

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

CAMPUS MONTERREY

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



**APLICACION DE UN ALGORITMO GENETICO A LA
OPTIMIZACION DE SISTEMAS DE DESTILACION
EN SIMULADORES MODULARES**

TESIS

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

MAESTRO EN CIENCIAS

CON ESPECIALIDAD EN INGENIERIA QUIMICA

CARLOS HUMBERTO MORENO MOLINA

Mayo de 2000

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

CAMPUS MONTERREY

DIVISION DE INGENIERIA Y ARQUITECTURA

PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERIA



**APLICACION DE UN ALGORITMO GENETICO A LA OPTIMIZACION DE
SISTEMAS DE DESTILACION EN SIMULADORES MODULARES**

TESIS

Presentada como Requisito Parcial para la obtención del grado académico de

MAESTRO EN CIENCIAS CON ESPECIALIDAD EN INGENIERIA QUIMICA

CARLOS HUMBERTO MORENO MOLINA

MAYO DE 2000

INDICE

Agradecimientos	i
Indice	ii
Capitulo 1: Introducción	1
1.1 Introducción	1
1.2 Ejemplo Motivacional	3
1.3 Objetivos	4
1.4 Descripción de la Tesis	5
Capitulo 2:	6
2.1 Modelación Matemática	7
2.1.1 Síntesis de Secuencias de Columnas de Destilación	8
2.1.2 Empleo de Simuladores para la Síntesis de Procesos	9
2.2 Algoritmos Genéticos	11
2.2.1 Algoritmos Genéticos para el Diseño, Optimización y Síntesis de Procesos	12
a) Síntesis de Redes de Intercambio de Calor	12
b) Síntesis de la Red de Intercambio de Calor y Optimización de Parámetros de Operación para Sistemas de Destilación	13
c) Síntesis de Secuencias de Destilación Integradas Energéticamente	14
2.2.2 Principios Básicos de los Algoritmos Genéticos	16
2.2.3 Empleo de Algoritmos Genéticos en Simuladores Modulares de Proceso	19
a) Implementación mediante la Interacción Externa (Gross y Rossen, 1998)	20
b) Implementación mediante la Interacción Interna (García, 1997)	22
2.3 Metas Alcanzadas y Futuras Líneas de Investigación para la Síntesis de Procesos	25
Capítulo 3	28
3.1 Antecedentes	28
3.2 Modelación del Proceso	29
3.2.1 Simulación Rigurosa del Proceso	29
3.2.2 Función Objetivo y Manejo de Restricciones	31
3.2.3 Optimización del Proceso Mediante un Estrategia de Camino Factible	32
3.2.3.1 Implementación	33
3.2.3.2 Resultados	34
3.2.3.3 Discusión de Resultados	36

3.2.4 Optimización del Proceso Mediante una Estrategia de Camino No Factible	38
3.2.4.1 Implementación	39
Capítulo 4 Síntesis de Secuencias de Destilación	42
4.1 Antecedentes	42
4.2 Optimización de la Secuencia de Destilación utilizando una Superestructura	43
4.2.1 Creación de la Superestructura	43
4.2.2 Implementación del Algoritmo Genético	46
4.2.3 Resultados y Discusión	47
4.3 Optimización utilizando la Estrategia Propuesta	54
4.3.1 Estrategia Propuesta	54
4.3.2 Una Posible Implementación	60
Capitulo 5 Conclusiones y Recomendaciones	62
5.1 Conclusiones	62
5.2 Recomendaciones	64
Bibliografía	66

CAPITULO 1: Introducción.

1.1 Antecedentes

El diseño y optimización de procesos representa un gran reto en la ingeniería química al involucrar decisiones estructurales (adquisición/utilización de diferentes tecnologías y/o equipos, así como sus interconexiones), decisiones de diseño (diámetros, número de etapas, etc.), y decisiones de operación (temperaturas, presiones, flujos, etc.). La solución matemática de este problema se ha planteado como un procedimiento en tres pasos (Grossmann et al., 1990): la definición de las tecnologías y/o equipos a considerar, la modelación matemática de su funcionamiento y la solución numérico del modelo resultante como un problema de optimización.

La definición de las tecnologías consiste en generar una superestructura que contenga todas los posibles diagramas de flujo de proceso que representen las decisiones estructurales.

