AGs buscan desde una población de puntos, no desde un punto único.
- Los AGs usan reglas de transición probabilísticas, no reglas determinísticas.

Para obtener mayor precisión en el proceso de optimización la longitud de las cadenas de bits tenderán a ser más grandes (obviamente para la codificación binaria) aumentando el tamaño de la población requerida (Goldberg, 1992). Todo esto incrementando la complejidad computacional del algoritmo. Existe un número de implementaciones de parámetros reales en un AG, donde los operadores de cruce y mutación son aplicados directamente a valores reales de los parámetros. Como los parámetros reales son usados directamente (sin codificación) la solución de estos es un paso más fácil comparado con los parámetros binarios. En los AGs con parámetros reales el principal reto es como usar un par de vectores de variables de decisión reales para crear un nuevo par de vectores descendientes, o como perturbar un vector de variables de decisión hacia un vector mutado en una manera manejable (Deb, 2001).

## ALGORITMOS EVOLUTIVOS MULTIOBJETIVO.

La primera implementación de lo que ahora se denomina Algoritmo Evolutivo Multiobjetivo (AEMO) fue hecha por Schaffer a mediados de los 80's, cuando introdujo el denominado *Vector Evaluated Genetic Algorithm (VEGA)*.

VEGA básicamente consiste de un Algoritmo Genético simple con un mecanismo de selección modificado. En cada generación, un cierto número de sub-poblaciones son generadas llevando a cabo una selección proporcional de acuerdo a alguna de las funciones objetivo para cada sub-población. Así, para un problema con  $k$  funciones objetivo se forman  $k$  sub-poblaciones. Posteriormente, las sub-poblaciones vuelven a mezclarse para obtener una población nueva a partir de los operadores genéticos convencionales (cruce y mutación).

### *AEMO's de primera generación.*

La primera generación de AEMO's surge con la propuesta de Goldberg (1989) al analizar VEGA y proponer un mecanismo de selección basado en el concepto de optimalidad de Pareto. Los algoritmos más representativos de esta generación son los siguientes:

#### 1. *Nondominated Storing Genetic Algorithm (NSGA)*

Este algoritmo genético fue propuesto por Srinivas y Deb en 1994. Su principal característica es que antes de llevar a cabo la selección, los individuos son clasificados de la siguiente manera: a todos los individuos no dominados se les asigna jerarquía 1 y una aptitud proporcional al tamaño de la población, que además permita que todos ellos tengan las mismas posibilidades de ser seleccionados. Posteriormente se les aplica un mecanismo conocido como "fitness sharing" (compartición de aptitud) que consiste en determinar una vecindad para cada individuo (en un radio  $\sigma_{\text{SHARE}}$  definido por el usuario) y disminuir su aptitud de manera proporcional al número de individuos de su mismo rango que se encuentren dentro de ella. Tales vecindades son llamadas comúnmente *nichos*. A continuación, este grupo de individuos de jerarquía 1 es ignorado y el proceso se repite. Esta vez los individuos no dominados tendrán jerarquía 2 y una aptitud menor a la de los individuos de jerarquía 1. El proceso continúa sucesivamente hasta que no queden individuos sin clasificar.

## 2. *Niched-Pareto Genetic Algorithm (NPGA)*

Este algoritmo genético fue propuesto por Horn y Nafpliotis en 1994. El NPGA usa un esquema de *torneo* basado en dominancia de Pareto: dos individuos de la población son seleccionados de manera aleatoria y son comparados contra un subconjunto de la población también escogido aleatoriamente (normalmente se escoge el 10% de la población). Si uno de los dos individuos es dominado y el otro no, el individuo no dominado gana el torneo. Si los dos individuos son dominados o no dominados, el ganador se elige de acuerdo a un mecanismo de compartición de aptitud que indica el número de individuos que se encuentran en el mismo nicho de cada contendiente y el individuo con menos vecinos gana.

## 3. *Multi-Objective Genetic Algorithm (MOGA)*

Propuesto por Fonseca y Fleming en 1993. En este algoritmo genético la jerarquía de cada individuo es proporcional al número de individuos que lo dominan.

La asignación de aptitud se lleva a cabo de la siguiente manera:

- Se ordena la población de acuerdo a las jerarquías.
- Se asigna aptitud interpolando del mejor (jerarquía 1) al peor de acuerdo a alguna función que es usualmente lineal, aunque no necesariamente.
- Se promedian las aptitudes de los individuos de la misma jerarquía.
- Finalmente, se lleva a cabo un mecanismo de compartición de aptitud similar al usado por el NSGA.

### *AEMO's de segunda generación.*

La introducción de la noción de elitismo dio paso a la segunda generación de AEMO's. El elitismo en optimización evolutiva multiobjetivo normalmente es implementado a través de una población externa, también conocida como población secundaria, en la que se van almacenando los individuos no dominados encontrados a lo largo de la búsqueda. Sin

embargo el elitismo también es posible de implementar mediante el uso de selección, en la que los padres compiten contra los hijos y aquellos no dominados se retienen para la siguiente generación. En cualquiera de los casos, eventualmente se hacen necesarias ciertas restricciones que ayuden a obtener un conjunto de individuos no dominados con la mejor distribución posible. A continuación se presentan de manera general los principales algoritmos de esta generación:

1. *Strength Pareto Evolutionary Algorithm (SPEA)*

Este algoritmo fue propuesto por Zitzler y Thiele (1999). Usa un archivo externo en el que almacena los individuos no dominados que va encontrando, actualizándolo en cada generación. Para cada uno de los individuos que son insertados en el archivo externo, se calcula un valor de “fortaleza” similar a las jerarquías de MOGA puesto que es proporcional al número de individuos que una solución dada domina.

2. *Strength Pareto Evolutionary Algorithm 2 (SPEA2)*

La segunda versión del SPEA fue propuesta por Zitzler (2001) y sus colegas recientemente. El algoritmo tiene básicamente tres diferencias con respecto a SPEA: asigna aptitudes tomando en cuenta la cantidad de individuos que domina y que dominan a una solución dada, usa una técnica de estimación de densidad de vecinos que guía una búsqueda de manera más eficiente e incorpora un mecanismo para truncar el archivo externo que garantiza la preservación de soluciones de frontera.

### 3. *Pareto Achieved Evolution Strategy (PAES)*

Este algoritmo fue propuesto por Knowles y Corne (2000). Es el algoritmo más simple posible de optimización evolutiva multiobjetivo. Consiste de una estrategia evolutiva (1+1) (un único padre genera un único hijo) en conjunto con un archivo externo en el que se almacenan algunas de las soluciones no dominadas encontradas. Este archivo se usa como una referencia contra cada uno de los individuos que se obtienen como resultado de la mutación.

La parte más interesante de este algoritmo es la técnica que se usa para mantener diversidad: se trata de una rejilla que divide el espacio de búsqueda de manera recursiva y que además es auto-adaptable. Cada individuo es colocado en la celda de la rejilla que le corresponde según sus coordenadas en el espacio de búsqueda, de manera que se mantiene el control del número de individuos que se encuentran en cada celda para obtener una mejor distribución de las soluciones obtenidas.

### 4. *Nondominated Sorting Genetic Algorithm II (NSGA-II)*

La versión revisada del NSGA fue propuesta por Deb (2000). EL NSGA- II es un algoritmo más eficiente que el NSGA desde un punto de vista computacional debido a que usa un operador de “*crowding*” (agrupamiento) para mantener diversidad. Este operador permite que individuos similares se reemplacen entre sí, con el fin de evitar que más individuos dominen un mismo nicho. Este proceso es similar al que lleva a cabo PAES mediante su rejilla adaptable. Este algoritmo usa elitismo pero no mediante un archivo externo como los algoritmos anteriores sino mediante selección. En el Anexo B se presenta el detalle de este algoritmo de optimización multiobjetivo ya que es utilizado en el presente trabajo.

##### 5. *Pareto Enveloped-based Selection Algorithm (PESA)*

El algoritmo es muy parecido a PAES, pues la población interna es pequeña mientras que la población externa es más grande y además usa la misma rejilla adaptable para mantener diversidad. Sin embargo, ahora la población externa no sólo determina el esquema de diversidad sino que también determina el mecanismo de selección del algoritmo decidiendo qué soluciones ingresan en el archivo externo mediante el operador de agrupamiento implícito en la rejilla adaptable.

Existe una versión revisada del PESA a la que le denominó PESA-II. La principal diferencia entre PESA-II y PESA es que en este caso la selección está basada en regiones y no en individuos. Esta modificación se hizo principalmente para mejorar el costo computacional del algoritmo original.

El NSGA fue uno de los algoritmos evolutivos iniciales. A lo largo de los años las principales críticas hacia el NSGA fueron: (i) la complejidad computacional igual a  $O(mN^2)$  donde  $m$  representa el número de funciones objetivo y  $N$  es el tamaño de la población, (ii) Carencia de Elitismo, el cual según estudios realizados (Rudolph, 1999, Zitzler, Deb & Thiele, 2000) demuestran claramente que el incorporar el elitismo puede acelerar la convergencia del algoritmo, y (iii) La necesidad de especificar el parámetro que asegura la diversidad de la población,  $\sigma_{SHARE}$ . La nueva versión del NSGA, llamada NSGA-II (Deb, Agrawal, Pratap, & Meyarivan, 2001) cubre cada una de las deficiencias del algoritmo original. Específicamente, la velocidad de aproximación en la clasificación de los no dominados con  $O(mN^2)$  de complejidad computacional es presentada en el algoritmo. De la misma forma, un operador de selección es definido el cual finalmente combina las poblaciones padres e hijas y selecciona la mejor en base a su aptitud y diversidad. De los resultados de un número de problemas con un alto grado de dificultad, se concluye (Knowles & Corne, 1999) que el NSGA-II obtiene mejores soluciones que el PAES –otro algoritmo evolutivo elitista para optimización multiobjetivo, debido a los bajos requerimientos computacionales, aproximación con elitismo y a la no-especificación del  $\sigma_{SHARE}$  (ver Anexo B para mayor detalle acerca del NSGA-II).



## OPTIMIZACIÓN MULTI OBJETIVO DE PROCESOS QUÍMICOS.

Numerosos estudios han sido publicados en el área de ingeniería química para optimización multiobjetivo de procesos. La tarea del control de procesos se centra en establecer las pautas de operación que aseguren un comportamiento estable del proceso satisfaciendo sus requerimientos en condiciones desfavorables tales como la acción de perturbaciones e incertidumbres en los modelos empleados en el diseño del sistema de control. En 1994 Luyben, & Floudas, trabajaron en la síntesis y diseño de unidades de destilación binaria mediante optimización multiobjetivo considerando criterios de diseño óptimo y controlabilidad en estado estacionario. En la década de los 90's la síntesis de procesos todavía se enfocaba principalmente en el criterio económico sin consideraciones de control. La formulación propuesta por Luyben & Floudas traslada el problema de optimización a un modelo MINLP (Mixto- Entero No Lineal) multiobjetivo. Por su parte, Cao & Yang (2004), proponen una nueva técnica para el control y análisis de procesos de transformación mediante optimización multiobjetivo. Las soluciones óptimas permiten mantener la controlabilidad de procesos específicos una vez realizado el análisis de resultados.

Chen & Lee, (2004) utilizaron optimización multiobjetivo en un modelo multi-producto, multi-etapa y multi-periodo de una cadena de suministro considerando incertidumbre en las demandas de mercado y en los precios del producto. La demanda incierta del mercado se modela como un número de escenarios discretos con probabilidades conocidas, y para describir las preferencias incompatibles de vendedores y compradores en los precios del producto se utilizan conjuntos difusos. El modelo de cadena de suministro es programado como MINLP multiobjetivo.

Chakraborty & Linninger, (2002) presentan un trabajo en la síntesis de procesos por lotes minimizando el costo total anualizado, sin embargo señalan que al tratar de encontrar diseños con el mínimo costo se pueden descuidar aspectos ambientales importantes. Esta publicación introduce al concepto de síntesis de procesos mediante políticas de tratamiento y recuperación en toda la planta de producción. Los resultados arrojados por el modelo multiobjetivo representan soluciones de pareto óptimas para los objetivos planteados (económicos y

ambientales). Esta publicación incluye casos de estudio ilustrando el procedimiento sistemático para el manejo de efluentes. Por su parte, el trabajo de Bonfill, Bagajewicz, Espuña, & Puigjaner, (2004) refiere a optimización estocástica para el manejo de riesgo en la calendarización a corto plazo de una planta multiproducto (producción por lotes) considerando incertidumbre en la demanda. El problema de maximización de ganancias es optimizado utilizando un modelo estocástico de dos etapas, incorporando el manejo de riesgo como objetivo de la optimización. La importancia de considerar incertidumbre no tan solo en el proceso de toma de decisiones sino también en la variabilidad de resultados es abordado.

La optimización multiobjetivo de procesos químicos mediante AGs ha tomado gran auge debido a las características que estos algoritmos evolutivos presentan. Los AGs no necesitan información explícita del modelo matemático, no requiere un punto inicial muy cercano al óptimo, y además no tiene problemas con funciones no convexas y discontinuidades en las variables de decisión lo que los hace realmente atractivos. La siguiente revisión bibliográfica se enfoca en aquellas publicaciones que utilizan específicamente el NSGA o el NSGA-II para la optimización multiobjetivo de procesos químicos.

Ravi, Gupta, & Ray, (2000) muestran la aplicabilidad del NSGA en la solución de problemas de optimización multiobjetivo referente a procesos de separaciones gas-sólido. Los autores maximizan la eficiencia de recolección y minimizan la caída de presión en los ciclones, para un problema industrial. Los valores óptimos de las variables de decisión, tales como el número de ciclones y parámetros geométricos del equipo de separación son obtenidos. Los autores utilizan el modelo de Shephred and Lapple (1940) para estimar la caída de presión. El costo para uno o varios ciclones es calculado usando la adaptación de las correlaciones de Vatajuk (1990) y Crawford (1976).

Rajesh, Gupta, Rangaiah & Ray, (2001) realizan la optimización multiobjetivo de una planta de hidrógeno. Operar Plantas de Hidrógeno eficientemente es un asunto crítico en el rubro energético, aplicable sobretodo a procesos de refinación de petróleo o industrias de fertilizantes. Para alcanzar esta meta se necesitan identificar condiciones óptimas de operación para mejorar el rendimiento de la unidad de proceso. Rajesh (2000) y colaboradores realizaron

la optimización de una planta completa de  $H_2$  para la obtención de las condiciones óptimas de operación en estado estable. La planta de hidrógeno es simulada usando modelos rigurosos para el Reformador de Vapor y Convertidores. Una adaptación del NSGA es empleado para la Optimización Multiobjetivo de la unidad de proceso. La maximización de: (i) Flujo de Hidrógeno producido y (ii) Flujo vapor (el cual es exportado de la planta), son consideradas como las funciones objetivo, manteniendo un flujo de alimentación fijo de metano a la unidad. Para la configuración específica de la planta, el conjunto de condiciones óptimas de operación son obtenidas.

El incremento en la demanda de la gasolina, LPG (gas licuado) y diesel se ha reflejado en el mejoramiento de los procesos de refinación. La Unidad de Cracking Catalítico de Lecho Fluidizado (FCCU) es una unidad de conversión importante del complejo. Kasat (2002), utilizan el NSGA-II para obtener el Pareto Óptimo en la optimización de una unidad FCCU. Este es el primer trabajo reportado en la Optimización Multiobjetivo de FCCU's. De la misma forma es el primer trabajo en Ingeniería Química en el cual se utiliza el NSGA-II. En esta unidad cualquier incremento en la producción de gasolina usualmente genera mayor producción de LPG o diesel, y por lo tanto un incremento en las ganancias. En contraste, el incremento en la producción de gasolina trae consigo un incremento en la formación de choque, el cual reduce la actividad del catalizador y necesita ser quemado en su totalidad en el regenerador, requiriendo grandes cantidades de aire de alimentación. Al quemar el choque se produce CO y  $CO_2$ . Existen dos opciones para la operación de la planta: llevar a cabo combustión completa en el regenerador, de esta forma la cantidad de CO emitida a la atmósfera es muy baja. La otra es llevar a cabo solo combustión parcial en el regenerador generando un efluente con una cantidad mayor de CO en la unidad. La combustión total requiere grandes cantidades de aire, lo cual incrementa automáticamente los costos de operación. Sin embargo se requiere quemar la máxima cantidad de coque en el regenerador para mantener la actividad del catalizador en el nivel más alto posible. En base a la discusión anterior los autores seleccionan las siguientes funciones objetivo: (i) maximización de la producción de gasolina (ganancias), (ii) minimización del flujo de aire en el regenerador (costos de operación), y (iii) minimización del CO en el gas de salida (contaminación).

Oh, Rangaiah, & Ray, (2002), desarrollan un modelo riguroso para la simulación de una planta de hidrogeno industrial utilizando como alimentación los gases de salida del proceso de refinación de petróleo, los cuales constan de gas licuado y gases de la unidad de separación por membranas. La presencia de hidrocarburos pesados en el sistema de reacción es tomada en cuenta para el modelo, así mismo el reformador es modelado utilizando datos de campo, con resultados satisfactorios. La optimización multiobjetivo se realizó por medio de NSGA. Para una alimentación fija de gases a la unidad de proceso, dos o tres funciones objetivo, tales como, maximizar la producción de hidrogeno y el vapor a exportar, así como minimizar la potencia térmica en el Reformador de Vapor, fueron optimizadas simultáneamente. El perfil óptimo de flujo de vapor en el reformador difiere a los resultados obtenidos por Rajesh & Gupta, (2001), en el cual la alimentación es metano. Consecuentemente, la metanación instantánea de hidrocarburos pesados no puede ser una suposición aceptable si se desea predecir el perfil del flux de calor axial en el reformador de vapor. Los resultados de la optimización demuestran que existe un amplio campo de estudio para la mejora de este tipo de unidades de proceso.

El estireno ha sido producido desde los años 20's por el proceso de Dehidrogenación Catalítica del Etilbenceno. Este monómero es usado para la producción de poliestireno, resinas ABS (acrilonitrilo-butadieno-estireno), y una gran variedad de polímeros en la industria petroquímica. Yee, Ray, & Rangaiah (2003) utilizan el NSGA para la optimización multiobjetivo de este proceso de transformación. El estudio se realizó utilizando dos configuraciones, 1) un modelo de reactor adiabático en el cual el vapor entra a lo largo del reactor y el etil-benceno por la entrada principal del reactor, 2) en la segunda configuración del reactor una fracción de vapor es mezclada con la alimentación de etil-benceno en la entrada al reactor, mientras que el vapor remanente es inyectado en un punto específico a lo largo del reactor. Las funciones objetivo usadas en este modelo fueron maximizar, (i) producción, (ii) selectividad y (iii) rendimiento de estireno, para las dos configuraciones del reactor mencionadas. El Pareto óptimo es obtenido, del cual un punto óptimo puede ser elegido dependiendo de las necesidades requeridas en la planta de producción.

# 3 Mejora de un Algoritmo Genético Multiobjetivo

## INTRODUCCIÓN

El algoritmo NSGA-II está diseñado para realizar la optimización de un problema multiobjetivo hasta terminar un número fijo de generaciones. Para asegurar que este algoritmo genético obtenga buenos resultados, el número de generaciones tendrá que ser relativamente grande. Para problemas de optimización simples esto no representa grandes inconvenientes ya que evaluaciones de hasta 1000 generaciones para poblaciones con un número de individuos relativamente grande se lleva a cabo de manera rápida y eficiente. Sin embargo la principal dificultad se presenta cuando el modelo de optimización es complejo, requiriendo un esfuerzo computacional importante. Uno de estos casos lo representa la optimización de procesos químicos en donde un simulador comercial como el ASPEN Plus® es usado para realizar la simulación rigurosa del proceso.

Se han realizado diversos estudios para mejorar el desempeño de los algoritmos genéticos. Recomendaciones con respecto al tamaño de la población son presentadas por Reed (2000). Por su parte Deb (2001) presenta un estudio acerca de los mejores valores asignados a los operadores genéticos así como el mejor manejo del elitismo. Estas recomendaciones evidentemente aceleran la convergencia hacia la curva de Pareto óptimo, sin embargo la evaluación del algoritmo no se detiene hasta terminar el total de generaciones especificadas aún y cuando el conjunto óptimo se haya encontrado con anticipación.

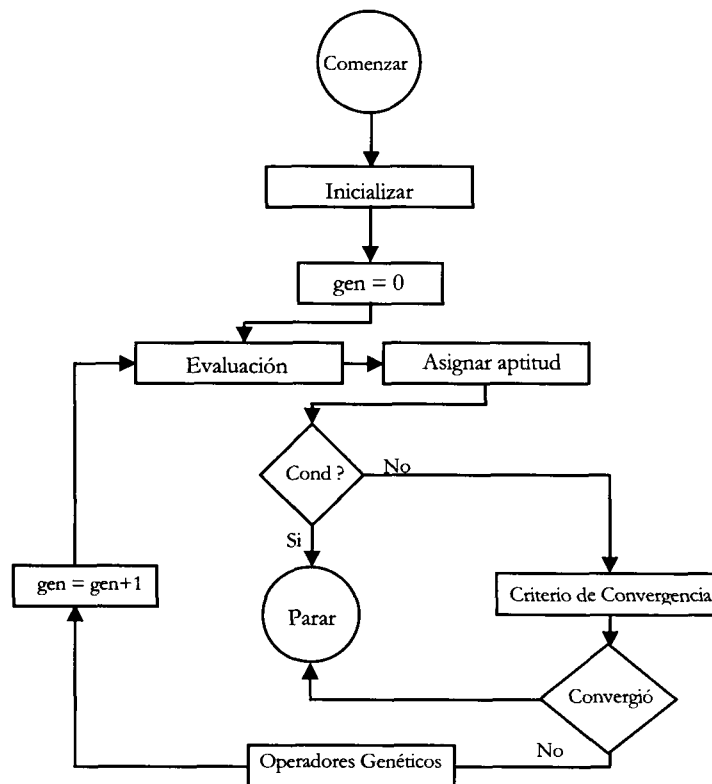


Figura 4. Ubicación del criterio de convergencia en el AG

La importancia de contar con un criterio de convergencia apropiado en los AGs recae en la minimización de tiempo de cómputo para problemas de optimización complejos. La idea central de este criterio de convergencia es que evitará evaluaciones innecesarias (evolución hacia las generaciones restantes) una vez que el conjunto de soluciones óptimas es encontrado. Con esta idea Barcena (2003) presenta la primera aproximación de un criterio de convergencia. Este criterio de convergencia entra en operación después de que los operadores genéticos de elitismo, selección, cruce y mutación tienen efecto en el NSGA-II (ver Figura 4). Se corrobora el funcionamiento de esta primera aproximación del criterio de convergencia con la solución de algunos problemas numéricos así como un problema de destilación extractiva acoplando el ASPEN Plus® 11.1 para la simulación de proceso. De manera general en la Figura 4 se interpreta lo siguiente: si durante el transcurso de la

optimización el criterio de convergencia encuentra el conjunto de soluciones óptimas, éste detiene la evolución de la población aunque no se hayan consumido el total de generaciones preestablecidas. Si la condición anterior no se cumple, el algoritmo continúa el proceso de búsqueda y la siguiente generación de individuos es creada y evaluada. Este proceso es iterativo hasta completar el número de generaciones totales.

Para iniciar la explicación del criterio de convergencia se van dos definiciones importantes:

**Convergencia Poblacional:** Cuando cierto porcentaje de la población esta integrada por soluciones no-dominadas o muy cercanas a las no-dominadas, se dice que se ha alcanzado una convergencia poblacional (recuadro superior de la Figura 5).

**Convergencia del AG:** Cuando dos poblaciones han cumplido con las etapas del criterio de convergencia son comparadas entre sí para identificar su cercanía, y si ésta cumple con un parámetro establecido se ha alcanzado la convergencia del AG y se detiene el proceso de optimización (recuadro inferior de la Figura 5).

Una vez que la población inicial es creada de forma aleatoria ésta se evalúa y se le asigna la aptitud correspondiente a cada individuo. En seguida se realiza el proceso de elitismo en donde los individuos mejor adaptados son pasados a la siguiente generación sin ser modificados por ningún operador genético. Este paso elitista debe ser controlado para permitir diversidad en la población Deb (2001). La población total se clasifica en individuos no-dominados (los cuales constituyen el frente de pareto) y los individuos dominados (peores soluciones).

En la Figura 5 se observan las etapas del criterio de convergencia y cada una de las salidas hacia el AG cuando cualquiera de estas etapas no se cumple. Las etapas presentadas en la Figura 5 refieren a parámetros (descritos más adelante) los cuales deben ser satisfechos para designar la población evaluada como primer conjunto de soluciones óptimas una vez que se alcanza la Convergencia Poblacional. Mientras no se cumpla con los parámetros del criterio de convergencia, el NSGA-II continúa con la evaluación de las generaciones restantes. Cada vez

que se alcanza la Convergencia Poblacional, la población es declarada como primer conjunto de soluciones óptimas y ésta es guardada por el algoritmo. Si una vez más es alcanzada la Convergencia Poblacional, estas poblaciones son comparadas entre sí para calcular la aproximación en aptitud de cada individuo. Si dicha aproximación satisface la tolerancia establecida, se ha encontrado la solución final (Convergencia del AG).

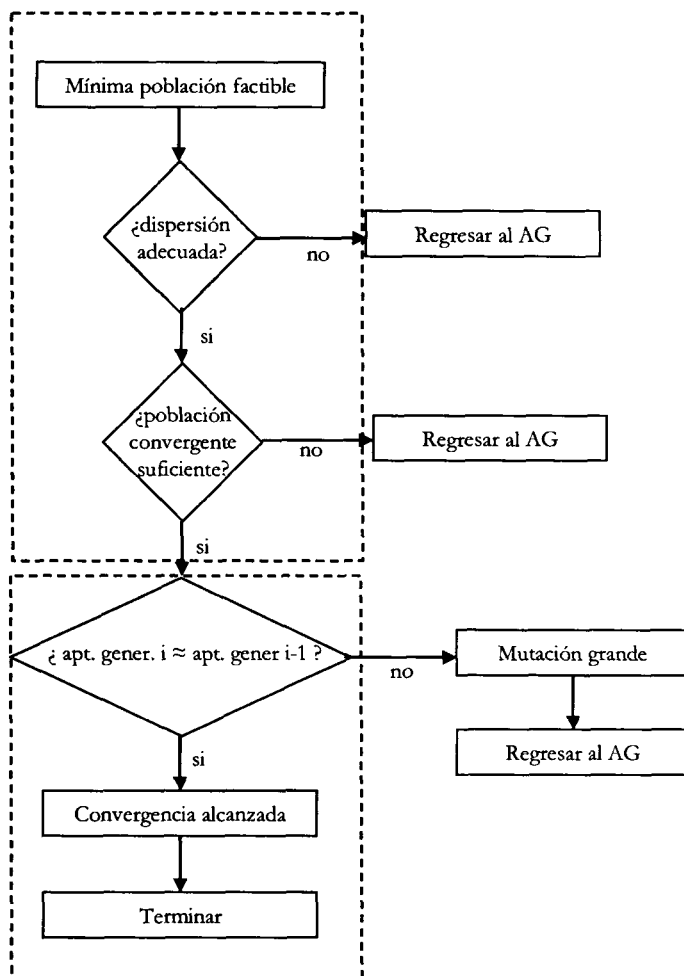


Figura 5. Secuencia del criterio de convergencia



## PARÁMETROS DEL CRITERIO DE CONVERGENCIA.

El criterio de convergencia se constituye de seis parámetros, y la descripción de cada uno de ellos se presenta a continuación.

Epsilon,  $\epsilon$ : Error adjudicado por el algoritmo de optimización NSGA-II a cada individuo de la población dependiendo de su aptitud y violación de las restricciones. Mediante este parámetro se elimina la posibilidad de que individuos no factibles entren al proceso de convergencia (e.g. simulaciones con mensaje de “error” o “warning” en ASPEN Plus®). La clasificación de los individuos como se aplica en el criterio de convergencia se muestra en la Figura 6.

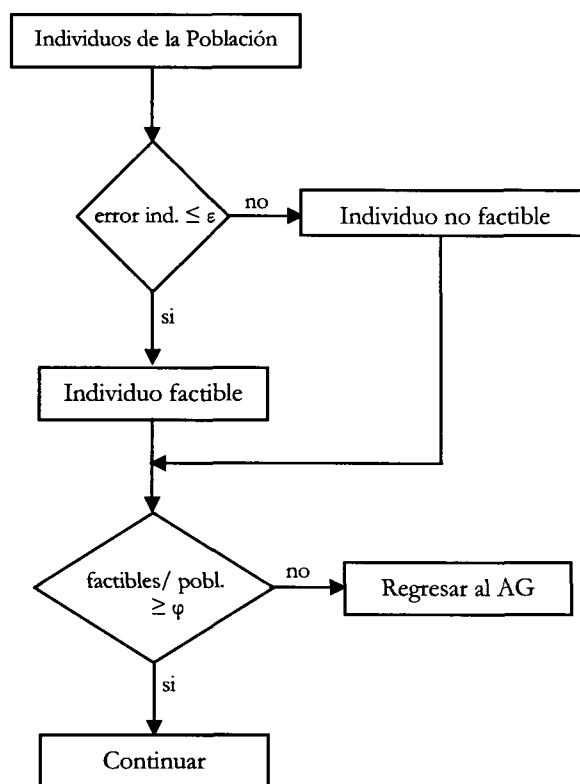


Figura 6. Procedimiento del Parámetro  $\epsilon$  y  $\varphi$ .

Aquel individuo de la población que tenga error por encima de  $1e-6$  se clasifica como no factible. Si el 40% o más de la población son clasificados como factibles continúa el proceso de convergencia, de lo contrario se abandona el criterio de convergencia y el AG continúa su evolución hacia la siguiente generación de individuos.

Phi,  $\phi$ : Este parámetro refiere a la población factible (individuos dominados y no-dominados) que entran al proceso de convergencia. Los individuos no factibles son aquellos que violan el parámetro  $\varepsilon$  (ver Figura 6). Valores en el rango de (20-80 %) son analizados para este parámetro.

Omega,  $\omega$ : Hasta este momento debemos tener en cuenta que el total de los individuos (buenos y malos) caen dentro de una región factible establecida por las restricciones del proceso. Una manera de controlar la dispersión de las mejores soluciones dentro de esa región factible es mediante la creación de intervalos (ver Figura 7). En la Figura 7 se supone que cada punto representa un individuo no dominado para el caso de minimización de  $f_1$  y  $f_2$ . Inicialmente se debe asegurar la existencia de individuos en cada uno de los intervalos propuestos, si en cualquiera de los intervalos no existen individuos no-dominados se incrementa el ancho del intervalo hasta el individuo más cercano respecto a  $f_1$  (Figura 9). Si al modificar el intervalo todavía no hay individuos no-dominados, el criterio de convergencia termina y regresa al AG. Por el contrario si se cumple con la existencia de no dominados en cada intervalo, el siguiente paso es cuantificar la diferencia entre el individuo de mayor aptitud y el de menor aptitud (respecto a  $f_2$ ). Si esta diferencia es mayor al valor asignado al parámetro  $\omega$ , el intervalo se subdivide (Figura 8). Si después de la subdivisión aún no se cumple con  $\omega$  el proceso de convergencia termina y regresa al AG.

El procedimiento detallado del parámetro  $\omega$  se presenta en la Figura 10. Valores en el rango de (10-60 %) son analizados para este parámetro.

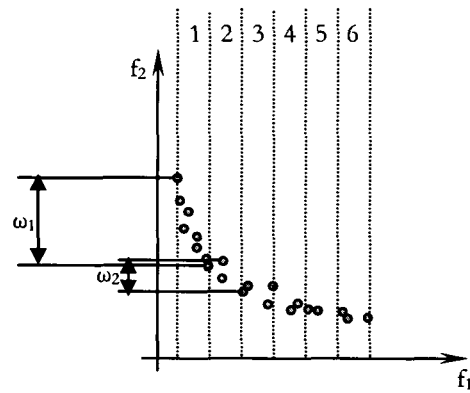


Figura 7. Representación de los intervalos respecto a  $f_1$

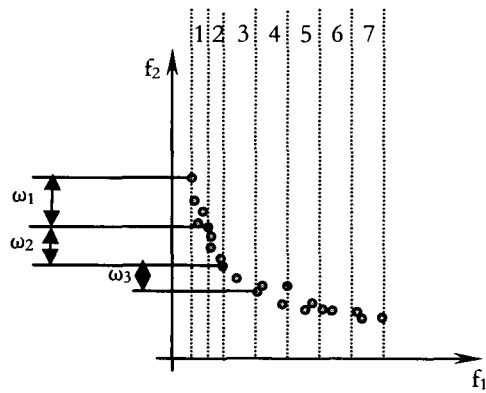


Figura 8. Subdivisión del intervalo 1.

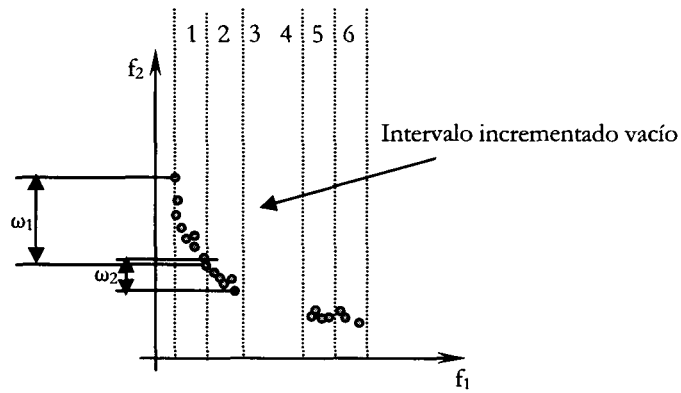


Figura 9. Representación de intervalo vacío

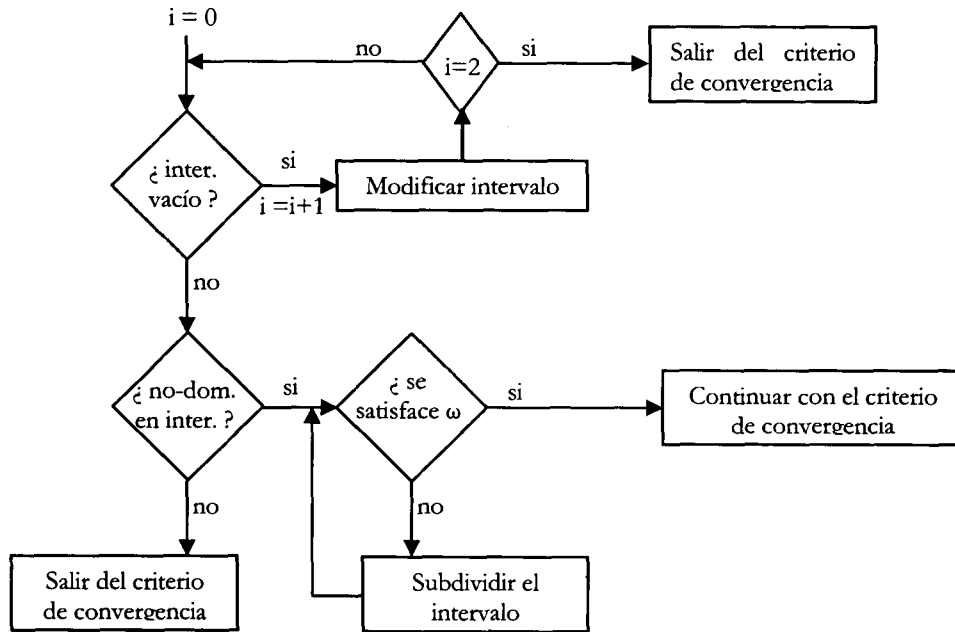


Figura 10. Procedimiento del parámetro  $\omega$ .

Epsilon 2,  $\epsilon_2$ : Este parámetro se refiere a la distancia entre un individuo no dominado y un individuo dominado en la curva de pareto. La idea de crear este parámetro es hacer que la población convergente aumente, ya que ahora se constituirá de no-dominados y de “dominados buenos”. Un individuo “dominado bueno” es aquel que se encuentra cerca de clasificarse como no-dominado por una distancia igual o menor a  $\epsilon_2$ . Si a los dominados buenos se les llama  $\alpha$  y a los no-dominados se les llama  $\beta$  (simplemente para simplificar el entendimiento del algoritmo de la Figura 11), tenemos lo siguiente.

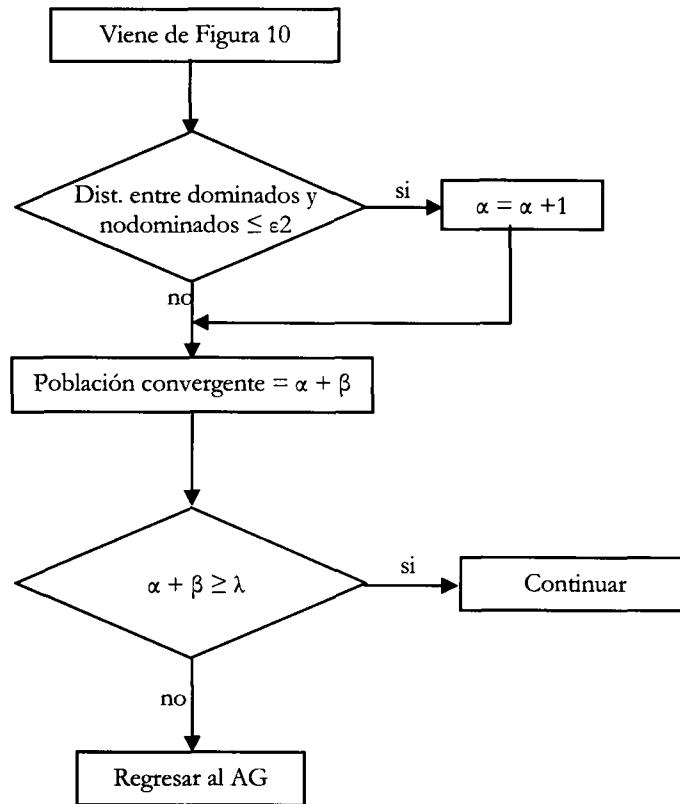


Figura 11. Procedimiento de los parámetros  $\epsilon_2$  y  $\lambda$ .

Valores en el rango de (5-30%) son analizados para este parámetro.

Lamda,  $\lambda$ : Se define como la relación entre la población convergente (no-dominados + dominados buenos) y la población total. Si al parámetro  $\lambda$  se le asigna un valor relativamente grande se garantiza la mayoría de los individuos de la población estarán en el conjunto de soluciones óptimas. Cuando se cumple por primera vez con el parámetro  $\lambda$ , la generación se guarda como primer conjunto de soluciones óptimas. Si durante la evolución de las siguientes generaciones se vuelve a satisfacer el parámetro  $\lambda$  esta generación se compara con el primer óptimo obtenido para verificar que tan similares son estas soluciones. La comparación es llevada a cabo mediante el parámetro  $\psi$ . Valores en el rango de (30-90%) son analizados para este parámetro.

Psi,  $\psi$ : Este parámetro cuantifica la diferencia entre cada uno de los individuos del primer óptimo (primera generación que cumple con  $\lambda$ ) y el segundo óptimo (segunda generación que cumple con  $\lambda$ ) respecto a la función objetivo 1. Si esta diferencia es igual o menor al parámetro  $\psi$  para cada uno de los individuos, se ha encontrado la solución final. Si no se cumple con  $\psi$  se actualiza la población óptima para futuras comparaciones, como se muestra en la Figura 12. Valores en el rango de (0.5-10 %) son analizados para este parámetro.

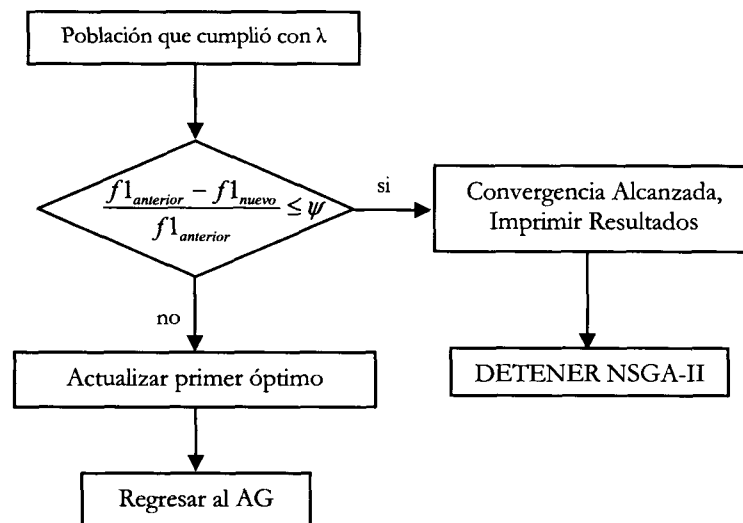


Figura 12. Procedimiento del parámetro  $\psi$ .

## APROXIMACIÓN AL PARETO ÓPTIMO

Una manera de cuantificar la exactitud de la solución encontrada por el criterio de convergencia, se realiza a través de la definición de una serie de errores los cuales nos representan la cercanía del resultado obtenido usando el Criterio de Convergencia y el resultado evaluado con un número grande de generaciones (el conjunto de soluciones

óptimas). Obviamente las soluciones obtenidas con el uso del Criterio de Convergencia consumen menos tiempo comparado con la solución en donde no se utiliza el Criterio. Dependiendo de los valores asignados a los parámetros del criterio es la exactitud obtenida.

*Error en los extremos (EE)*. Se refiere al error que presentan los extremos de la solución obtenida implementado el criterio de convergencia, con respecto a los extremos de la solución de referencia (sin criterio de convergencia y para un número grande de generaciones evaluadas).

$$EE = \frac{|y_1 - x_1|}{x_1} + \frac{|y_2 - x_2|}{x_2} + \frac{|y_3 - x_3|}{x_3} + \frac{|y_4 - x_4|}{x_4} \quad \text{Ec. 5}$$

En la Figura 13 se representa este error mediante la utilización de dos curvas de pareto obtenidas con y sin la utilización del criterio de convergencia. Es evidente que los puntos que representan los extremos para cada curva de pareto están separados considerablemente generando por consecuencia un error significativo.

- X<sub>1</sub>    Máximo valor de f1 sin CC
- X<sub>2</sub>    Mínimo valor de f2 sin CC
- X<sub>3</sub>    Valor de f2 en X<sub>1</sub>
- X<sub>4</sub>    Valor de f1 en X<sub>2</sub>
- Y<sub>1</sub>    Máximo valor de f1 con CC
- Y<sub>2</sub>    Mínimo valor de f2 con CC
- Y<sub>3</sub>    Valor de f2 en Y<sub>1</sub>
- Y<sub>4</sub>    Valor de f1 en Y<sub>2</sub>

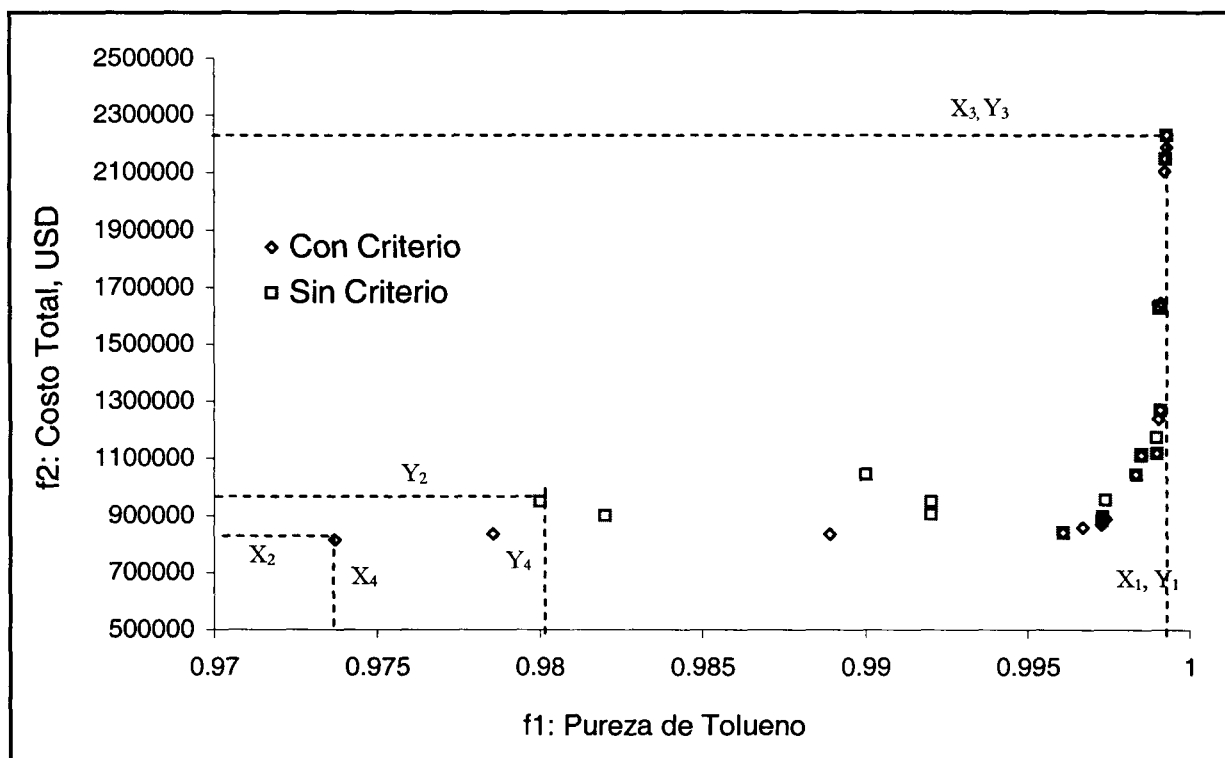


Figura 13. Representación de EE.

CC: Criterio de convergencia.

*Error de dispersión (ED)*. Refiere a la diferencia que existe entre cada uno de los puntos de la solución con criterio de convergencia comparado con el punto más cercano de la curva de Pareto obtenida sin el criterio. Dicha diferencia es cuantificada de la siguiente manera:

$$ED' = \sum_{i=1}^n \left[ \sqrt{(X - X')^2 + (Y - Y')^2} \right] \quad \text{Ec. 6}$$

Una vez cuantificado el ED', se obtiene el promedio de dichos errores (ya que tenemos tantos ED's como individuos no dominados tengamos en nuestra solución). Este promedio representa el ED.



N:	Número de individuos
X:	Valor de FO1 sin CP del individuo $i$ .
X':	Valor de FO1 con CP del individuo $i$ .
Y:	Valor de FO2 sin CP del individuo $i$ .
Y':	Valor de FO2 con CP del individuo $i$ .

*Diferencia de generaciones* (DG). Representa la diferencia respecto a la evolución de los individuos al encontrar la solución final. Entre más avance el número de generaciones, esta diferencia incrementará su valor.

*Distancia de no dominados* (DND). Refiere al número de individuos no dominados obtenidos al final de la corrida con respecto a los individuos iniciales. Esto es, mientras el número de individuos no dominados disminuya del número inicial de individuos, el DND se incrementa.

Supongamos que  $\alpha$  representa el número de individuos iniciales, y  $\beta$  el número de no dominados usando el Criterio de Convergencia. Entonces:

$$DND = \left[ 1 - \frac{\alpha}{\beta} \right] \quad \text{Ec. 7}$$

Es decir si  $\alpha = \beta$ , entonces DND= Cero. De lo contrario al disminuir  $\beta$ , DND se incrementa.

*Diferencia de individuos evaluados (EIE)*. Refiere al número de individuos evaluados por el algoritmo de optimización hasta encontrar la solución óptima. Este error se obtiene al multiplicar el número de generaciones evolucionadas por el número de individuos en la población inicial.

A continuación se presenta un ejemplo en la obtención de los errores para el problema 1 (Anexo C). Se tomó una de las 100 corridas (aproximadamente) realizadas para el ejemplo 1, los valores de los parámetros del criterio de paro así como los errores calculados se presentan a continuación. Es imposible anexar todos los resultados de las corridas realizadas ya que se estudiaron 4 ejemplos numéricos y un problema de destilación extractiva (presentado más adelante) para el análisis de sensibilidad y cálculo de los 5 errores.

<b>Parámetros</b>	
$\Phi$	0.4
$\psi$	0.3
$\epsilon_2$	0.1
$\lambda$	0.4
$\psi$	0.01

<b>Cálculo de errores</b>	
Población	50
Generaciones	14
No dominados	50
DIE	0.014
EE	0.339
DG	0.014
DND	0.000
ED	0.050

Sin embargo en el Anexo C se encuentran resultados condensados en forma de Tablas y Figuras correspondientes al cálculo de errores para cada una de las corridas realizadas con los ejemplos numéricos (Deb, 2001) y del problema de Destilación Extractiva (Henley & Seader, 1990). En los resultados presentados en la Figura 14 se pone especial atención en el error de dispersión y el error en los extremos. El primero no presenta mayores complicaciones ya que la curva (con utilización del criterio de convergencia) está prácticamente sobre la curva de referencia (sin criterio de convergencia). Sin embargo los extremos de las curvas presentan

diferencias importantes por lo que el EE alcanza un valor de 33.9%. En este caso el algoritmo evolucionó 14 generaciones y obtuvo un total de 50 individuos no dominados (100% de los individuos iniciales).

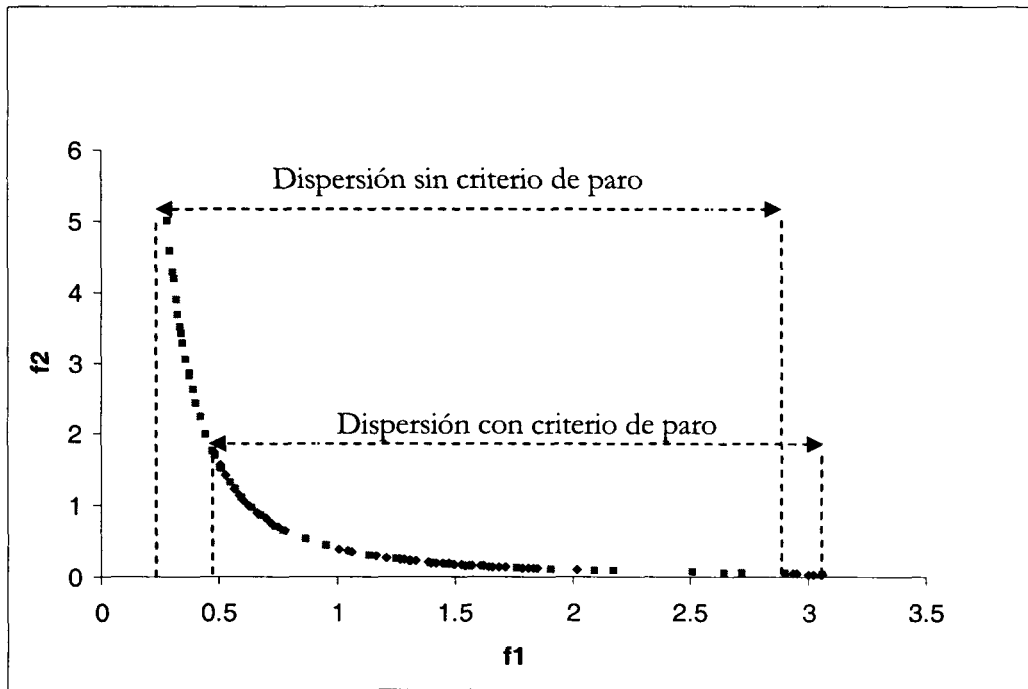


Figura 14. Ejemplificación del cálculo de errores

La curva de Pareto de referencia refiere a la evaluación del problema multiobjetivo para un total de 1000 y 300 generaciones.