En la modelación matemática se ha seguido un enfoque sistemático para el planteamiento de los modelos y su optimización a través de formulaciones mixtas-enteras no lineales (MINLP). Para las solución de estos modelos se han utilizado principalmente la descomposición generalizada de Benders (GBD) (Geoffrion, 1972) y la aproximación externa (AO) (Duran y Grossmann, 1985).

Los dos últimos pasos, la modelación matemática del proceso y la solución del mismo, han sido el objetivo de gran número de trabajos en la literatura. En estos trabajos es

obvio que la generación de un modelo matemático que represente apropiadamente un proceso es una tarea completa que requiere, además de tiempo, un alto conocimiento de ingeniería de procesos y métodos numéricos aplicados.

Para facilitar este trabajo, se han desarrollado numerosos trabajos para ofrecer al ingeniero herramientas a nivel comercial. Estas herramientas han sido desarrolladas en forma de simuladores los cuales contienen los modelos matemáticos de las operaciones unitarias más comunes en sistemas de procesos químicos, así como métodos especializados para la solución numérica de los mismos. Típicamente estos simuladores han adoptado técnicas de programación matemática, como variantes de SQP (Biegler, 1985), para la optimización de procesos. La ventaja principal de utilizar estos simuladores para la optimización, es la disponibilidad de modelos rigurosos lo cual simplifica el trabajo de modelación.

La mayoría de los simuladores comerciales han seguido una estrategia de solución modular secuencial, es decir, basada en la generación de módulos o bloques que representan el comportamiento de una operación unitaria específica resolviendo los módulos que conforman el diagrama de flujo de proceso de manera secuencial seriada e iterativa en caso de haber reciclos. Esta estrategia ha permitido la generación de módulos altamente sofisticados con métodos numéricos eficientes y robustos, haciendo de estos simuladores una herramienta muy atractiva.

Uno de los primeros problemas que se presentan al utilizar simuladores modulares secuenciales en la síntesis de procesos es la definición del diagrama de flujo, ya que este varía durante el proceso de selección de equipo y sus interconexiones, adicionando y quitando bloques de simulación. Los problemas numéricos que esto origina son particularmente importantes al utilizar métodos de simulación basados en gradientes, que son los que se encuentran en estos paquetes. Aunque el uso de métodos de optimización mixta-entera no lineal ha ayudado a resolver este problema (Diwekar y Rubin, 1993), la complejidad de los algoritmos de solución de este tipo de modelos, ha hecho muy difícil su implementación como un módulo independiente del simulador. Otros problemas encontrados en estos trabajos son: la discontinuidad de la función objetivo (funciones de costo de equipo al intentar minimizar el costo total de la planta), varios óptimos locales y funciones objetivos poco sensibles a ciertos rangos en las variables.

De manera paralela a los métodos matemáticos de optimización, se han desarrollado otras herramientas de inteligencia artificial que se han ido aplicando a la ingeniería de manera gradual, en la última década, diferentes autores han reportado aplicaciones de algoritmos evolutivos como los algoritmos genéticos (AG). Los algoritmos genéticos hacen una analogía con los procesos biológicos donde las características se transmiten de una generación a otra. Un AG es un método estocástico de búsqueda basado en la mecánica de la selección natural y la idea darwiniana de la supervivencia de acuerdo a la aptitud. En una AG las posibles soluciones son codificadas en forma de "tiras de caracteres" de un alfabeto reducido (generalmente binario) que asemejan a los cromosomas de los seres vivos, evolucionando una población de estos individuos a través de operadores genéticos básicos: selección, cruce y mutación.

Las principales diferencias de un AG con un método de optimización matemática son: a) evoluciona una población, no un solo punto; b) se trabaja con variables codificadas, no con sus valores reales; c) utiliza información de la evaluación de la función objetivo, no de sus derivadas; y d) utiliza reglas probabilísticas, no determinísticas.

Estas características han hecho a los AG sean una herramienta atractiva para implementarse en ambientes modulares secuenciales y diferentes autores han desarrollado estrategias para la interacción del simulador con el código del AG. Gross y Rossen (1998) plantean una estrategia externa donde el simulador es utilizado mediante una llamada del ejecutable. García (1997) utiliza una estrategia interna de manera que el AG se ejecuta dentro de la secuencia de cálculo del diagrama de flujo de proceso. Por último, Tayal et al. (1999) también utilizan una estrategia externa.

Estas aplicaciones han demostrado la confiabilidad y robustez de los AG y que presentan ventajas cuando se comparan contra las técnicas basadas en gradientes. Sin duda alguna las principales ventajas de un AG sobre estos métodos son: (a) no requieren información de la forma de la función objetivo ni restricciones (derivadas, linealidad, etc.); (b) son concebidos para utilizar la función objetivo bajo el enfoque de “caja negra” tal como los simuladores modulares secuenciales tratan a los bloques; y (c) trabajan de forma natural con variables enteras.

1.2 Ejemplo Motivacional

Los procesos de destilación representan un alto porcentaje en los costos fijos de las plantas químicas. A su vez, la destilación es una de las operaciones unitarias más comunes y mejor estudiadas en la ingeniería química, en una planta química representa un alto costo de operación en forma de calor en los hervidores. Es por esto que la síntesis y optimización de secuencias de destilación es un tema muy importante.

La superestructura generada para la separación completa de una mezcla multicomponente de cuatro compuestos se presenta en la Figura 1-1. En la superestructura cada mezclador y cada divisor representa una o más variables binarias de decisión para la secuencia de destilación. Además, en cada divisor de flujo la selección de una estructura externa implica que únicamente una corriente tendrá flujo y las demás serán corrientes “secas”. Estas corrientes “secas” generan problemas a la hora del cálculo de derivadas ya que los se debe calcular el cambio de la función objetivo ante la aparición y desaparición de bloques en el diagrama de flujo de proceso.

La integración de modelos matemáticos rigurosos para los separadores genera no linealidades que dificultan la aplicación directa de los métodos de optimización. El planteamiento se ve complicado cuando se requiere el uso de modelos termodinámicos más complejos por lo que generalmente se considera equilibrio ideal lo limita su aplicación. Además, los modelos de costos para el cálculo del costo de inversión son

generalmente no lineales, esto conlleva el aumento en la dificultad de resolver el problema, típicamente estos modelos de costos son linealizados en función de las variables optimización.

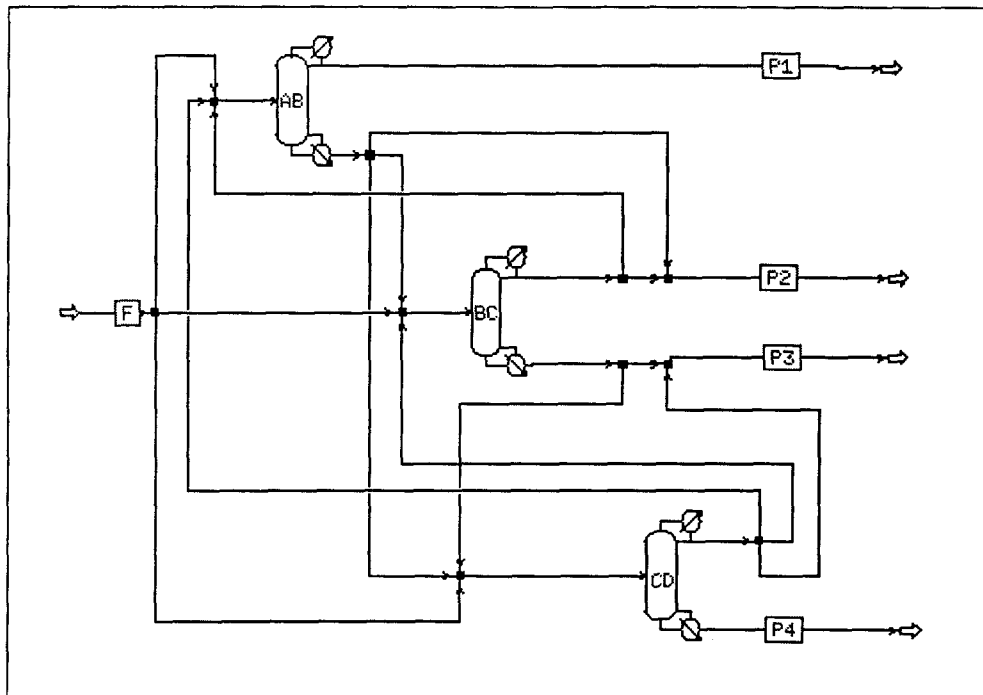


Figura 1-1. Superestructura para Separación Completa de Cuatro Componentes

Mediante el empleo de un simulador, el manejo de modelos rigurosos para los bloques y la termodinámica del sistema se hace relativamente fácil, pero la implementación de métodos matemáticos de optimización todavía requiere el cálculo de derivadas ante un diagrama de flujo de proceso cambiante.