## DESCRIPCIÓN DEL DISEÑO DE EXPERIMENTOS

Para realizar el análisis sobre los parámetros del criterio de convergencia se utilizaron 4 problemas numéricos (lineales, no lineales, con varias restricciones y uno sin restricciones) tomados de Deb (2001). En el Anexo C se encuentra el detalle de cada uno de los problemas así como el resumen del análisis de sensibilidad hacia los parámetros del criterio de convergencia (en esta sección se va a hacer referencia a las tablas de este Anexo). Una vez realizado el análisis sobre ejemplos numéricos sencillos, el análisis se trasladó a un problema de destilación extractiva (tolueno-*n*heptano presentado al final de esta sección) sin recirculación. Después de estas etapas de experimentación se obtuvieron conclusiones interesantes presentadas al final de la sección.

Para poder implementar esta metodología a procesos complejos primero se tiene que confirmar su funcionamiento. Una vez concluido que el criterio de convergencia funcionaba de manera correcta, se resolvieron problemas de síntesis procesos, de destilación ordinaria y destilación extractiva (presentado en el Capítulo 4).

Para la experimentación con los problemas sencillos se realizó la corrida del NSGA-II con la implementación del criterio de convergencia, se modificaron cada uno de los parámetros del criterio de forma independiente en los rangos ya mencionados (en la sección de definición de parámetros) y además se utilizaron tres tamaños de población 20, 50 y 100 individuos para el análisis.

Evidentemente se genera una gran cantidad de datos con lo cual se puede analizar el efecto de cada parámetro sobre el problema de optimización. Los errores antes definidos nos ayudan a cuantificar el efecto de los parámetros en la curva de pareto óptimo.

## ANÁLISIS DE PARÁMETROS DEL CRITERIO DE CONVERGENCIA

La cantidad de corridas para cada ejemplo se incrementa de manera considerable tomando en cuenta las variantes inmersas (valores asignados a los parámetros del criterio de convergencia, variantes en el tamaño de la población, variantes en los operadores genéticos etc.). La razón de ejecutar corridas similares con diferente valor de la semilla (parámetro del

AG utilizado para generar la población inicial de forma aleatoria) es asegurar que éste (el valor asignado a la semilla) no tiene efecto sobre el resultado final (ver Figura C.9 del Anexo C). Para corroborar el efecto de la semilla se realizaron varias corridas, lo presentado en la Figura C.9 corresponde a una corrida del proceso de destilación extractiva para 10 individuos iniciales y valores de semilla de 0.5 y 0.8. El algoritmo se detiene en la generación 12 para ambos casos y se obtienen exactamente los mismos puntos óptimos.

El número de corridas para cualquiera de los problemas presentados es realmente elevado, aclarando que para cada modificación en cualquiera de los parámetros se realiza una corrida completa de la optimización para analizar el resultado y calcular cada uno de los errores (EE, ED, DG, DND y DIE). Por tanto en el anexo C solo se presenta un resumen (Tablas y Figuras) del problema 1 y 2 así como del problema de destilación extractiva. En el Anexo C se presenta el modelo y las corridas (Figuras C.1-C.8) de los cuatro ejemplos numéricos con y sin la utilización del criterio de convergencia.

Algunos parámetros tienen mayor influencia en el proceso de convergencia (desde el punto de vista de tiempo de evaluación) pero cada uno de ellos es indispensable. Por ejemplo  $\epsilon$ , es el parámetro que elimina la posibilidad de que alguna solución no factible proveniente de ASPEN Plus<sup>®</sup> entre al proceso de convergencia. Este parámetro no va a ser limitante para el proceso de convergencia mientras el 40% de la población (como mínimo) tenga error menor o igual al valor asignado a este parámetro, en este caso  $1e-6$ . El análisis de sensibilidad sobre este parámetro obviamente no afecta el desempeño del criterio de convergencia, es por esto que en los ejemplos posteriores no se realizó dicho análisis sobre este parámetro y el valor preestablecido será el mismo para todas las corridas. Caso contrario es el parámetro  $\lambda$ , el cual representa la población convergente mínima necesaria para continuar en el proceso de convergencia. Este parámetro tiene impacto directo en el tiempo de ejecución de la optimización, y es evidente que conforme se reduce su valor el número de generaciones para encontrar la solución disminuye y viceversa cuando su valor aumenta. Profundizando con respecto al parámetro  $\lambda$ , tiene efecto importante en los errores obtenidos, por ejemplo, cuando se trabaja con valores bajos de  $\lambda$ , el error en los extremos (EE) así como el error de dispersión (ED) aumentan. Sin embargo al tener  $\lambda$  bajo, el número de generaciones evaluadas (por tanto el tiempo de cómputo) disminuye. Habrá casos en donde el objetivo sea conocer la tendencia

óptima del sistema a optimizar y por tanto el valor de  $\lambda$  se deberá establecer relativamente bajo, ahorrando tiempo de cómputo.

Un efecto muy similar presentado por  $\lambda$ , se presenta con el parámetro  $\psi$  (comparación de dos generaciones convergidas). Cuando se relaja este parámetro (valores arriba de 5%) la solución puede acelerarse. Al hacer muy pequeño  $\psi$ , el error en los extremos baja, pero el número de generaciones evaluadas aumenta. Este efecto es menos drástico cuando se evalúan poblaciones menores a 50 individuos. En general resumiendo los resultados de las corridas, el tamaño de la población que mejores resultados generó fue de 50 individuos permitiendo errores mínimos en extremos y dispersión (que son los errores que más nos interesa minimizar).

Mientras tanto para el parámetro  $\phi$  (población factible mínima para entrar al criterio de paro) se concluye que 40% es un valor aceptable. Permitiendo que el criterio de convergencia entre en operación si 40% o más de la población total se cataloga como solución factible. Se llevaron a cabo análisis sobre este parámetro en el rango 20-90%, concluyendo que este parámetro al igual que  $\epsilon$  no tiene gran efecto sobre el desempeño del criterio de paro, más sin embargo son necesarios.

Cuando el parámetro  $\omega$  tiende a ser muy pequeño (10 o 5%), el número de intervalos se incrementa de manera significativa y eventualmente se lleva el proceso hasta el número máximo de generaciones quedando fuera automáticamente el uso del criterio de paro. Al realizar corridas con valores relativamente grande (arriba de 50%) se pierde exactitud en los resultados, respecto al pareto óptimo. Algo curioso que se encontró fue que el número de generaciones transcurridas es el mismo cuando se usa  $\omega = 30\%$  y  $\omega = 60\%$ , sin embargo, la exactitud de resultados es mucho mejor para  $\omega = 30\%$ . Según la experimentación realizada (corridas totales), este parámetro se recomienda en el rango 30-40%.

El parámetro  $\epsilon_2$ , (distancia para ser clasificado como "dominado bueno"), se analizó en un rango de 5-30% careciendo de importancia con respecto a los parámetros anteriores. Los resultados numéricos demuestran que este parámetro se ve opacado ante cualquier modificación realizada por ejemplo en  $\lambda$  o en  $\psi$ .

➤ *Análisis sobre un proceso de destilación extractiva*

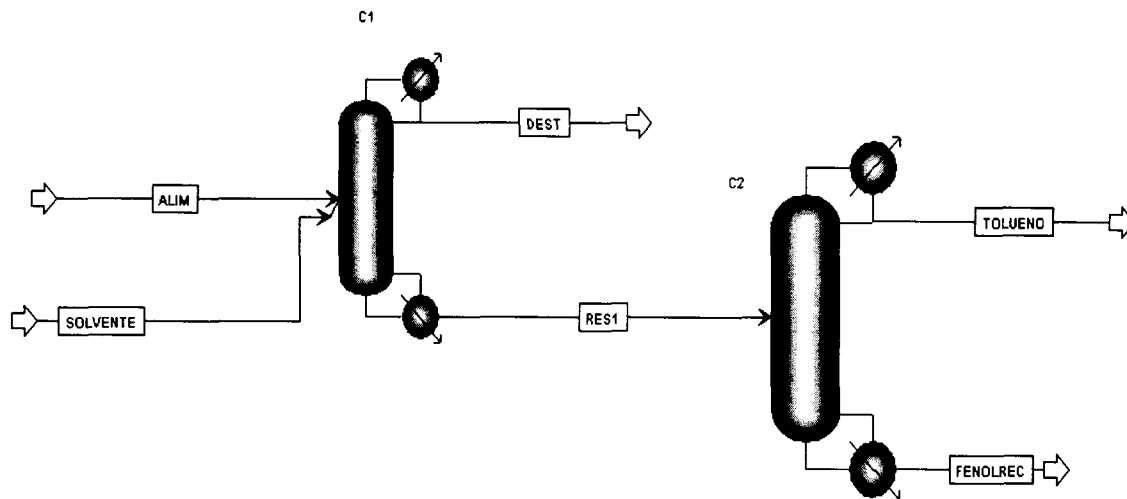


Figura 15. Proceso de destilación extractiva sin recirculación

En este proceso en particular se va a estudiar el efecto de  $\lambda$  y  $\psi$ . Ya que según corridas preliminares son los principales parámetros del criterio de convergencia. Se trata de un proceso de destilación altamente no ideal y por tanto serán de gran interés los resultados obtenidos (Figura 15). Se estudia el sistema tolueno-*n*-heptano donde se utiliza el fenol como solvente. Los objetivos son minimización del costo total (capital y operación) y maximización de la pureza de *n*-heptano. En el Capítulo 4 se vuelve a retomar este ejemplo y ahí se dan más detalles acerca de este proceso. En esta sección analizamos el efecto de los parámetros del criterio de convergencia sobre el rendimiento del NSGA-II. Se especifican detalles de los diseños obtenidos en el Capítulo 4. La Figura 16 muestra las diferentes configuraciones de los parámetros del Criterio de Convergencia para la optimización de este proceso.

Los resultados condensados se presentan en el Anexo C (Tablas C.9-C.11) para valores de  $\lambda$  igual a 0.4, 0.5 y 0.6 según lo sugerido en la Figura 16

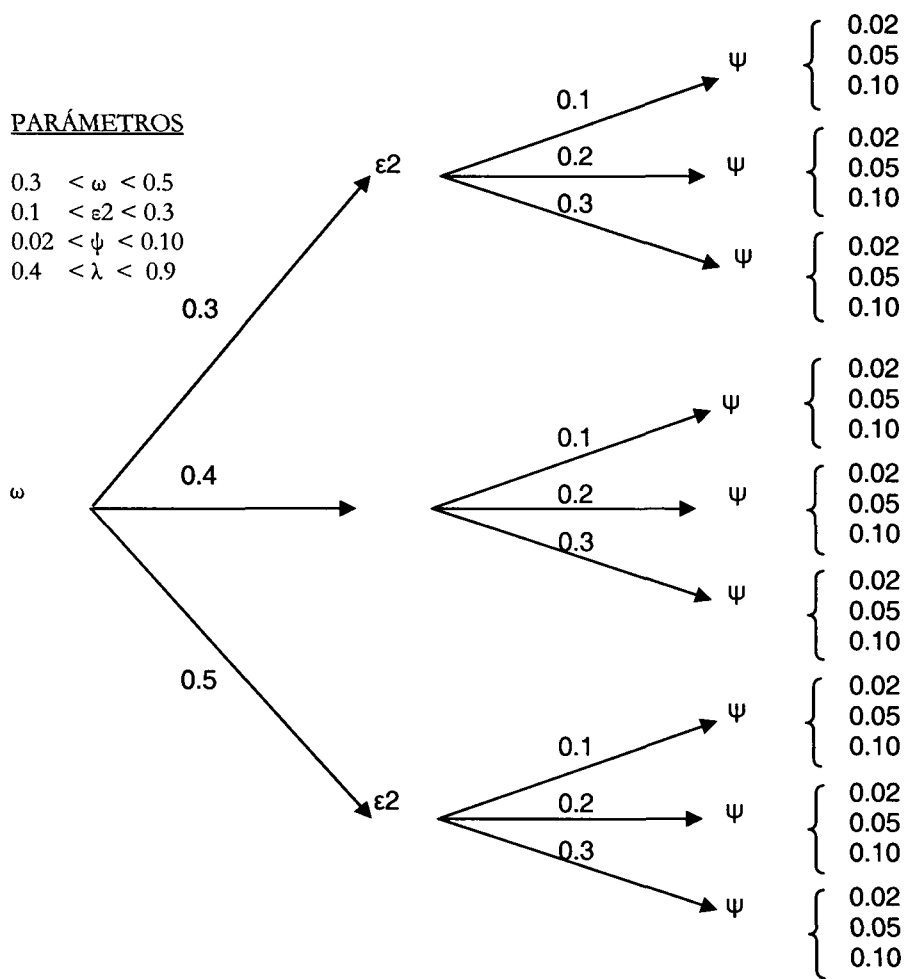


Figura 16. Valores de parámetros en el análisis de sensibilidad

Para el análisis del problema evaluando a  $\lambda$  en el rango  $0.7 < \lambda < 0.9$  se obtienen los siguientes resultados.



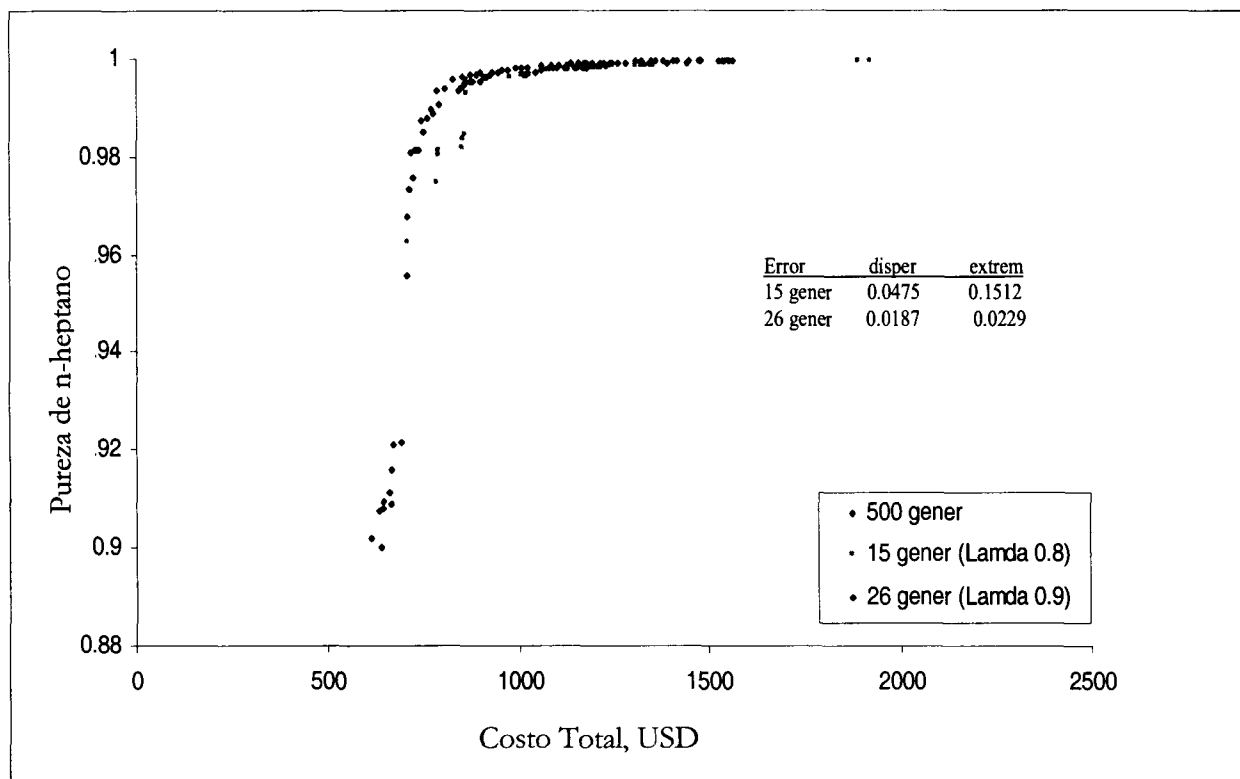


Figura 17. Costo Total vs Pureza

Como se puede observar (Figura 17)  $\lambda$  sí tiene efecto sobre el proceso de estudio, variando 9 generaciones entre  $\lambda=0.8$  y  $\lambda=0.9$ , lo cual es importante teniendo en mente el número de evaluaciones realizadas por el algoritmo. Para  $\lambda=0.9$  (26 generaciones,  $EE=0.0229$  y  $ED=0.0187$ ) se obtiene una buena aproximación al Pareto óptimo, mientras que para  $\lambda=0.8$  (15 generaciones,  $EE=0.1512$  y  $ED=0.0475$ ) existen cerca de 6 puntos fuera del Pareto óptimo. En esta instancia el parámetro  $\omega$  ya no tiene efecto (Tablas C.9-C.11), lo cual confirma que el parámetro al que es sensible el sistema es a  $\lambda$ , como se observó en las corridas realizadas anteriormente. Adicionalmente se realizó la corrida cambiando los ejes de las funciones objetivo para asegurar que el acomodo de éstas no influye en la solución. Los resultados obtenidos fueron satisfactorios y se pueden apreciar en las Figuras 17 y 18.

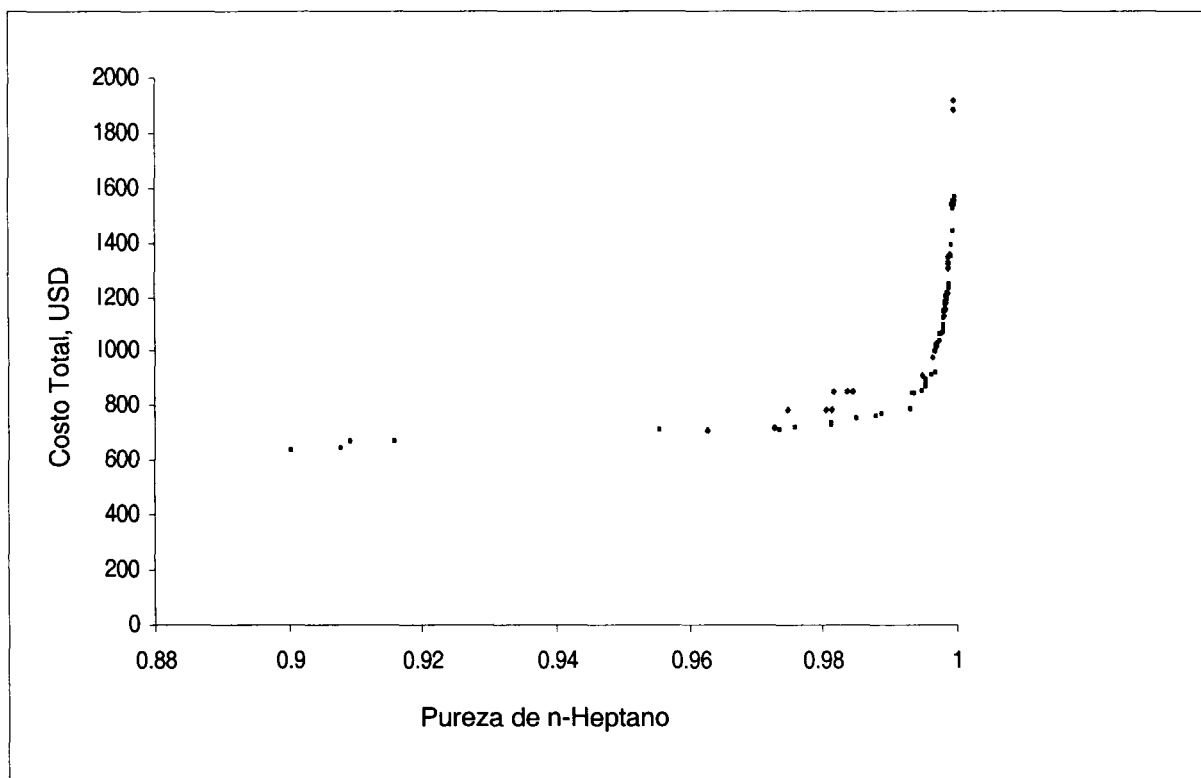


Figura 18. Pureza vs Costo Total

## MODIFICACIONES AL CRITERIO DE CONVERGENCIA

Inicialmente se proponen seis parámetros para el algoritmo de convergencia. Sin embargo, para algunos de estos parámetros no es necesario clasificarlos como tales e incluirlos dentro del conjunto de "parámetro del criterio de convergencia". Un caso de esto es  $\epsilon$  cuyo uso puede ser obviado al asignar un error grande a los individuos no factibles antes de llegar al criterio de convergencia. Incluso desde la misma interfase de Visual Basic se le puede asignar un castigo a aquellos individuos que resulten no factibles en la simulación de ASPEN Plus® y por tanto no serán elegidos por el algoritmo de optimización como candidatos a la curva de Pareto.

Otra modificación es el uso de  $\omega$  para la obtención de la distancia entre miembros de los intervalos formados respecto a la función objetivo 1, ¿Pero que sucede si la optimización involucra más de dos funciones objetivo? Con base en la experimentación realizada con problemas sencillos y relativamente complejos se ha visto que este parámetro sí tiene efecto sobre el resultado final, pero nunca comparado a lo que el parámetro  $\lambda$  o el parámetro  $\psi$  aportan (ver Figuras 17,18 y Tablas C.9-C.11).

Finalmente para las corridas de la interfase de optimización se recomiendan las siguientes configuraciones de parámetros para dos casos: (i) Optimización con resultados rigurosos y (ii) Optimización con resultados relajado. Para cualquiera de los casos,  $\epsilon$  se fija en  $1e-6$ ,  $\phi$  se fija en 0.4, y  $\epsilon_2$  se fija en 0.2.

#### **Caso Riguroso (i)**

Parámetro	Valor
$\omega$	0.3
$\lambda$	0.9
$\psi$	0.01

#### **Caso Relajado (ii)**

Parámetro	Valor
$\omega$	0.4
$\lambda$	0.6
$\psi$	0.03

## CONCLUSIONES

Mientras más relajados sean los parámetros del criterio de paro, el algoritmo multiobjetivo converge más rápido sacrificando (posiblemente) exactitud en los resultados. Sin embargo cuando se requiere de exactitud, los parámetros deberán ser más rígidos y aunque el tiempo de optimización incrementará relativamente, los resultados serán más precisos.

El criterio de convergencia propuesto para el NSGA-II funciona de manera efectiva en los problemas numéricos presentados y en la optimización del proceso de separación, y por lo tanto está listo para ser aplicado a procesos más difíciles, como síntesis de procesos de destilación multicomponente, diseño óptimo de destilación extractiva etc. Lo anterior se puede afirmar basado en el buen desempeño que el criterio de convergencia mostró para la optimización (Costo vs Pureza *n*-heptano) del proceso de destilación extractiva obteniendo resultados satisfactorios en un tiempo de evaluación aceptable.

# 4 Síntesis y Diseño Óptimo de Procesos de Separación

## INTRODUCCIÓN

En este capítulo se aplica el Criterio de Convergencia Propuesto en el Capítulo 3 para la Optimización Multiobjetivo de síntesis de procesos de separación analizando diferentes casos de estudio. En el ejemplo 1 se realiza la síntesis de la separación de una mezcla de cuatro hidrocarburos (nC4-nC7) con las funciones objetivo de: (i) Máxima recuperación de n-Hexano (compuesto intermedio) y (ii) Minimización del Costo Total (capital y operación). En el ejemplo 2 se realiza la síntesis de un proceso de separación referente a una mezcla concentrada de C4's (hidrocarburos de cuatro carbonos). Este proceso es difícil de resolver por la particularidad de que los 5 compuestos involucrados tienen volatilidades relativas muy cercanas y la separación se torna difícil requiriendo columnas de gran tamaño, por lo que se simula integración de energía entre corrientes para satisfacer de manera parcial o total las necesidades térmicas de otra corriente, minimizando el costo de operación y capital. Las funciones objetivo manejadas en el ejemplo 2 son: (i) Minimización del Costo Total y (ii) máxima recuperación del 1-Buteno. Para el ejemplo 3 se retoma el proceso de Destilación Extractiva de la mezcla altamente no ideal n-heptano-tolueno utilizando fenol como agente de separación. La maximización de la recuperación de n-heptano, la máxima pureza de n-heptano y la minimización del costo total son tomadas como criterios de optimización.