Dado el enfoque de “caja negra” de los métodos de inteligencia artificial, como los AG, hacia la función objetivo es que se han desarrollado diferentes implementaciones para su utilización en la síntesis y optimización de procesos utilizando simuladores modulares secuenciales.

1.3 Objetivos

Considerando las ventajas de los AG para su implementación en ambientes modulares secuenciales, y partiendo de implementaciones exitosas de los mismos a la ingeniería química, se cree factible su aplicación a la solución de problemas realistas de optimización y síntesis de procesos.

Retomando la implementación de García (1997) de un AG en el simulador ASPEN+, el presente trabajo de investigación tiene como objetivos:

- Demostrar la aplicabilidad de modelos realistas a la optimización de un sistema de columnas de destilación acopladas energéticamente mediante un algoritmo genético en un ambiente modulare secuencial utilizando modelos rigurosos tanto para los bloques de proceso como para los modelos termodinámicos.
- Generar un algoritmo para la síntesis y diseño óptimo de secuencias de destilación y su implementación utilizando un algoritmo genético en un ambiente modular secuencial.

1.4 Descripción de la Tesis

Para cumplir con los objetivos planteados el trabajo de investigación tiene la siguiente estructura general:

En el Capítulo 2 se hace una revisión detallada del status quo de la síntesis de procesos en ingeniería química analizando las características de los enfoques de modelación matemática y AG. Se analizan las implementaciones de estos enfoques en ambientes modulares secuenciales identificando las ventajas y desventajas de cada una de ellas. Haciendo un espacio especial para la revisión sobre la síntesis de secuencias de destilación.

En el Capítulo 3 se implementa un AG en el simulador modular secuencial ASPEN para la optimización de un sistema de destilación acoplado energéticamente. Se describe la creación y optimización del modelo de simulación y su adecuación hacia un modelo de optimización, se discuten los puntos más importantes a considerar en la creación de los modelos y se sustentan las estrategias utilizadas. Se implementan diferentes estrategias para la solución del modelo y se discuten los resultados obtenidos en cada una de ellas.

En el Capítulo 4 se propone una nueva estrategia para la síntesis de secuencias de destilación utilizando un AG genético en un ambiente modular secuencial. Se describen las partes de la estrategia planteada y su interacción con el código base del AG. Como ejemplo de esta nueva estrategia se resuelve el problema de la destilación completa de una mezcla multicomponente sentando precedente para la solución, mediante la estrategia propuesta, de problemas más complejos. Finalmente, se analizan los resultados obtenidos.

Por último, en el Capítulo 5, se exponen las conclusiones a las cuales se llegan después de resolver los problemas planteados y analizar los resultados obtenidos, y se hacen recomendaciones para el futuro desarrollo y mejora de las implementaciones realizadas.

CAPITULO 2: Síntesis de Procesos en Ingeniería Química

La síntesis de procesos consiste en la selección óptima de las unidades de proceso así como la determinación de la interconexión y diseño óptimo de dichas unidades (Nishida et al., 1981). Históricamente la síntesis de procesos se ha desarrollado siguiendo tres enfoques: reglas heurísticas y descomposición jerárquica (Douglas, 1988); análisis termodinámicos (Linnhoff, 1983); y el enfoque basado en la modelación matemática de los procesos y su posterior optimización típicamente a través de formulaciones mixtas-enteras (e.g. Grossmann, 1990).

En conjunto con los algoritmos de modelación matemática se han desarrollado simuladores para su solución. La mayoría de los simuladores siguen la estrategia orientada a ecuaciones en las que las restricciones y los modelos se optimizan de manera conjunta (ver por ejemplo Kocis y Grossmann, 1989). En los últimos años se han implementado estrategias en simuladores modulares en los cuales se pueden incluir modelos rigurosos (Diwekar et al., 1992).

En forma paralela, se han aplicado métodos directos (e.g. algoritmos genéticos, AG, recocido simulado y métodos combinatoriales) los cuales no requieren información de la forma de la función objetivo ni restricciones lo que permite atacar gran diversidad de problemas sin embargo pueden ser ineficientes ante métodos específicos para cierto tipo de problemas.

En este capítulo se presenta una descripción de las características más importantes de la modelación matemática y los AG para la síntesis de procesos.

2.1 Modelación Matemática

En general, este enfoque sistemático para la síntesis de procesos consta de 2 pasos: (a) generar una superestructura donde estén contenidas todas las configuraciones posibles del proceso, (b) encontrar la estructura y el conjunto de operación que cumplan con las especificaciones de desempeño y costo (Grossmann, 1990). De igual forma el problema se puede dividir en tres pasos: (a) generar la superestructura, (b) obtener un modelo que la represente, y (c) encontrar la solución al modelo.

Para la generación de superestructuras que se aseguren de contener todas las configuraciones posibles de los procesos se han generado diferentes técnicas las cuales no se discuten en este escrito.

En el modelo matemático podemos distinguir diferentes tipos de variables: (a) variables binarias topológicas, y , que definen la existencia o no de las unidades en la superestructura; (b) variables reales, x , que son variables continuas representando a los parámetros de diseño y operación de equipos. De igual forma las restricciones pueden dividirse en igualdades, $h(x) = 0$, y desigualdades, $g(x) \leq 0$, las cuales generalmente son no lineales generando un problema MINLP. De manera que la formulación básica del problema queda como:

$$\begin{aligned} & \min \quad c^T \cdot y + f(x) \\ & \text{s.a} \\ & \quad B \cdot y + g(x) \leq 0 \\ & \quad h(x) = 0 \\ & \text{donde: } \quad x \in \mathbb{R}^n \\ & \quad y \in \{0, 1\} \end{aligned}$$

Para su solución los métodos comúnmente utilizados descomponen el problema en dos sub-problemas: (a) el problema “primo” donde las variables enteras están definidas resultando un problema no lineal (NLP). En este problema la estructura del proceso esta fija y se optimizan las condiciones de operación mediante métodos como programación cuadrática sucesiva (SQP por sus siglas en inglés) o gradiente proyectado reducido (RPG por sus siglas en inglés). La solución a este problema constituye un límite superior a la solución óptima del problema MINLP; (b) el segundo problema, llamado “maestro”, es un problema MILP que se resuelve por métodos como el “branch and bound” (BB). Ambos problemas son resueltos sucesivamente hasta la convergencia.

Existen dos variantes principales de este procedimiento que difieren en el planteamiento del problema maestro: la descomposición generalizada de benders (GBD) (Geoffrion, 1972) que involucra la representación del problema dual; y la aproximación externa (OA) (Duran y Grossmann, 1986) con la representación prima. De estas dos variables se

prefiere la aproximación externa por requerir menos iteraciones en la solución del problema NLP, ya que es la etapa que requiere mayor cantidad de esfuerzo computacional, aunque no se ha comprobado que en realidad sea mejor. De igual forma para solventar algunas deficiencias (e.g. manejo de igualdades y no convexidades) se han desarrollado variantes como por ejemplo: aproximación externa con relajación de ecuaciones (OA/ER) (Kocis y Grossmann 1987), castigo aumentado (AP/OA/ER) (Viswanathan y Grossmann, 1990) y una re-formulación mixta del problema maestro (GBD/OA/ER/AP) (Diwekar et al. 1992).

La solución del problema de optimización se basa en la modelación de las operaciones unitarias. Los modelos matemáticos de dichas operaciones varían de complejidad de acuerdo al tipo de operación y a las consideraciones tomadas en su desarrollo. Por ejemplo, el modelo de una columna de destilación simple puede ser planteado de forma simple a través de las ecuaciones de Underwood-Fenske-Gilliland-Wind asumiendo volatilidades constantes, razón L/G constante, etapas ideales, sistema ideal etc., o a través de diferentes modelos como el planteado por Viswanathan y Grossmann (1990) o Dünnebier y Pantelides (1999) que plantean el modelo etapa por etapa.

Los modelos generados de manera rigurosa resultan en el aumento de la sofisticación del método de solución y el tiempo de convergencia de los mismos. Para lograr la solución y convergencia de los problemas muchas veces se tiene que sacrificar la rigurosidad de los modelos. Aunque la limitante en la optimización mediante modelación matemática está más en los métodos de solución de los problemas resultantes que en la modelación de las operaciones, se han desarrollado simuladores en los cuales se agrupan los modelos necesarios para la optimización de procesos en los cuales además de modelos cuentan con métodos de solución robustos por lo que la generación de la superestructura se facilita.