## SÍNTESIS DE SECUENCIAS DE DESTILACIÓN.

El primer paso para la síntesis de procesos es la creación de la superestructura que represente todas las configuraciones posibles para llevar a cabo dicho proceso químico. Para el caso específico de síntesis de secuencias de destilación, la superestructura evalúa cada ruta asignada para la separación de los componentes de la mezcla inicial (Destilación Multicomponente). El simulador de procesos ASPEN Plus® 12.1 es usado en el presente trabajo para realizar la simulación de cada secuencia elegida. Así mismo el NSGA-II es utilizado para llevar a cabo la optimización multiobjetivo. Diferentes casos de estudio son presentados con la finalidad de apreciar el efecto del criterio de paro propuesto en el algoritmo de optimización. Para cada secuencia se obtienen los datos de diseño y se evalúa el costo total. La actualización del costo total se realiza por medio del CEPCI (Chemical Engineering Plant Cost Index). El valor del CEPCI actualizado al año 2004 es de 405.90. El costo total considera: costos de capital (e.g. dimensión de columnas, área de intercambio de calor) así como costos de operación (e.g. servicios auxiliares).

### *EJEMPLO1. Separación de $nC_4$ , $nC_5$ , $nC_6$ y $nC_7$ .*

Se considera una alimentación fija de una mezcla líquida de cuatro hidrocarburos el cual será separado en sus componentes puros. La mezcla de 60, 100, 100, y 60 lbmol/hr de n-Butano, n-Pentano, n-Hexano y n-Heptano respectivamente, es alimentada al proceso para iniciar la operación unitaria. Las condiciones iniciales de la mezcla a separar son, 212 F y 150 psi. La simulación del proceso se lleva a cabo utilizando el bloque RADFRAC, el cual es un modelo riguroso del ASPEN Plus® para las operaciones de separación vapor líquido, en las que incluye la destilación. Las torres operan a 140 psi, utilizan condensadores totales y Rehervidor tipo Kettle, Platos perforados con un espaciado entre ellos de 24 pulgadas y una fracción de inundación igual a 0.80. Así mismo para la modelación del equilibrio se utiliza la ecuación de estado Peng-Robinson. La superestructura del proceso de separación se muestra en la Figura 20. Las Funciones Objetivo son: Minimizar Costos Totales y Maximizar Recuperación del n-Hexano. Dos casos de estudio se analizan: Primero donde el objetivo es obtener la máxima

recuperación del n-Hexano y pureza mayor o igual a 90% de cada uno de los componentes de la mezcla. Segundo, se desea la máxima recuperación del n-Hexano y pureza mayor o igual a 90% del mismo compuesto.

**EJEMPLO 1, CASO1. Separación Completa de los Cuatro Hidrocarburos (Sharp Split)**

Para realizar la síntesis del proceso se tienen cinco secuencias posibles Figura 19 (a, b, c, d, e), elegidas mediante una variable binaria  $\alpha \in [0-4]$  (3 bits). Cada valor tomado por la variable  $\alpha$ , corresponde a una secuencia de destilación, así si  $\alpha=0$ , se evaluará la secuencia 1; si  $\alpha=1$ , se evaluará la secuencia 2, etc. El valor de  $\alpha$  es aleatorio y asignado por el algoritmo de optimización. Las variables, funciones objetivo y las restricciones son presentadas en la Tabla 1.

Funciones Objetivo			
[1]	MINIMIZAR COSTOS TOTALES		
[2]	MAXIMIZAR RECUP. DE n-HEXANO		
Restricciones			
[1]	Pureza de n-Butano $\geq 90\%$		
[2]	Pureza de n-Pentano $\geq 90\%$		
[3]	Pureza de n-Hexano $\geq 90\%$		
[4]	Pureza de n-Heptano $\geq 90\%$		
Tabla de Optimización			
	Rango	Bits	Tipo
Relación de Relujo *	0-20	-	Real
Número de Platos *	0-63	6	Binaria
Plato de Alimentación*	0-63	6	Binaria
Variable $\alpha$	0-4	3	Binaria

\* Para cada columna

Tabla 1. Modelo y variables de optimización

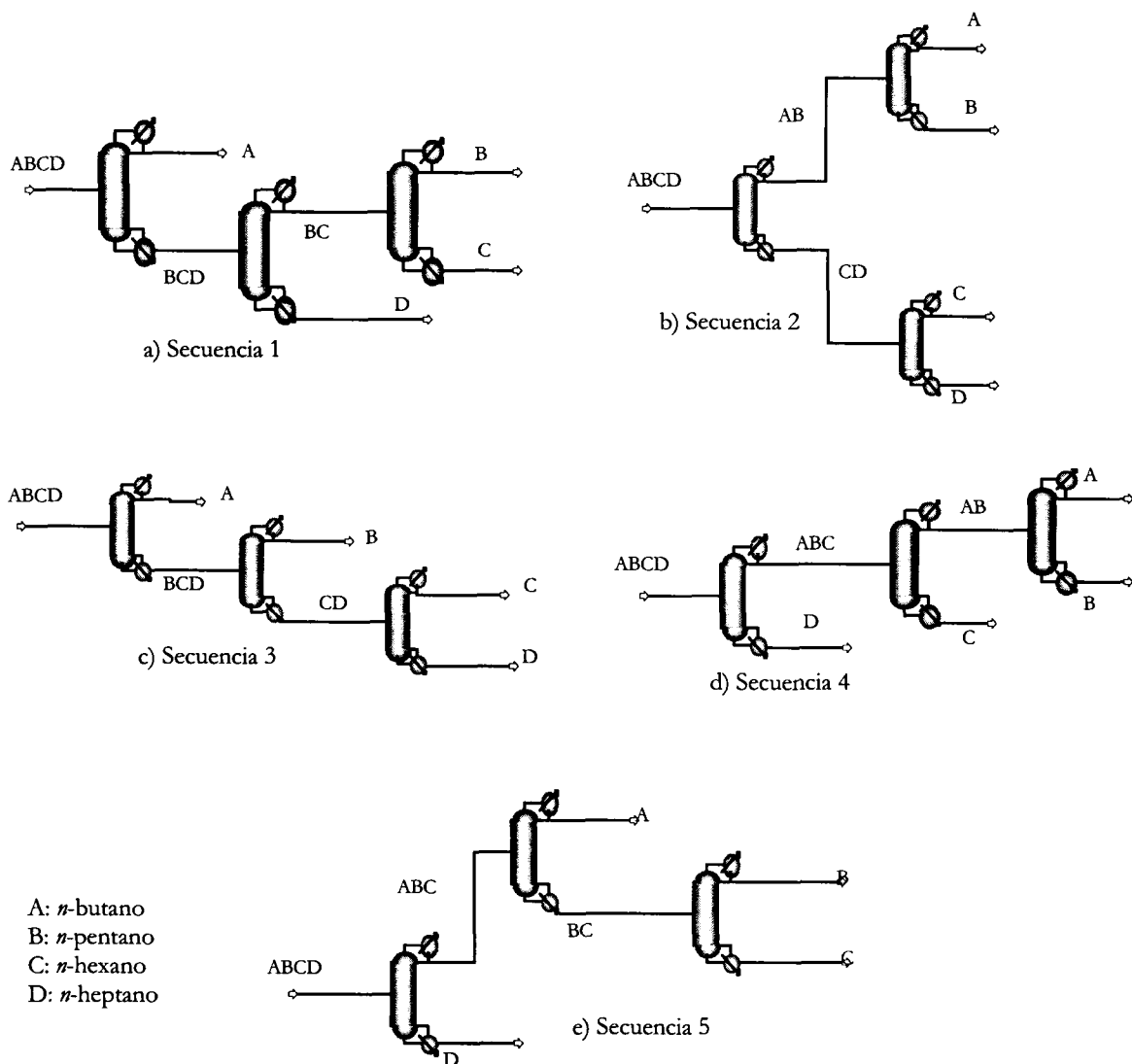


Figura 19. Secuencias de destilación para la separación de ejemplo1, caso1.



Se llevan a cabo corridas con diferentes valores del criterio de paro (Tabla 2). Los mejores resultados son mostrados en la Figura 21. La curva óptima se obtiene después de 200 generaciones y 50 individuos iniciales sin la utilización del criterio de paro. Al finalizar dicha corrida se obtienen 50 individuos no dominados.

	Conjunto 1	Conjunto 2	Conjunto 3	Conjunto 4	Conjunto 5
$\varphi$	0.4	0.4	0.4	0.4	0.4
$\omega$	0.4	0.4	0.4	0.4	0.3
$\varepsilon$	0.2	0.2	0.2	0.2	0.1
$\lambda$	0.4	0.4	0.6	0.8	0.9
$\psi$	0.05	0.03	0.03	0.03	0.01

Tabla 2. Parámetros del Criterio de Paro usados para el caso 1

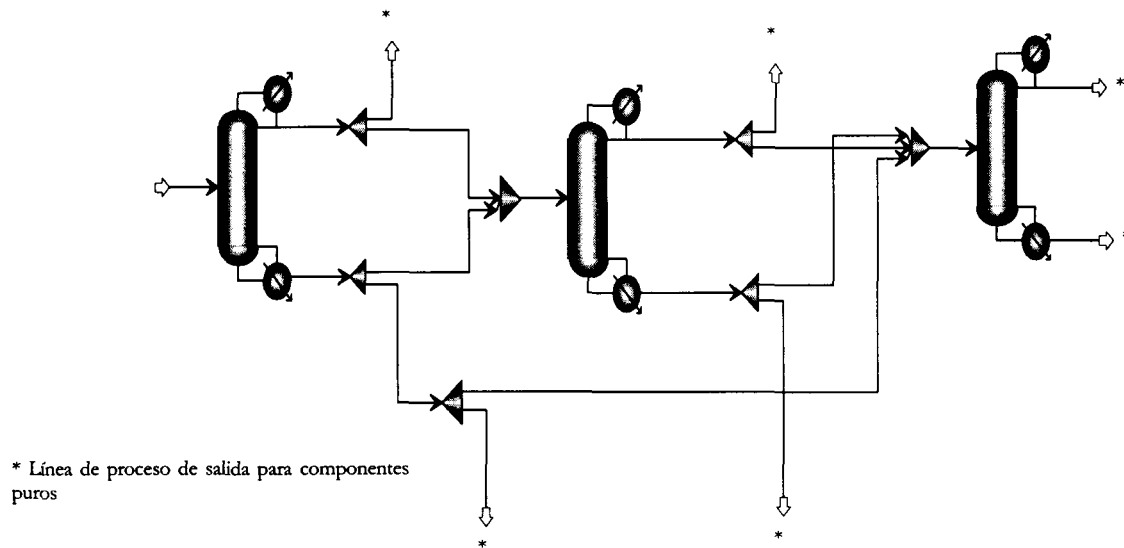


Figura 20. Superestructura del proceso de separación

Con la utilización de parámetros se encontró la solución en 44 generaciones para una población inicial de 50 individuos, obteniéndose 50 individuos no dominados al final. Por su

parte con parámetros relajados la solución se encontró en 12 generaciones para el mismo número de individuos iniciales y se obtienen 21 individuos no dominados al final de la corrida.

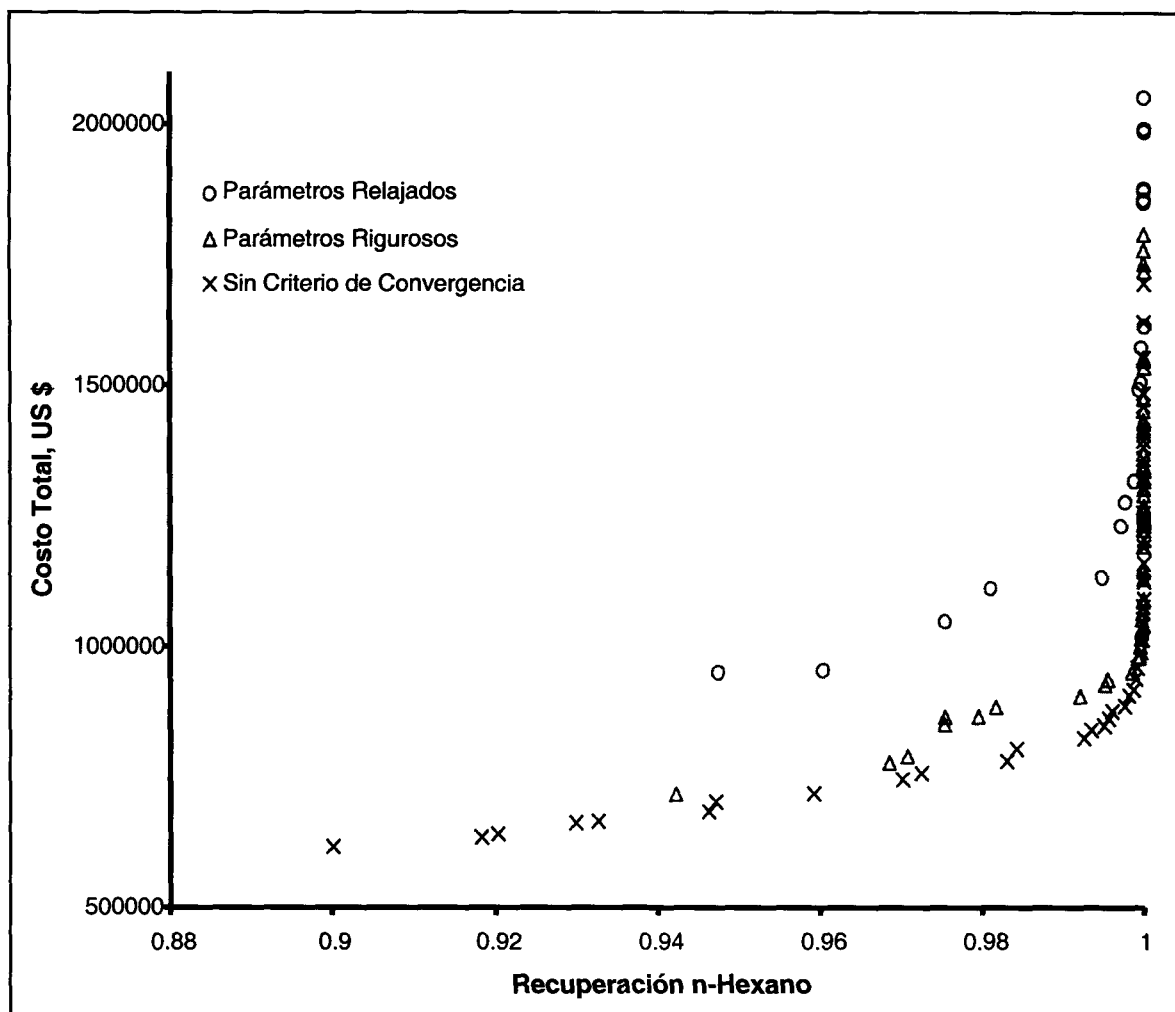


Figura 21. Mejores soluciones para ejemplo 1, caso 1

Analizando los diseños obtenidos con la utilización de parámetros rigurosos se observa que las secuencias 1 y 3 dominan el proceso de separación (Figuras 21 y 22). Tres puntos de la curva

de diseños óptimos (número de platos, plato de alimentación, relación de reflujo, etc.) de la secuencia 3 son seleccionados para conocer sus detalles. Estos datos se encuentran en las Figura 23, y 24 y en las Tablas 3, 4 y 5.

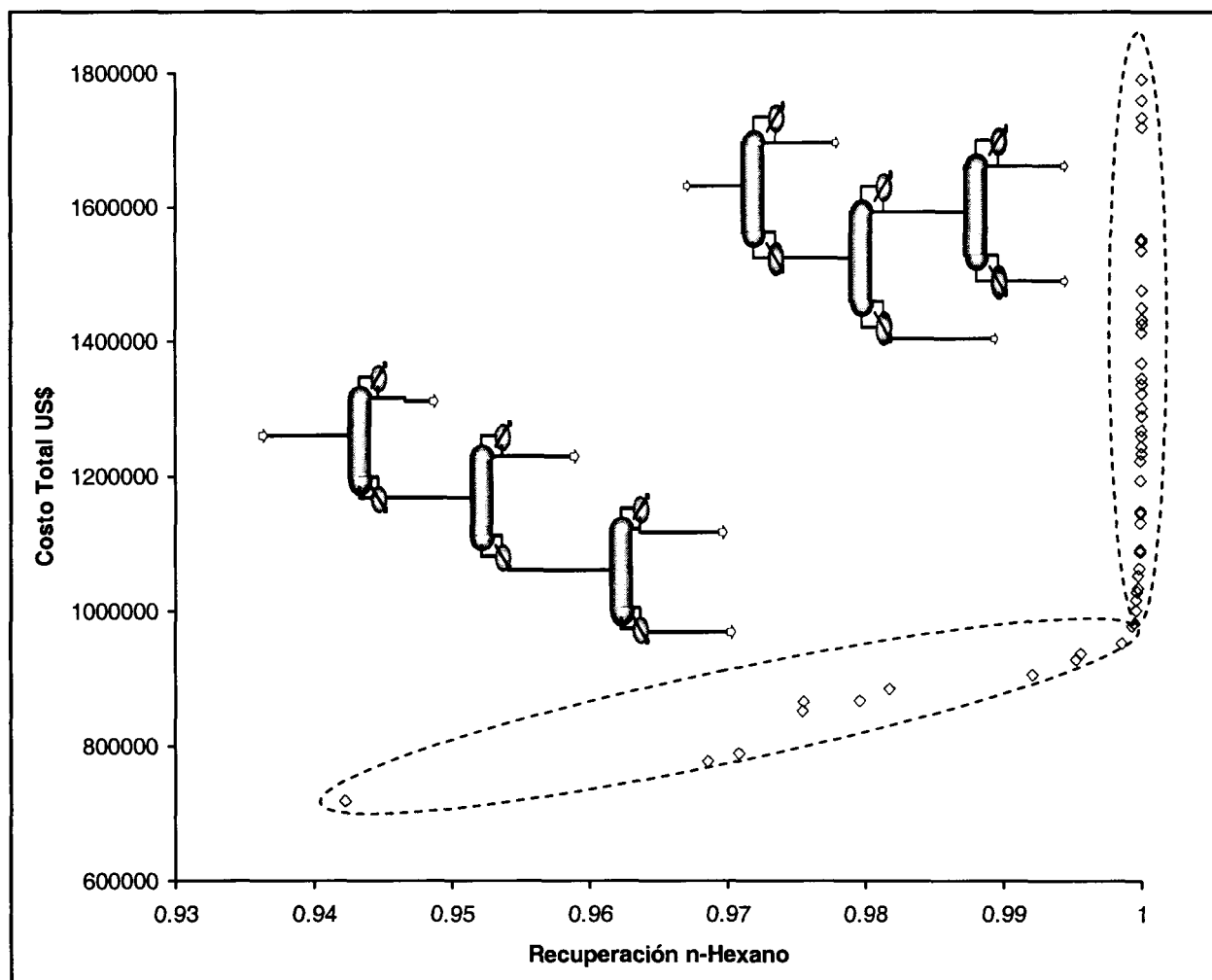


Figura 22. Secuencias dominantes en la síntesis

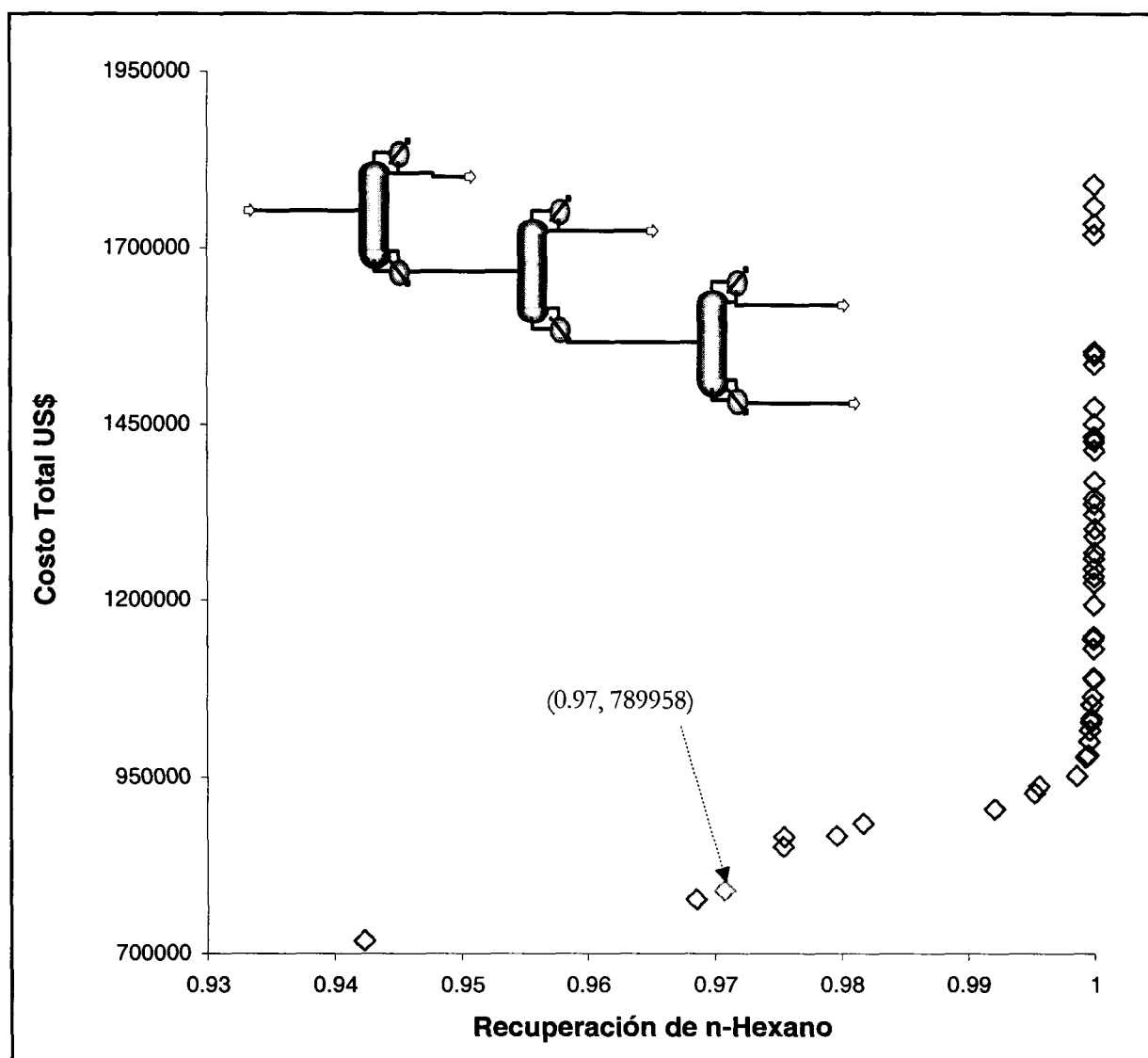


Figura 23. Identificación de un diseño óptimo para la separación

El diseño presentado en la Figura 23 (0.97, 789958) representa una de las mejores opciones, recuperando 90% de n-hexano a un costo razonable. Se estima un Costo total de \$ 789,958 USD, para un duty total en la columna 1 de 1807 kW, 2861 kW en la segunda y 2117 kW en la tercera. Las áreas de los rehedidores son: 62.3, 10.9 y 10.2 m<sup>2</sup> respectivamente. Los detalles de diseño se presentan en la Tabla 3.

Diseño Óptimo Obtenido			
Variable	Col 1	Col 2	Col 3
Número de Platos	25	25	43
Plato de Alimentación	18	12	22
Relación de Reflujo	4.4	4.6	2.9
Flujo de Destilados, kgmol/hr	27.2	45.4	45.4
Area de Condensadores, m <sup>2</sup>	14.4	14.3	7.3
Area de Rehervidores, m <sup>2</sup>	62.3	10.9	11.2
Carga Térmica Cond, kW	722.3	1399.6	1051.3
Carga Térmica Reherv, kW	1084.9	1461.8	1066.2
Diámetro de Columnas, m	0.9	1.4	1.0
Longitud de Columnas, m	14.0	14.0	25.0
Temp. Condensadores, K	352.4	394.3	435.7
Temp. Rehervidores, K	422.8	448.1	470.9
Costo Total, US \$	789958.31		

Tabla 3. Diseño óptimo del punto [0.97, 789958] de Figura 23.

En la curva de diseños óptimos se identifican dos zonas las cuales son dominadas por la secuencia 1 y la secuencia 3. Existe un punto en el cual se cambia de la secuencia 3 a la secuencia 1, el cual es identificado en la Figura 24, Tabla 4.

Diseño Óptimo Obtenido			
Variable	Col 1	Col 2	Col 3
Número de Platos	25	56	60
Plato de Alimentación	16	28	31
Relación de Reflujo	3.9	4.2	3.9
Flujo de Destilados, kgmol/hr	27.2	45.4	45.4
Area de Condensadores, m <sup>2</sup>	13.2	13.1	9.0
Area de Rehervidores, m <sup>2</sup>	59.9	10.1	14.1
Carga Térmica Cond, kW	659.4	1278.3	1309.3
Carga Térmica Reherv, kW	1023.3	1342.2	1324.4
Diámetro de Columnas, m	0.9	1.3	1.1
Longitud de Columnas, m	14.0	32.9	35.4
Temp. Condensadores, K	352.1	394.2	436.1
Temp. Rehervidores, K	423.0	448.7	471.7
Costo Total, US \$	982036		

Tabla 4. Diseño óptimo del punto [0.994,982036] de la Figura 24.