2.1.1 Síntesis de Secuencias de Columnas de Destilación

La síntesis de secuencias de destilación consiste en la selección del orden de separación de una mezcla multicomponente en diferentes productos y la optimización de los parámetros de operación de los destiladores. Cuando los productos constituyen compuestos puros se denomina separación completa (Sharp) y cuando los productos constituyen mezclas multicomponentes se denomina separación no completa (Non-Sharp).

Siendo la destilación una de las operaciones más comunes en ingeniería química no es de extrañarse que se hallan desarrollado gran cantidad de trabajos sobre el tema. Los procesos de separación constituyen una porción significativa de los costos de capital y operativos de una planta química por lo que se han desarrollado métodos sistemáticos para la selección óptima de la secuencia de separación.

En los últimos años se ha pasado de la síntesis de secuencias de destilación mediante reglas heurísticas (ver por ejemplo, Hu et al, 1993 y Ger-Jan y Liu, 1994) al desarrollo de modelos matemáticos para la síntesis y optimización de secuencias de destilación (ver por ejemplo a Paules IV y Floudas, 1992). Métodos numéricos más eficientes y algoritmos más robustos han permitido la optimización de sistemas de separación no completa (ver por ejemplo a Fraga y Senos Matias, 1996) y configuraciones avanzadas de rectificadores y agotadores laterales, configuración de Petliuk y otros acoplamientos energéticos (ver por ejemplo a Agrawal, 1996). Un modelo completo que permite revisar estas opciones es planteado por Dünnebier y Pantelides (1999) aunque como los mismos autores mencionan su solución no es posible, por lo que tienen que deben considerar relaciones termodinámicas ideales.

En la actualidad se han desarrollado modelos MINLP que consideran separaciones no completas con configuraciones avanzadas y acopladas energéticamente. La solución de estos modelos se basa en: (a) la generación de una superestructura que contenga todas las secuencias y acoplamientos posibles. La selección de la secuencia y el acoplamiento energético se hace mediante variables enteras de divisores y mezcladores de flujo; (b) simplificaciones de los modelos, por ejemplo, la consideración de funciones de costo lineales con respecto a la composición del componente clave y el flujo de alimentación; (c) la división del problema en dos subproblemas: (i) la selección de la secuencia y optimización de condiciones de operación, y (ii) la optimización de la red de intercambio de calor.

En forma paralela a los métodos matemáticos se han implementado métodos combinatoriales (ver por ejemplo a Floquet et al., 1994), recocido simulado (ver por ejemplo a Floquet et al., 1992) y AG (ver por ejemplo a Wang et al., 1998 y a Fraga et al., 1996).

2.1.2 Empleo de Simuladores para la Síntesis de Procesos

La investigación sobre la solución del problema MINLP ha llevado a la creación de programas como APROS (Paules y Floudas, 1989), DICOPT++ (Kocis y Grossmann, 1989; Viswanathan and Grossmann, 1990) y PROSIN (Kravanja y Grossmann, 1990). Todos estos códigos son orientados a ecuaciones, donde las restricciones y los modelos son manejados a nivel optimización de manera conjunta. Sin embargo, en la mayoría de los casos los modelos son discontinuos, no convexos y multimodales, haciendo necesaria la simplificación del problema mediante la consideración de fases ideales, modelos de costos basados en regresiones, etc. Lo anterior con el fin de encontrar el equilibrio entre precisión del modelo y costo computacional para su solución.

Además de simuladores orientados a ecuaciones existen simuladores modulares secuenciales los cuales tienen como característica distintiva el contar con modelos rigurosos de los operaciones de proceso. La utilización de este tipo de simuladores para la síntesis de procesos ha sido encabezada por Diwekar et al. utilizando el simulador

ASPEN (ver por ejemplo Diwekar et al., 1992; Diwekar y Rubin, 1993) y Reneaume (ver Reneaume et al., 1995 y 1995a) en el simulador ProSim.

Dentro del ambiente modular la formulación de las problema MINLP cambia debido a que dentro de los bloques de simulación se encuentran restricciones implícitas, $m(d, x) = 0$, (balances de materia, balances de energía, relaciones de equilibrio, etc.). Las variables ahora se dividen en: (a) variables binarias, y , que definen la topología del proceso; (b) variables de decisión, d , que son variables reales a optimizar; (c) variables independientes, x , que son las variables independientes de los módulos del simulador. A las variables x presentes en la función objetivo y en las restricciones se les denomina s .

El problema se plantea como:

$$\min c^T \cdot y + f(d, s)$$

s.a

$$B \cdot y + h(d, s) \leq 0$$

$$C \cdot y + g(x) = 0$$

$$m(d, x) = 0$$

Donde:

$$x \in R^n$$

$$s \in R^n$$

$$d \in R^n$$

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

La presencia de restricciones implícitas, de las cuales no se tiene información de su forma o sus derivadas, hace necesaria la creación de variables de unión y la estimación numérica de las derivadas mediante perturbaciones de manera que se pueda resolver el problema NLP. Para los métodos matemáticos donde la información de la forma de las restricciones es necesaria, la implementación de estrategias para el manejo de las restricciones implícitas, la selección de las variables unión y la perturbación para la estimación de las derivadas son complicadas.

Para su solución Diwakar et al. proponen una modificación del algoritmo de GBD/AO y para evitar los problemas de corrientes con cero flujo utilizan la descomposición propuesta por Kocis y Grossmann (Kocis y Grossmann, 1989). En su investigación identificaron dos problemas principales: (a) la solución inicial del problema NLP relajado que podría requerir gran esfuerzo computacional; y (b) el crecimiento del problema maestro al evolucionar las iteraciones que ocasiona la necesidad de reestructurarlo para cada iteración. La definición del problema en ASPEN se realiza mediante la definición de un bloque para la optimización del problema NLP y la superestructura. La inicialización del problema se realiza en el archivo de entrada (INPUT FILE) de ASPEN y en esta etapa se traduce la estructura seleccionada.

Reneaume et al., distinguen 3 niveles jerárquicos: (a) la superestructura; (b) la estructura; y (c) los módulos. A su vez el nivel de la superestructura está compuesto de tres pasos: construcción del problema maestro, la solución del problema maestro por el método de BB y la construcción del problema primo. En este nivel se requiere modificaciones considerables a la arquitectura del simulador. En el nivel de estructura las variables binarias están fijas según el nivel de superestructura y se optimizan las condiciones de operación del diagrama seleccionado (problema NLP) mediante una estrategia de camino no factible. El nivel modular está dedicado a la simulación del proceso en lazo abierto por lo que modelos rigurosos pueden ser empleados sin incrementar el tamaño del problema de optimización.

Estas implementaciones conllevan problemas en el manejo de las restricciones para los bloques que están activos o inactivos. Esto lleva a la clasificación de las restricciones en dos tipos: las restricciones del Tipo I son aquellas que cuando están activas todas las variables en su expresión también lo están; y las restricciones del Tipo II son aquellas que al estar activas al menos una de las variables en su expresión no lo está. Lo anterior lleva a la definición de pseudo corrientes de corte y pseudo variables respectivamente (Reneaume et al., 1995) por lo que el algoritmo de solución original tiene que ser modificado para su implementación.

Debido a la presencia de variables restricciones implícitas en la solución de un problema MINLP utilizando un simulador secuencial la implementación de un módulo universal no sería eficiente ya que el usuario tendría que definir, de acuerdo a las restricciones presentes, las corrientes de corte y pseudo variables lo cual afectaría a su vez a la convergencia del diagrama de flujo de proceso.

2.2 Algoritmos Genéticos

Para solventar los problemas encontrados en la optimización de problemas MINLP utilizando simuladores secuenciales mediante el enfoque de formulación matemática se propone utilizar un método directo de búsqueda.

Los métodos directos de búsqueda, como los AG, no requieren información sobre la forma (derivadas y convexidad) de la función objetivo ni de las restricciones por lo que las restricciones implícitas y los bloques inactivos son manejados de forma natural. Esta propiedad permite utilizar un enfoque de caja negra para la evaluación del diagrama de flujo de proceso cuya solución mediante simuladores modulares se hace de manera robusta y eficiente.

En los últimos años los AG han sido empleados para la solución de numerosos problemas de optimización en ingeniería química.