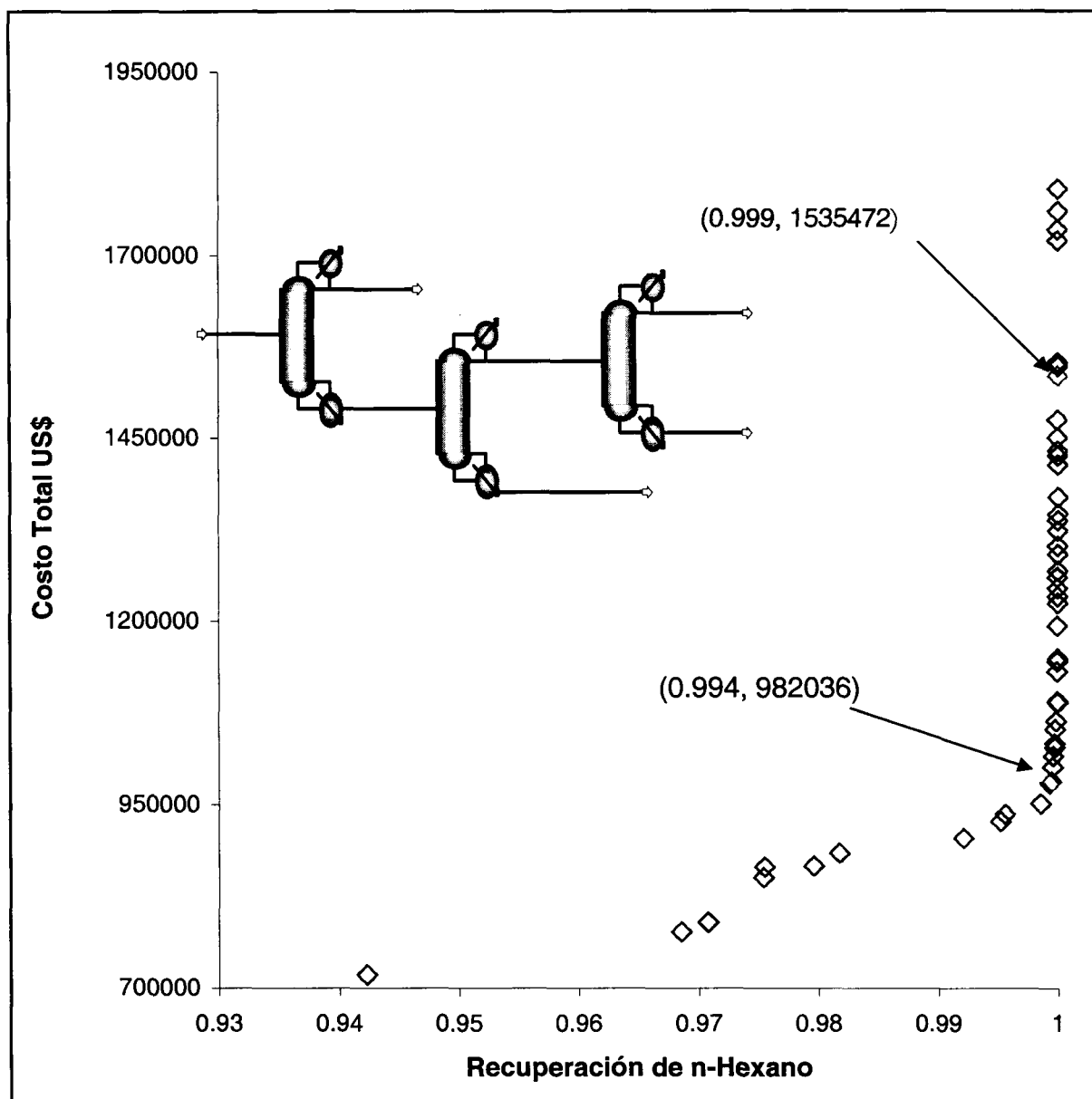


Figura 24. Identificación de un diseño óptimo para la separación

Para el diseño (0.994, 982036) se necesitan 56 y 60 platos de separación en las columnas 2 y 3 respectivamente, 3690 kW de potencia térmica en los rehedidores y 3246 kW en condensadores. El costo total es igual a \$982036 US (ver Tabla 4).

Al incrementar la recuperación del n-hexano aumenta de manera significativa el costo total. El punto mostrado (0.999, 1535472) en la Figura 24 y Tabla 5, no sería definitivamente un diseño factible, la finalidad de detallar aquí su diseño es para ver el efecto meramente numérico. El costo aumenta exponencialmente a medida que la recuperación tiende al 100%. Aunque en la realidad los diseños factibles serían aquellos que están por debajo de \$ 1000,000 US donde el costo no aumenta de manera drástica. La importancia física de obtener recuperaciones de 99.99% en vez de 98% no se considera importante. De hecho es imposible obtener recuperaciones tan altas en un proceso real, más sin embargo los resultados numéricos y el algoritmo de optimización lo consideran como factibles.

Diseño Óptimo Obtenido			
Variable	Col 1	Col 2	Col 3
Número de Platos	26	80	83
Plato de Alimentación	20	32	46
Relación de Reflujo	4.8	4.1	7.5
Flujo de Destilados, kgmol/hr	27.2	90.8	45.4
Area de Condensadores, m <sup>2</sup>	15.6	23.6	21.7
Area de Rehervidores, m <sup>2</sup>	65.2	30.3	60.0
Carga Térmica Cond, kW	783.0	2793.9	2108.4
Carga Térmica Reherv, kW	1145.0	2846.2	2136.0
Diámetro de Columnas, m	1.0	2.0	1.3
Longitud de Columnas, m	14.6	47.5	49.4
Temp. Condensadores, K	352.5	412.3	393.6
Temp. Rehervidores, K	422.7	471.8	436.1
Costo Total, US \$	1535472.6		

Tabla 5. Diseño óptimo del punto [0.999, 1535472] de la figura 24.

En este punto de la curva óptima se requieren 23, 80 y 83 platos de separación respectivamente y la secuencia de separación número 1 es la que rige el proceso. En este caso el producto principal se obtiene en el fondo de la tercera columna. Se estima un Costo total de \$ 1, 535,472 US, para un duty total en la columna 1 de 1928 kW, 5640 kW en la

segunda y 4244 kW en la tercera. Las áreas de los rehervidores son: 65.2, 30.3 y 60.0 m<sup>2</sup> respectivamente (ver tabla 5).

#### *EJEMPLO 1, CASO 2. Separación Completa del n-Hexano.*

Muchos procesos industriales de separación solo requieren obtener como producto principal un componente de la mezcla inicial. En algunos casos sólo uno de estos componentes tiene valor significativo por lo que la recuperación tenderá al máximo, o tal vez se trata de un producto intermedio o final que deberá ser entregado al proceso siguiente (o al mercado) con una pureza especificada.

La misma separación presentada en el Caso 1 es considerada aquí. Sin embargo, sólo uno de los componentes de la mezcla inicial es simulado como producto de interés, n-hexano. Las funciones objetivo son las mismas que en el Caso 1, Mínimo Costo y Máxima Recuperación. Las restricciones por su parte tendrán que ser más relajadas al Caso 1, especificando solamente la restricción de pureza del n-hexano. En la Figura 25 se muestran las dos secuencias adicionales para la síntesis de este proceso.

Al simular la separación por la secuencia 6 ó secuencia 7, los costos de inversión de capital se reducen debido a que no existe la tercera columna. Algo lógico que podría suponerse hasta esta instancia es que al realizar la síntesis del proceso, el algoritmo de optimización tenderá a elegir alguna de éstas secuencias debido al bajo costo que representan. La superestructura del proceso es la misma al caso anterior (Figura 20), sin embargo la variable binaria ahora tendrá un rango mayor el cual tomará en consideración las dos nuevas secuencias,  $\alpha \in [0-6]$  (3 bits). La interfase interpretará el valor asignado a la variable  $\alpha$ , y evaluará la secuencia correspondiente. Las variables de optimización consideradas en este caso se enlistan en la Tabla 6.



Variables de Optimización			
	Rango	Bits	Tipo
Relación de Relujo *	0-20	-	Real
Número de Platos *	0-63	6	Binaria
Plato de Alimentación *	0-63	6	Binaria
Variable $\alpha$	0-6	3	Binaria

\* Para cada columna

Tabla 6. Variables de optimización para Ejemplo 1, Caso 2

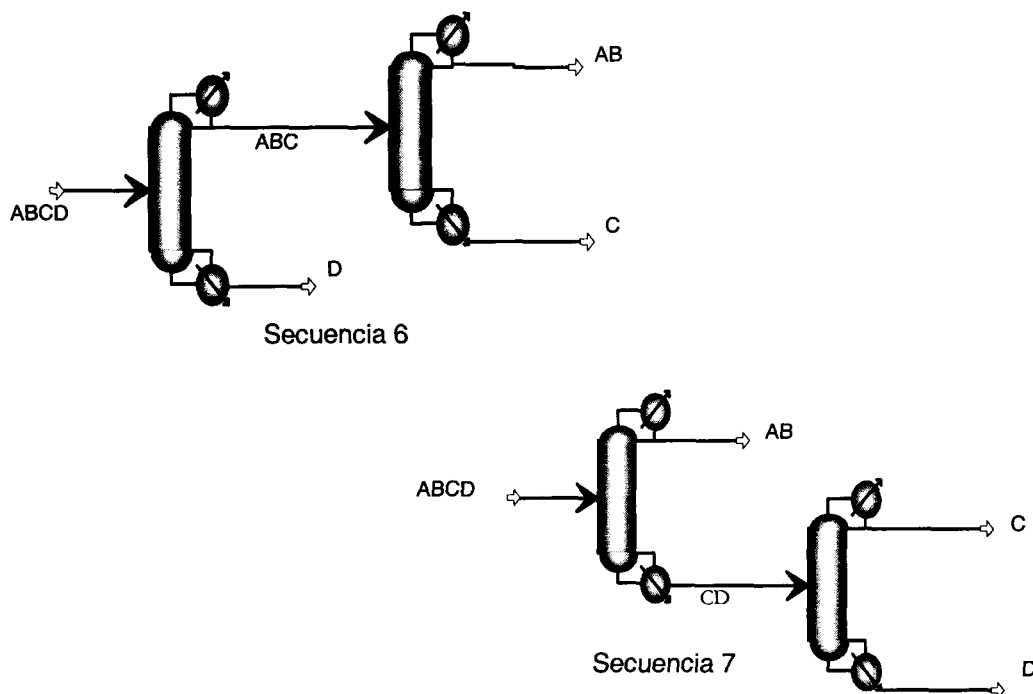


Figura 25. Producto C de interés, secuencias adicionales

La interfase de Visual Basic asigna la configuración correspondiente a la superestructura del proceso en ASPEN Plus®. Una vez que el simulador realiza la corrida, la interfase obtiene los

datos del diseño y evalúa las funciones objetivo. Los criterios de optimización, las variables de optimización y los datos del diseño son transmitidos hacia el NSGA-II para evaluar las restricciones y funciones objetivo, permitiendo de esta forma, clasificar al individuo (diseño obtenido de la corrida) dependiendo de la aptitud que presente.

Los resultados presentados para este caso corresponden a la corrida del proceso con parámetros rigurosos del criterio de convergencia en el cual se realiza la optimización con 50 individuos iniciales. El algoritmo detiene las evaluaciones en la generación 20 y obtiene 50 individuos no dominados (24 generaciones menos al Caso 1 para el mismo conjunto de parámetros del criterio de paro). Cada punto en la curva representa un diseño óptimo del proceso de separación el cual a su vez, corresponde a una secuencia de destilación.

Debido a la incorporación de las dos secuencias, los costos de los diseños son más bajos y la optimización recomienda una secuencia que cuente con solo 2 columnas de destilación, esta secuencia domina prácticamente toda la región de Pareto. Las corrientes que no refieren a la del producto principal tendrán purezas relativamente bajas debido a las condiciones y configuración óptima obtenida.

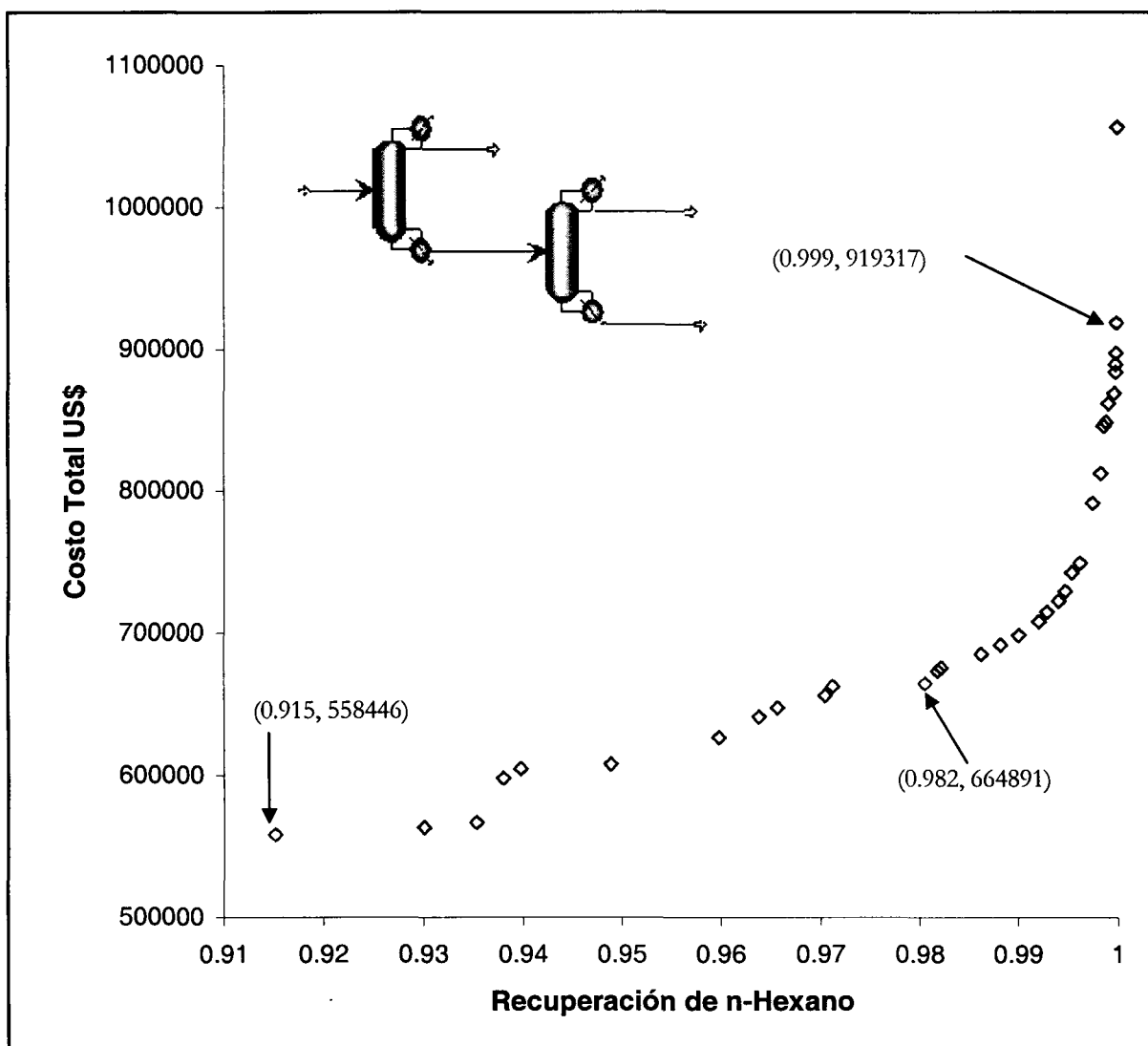


Figura 26. Conjunto de soluciones óptimas ejemplo 1 Caso 2

Diseños óptimos cuyos costos totales fluctúan entre 550,000 y 1,000,000 US \$ son obtenidos (Figura 26). Para la carga inicial con flujos de alimentación de 60, 100, 100, y 60 lbmol/hr de n-Butano, n-Pentano, n-Hexano y n-Heptano (Ver Tablas 7, 8 y 9 para los tres puntos de la Figura 26).

Diseño Óptimo Obtenido		
Variable	Col 1	Col 2
Número de Platos	25	37
Plato de Alimentación	12	10
Relación de Reflujo	1.4	3.2
Flujo de Destilados, kgmol/hr	72.6	45.4
Area de Condensadores, m <sup>2</sup>	13.3	8.0
Area de Rehervidores, m <sup>2</sup>	78.3	11.9
Carga Térmica Cond, kW	1006.3	1138.1
Carga Térmica Reherv, kW	1401.3	1154.1
Diámetro de Columnas, m	1.1	1.3
Longitud de Columnas, m	14.0	21.3
Temp. Condensadores, K	374.7	434.0
Temp. Rehervidores, K	446.5	470.1
Costo Total, US \$	558446.9	

Tabla 7. Diseño óptimo del punto (0.915, 558446) de la Figura 26.

Diseño Óptimo Obtenido		
Variable	Col 1	Col 2
Número de Platos	33	37
Plato de Alimentación	15	18
Relación de Reflujo	1.9	3.5
Flujo de Destilados, kgmol/hr	72.6	45.4
Area de Condensadores, m <sup>2</sup>	15.7	8.3
Area de Rehervidores, m <sup>2</sup>	11.8	12.8
Carga Térmica Cond, kW	1171.3	1203.2
Carga Térmica Reherv, kW	1575.3	1218.1
Diámetro de Columnas, m	1.1	1.3
Longitud de Columnas, m	18.9	21.3
Temp. Condensadores, K	373.9	435.9
Temp. Rehervidores, K	448.3	471.2
Costo Total, US \$	664891	

Tabla 8. Diseño óptimo del punto (0.982, 664891) de la Figura 26.

Diseño Óptimo Obtenido		
Variable	Col 1	Col 2
Número de Platos	73	73
Plato de Alimentación	34	31
Relación de Reflujo	1.9	3.3
Flujo de Destilados, kgmol/hr	72.6	45.4
Area de Condensadores, m <sup>2</sup>	15.7	7.9
Area de Rehervidores, m <sup>2</sup>	11.8	12.4
Carga Térmica Cond, kW	1167.7	1153.1
Carga Térmica Reherv, kW	1573.5	1168.2
Diámetro de Columnas, m	1.2	1.3
Longitud de Columnas, m	43.3	43.3
Temp. Condensadores, K	373.7	436.1
Temp. Rehervidores, K	448.7	471.8
Costo Total, US \$	919317.1	

Tabla 9. Diseño óptimo del punto (0.999, 919317) de la Figura 26.

Para la misma secuencia al aumentar la recuperación de n-hexano los costos de operación aumentan considerablemente reflejándose en los costos totales. Aunado al incremento en la demanda de energía en el fondo y domo de la torre, los costos de inversión de capital se ven afectados por las dimensiones de los equipos de separación y de intercambio de energía. Dependiendo del objetivo trazado en cuanto a especificaciones de separación se utilizarán ya sea la secuencia 3 (para el caso 1) o la secuencia 7 (para el caso 2). Al incrementar la recuperación del nhexano de 98 al 99.9 %, las etapas de separación de las columnas aumentan de 33 a 73 y de 37 a 73 para la primer y segunda columna respectivamente, afectando obviamente la longitud de cada una de ellas. Este efecto es similar al presentado en el caso 1, en el que los costos totales se incrementan exponencialmente cuando la recuperación tiende al máximo.

*EJEMPLO 1, CASO 3. Comparación de estrategias EO y SM en ASPEN Plus®.*

Para este caso se realizó la simulación del proceso mediante Equation Oriented Strategy (EO) de ASPEN Plus®. Esta alternativa permite evaluar la simulación del proceso como un conjunto de ecuaciones simultáneas y no como un modelo secuencial (Sequential Modular Strategy, SM). Este método además de realizar las simulaciones más rápido es ideal para procesos con recirculaciones donde el método de evaluación SM tarda algunas iteraciones en resolverlo. En la Figura 27 se presenta la curva óptima de Pareto y la secuencia de separación elegida por el algoritmo de optimización. Se compara el desempeño de la estrategia EO con SM encontrando prácticamente la misma tendencia para cualquiera de las estrategias de solución. Aunque una ventaja de la estrategia EO es la minimización del tiempo de cómputo para la simulación, aquí esto no se ve reflejado debido a la carencia de recirculaciones en el proceso.

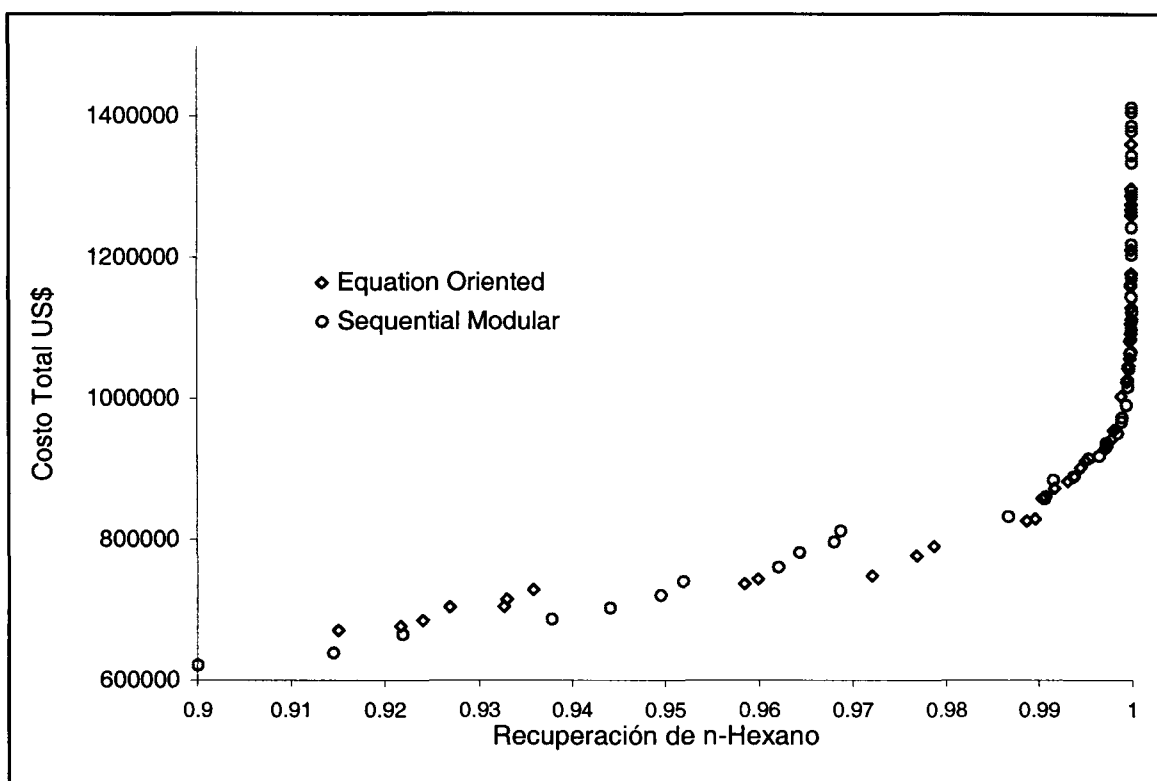


Figura 27. Comparación de resultados usando estrategia EO y SM.

## SÍNTESIS DE SECUENCIAS DE DESTILACIÓN CON INTEGRACIÓN DE ENERGÍA

En los problemas presentados en la sección anterior, se asume que el enfriamiento en los condensadores y el calentamiento en los rehedidores es llevado a cabo con servicios auxiliares (e.g. agua de torre de enfriamiento y vapor, respectivamente). Sin embargo, siempre es deseable llevar a cabo una integración energética en secuencias de destilación, debido a que la energía, más que la inversión de capital, tiende a ser el costo dominante del proceso.

La integración de energía puede ser llevada a cabo como se muestra en la Figura 28 (Tomado de Biegler, 1997). En este ejemplo ilustrativo la separación de ABC se lleva a cabo. Aquí la primera columna opera a alta presión de tal forma que su condensador puede ser usado como fuente de calor para el rehedidor de la segunda columna, la cual opera a presión más baja. Es claro que la selección de la presión de operación de las columnas es de vital importancia.

En esta sección se presenta la síntesis de un proceso de separación (ejemplo 2), tomado de Dunnebir & Pantelides, (1999).

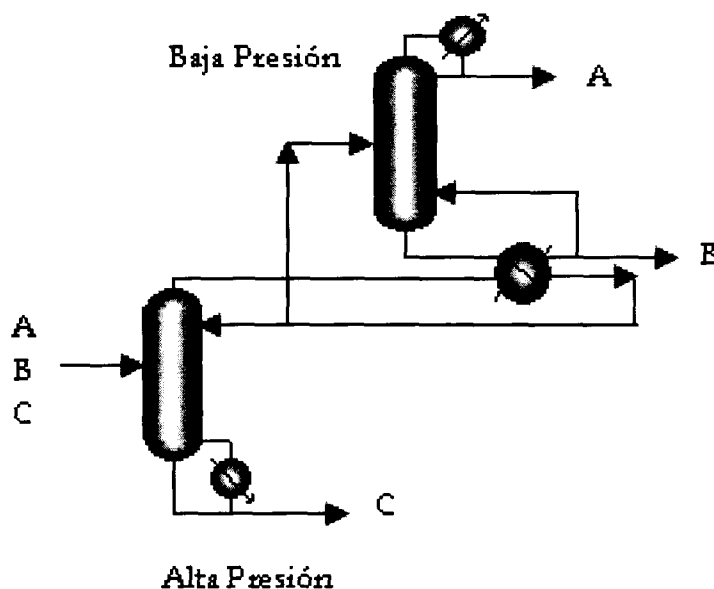


Figura 28. Integración de energía para la separación de ABC

### *EJEMPLO 2. Separación de Hidrocarburos de 4 carbonos con Integración de Calor*

Debido a la cercanía en sus puntos de ebullición, la separación de hidrocarburos de cuatro carbonos (C4's) es una de las tareas más difíciles encontradas en las refinerías. Aquí es considerada una alimentación fija (mezcla líquida) de isobutano (4.9 % mol), 1-buteno (50.71 % mol), n-butano (6.95 % mol), trans-2-buteno (9.46 % mol) y cis-2-buteno (27.98 % mol). Los componentes se dan en orden decreciente de volatilidad relativa; el objetivo principal es obtener la máxima recuperación de uno de los componentes con punto de ebullición intermedio 1-buteno, aunado a la minimización de costos totales del proceso. Las condiciones de la mezcla inicial son, 6 bar de Presión, 323 K y una alimentación de 250 kmol/hr. Los requerimientos energéticos para este proceso son considerables, por lo que la integración de energía conducirá a ahorros importantes (Dunnebie & Pantelides, 1999).

Leboreiro & Acevedo, (2001, 2004) realiza un análisis sobre modelos termodinámicos usados para esta separación. El autor encuentra que el modelo Redlich-Kwong-Soave (RKS) así como el Peng-Robinson obtienen diseños satisfactorios teniendo en cuenta que estos modelos son bastante confiables para la estimación de propiedades de hidrocarburos.

En el ejemplo 2 la ecuación de estado RKS es utilizada para modelar el equilibrio. Al igual que en secciones anteriores el modelo RADFRAC de ASPEN Plus® es usado para la simulación del proceso de destilación.

Se desea que el 1-buteno se obtenga con una pureza y recuperación alta. Por tanto, se tendrán dos secuencias posibles para llevar a cabo la síntesis y optimización de este proceso. Las secuencias estudiadas, la superestructura del proceso con y sin integración de energía se presentan en las Figuras 29, 30 y 31.



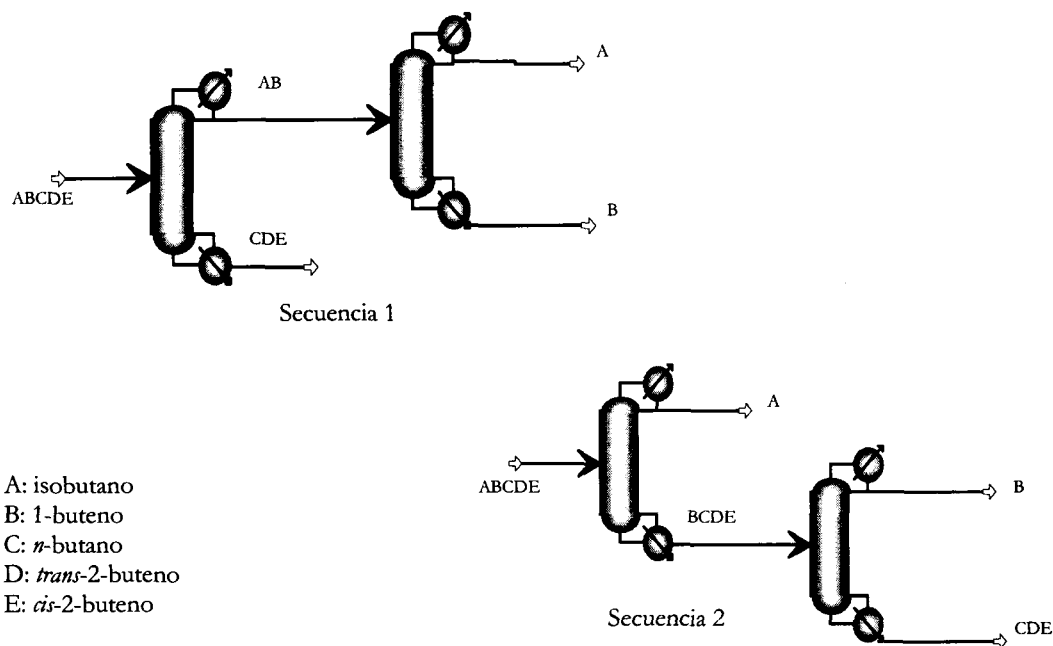
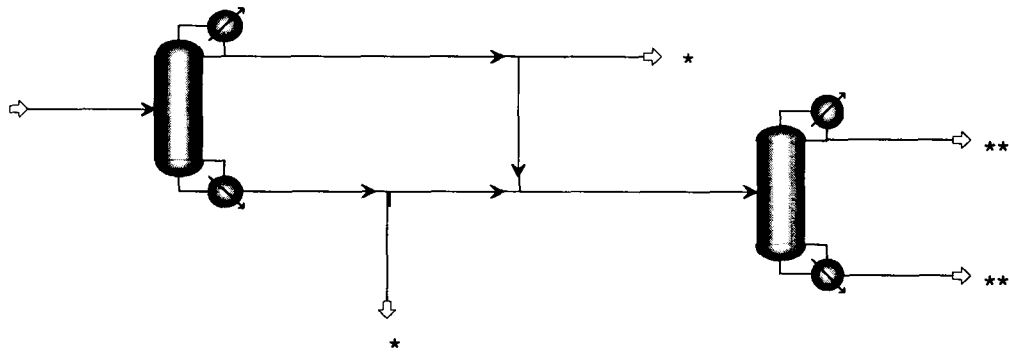


Figura 29. Secuencias de separación del ejemplo 2

Las funciones objetivo del algoritmo de Optimización para esta síntesis, son: La Minimización de Costos Totales y la Maximización de Recuperación de 1-Buteno el cual se obtiene en la segunda columna (en el destilado o residuo según la configuración evaluada). La única restricción propuesta será la pureza del 1-buteno en la corriente de salida la cual deberá ser mayor o igual al 90 %.



- \* Salida de subproductos
- \*\* Salida de 1-buteno

Figura 30. Superestructura del proceso de separación sin integración de energía

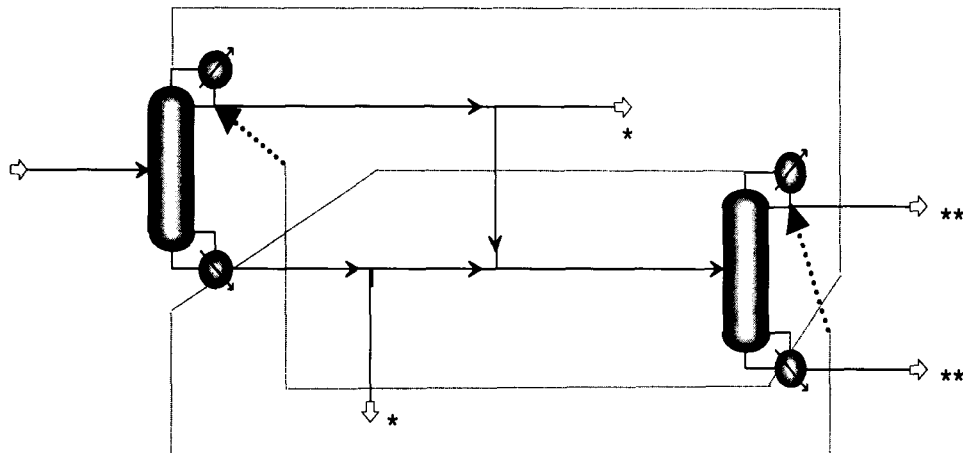


Figura 31. Superestructura del proceso de separación con integración de energía

El algoritmo de optimización utiliza la variable  $\alpha \in [0-1]$  (1 bit), para definir la secuencia a evaluar. Debido a que la única restricción es la pureza del 1-buteno, solo dos secuencias se utilizan para la síntesis del proceso. Para llevar a cabo la integración de calor, la presión de las columnas se deja como un grado de libertad. Si la energía de cualquier condensador satisface de manera total o parcial la energía requerida en el rehedidor de la otra columna, la integración podrá llevarse a cabo, evitando costos de operación importantes (e.g. vapor de baja, media o alta presión).

Las variables usadas en la optimización son: Número de Platos, Plato de Alimentación, Relación de Reflujo, Flujo de Destilado, Presiones de Operación, y por supuesto la variable binaria  $\alpha$ , para la elección de la secuencia de separación (Tabla 10). Para una población inicial de 50 individuos y parámetros rigurosos del criterio de convergencia se obtiene el conjunto de soluciones óptimas mostradas en la Figura 32. Dunnebie & Pantelides, (1999) en base a los estudios realizados en este proceso recomiendan algunas condiciones de operación para el mejor desempeño del proceso: Presión de operación entre 8 y 13 bar, máximo número de platos igual a 90 y 118 para la columna 1 y 2 respectivamente, relación de reflujo entre 70 y 100 para la primera columna y de 0 a 30 para la segunda. Adicionalmente a las recomendaciones de Dunnebie & Pantelides se realizaron corridas manteniendo el primer reflujo en un rango entre 0-100. Los resultados de ambos casos se presentan en las Tablas 11 y 12 así como en las Figuras 32 y 33. El algoritmo encontró el conjunto de diseños óptimos en 22 generaciones, obteniendo 50 individuos no dominados.

Variables de Optimización			
	Rango	Bits	Tipo
Relación de Reflujo Col 1	0-100	-	Real
Relación de Reflujo Col 2	0-30	-	Real
Número de Platos *	0-63	6	Binaria
Plato de Alimentación*	0-63	6	Binaria
Presión de Operación, KPa*	600-1300	-	Real
Variable $\alpha$	0-1	1	Binaria

\* Para cada columna

Tabla 10. Variables de optimización para el proceso.

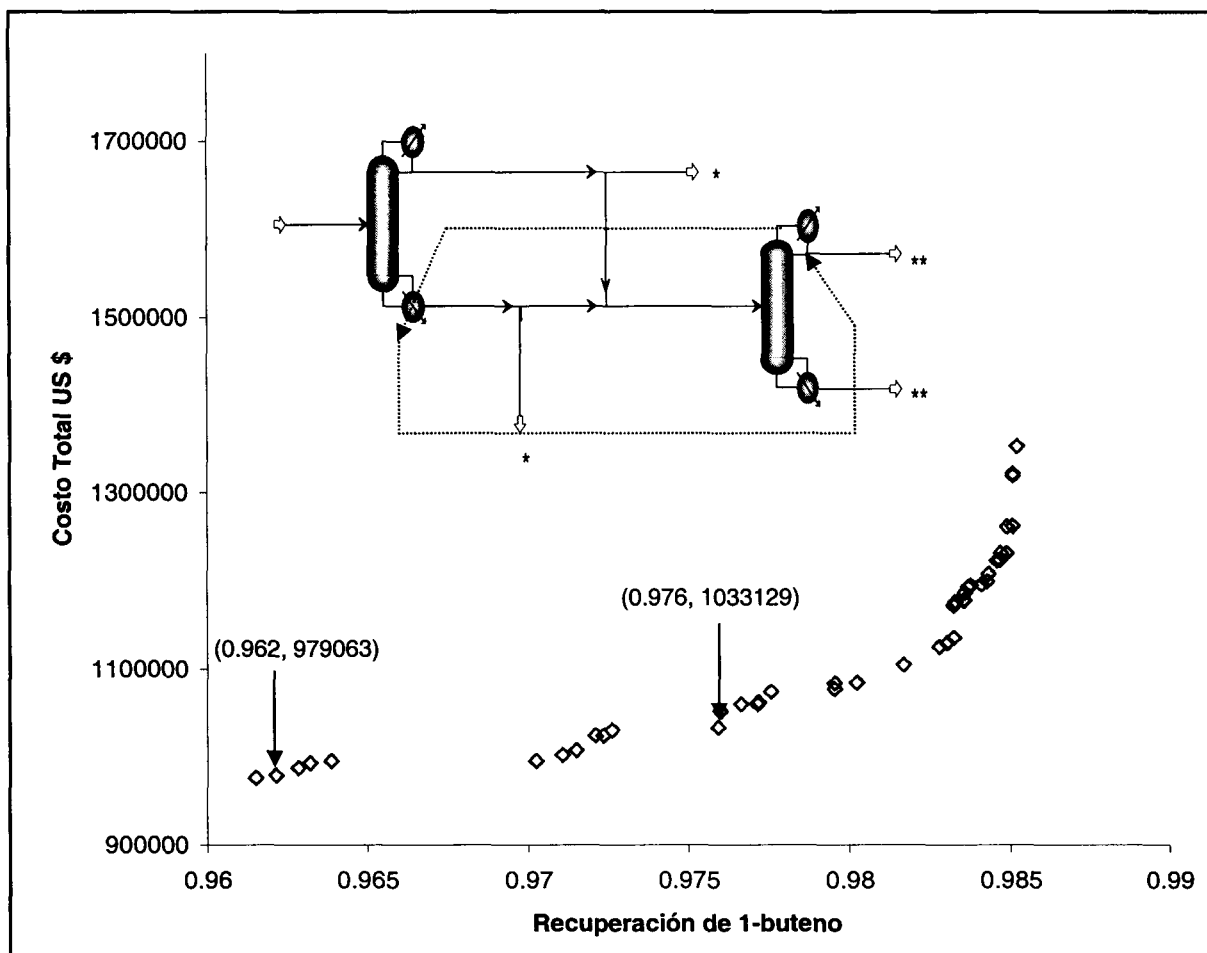


Figura 32. Soluciones óptimas de la separación de C4's.

El conjunto de diseños óptimos está totalmente dominado por la secuencia 2, en la que el 1-buteno se obtiene por el domo de la segunda columna. Los resultados con integración energética son mostrados en la Figura 32. Estos resultados muestran que la carga térmica presente en el domo de la columna 2 satisface los requerimientos energéticos del fondo de la primera columna. Cada punto sobre la curva representa un diseño óptimo para el proceso, clasificados como soluciones no dominadas en el proceso de optimización. Detalles de dos diseños dentro del conjunto óptimo son detallados en las Tablas 11 y 12.

Se obtienen diseños por debajo de \$ 1, 000,000 US, para recuperaciones entre 96 y 97.5%. El rehedidor de la columna 1 no existe debido a que la carga térmica del destilado de la columna 2 satisface parcialmente las necesidades de calor del fondo de la columna 1. Sin embargo se necesita un intercambiador de calor relativamente pequeño para completar el 100% del calor requerido.

Diseño óptimo		
Variable	Col 1	Col 2
Número de Platos	41	95
Plato de Alimentación	28	55
Relación de Reflujo	8.5	11.2
Flujo de Destilados, kgmol/hr	9.4	126.9
Area de Condensadores, m <sup>2</sup>	29.9	216.4
Area de Rehervidores, m <sup>2</sup>	-	53.4
Carga Térmica Cond, kW	468.7	7132.4
Carga Térmica Reherv, kW	-	7789.9
Diámetro de Columnas, m	1.0	3.2
Longitud de Columnas, m	13.9	33.1
Temp. Condensadores, K	322.4	337.3
Temp. Rehervidores, K	327.0	347.3
Presión de Operación, bar	6.0	8.6
Area de Int. de Calor, m <sup>2</sup>	43.3	-
Carga Térmica Int. de Calor, kW	507.1	-
Costo Total, USD	\$979,064	

Tabla 11. Diseño óptimo del punto (0.962, 979064) de la Figura 32.

Diseño Óptimo Obtenido		
Variable	Col 1	Col 2
Número de Platos	41	111
Plato de Alimentación	28	65
Relación de Reflujo	7.8	11.2
Flujo de Destilados, kgmol/hr	10.4	126.9
Area de Condensadores, m <sup>2</sup>	29.3	234.2
Area de Rehervidores, m <sup>2</sup>	-	52.6
Carga Térmica Cond, kW	482.7	7187.6
Carga Térmica Reherv, kW	-	7838.9
Diámetro de Columnas, m	1.0	3.2
Longitud de Columnas, m	13.9	38.8
Temp. Condensadores, K	323.1	335.3
Temp. Rehervidores, K	327.6	345.5
Presión de Operación, bar	6.1	8.2
Area de Int. de Calor, m <sup>2</sup>	59.7	-
Carga Térmica Int. De Calor, kW	526.6	-
Costo Total, US\$		1033130

Tabla 12. Diseño óptimo del punto (0.976, 1033130) de la Figura 32.

Obviamente para este ejemplo las columnas son de gran tamaño por la complejidad de la separación requiriéndose arriba de 100 platos para la segunda columna (1-buteno separado por el destilado). Los resultados presentados corresponden a las corridas manteniendo el rango de reflujo de 0 a 100 para la primera columna y de 0 a 30 para la segunda torre de destilación. La separación de estos compuestos es difícil y se obtienen buenos resultados de la síntesis con la utilización del criterio de convergencia propuesto para el algoritmo multiobjetivo. El tiempo de optimización es razonable ya que se evalúan solo 22 generaciones.

## DISEÑO ÓPTIMO DE PROCESOS DE DESTILACIÓN

La Destilación es una de las operaciones unitarias que más energía requieren durante su operación, por lo tanto el óptimo diseño de separación refleja importantes ahorros en costos de capital y operación.

Un caso especial de estos procesos es la destilación extractiva, la cual se lleva a cabo mediante la inclusión de un solvente como agente de separación. La destilación azeotrópica y extractiva son procesos antiguos que se han empleado desde el año 1930 aproximadamente. Las columnas de destilación extractiva constituyen un ejemplo de columnas para separaciones altamente no ideales. En este tipo de procesos se aprovecha el comportamiento no ideal que exhiben ciertas mezclas en presencia de solventes selectos. La aplicación de la destilación extractiva continúa creciendo pues muchas mezclas de punto de ebullición muy cercano se pueden separar de una manera relativamente económica empleando esta técnica. La separación de tales mezclas utilizando métodos de destilación convencionales normalmente es antieconómica debido al número elevado de etapas que se requerirían. Como existe la tendencia de las mezclas al comportamiento no ideal por lo general es posible encontrar un componente que al agregarlo a la mezcla incrementa la diferencia de volatilidades entre los componentes clave ligero y pesado que se van a separar.

Para el diseño óptimo del proceso de separación de una mezcla altamente no ideal de tolueno y n-heptano se utiliza fenol como solvente (Henley & Seader, 1981, Perry & Chilton, 1973). Este mismo sistema a separar es tratado por Leboreiro (2001) y Barcena, (2003). Se presenta la optimización multiobjetivo de este proceso de separación: sin recirculación de solvente.

### EJEMPLO 3. Destilación Extractiva de tolueno-nheptano-fenol.

200 lbmol/hr de n-heptano y 200 lbmol/hr de tolueno a 200 F y 20 psia serán separados utilizando una corriente de fenol como solvente (156 lbmol/hr) la cual contiene 99% de fenol y 1% de tolueno a 220 F y 20 psia. La presión de la columna permanece constante en 20 psia. Ambas columnas fueron simuladas con el bloque RADFRAC. El cálculo de las propiedades termodinámicas se realizó mediante la ecuación de estado de RKS. Para calcular la hidráulica de las columnas se utilizó el método de Fair y se consideró el uso de platos perforados, espacio entre platos de 24 pulgadas, y una fracción de inundación de 0.8

Este sistema de separación además de utilizarse como ejemplo para la obtención de diseños óptimos, se utiliza para el análisis de sensibilidad sobre los parámetros del criterio de convergencia (capítulo 3). Se utilizan dos funciones objetivo: Maximizar Pureza de nheptano en el destilado de la primera torre y Minimizar Costo Total (Operación y Capital).

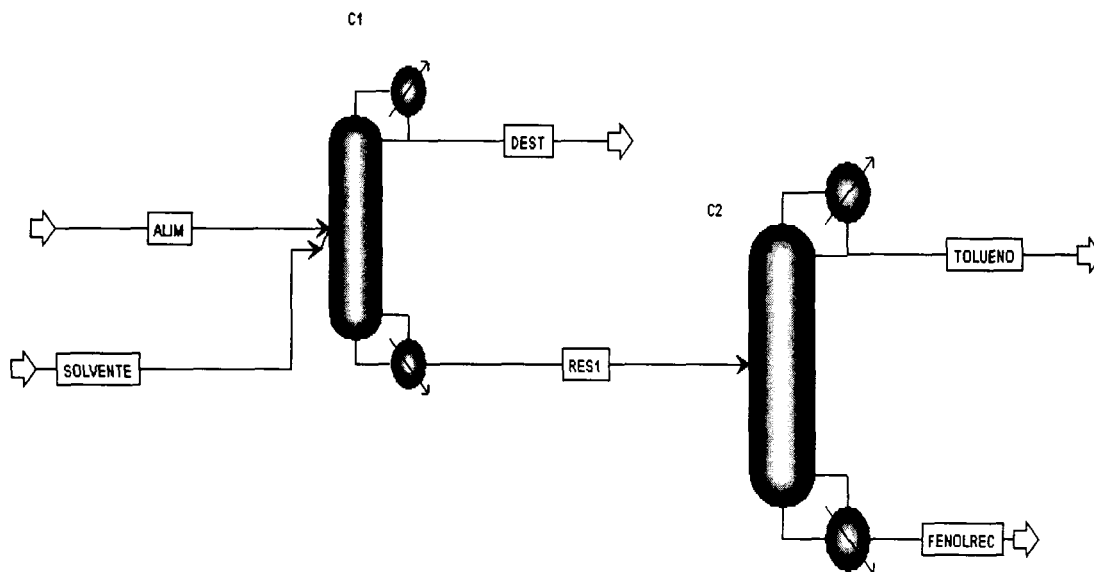


Figura 33. Proceso de extracción sin recirculación



Para el primer caso se obtienen costos del diseño óptimo de \$ 813,000 USD a \$ 890,000 USD para recuperaciones de *n*heptano que van de 97.3 a 99.7 % (ver Figura 34).

El costo del proceso prácticamente se mantiene según nos desplazamos hacia la máxima recuperación. En el rango 97-99.5 % de recuperación el diseño del proceso se obtiene sin incrementos importantes en el costo total.

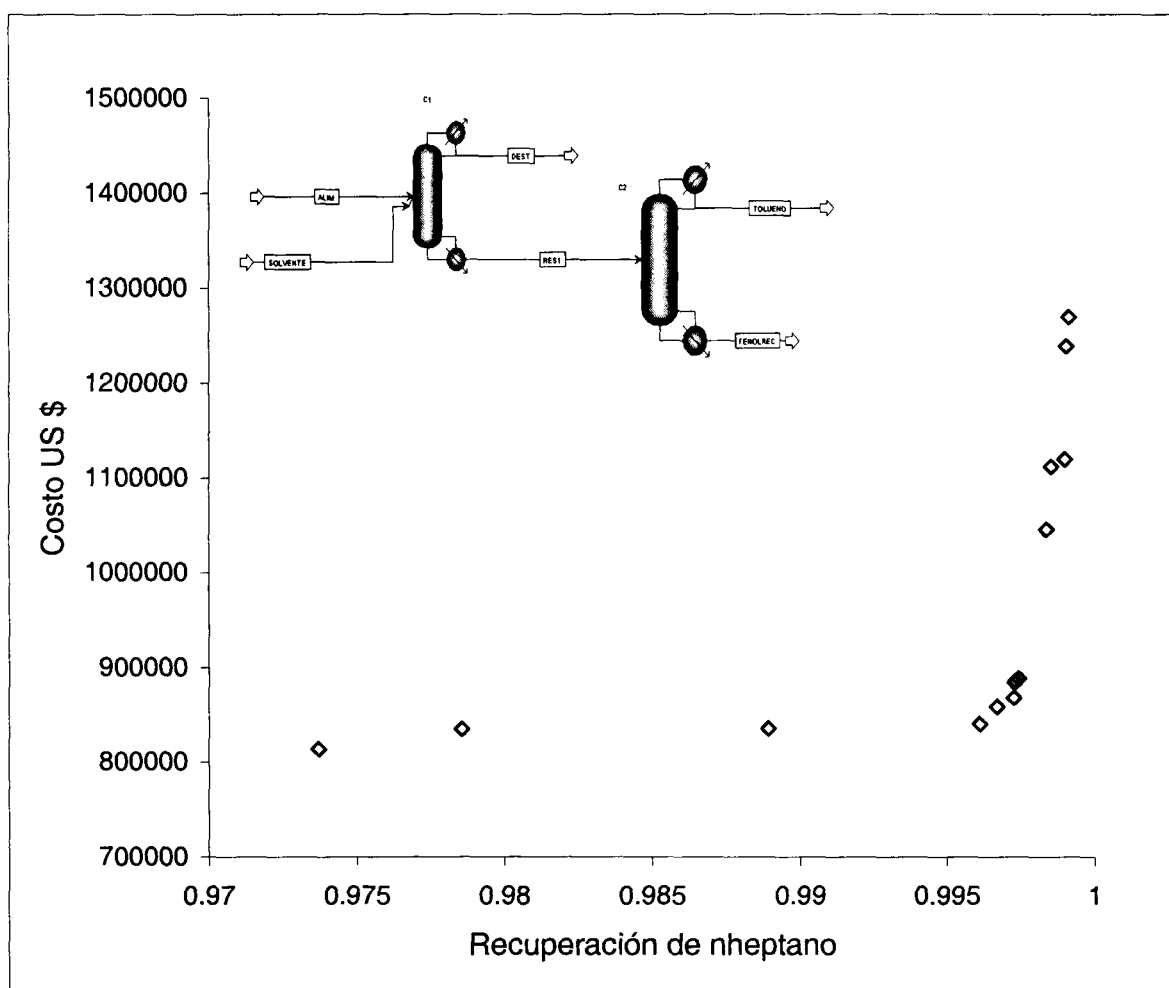


Figura 34. Diseños óptimos para el proceso sin recirculación

# 5 | Conclusiones y Trabajo Futuro

## CONCLUSIONES, RECOMENDACIONES Y TRABAJO FUTURO

Se realizó la síntesis y diseño de procesos de destilación mediante un AG Multiobjetivo utilizando el simulador de procesos APEN Plus® 12.1. La superestructura del proceso de separación es usada para diferentes casos de estudio, asignando la configuración del proceso a simular desde la interfase Visual Basic. Esta superestructura puede simular cualquier proceso de separación líquido-vapor o extracción líquido-líquido. Se resolvieron procesos de destilación multicomponente con y sin integración de energía obteniendo resultados adecuados en tiempos de optimización aceptables.

El Criterio de Convergencia propuesto mejora el rendimiento del AG Multiobjetivo. Se obtienen reducciones arriba del 60% en tiempo de cómputo en problemas numéricos simples y de procesos. A través del análisis de los parámetros del Criterio de Convergencia se recomiendan diferentes configuraciones de los parámetros del criterio para resultados rígidos y relajados.

El método propuesto puede ser utilizado para optimización de procesos con datos reales, ya que se ha comprobado su funcionamiento por medio de problemas de síntesis de procesos obteniendo buenos resultados.

En la actualidad uno de los principales retos es realizar optimizaciones de procesos tomando en consideración funciones no-convexas y discontinuas. El AG utilizado en este trabajo no tiene problemas con este aspecto ni con variables discretas por lo que se considera una herramienta poderosa una vez que se le ha acoplado el criterio de convergencia.

## TRABAJO FUTURO

### DE LA INTERFASE DE OPTIMIZACIÓN Y CRITERIO DE CONVERGENCIA

- Automatización completa de la interfase. Desde Visual Basic se puede crear la superestructura del proceso, además se puede controlar la conectividad de las corrientes hacia (o desde) las unidades de separación. La completa automatización de la interfase es un área de oportunidad interesante.
- Control del número de no dominados en el pareto óptimo. Uno de los objetivos principales de la optimización multiobjetivo es mantener diversidad en el conjunto de soluciones óptimas. Sin embargo en ocasiones no es tan conveniente obtener todos los individuos de la población como no dominados sino solo algunas de ellas representativas de toda la zona de la curva óptima (sobre todo cuando el número de individuos de la población es elevado), Esto se puede lograr controlando el elitismo del algoritmo original, NSGA-II.
- El criterio está formulado para problemas de optimización con 2 funciones objetivo. Sin embargo con el NSGA-II se puede optimizar para  $n$  funciones independientes. Esto representa una limitación y un área de oportunidad para trabajo futuro. Una propuesta inicial para lograr esto, es eliminar  $\omega$  del criterio de convergencia y operar con  $\lambda$  y  $\psi$  rígidos ( $\lambda \geq 90\%$  y  $\psi \leq 1\%$ ) permitiendo que el NSGA-II mantenga la diversidad de la población y el parámetro  $\psi$  se encargue de identificar la convergencia en base a la comparación de aptitudes (obviamente haciendo los cambios pertinentes en la definición de  $\psi$ ).
- Realizar la aplicación de mutación dinámica en el criterio de convergencia. La población al evolucionar tiende a cierta convergencia a través del tiempo. Con la

finalidad de llegar más rápido a la población convergente se aplica una mutación menor conforme la población tiende hacia la convergencia. Se recomienda aplicar este procedimiento (basado en Lebreiro, 2001) al algoritmo multiobjetivo utilizado en el presente trabajo.

## DE APLICACIÓN A PROCESOS

- Ahora que se ha demostrado que el método de optimización multiobjetivo funciona adecuadamente con problemas de literatura, es inevitable el pensar trasladarlo a optimizaciones con datos reales de proceso. Esto no es una tarea fácil más sin embargo algo necesario pues se cuenta con las herramientas y el modelo establecido. Aunado a esto la simulación y/o optimización del proceso puede realizar implementando la “nueva” opción del ASPEN Plus® en la cual el proceso no se evalúa de forma secuencial (Sequential Modular Strategy, SM), si no como un conjunto de ecuaciones evaluadas simultáneamente (Equation Oriented Strategy, EO).
- En días actuales, las normas ambientales son cada vez más rígidas, por lo tanto es inevitable el analizar procesos desde el punto de vista ambiental para la optimización multicriterio. La simulación y optimización de procesos para minimizar las emisiones (gases, residuos sólidos o líquidos) deben tomarse en consideración dependiendo de las necesidades del proceso estudiado. Para esto se deben construir escenarios posibles para realizar la optimización y crear las subrutinas necesarias para cuantificar y minimizar los efluentes de una planta de proceso. Por ejemplo, optimizar las condiciones de operación de un quemador de fuego directo (*Lean or Reach*) tal que se minimicen las emisiones de partículas, NOx, SOx etc. (dependiendo del combustible) según sean las necesidades propias del proceso a optimizar.
- Se recomienda realizar síntesis de procesos considerando más de dos funciones objetivo, tomando en cuenta que el Criterio de Convergencia actualmente esta diseñado para trabajar solo con dos criterios de optimización.
- Realizar la síntesis y optimización de una planta completa de proceso mediante optimización multiobjetivo.

- En la actualidad diferentes estudios se han reportado en optimización multiobjetivo tomando consideraciones de controlabilidad de procesos. Por lo tanto se propone realizar el Diseño Integrado de procesos, por medio de la cual se obtengan los parámetros físicos de la planta que minimicen el coste de operación y capital, al mismo tiempo que cumplen con las características de controlabilidad que se imponen al proceso.
- Otra área que actualmente se desarrolla de manera importante para el diseño y operación de procesos químicos es la optimización con incertidumbre la cual se puede realizar considerando más de un objetivo de optimización.

## BIBLIOGRAFÍA Y REFERENCIAS

**Armor, J. N., (1999)** *The multiple roles for catalysis in the production of H<sub>2</sub>*. Applied Catalysis A: General, 176, 159-176.

**Barcena, R. M. C., (2003)** *Optimización multiobjetivo de procesos usando algoritmos genéticos*; TESIS de maestría ITESM.

**Beveridge, G. S. G. and Schechter, R., (1970)** *Optimization: Theory and Practice*. McGraw Hill, New York.

**Bhaskar, V., Gupta, S. K., Ray, A. K., (2000)** *Applications of Multiobjective Optimization in Chemical Engineering*, Rev. Chem. Eng., 16, 1.

**Bhaskar, V., Gupta, S. K., Ray, A. K., (2001)** *Multiobjective optimization o fan industrial wiped film (polyethylene terephthalate) reactor: some further insights*, Comp. and Chem. Eng. 25, 391-407.

**Biegler, L. T., Grossmann, I. E., Westerberg, A. W., (1997)**, *Systematic Methods of Chemical Process Design*. Prentice-Hall, New Jersey.

**Bonfill, A., Bagajewicz, M., España, A., and Puigjaner, L., (2004)**, *Risk Management in the Scheduling of Batch Plants under Uncertain Market Demand*. Ind. Eng. Chem. Res., 43 (3), 741 - 750.

**Cao, Y. and Yang, Z., (2004)**, *Multiobjective process controllability analysis*. Comp. And Chem. Eng. 28, 83-90

**Chakraborty, A. and Linninger, A. A., (2002)** *Plant - Wide Waste Management 1. Synthesis and Multiobjective Design*. Ind. Eng. Chem. Res., 41 (18), 4591 - 4604.

**Chen, C. L. and Lee, W. C., (2004)** *Multi-objective optimization of multi-echelon supply chain networks with uncertain product demands and prices*. Evolutionary Computation, 8, page 173-196.

**Chitnis, U. K., Corripio, A. B., (1998)** *On-line optimization of a model IV Fluid Catalytic Cracking Unit*. ISA Trans. 37, 215.

**Cussler, E. L., Moggridge, G. D., (2004)** *Chemical Product Design*. Sixth International Conference on Foundations of Computer - Aided Process Design, Princeton University.

**Dantus, M. M., High K. A., (1999)** *Evaluation of waste minimization alternatives under uncertainty: a multiobjective optimization approach*, Comp. and Chem. Eng. 23 1999, 1493-1508.

**Davis, T. A., Griffin, D. E., Webb, P. U., (1974)** *Cat Cracker Optimization and Control*, Chem. Eng. Progress. 70, 53.

**Deb, K., (2001)** *Multi-Objective Optimization using Evolutionary Algorithms*. Ed. Wiley.

**Deb, K., Agrawal, S., Pratap, A., and Meyarivan, T., (2001)** *A Fast Elitist Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm for Multi-Objective Optimization: NSGA-II*, KanGAL Report No. 200001

**Delgado, A., (1998)** *Inteligencia Artificial y Minirobots*. Ecoe-Universidad Nacional de Colombia, Bogotá.

**Diwekar, U. M., Grossman, I. E., and Rubin, E.S., (1992)** *A MINLP Process Synthesizer for a Sequential Modular Simulator*. Ind. Eng. Chem., 31, 313-322.

**Dunnebie G., Pantelides, C. C., (1999)** *Optimal Design of Thermally Coupled Distillation Columns*. Ind. Eng. Chem. Res., 38, 162-176.

**Elnashaie, S. S. E. H., Adris, A. M., Soliman, M. A., and Al-Ubaid, A. S., (1992)** *Digital simulation of industrial steam reformers for natural gas using heterogeneous models*. Canadian Journal of Chemical Engineering, 70, 786-793.

**Elnashaie, S. S. E. H. and Elshishini, S. S., (1994)** *Modeling, Simulation and optimization of industrial fixed bed catalytic reactors* . London: Gordon and Breach Science Publisher.

**Floudas, C. A., (1995)** *Nonlinear and mixer integer optimization: Fundamentals and Applications*, Press, New York.

**Fonseca, C. M. and Fleming, P.J., (1993)** *Genetic Algorithms for multiobjective optimization: Formulation, discussion and generalization*. In Forrest, S., editor, Proceedings of the Fifth International Conference on Genetic Algorithms, pages 416-423, Morgan Kaufman, San Mateo, California.

**García, M. S., (1997)** *Implementación de un Algoritmo Genético en un Simulador Secuencial*. TESIS de maestría ITESM.

**Goldberg, D. E., (1989)** *Genetic Algorithms in search Optimization and Machine Learning*, Ed. Addison-Wesley.



**Grossmann I. E., (1996)** *Global Optimization in Engineering Design*, Kluwer Academic Pub.

**Gruber, P. R., (2004)** *The coming change in the chemical industry*. Sixth International Conference on Foundations of Computer-Aided Process Design, Princeton University.

**Henley, E. J., Seader, J. D., (1981)** *Equilibrium-Stage Separations Operations in Chemical Engineering*. Ed. John Wiley & Sons.

**Henley, E. J., Seader, J. D., (1990)** *Operaciones de Separación por etapas de equilibrio en Ingeniería Química*. Ed. Reverté, S. A.

**Himmelblau, E., (1988)** *Optimization of Chemical Processes*. McGraw - Hill.

**Holland, C. D., (1988)** *Fundamentals of Multicomponent Distillation*. McGraw - Hill.

**Horn, J., Nafploitis N., and Goldberg D. E., (1994)** *A niched Pareto genetic algorithm for multiobjective optimization*. In Michalewicz, Z., editor, Proceedings of the First IEEE Conference on Evolutionary Computation, page 82-87, IEEE Service Center, Piscataway, New Jersey.

**Kasat, R. B. , Kunzru, D., Saraf, D. N., and Gupta, S. K., (2002)** *Multiobjective Optimization of Industrial FCC Units Using Elitist Nondominated Sorting Genetic Algorithm*, Ind. Eng. Chem. Res., 41, 4765-4776.

**Khandalekar, P. D., Riggs, J. B., (1995)** *Nonlinear Process Model Based Control and Optimization of a model IV FCC Unit*. Comp. Chem. Eng. 19, 1153.

**Knowles, J. and Corne, D., (1999)** *The pareto achieved evolutionary strategy: A new baseline algorithm for multiobjective optimisation*. Proceedings of the 1999 Congress on Evolutionary Computation, Piscatway: New Jersey: IEEE Service Center, 98-105.

**Leboreiro, H. J., (2001)** *Eficiencia de un algoritmo genético para la optimización de secuencias de destilación utilizando un simulador*. TESIS de maestría ITESM.

**Leboreiro, J. and Acevedo, J., (2004)** *Process synthesis and design of distillation sequences using modular simulators: a genetic algorithm framework*, Comp. and Chem. Eng. 28, 1223-1236.

**Lim, Y. I., Floquet, P. I, and Joulia, X., (1999)** *Multiobjective Optimization in Terms of Economics and Potential Environmental Impacts for Process Design and Analysis in a Chemical Process Simulator*, Ind. Eng. Chem. Res., 38, 4729-4741.

**Lis and Eiben., (1996)** *A Multisexual Genetic Algorithms for Multiobjective Optimization*, Nagoya, Japan.

**Luyben, M. L., and Floudas, C. A., (2001)**, *Analyzing the interaction of design and control—1. A multiobjective framework and application to binary distillation synthesis*. Comp. And Chem. Eng. 28, 83-91

**Mahmoud, M. E., (1997)** *Pollution Prevention through Process Integration*, Academic Press.

**Martínez, S. V. H., Rocha, U. J. A., López, T. J., Galván, L. B. E., (2004)**, *Procesos de Separación en Ingeniería Química*. Ed. ACD

**McFarlane, R. C., Bacon D. W., (1989)** *Adaptive Optimization Control of Multivariable Constrained Chemical Process, 1. Theoretical Development*. Ind. Eng. Chem. Res., 28, 1828.

**Moncada, A. E., (2000)** *Incorporación de aspectos ambientales y de operabilidad en la optimización de procesos vía programación paramétrica; TESIS de maestría ITESM.*

**Moncada, A. E. and Acevedo J., (2001)** *A Methodology for the Minimization of Environmental Impact of Chemical Processes under Presence of Uncertainty, 6<sup>th</sup> World Congress of Chemical Engineering, Melbourne 2001.*

**Moreno, M. C. H., (2000)** *Aplicación de un algoritmo genético a la optimización de sistemas de destilación en simuladores modulares; TESIS de maestría ITESM.*

**Oh, P.P., Rangaiah, G. P. and Ray, A. K., (2002)** *Simulation and Multiobjective Optimization of an Industrial Hydrogen Plant Based on Refinery Off- Gas*, Ind. Eng. Chem. Res., 41. 2248-2261

**Perry, R. H., Chilton, C. H., (1973)** *Chemical Engineers Handbook 5th Ed.* McGraw-Hill.

**Poling, B. E., Prausnitz, J. M., O'Connell, J. P., (2000)** *The Properties of Gases and Liquids, 5th Edition.* McGraw Hill.

**Rajesh, J. K., Gupta, S .K, Rangaiah, G. P., Ray, A. K., (2001)** *Multi-Objective Optimization of Industrial hydrogen plants.* Chemical Engineering Science, 56, 999-1010.

**Rajesh, J. K., Gupta, S. K., Rangaiah, G.P. and Ray, A. K., (2000)** *Multiobjective Optimization of steam Reformer Performance Using Genetic Algorithm*, Ind. Eng. Chem. Res., 39. 706-717

**Ramasubramanian S., Luus R., Woo S. S., (2000)** *Optimization of a Fluidized Catalytic Cracking Unit*. 50th Canadian Chemical Engineering Conference, Montreal, Canada, 2000.

**Ravi, G., Gupta, S. K., and Ray, M. B., (2000)** *Multiobjective Optimization of Cyclone Separators Using Genetic Algorithm*, Ind. Eng. Chem. Res., 39, 4272-4286.

**Reklaitis, G. V., Ravindran A., and Ragsdell, K. M., (1983)** *Engineering Optimization*. Wiley New York.

**Reyes, S. M., (2002)** *Estudio de Algunos Aspectos Teóricos de los Algoritmos Genéticos TESIS de maestría CINVESTAV-IPN*.

**Rhemann, H., Schwarz, G., Badgwell, T. A., Darby, M. L., White D. C., (1989)** *On-line FCCU Advanced Control and Optimization*, Hydrocarbon Processing, June, 64.

**Rodera, H., Bagajewicz, M. J. and Trafalis, T. B., (2002)** *Mixed-Integer Multi-Objective Process Planning under Uncertainty*, Ind. Eng. Chem. Res., 41. 4075-4084

**Rudolph, G., (1999)** *Evolutionary search under partially ordered sets*. Technical report No. CI-67/99, Dortmund: Department of Computers Science/LS11, University of Dortmund, Germany.

**Seider, W. D., Seader, J. D. and Lewin, D. R., (1999)** *Process Design Principles, Synthesis Analysis, and Evaluation*. Ed. John Wiley & Sons.

**Sheel, J. G. P., and Crowe, C. M., (1969)** *Simulation and Optimization of existing ethyl benzene dehydrogenation reactor*. Canadian Journal of Chemical Engineering, 47, 183-187.

**Shepherd, C. B., Lapple, C. E., (1940)** *Flow pattern and pressure drop in cyclone dust collectors, cyclone without inlet vane.* Ind. Eng. Chem., 32, 1246.

**Singh C. P. P., and Saraf D. N., (1979)** *Simulation of side fire steam-hydrocarbon reformers.* Industrial Engineering Chemistry, Process, Design and Development, 18, 1-7.

**Song, J., Park, H., Lee, D. and Park, S., (2002)** *Scheduling of actual size Refinery Processes Considering Environmental Impacts with Multiobjective Optimization.* Ind. Eng. Chem. Res., 41, 4794-4806.

**Srinivas, N. and Deb, K., (1995)** *Multi-Objective function optimization using non-dominated sorting genetic algorithms,* Evolutionary Computation, 2(3):221-248.

**Summanwar, V.S., Jayaraman, V. K., Kulkarni, B.D., Kusumakar, H.S., Gupta, K., Rajesh, J., (2002)** *Solution of constrained optimization problems by multi-objective genetic algorithm,* Comp. and Chem. Eng. 26, 1481-1492

**Turton, R., Bailie, R. C., Whiting, W. B., Shaeiwitz, J. A., (2003)** *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes, Second Edition.* Prentice Hall, New Jersey.

**Vatabuk, W. M., (1990)** *Estimating Costs of Air Pollution Control,* Lewis, Chelsey, MI.

**Webb, P. U., Lutter, B. E., Hair, R. L., (1978)** *Dynamic Optimization of Fluid Cat Crackers,* Chem. Eng. Prog., 74, 72.

**Xu, J., and Froment, G. F., (1989)** *Methane steam reforming, methanation and water-gas shift: I. Intrinsic kinetics.* American Institute of Chemical Engineers Journal, 35, 88-96.

**Xu, J., and Froment, G. F., (1989)** Methane steam reforming: II. Diffusional limitations and reactor simulation. American Institute of Chemical Engineers Journal, 35, 97-103.

**Yee, A. K. Y., Ray, A. K., Rangaiah, G. P., (2003)** *Multiobjective optimization of an Industrial styrene reactor*, Comp. and Chem. Eng. 27, 111-130

**Zhao, W., Chen, D., Hu, S., (2000)** *Optimizing Operating Conditions Based on ANN and modified Gas*. Comp. Chem. Eng., 24, 61.

**Zitzler, E. and Thiele, L., (1998)** *Multiobjective optimization using Evolutionary algorithms -A comparative case study*. In Eiben, A. E., Back, T., Schoenauer, M., and Schwefel, H.-P., editors, *Parallel Problem Solving from Nature, V*, pages 292-301, Springer, Berlin, Germany.

**Zitzler, E., Deb K., and Thiele, L., (2000)** *Comparison of Multiobjective Evolutionary algorithms: Empirical results*. Evolutionary Computation, 8, page 173-195

## ANEXOS

## ANEXO A. INTERFASE DE OPTIMIZACIÓN.

Después de que se ha evaluado el primer individuo en el ASPEN Plus®, la función *\_spawn* se ejecuta en la subrutina *sub-con.h* del AG, desde aquí se leen los archivos de entrada del AG (resultados de simulación). El Algoritmo de optimización evalúa a los individuos y les asigna una aptitud. Este proceso se repite hasta completar el total de individuos de la población.

```
_spawn(_P_WAIT,prog,prog,NULL);
fopen("c:\inter\s_rec\Resultado.out","r");// Archivos de entrada al AG
fopen("c:\inter\s_rec\Resultado2.out","r");// Archivos de entrada al AG
```

El simulador de procesos evalúa cada individuo (conjunto de variables de optimización) y obtiene resultados (Duty, Área de intercambio de calor, altura de columna, etc.) y los regresa a la interfase de Visual Basic donde se evalúa el Costo Total del proceso (operación y capital)

Ejemplo de la Interfase en Visual Basic.

```
Dim sim As HappIP
Dim CollInput, As IHNode
Sub Main()
    Call Datos_de_entrada
        Open "c:\inter\s_rec\Datos.inp" For Input As #1
    Call Abrir_Aspen
        Set sim = GetObject("c:\inter\s_rec\multi.bkp")
    Call Correr_Aspen
        Call sim.Engine.Run2(False)
    Call Datos_de_salida
        Open "c:\inter\s_rec\Resultado.out" For Output As #1
```

```
    Open "c:\inter\s_rec\Resultado2.out" For Output As #2
  'Cerrar Aspen
  '      sim.Visible = False
  '      Set sim = Nothing
      End
End Sub
```

Por medio de los controles Active X es posible manipular el simulador ASPEN Plus®. El objeto cliente es el HappIP con el cual se puede abrir, cerrar, o guardar archivos del simulador Aspen Plus®. Los datos de entrada y salida en una simulación están organizados en una estructura de árbol dentro del objeto IHNode. Para acceder a las variables es por medio del *Variable Explorer* del simulador.



## ANEXO B. FUNCIONAMIENTO DEL NSGA-II.

A continuación se describe el funcionamiento del NSGA-II descrito en 11 etapas y un algoritmo.

1. Obtención de los datos de entrada. Por medio de la subrutina *input* el usuario provee al programa de los parámetros para realizar la corrida, ya sea de forma manual o por medio de un archivo de entrada:

- Número de variables reales y binarias.
- Número de funciones objetivo y el número de restricciones.
- Tamaño de la población y número de generaciones.
- Probabilidad de cruce.
- Un número entre 0 y 1 que servirá como semilla del generador de números aleatorios.

Para variables reales:

- Probabilidad de mutación.
- Índice de distribución para cruce e índice de distribución para mutación.
- Límites superiores e inferiores de las variables.

Para variables binarias:

- Tipo de cruce (1 para simple, 2 para uniforme)
- Número de bits asignados a cada variable.
- Límites de las variables.
- Probabilidad de mutación.

2. Inicializar las variables. Después de que fueron especificados los parámetros de entrada, el siguiente paso es inicializar variables de los individuos que formarán la primera población (*oldpop*). Para las variables codificadas como reales se genera un número entre los límites de la variable en forma aleatoria (*realinit.h*) En el caso de las variables codificadas como binarias, de manera aleatoria se van llenando con ceros y unos los  $n$  espacios (donde

n es igual al número de bits asignados a cada variable, *init.h*); posteriormente estas variables serán decodificadas (*decode.h*).

3. Evaluación de la función objetivo (1). Una vez formada la primera población de individuos (*oldpop*), el paso siguiente es evaluar las funciones objetivo (*func.h*) y las restricciones para obtener la aptitud (*fitness*) de cada uno de los individuos y el error. El siguiente paso es determinar a los individuos *no-dominados* para clasificarlos en rangos. El procedimiento consiste en comparar uno a uno los individuos de la población donde los criterios para determinar quien es el dominado y quien es el dominante son: el error y la aptitud. Es decir que los individuos con menor error y menor aptitud (para el caso de un problema de minimización) serán individuos no-dominados. Este proceso continúa hasta que todos los individuos son clasificados en cierto rango.

4. Selección. Los 3 puntos anteriores fueron para crear la población inicial. A partir de esta se generan las poblaciones que evolucionarán durante un número n de generaciones. La siguiente población que surge es la llamada *matepop*, la cual es el resultado de someter a la población anterior (*oldpop*) a un proceso de selección (*nselect.h*) donde los individuos mejor adaptados serán los que formen parte de ella. El proceso es como sigue: dos individuos seleccionados de manera aleatoria son comparados, el primer criterio de comparación es el rango, Resultará vencedor aquél que esté clasificado en el rango menor. El segundo criterio de comparación es la distancia de amontonamiento (*crowdingfactor*), el ganador será aquel que posea el factor más alto.

5. Cruce. Seleccionando parejas de individuos de la población recién formada (*matepop*) se realiza el intercambio genético entre ellos para obtener a otra población llamada (*newpop*) Para el caso de las variables codificadas como reales el proceso es el siguiente: seleccionados ya los dos individuos, los hijos se calculan a partir de un promedio entre los valores de los padres (*xreal[i]*), los límites de las variables y el índice de distribución para cruce (*di*). En caso de las variables codificadas como binarias existen 2 opciones: el cruce de un punto y el cruce uniforme. Para el primer caso se determina un punto de cruce,

antes de ese punto los genes del hijo 1 (gen [i]) serán los mismos que los del padre 1, lo mismo sucede con el hijo 2, a partir del punto de cruce, el contenido genético del padre 1 se copiará al hijo 2 y el del padre 2 se copiará al hijo 1. En el caso del cruce uniforme, a partir de un número aleatorio se determina a que individuo hijo se heredará el contenido genético, es decir si el número aleatorio es menor o igual a la probabilidad de cruce, entonces el gen [j] del padre 2 será copiado al hijo 1 y el gen [j] del padre 1 será copiado al hijo 2, en caso contrario el contenido genético del padre 1 será copiado al hijo 1 y el del padre 2 al del hijo 2.

6. Mutación. Operador que se aplica a cada individuo de la nueva población (*newpop*). Para las variables codificadas como reales, es un procedimiento parecido al del cruce solo que esta vez el parámetro que se considera en el cálculo es el índice de distribución para mutación (*dim*). En el caso de las variables codificadas como binarias consiste en cambiar el contenido si es cero por un uno y viceversa.

7. Evaluación de la función objetivo (2). Para la población recién formada se evalúa la función objetivo 2, el procedimiento es el mismo que el del punto 3.

8. Formación de la población global (*globalpop*), cálculo de la distancia de amontonamiento (*crowding distance*) y elitismo. La población global es el resultado de la unión de *oldpop* y de *newpop*, por lo que ahora el tamaño de la población es dos veces el tamaño de la población inicial. El paso siguiente es la clasificación de la población recién formada en rangos tal como se explica en el paso 3 (después de la evaluación de la función objetivo) Al finalizar la clasificación se tiene el número total de rangos, cuantos y cuales individuos quedaron en cada uno de ellos. Lo siguiente es calcular la distancia de amontonamiento (*crowding distance*) para cada uno de los rangos en los que fue clasificada la población, esta operación se hace por rangos. El primer paso es ordenar de mayor a menor aptitud los individuos presentes en el rango, una vez ordenados se identifica al individuo con mayor aptitud (*max*). El cálculo de la distancia (*cub\_len*) es como sigue, para los individuos que están en los extremos del rango (es decir el que tiene menor y el que tiene mayor aptitud) es igual al producto de un factor (100.0) por la máxima aptitud localizada en

ese rango (max); para el resto de los individuos el cálculo es igual al valor absoluto de la diferencia entre la aptitud del individuo  $[i+1]$  y el individuo  $[i-1]$ . Para determinar cuales individuos serán los escogidos para formar parte de la siguiente generación se aplica el elitismo. Este operador consiste en seleccionar a los mejores individuos de la población global, por lo que para seleccionarlos el proceso se realiza por rangos, generalmente los mejores son los ubicados en los primeros rangos de la clasificación. La selección continúa mientras el número de clasificados sea menor o igual al número de la población.

9. La nueva población. Una vez aplicado el elitismo ya se tienen identificados los individuos que formarán parte de la nueva población que será copiada a la estructura *matepop*.

10. Cálculo del Rank ratio. Después de creada la nueva población se determina una relación de rangos entre la población inicial (*oldpop*) y el número del rango de donde fue copiado el último individuo seleccionado por el elitismo. Es decir, se calcula el número total de individuos que hay en cada uno de los "n" rangos de ambas poblaciones (*tot*) y después se divide el número de individuos de cada rango de la población recién formada entre el total.

11. Repetir ciclo "n" generaciones. Por último, los individuos de la estructura *matepop* son copiados a la estructura *oldpop* que es la que ahora repetirá nuevamente el ciclo. Regresar al punto 4 "n" generaciones.

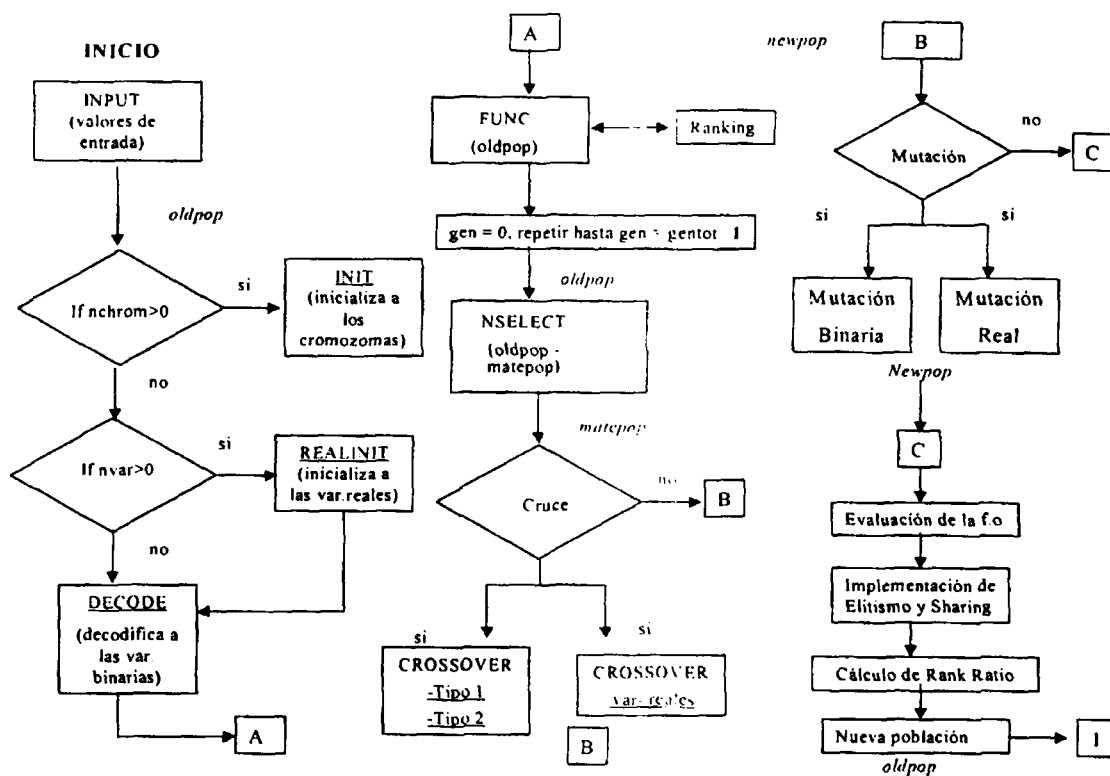


Figura B.1. Algoritmo del NSGA-II

## ANEXO C. RESULTADOS DE ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

## PROBLEMAS NUMÉRICOS

*Problema 1*

Ref. Deb K. (2001).

Minimizar:  $f_1(x_1, x_2) = 6126 x_1^2 x_2$ Minimizar:  $f_2(x_1, x_2) = 0.033 \frac{x_2^3}{x_1^4}$ 

Sujeto a:

$$10.186 \frac{x_2}{x_1^3} \leq 300$$

$$0.033 \frac{x_2^3}{x_1^4} \leq 5$$

$$10 \leq x_1 \leq 50$$

$$200 \leq x_2 \leq 1000$$

*Problema 3*

Ref. Deb K. (2001).

Minimizar:  $f_1(x) = - \left[ \frac{25(x_1 - 2)^2 + (x_2 - 2)^2 + (x_3 - 1)^2}{(x_4 - 4)^2 + (x_5 - 1)^2} \right]$ 

Minimizar:

$$f_2(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 +$$

$$x_4^2 + x_5^2 + x_6^2$$

Sujeto a:

$$C_1(x) = x_1 + x_2 - 2 \geq 0$$

$$C_2(x) = 6 - x_1 - x_2 \geq 0$$

$$C_3(x) = 2 - x_2 + x_1 \geq 0$$

$$C_4(x) = 2 - x_1 + 3x_2 \geq 0$$

$$C_5(x) = 4 - (x_3 - 3)^2 - x_4 \geq 0$$

$$C_6(x) = (x_5 - 3)^2 + x_6 - 4 \geq 0$$

$$0 \leq x_1, x_2, x_6 \leq 10$$

$$1 \leq x_3, x_5 \leq 5$$

$$0 \leq x_4 \leq 6$$

*Problema 2.*

Ref. Deb K. (2001).

Minimizar:

$$f_1(x) = x_1$$

$$f_2(x) = \frac{1 + x_2}{x_1}$$

Sujeto a:

$$g_1(x) = x_2 + 9x_1 \geq 6$$

$$g_2(x) = -x_2 + 9x_1 \leq 1$$

$$0.1 \leq x_1 \leq 1$$

$$0 \leq x_2 \leq 5$$

*Problema 4*

Ref. Deb K. et al (2001).

Minimizar:  $f_1(x) = x^2$ Minimizar:  $f_2(x) = (x - 2)^2$ 

-Sin restricciones.

$$x \in [0, 2]$$

Tabla C.3-C.5. Resumen del Análisis de sensibilidad. Problema 1

a) Tabla C.3  $\lambda = 0.4$

Corrida del NSGA-II problema 1  
 Corrida: Agosto 28 2k4  
 Revisión: Septiembre 1st 2k4  
 Notas importantes: LAMDA = 0.4 (FIJO)

No. De Generaciones Default= 300

CASO 1 : Rápido					CASO 2 : Lento					CASO 3 : + -		
FACTORES DE PESO					FACTORES DE PESO					FACTORES DE PESO		
err-indiv_eval	0.5	VARIABLE	err-indiv_eva	0.2	err-indiv_eval	0.30	err-indiv_eval	0.30	err-indiv_eval	0.30	err-indiv_eval	0.30
err-extremos	0.1	VARIABLE	err-extremos	0.4	err-extremos	0.40	err-extremos	0.40	err-extremos	0.40	err-extremos	0.40
err-gener	0.4	FIX	err-gener	0.4	err-gener	0.40	err-gener	0.40	err-gener	0.40	err-gener	0.40
err-ndom	0.5	FIX	err-ndom	0.5	err-ndom	0.50	err-ndom	0.50	err-ndom	0.50	err-ndom	0.50
err-disper	0.4	VARIABLE	err-disper	0.4	err-disper	0.40	err-disper	0.40	err-disper	0.40	err-disper	0.40

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon_2$	$\lambda$	$\psi$
variable	0.3	0.1	0.4	0.01

Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	err-indiv_eval	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	CASO 1	CASO 2	CASO 3
	[0.2-0.7]									SUMA ERR	SUMA ERR	SUMA ERR
0.2	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401	
0.3	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401	
0.4	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401	
0.5	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401	
0.6	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401	
0.7	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401	

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon_2$	$\lambda$	$\psi$
0.4	variable	0.1	0.4	0.01

Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR	
	[0.1-0.6]										
0.1	50	62	50	0.062	0.0033	0.062	0	0.0541	0.1150	0.0974	0.1032
0.2	50	141	50	0.141	0.0023	Out of Range	0	0.0468	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!
0.3	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
0.4	50	30	50	0.03	0.0121	0.03	0	0.0523	0.0671	0.0618	0.0638
0.5	50	17	50	0.017	0.2483	0.017	0	0.0428	0.0675	0.1368	0.1137
0.6	50	17	50	0.017	0.2483	0.017	0	0.0428	0.0675	0.1368	0.1137
0.7	50	37	50	0.037	0.0015	0.37	0	0.0441	0.4063	0.3957	0.3992

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon_2$	$\lambda$	$\psi$
0.4	0.3	variable	0.4	0.01

Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR	
	[0.05 - 0.2]										
0.05	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
0.1	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
0.2	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
0.3	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon_2$	$\lambda$	$\psi$
0.4	0.3	0.1	0.4	variable

Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR	
	[0.005 - 0.1]										
0.005	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
0.01	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
0.03	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
0.05	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
0.07	50	13	50	0.013	0.3390	0.013	0	0.0481	0.0719	0.1687	0.1371
0.1	50	13	50	0.013	0.3390	0.013	0	0.0481	0.0719	0.1687	0.1371





c) Tabla C.5  $\lambda = 0.6$

Corrida del NSGA-II problema 1  
 Corrida: Agosto 26 2k4  
 Revisión: Septiembre 1st 2k4  
 Notas importantes: LAMDA = 0.6 (FIJO)

No. De Generaciones Default= 300

CASO 1 : Rápido				CASO 2 : Lento				CASO 3 : + -			
FACTORES DE PESO				FACTORES DE PESO				FACTORES DE PESO			
err-indiv_eval	0.5	VARIABLE		err-indiv_eva	0.2			err-indiv_eval	0.30		
err-extremos	0.1	VARIABLE		err-extremos	0.4			err-extremos	0.30		
err-gener	0.4	FIX		err-gener	0.4			err-gener	0.40		
err-ndom	0.5	FIX		err-ndom	0.5			err-ndom	0.50		
err-disper	0.4	VARIABLE		err-disper	0.4			err-disper	0.40		

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$						CASO 1	CASO 2	CASO 3
variable	0.3	0.1	0.6	0.01						SUMA ERR	SUMA ERR	SUMA ERR
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	err-indiv_eval	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper			
	[0.2-0.7]											
	0.2	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.3	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.4	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.5	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.6	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.7	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$								
0.4	variable	0.1	0.6	0.01								
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR		
	[0.1-0.6]											
	0.1	50	62	50	0.062	0.0033	0.062	0	0.0541	0.1150	0.0974	0.1032
	0.2	50	141	50	0.141	0.0023	Out of Range	0	0.0468	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!
	0.3	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.4	50	30	50	0.03	0.0121	0.03	0	0.0523	0.0671	0.0618	0.0636
	0.5	50	25	50	0.025	0.0062	0.025	0	0.0443	0.0558	0.0502	0.0521
	0.6	50	15	50	0.015	0.3012	0.015	0	0.0428	0.0696	0.1555	0.1288
	0.7	50	55	50	0.055	0.0063	0.55	0	0.0468	0.5968	0.5821	0.5870
$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$								
0.4	0.3	variable	0.6	0.01								
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR		
	[0.05 - 0.2]											
	0.05	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.1	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.2	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.3	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$								
0.4	0.3	0.1	0.6	variable								
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR		
	[0.005 - 0.1]											
	0.005	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.01	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.03	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.05	50	14	50	0.014	0.3390	0.014	0	0.0505	0.0751	0.1728	0.1401
	0.07	50	13	50	0.013	0.3390	0.013	0	0.0461	0.0719	0.1697	0.1371
	0.1	50	13	50	0.013	0.3390	0.013	0	0.0461	0.0719	0.1697	0.1371

Tabla C.6-C.8. Resumen del Análisis de sensibilidad. Problema 2.

a) Tabla C. 6  $\lambda=0.4$

Corrida del NSGA-II problema 2  
 Corrida: Agosto 28 2k4  
 Revisión: Septiembre 1st 2k4  
 Notas importantes: LAMDA = 0.4 (FIJO)

No. De Generaciones Default= 300

CASO 1 : Rápido			CASO 2 : Lento			CASO 3 : + -		
FACTORES DE PESO			FACTORES DE PESO			FACTORES DE PESO		
err-indiv_eval	0.5	VARIABLE	err-indiv_eva	0.2		err-indiv_eval	0.30	
err-extremos	0.1	VARIABLE	err-extremos	0.4		err-extremos	0.30	
err-gener	0.4	FIX	err-gener	0.4		err-gener	0.40	
err-ndom	0.5	FIX	err-ndom	0.5		err-ndom	0.50	
err-disper	0.4	VARIABLE	err-disper	0.4		err-disper	0.40	

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$															
variable	0.3	0.1	0.4	0.01															
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	err-indiv_eval	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	CASO 1	CASO 2	CASO 3							
	[0.2-0.7]									SUMA ERR	SUMA ERR	SUMA ERR							
	0.2	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.3	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.4	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.5	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.6	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.7	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$															
0.4	variable	0.1	0.4	0.01															
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR									
	[0.1-0.6]																		
	0.1	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.2	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.3	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.4	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.5	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.6	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.7	50	10	50	0.01	0.1989	0.1	0	0.0537	0.1494	0.2030	0.1842							
$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$															
0.4	0.3	variable	0.4	0.01															
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR									
	[0.05 - 0.2]																		
	0.05	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.1	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.2	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.3	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$															
0.4	0.3	0.1	0.4	variable															
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR									
	[0.005 - 0.1]																		
	0.005	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.01	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.03	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.05	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.07	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							
	0.1	50	10	50	0.01	0.1989	0.01	0	0.0537	0.0564	0.1130	0.0942							

b) Tabla C. 7  $\lambda=0.5$

Corrida del NSGA-II problema 2  
 Corrida: Agosto 28 2k4  
 Revisión: Septiembre 1st 2k4  
 Notas importantes: LAMDA = 0.5 (FIJO)

No. De Generaciones Default= 300

CASO 1 : Rápido			CASO 2 : Lento			CASO 3 : + -		
FACTORES DE PESO			FACTORES DE PESO			FACTORES DE PESO		
err-indiv_eval	0.5	VARIABLE	err-indiv_eva	0.2		err-indiv_eval	0.30	
err-extremos	0.1	VARIABLE	err-extremos	0.4		err-extremos	0.30	
err-gener	0.4	FIX	err-gener	0.4		err-gener	0.40	
err-ndom	0.5	FIX	err-ndom	0.5		err-ndom	0.50	
err-disper	0.4	VARIABLE	err-disper	0.4		err-disper	0.40	

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$
variable	0.3	0.1	0.5	0.01

Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	err-indiv_eval	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	CASO 1	CASO 2	CASO 3
	[0.2-0.7]									SUMA ERR	SUMA ERR	SUMA ERR
0.2	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.3	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.4	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.5	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.6	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.7	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$
0.4	variable	0.1	0.5	0.01

Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR	SUMA ERR	SUMA ERR
	[0.1-0.8]											
0.1	50	300	50	0.3	0.1946	Out of Range	0	0.0693	#VALUE!	#VALUE!	#VALUE!	
0.2	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.3	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.4	50	14	50	0.014	0.1974	0.014	0	0.0434	0.0581	0.1131	0.0948	
0.5	50	11	50	0.011	0.1970	0.011	0	0.0356	0.0504	0.1062	0.0876	
0.6	50	11	50	0.011	0.1970	0.011	0	0.0356	0.0504	0.1062	0.0876	
0.7	50	11	50	0.011	0.1970	0.11	0	0.0356	0.1494	0.2052	0.1866	

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$
0.4	0.3	variable	0.5	0.01

Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR	SUMA ERR	SUMA ERR
	[0.05 - 0.2]											
0.05	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.1	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.2	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.3	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$
0.4	0.3	0.1	0.5	variable

Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR	SUMA ERR	SUMA ERR
	[0.005 - 0.1]											
0.005	50	21	50	0.021	0.1994	0.021	0	0.0683	0.0780	0.1315	0.1138	
0.01	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.03	50	13	50	0.013	0.1985	0.013	0	0.0342	0.0530	0.1087	0.0901	
0.05	50	11	50	0.011	0.1970	0.011	0	0.0356	0.0504	0.1062	0.0876	
0.07	50	11	50	0.011	0.1970	0.011	0	0.0356	0.0504	0.1062	0.0876	
0.1	50	11	50	0.011	0.1970	0.011	0	0.0356	0.0504	0.1062	0.0876	

c) Tabla C. 8  $\lambda=0.6$

Corrida del NSGA-II problema 2  
 Corrida: Agosto 28 2k4  
 Revisión: Septiembre 1st 2k4  
 Notas importantes: LAMDA = 0.6 (FIJO)

No. De Generaciones Default= 300

CASO 1 : Rápido			CASO 2 : Lento			CASO 3 : + -		
FACTORES DE PESO			FACTORES DE PESO			FACTORES DE PESO		
err-indiv_eval	0.5	VARIABLE	err-indiv_eva	0.2		err-indiv_eval	0.30	
err-extremos	0.1	VARIABLE	err-extremos	0.4		err-extremos	0.30	
err-gener	0.4	FIX	err-gener	0.4		err-gener	0.40	
err-ndom	0.5	FIX	err-ndom	0.5		err-ndom	0.50	
err-disper	0.4	VARIABLE	err-disper	0.4		err-disper	0.40	

$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$						CASO 1	CASO 2	CASO 3
variable	0.3	0.1	0.6	0.01						SUMA ERR	SUMA ERR	SUMA ERR
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	err-indiv_eval	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper			
	[0.2-0.7]											
	0.2	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.3	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.4	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.5	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.6	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.7	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$								
0.4	variable	0.1	0.6	0.01								
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR		
	[0.1-0.8]											
	0.1	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.2	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.3	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.4	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.5	50	22	50	0.022	0.1980	0.022	0	0.0318	0.0654	0.1182	0.1006
	0.6	50	22	50	0.022	0.1980	0.022	0	0.0318	0.0654	0.1182	0.1006
	0.7	50	22	50	0.022	0.1980	0.22	0	0.0318	0.2634	0.3162	0.2986
$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$								
0.4	0.3	variable	0.6	0.01								
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR		
	[0.05 - 0.2]											
	0.05	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.1	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.2	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.3	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
$\Phi$	$\Omega$	$\epsilon^2$	$\lambda$	$\psi$								
0.4	0.3	0.1	0.6	variable								
Parámetro	Rango	Población	Generaciones	No dominados	indiv_evaluad	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR		
	[0.005 - 0.1]											
	0.005	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.01	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.03	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.05	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.07	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994
	0.1	50	21	50	0.021	0.1980	0.021	0	0.0318	0.0640	0.1171	0.0994

Tabla C.9-C.11. *Resumen del Análisis de sensibilidad. Destilación Extractiva sin Recirculación.*

- a) Tabla C.9  $\lambda=0.4$
- b) Tabla C.10  $\lambda=0.5$

No. De Generaciones Default= 500

Corrida	Población	Generaciones	No dominados	CASO 1 : Rápido				CASO 2 : Lento				CASO 3 : + -		
				err-indiv_eval	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR	SUMA ERR	SUMA ERR			
1	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
2	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
3	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
4	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
5	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
6	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
7	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
8	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
9	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
10	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
11	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
12	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
13	50	5	27	0.005	0.1776	0.05	0.46	0.0293	0.5420	0.5938	0.5765			
14	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
15	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
16	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
17	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
18	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
19	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
20	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
21	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
22	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
23	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
24	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
25	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
26	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
27	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			

No. De Generaciones Default= 500

Corrida	Población	Generaciones	No dominados	CASO 1 : Rápido				CASO 2 : Lento				CASO 3 : + -		
				err-indiv_eval	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	SUMA ERR	SUMA ERR	SUMA ERR			
1	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
2	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
3	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
4	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
5	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
6	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
7	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
8	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
9	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
10	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
11	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
12	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
13	50	5	27	0.005	0.1776	0.05	0.46	0.0293	0.5420	0.5938	0.5765			
14	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
15	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
16	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
17	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
18	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315			
19	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
20	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
21	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
22	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
23	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
24	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
25	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
26	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			
27	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788			

c) Tabla C.9  $\lambda=0.6$

Corrida: Destilación Extractiva Sin Recirculación  
 Corrida: Sept 1 - Sept 8  
 Revisión: Septiembre 8 2k4  
 Notas importantes: LAMDA = 0.6 (FIJO)

No. De Generaciones Default= 500

CASO 1 : Rápido			CASO 2 : Lento			CASO 3 : + -		
FACTORES DE PESO			FACTORES DE PESO			FACTORES DE PESO		
err-indiv_eval	0.5	VARIABLE	err-indiv_eva	0.2		err-indiv_eval	0.30	
err-extremos	0.1	VARIABLE	err-extremos	0.4		err-extremos	0.30	
err-gener	0.4	FIX	err-gener	0.4		err-gener	0.40	
err-ndom	0.5	FIX	err-ndom	0.5		err-ndom	0.50	
err-disper	0.4	VARIABLE	err-disper	0.4		err-disper	0.40	

Corrida	Población	Generaciones	No dominados	err-indiv_eval	err-extrem	err-gener	err-ndom	err-disper	CASO 1 SUMA ERR	CASO 2 SUMA ERR	CASO 3 SUMA ERR
1	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
2	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
3	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
4	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
5	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
6	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
7	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
8	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
9	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
10	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
11	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
12	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
13	50	5	27	0.005	0.1776	0.05	0.46	0.0293	0.5420	0.5938	0.5765
14	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
15	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
16	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
17	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
18	50	5	27	0.005	0.1776	0.005	0.46	0.0293	0.4970	0.5488	0.5315
19	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788
20	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788
21	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788
22	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788
23	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788
24	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788
25	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788
26	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788
27	50	9	45	0.009	0.1498	0.009	0.1	0.0554	0.1506	0.1929	0.1788

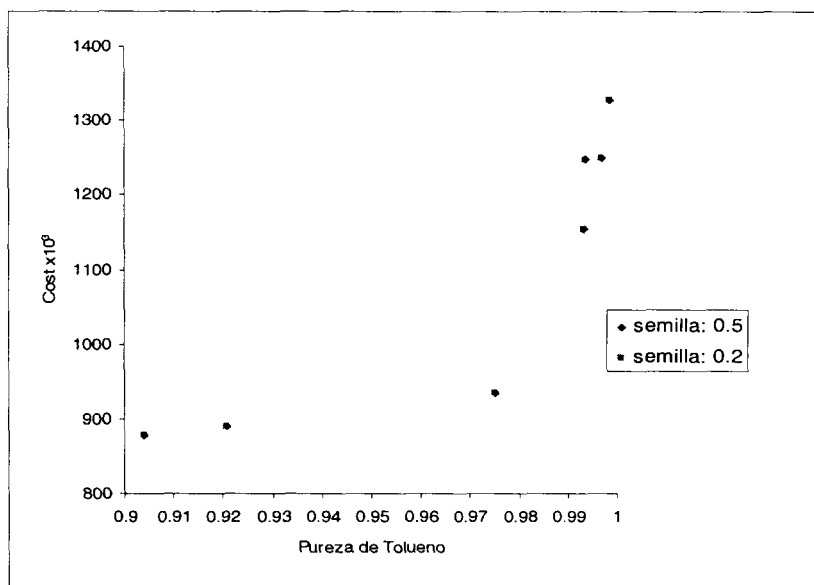


Figura C.9. Efecto nulo de la semilla del AG sobre los resultados finales

Centro de Información-Biblioteca



30002006524722