2.2.1 Algoritmos Genéticos para el Diseño, Optimización y Síntesis de Procesos.

Upreti y Deb (1997) utilizan un AG para el diseño óptimo de un reactor de síntesis de amoníaco. Castell (1998) utiliza un AG para la optimización del Layout de plantas. Park y Froment (1998) implementan un AG híbrido para la estimación de parámetros de modelos detallados de cinética. Edwards et al. (1998) utilizan los AG para la reducción de modelos cinéticos. Pham (1998) utiliza AG para la optimización dinámica de procesos. Bernal-Haro et al. (1998) y Wang et al. (1996) plantean el diseño de una planta batch multipropósitos mediante AG. Tayal et al. (1999) plantean un algoritmo genético para el diseño óptimo de intercambiadores de calor. Hugget et al. (1999) realizan la optimización global de un secador mediante un AG.

La variedad de aplicaciones en las cuales se ha implementado el AG es una muestra de la versatilidad del algoritmo. En el desarrollo básico del algoritmo se establecen las operaciones de selección, cruce y mutación pero su aplicación se deja abierta a los requerimientos de la aplicación llevando al desarrollo de diferentes formas de los operadores, por ejemplo operadores para genes reales (Moros et al., 1996). Además del desarrollo de nuevos operadores, el desarrollo de los AG a llevado a la implementación de estrategias en calculo paralelo (Fraga y Senos Matias, 1996) y Wang et al. (1998).

Para demostrar la robustez de los AG en la búsqueda y optimización de procesos diferentes investigadores han resuelto funciones prueba como las funciones de Ryoo y Sahinidis (1995) y las funciones de De Jong (1975), implementadas por Gross y Rossen (1998) y Wang et al. (1998) respectivamente.

En las pruebas realizadas por Gross y Rossen (1998) sobre las funciones propuestas por Ryoo y Sahinidis (1995) los AG fueron capaces de encontrar el óptimo global en más del 70% de los casos (92.5% en promedio) a excepción del problema 20 (diseño de una red de reactores con 6 restricciones y 5 variables) en el cual Ryoo y Sahinidis explícitamente mencionan su dificultad por tener un óptimo local con una diferencia del 0.18% del óptimo global.

a) Síntesis de Redes de Intercambio de Calor

Androulakis y Venkatasubramanian (1990) realizan la optimización de una red de intercambio de energía mediante un AG.

Su primera propuesta es emplear técnicas combinatoriales basados en los cálculos del máximo calor recuperado (MCR) y el mínimo de unidades necesarias (MUN). Emplean un AG para la optimización de la estructura de la red de intercambio y un optimizador no lineal para los parámetros de operación.

Debido a que la estructura de la red de intercambio de calor era la variable de optimización del AG utilizaron una codificación que representaba la conectividad entre una corriente fría (C_f) y una corriente caliente (C_c), $\{C_f, C_c\}$, donde el alfabeto tenía $N_f \times N_c$ caracteres que representaban el número total de apareamientos posibles (donde N_f es el número total de corrientes frías y N_c es el número total de corrientes calientes). Dada esta codificación define sus propios operadores genéticos para los cuales tiene que definir restricciones de apareamiento (de manera que únicamente se apareen corrientes frías con corrientes calientes). La principal idea de la codificación en forma de parejas es utilizar la estructura como variable independiente en vez de una representación binaria.

Los resultados iniciales de su trabajo partían del conocimiento de MUN. Debido a que en la mayoría de los problemas de síntesis se desconoce se planteo un AG con número de unidades como variable. Este problema no convergió debido a que la dimensionalidad del problema no estaba fija y que el número de unidades no tenía una relación monótonica con la función objetivo. El segundo planteamiento consistió en establecer un número máximo de unidades y que el AG definiera cuantas iba a utilizar.

En su trabajo identifican que operadores mutación - cruce determinan si el AG se comporta como un buscador aleatorio o sufre de convergencia prematura. Para solucionar el problema de la convergencia prematura utilizan una probabilidad de mutación dependiente de las generaciones. Utilizan una probabilidad de mutación constante, una lineal y una sigmoïdal.

Como parte de su investigación proponen un AG modificado para la optimización en regiones continuas. El nuevo algoritmo es un mezcla entre la optimización por gradientes y el AG en el que se utilizan los operadores genéticos especiales (selección, cruce y mutación) para la búsqueda del gradiente óptimo para la optimización.

b) Síntesis de la Red de Intercambio de Calor y Optimización de Parámetros de Operación para Sistemas de Destilación

El problema de la síntesis de columnas de destilación se divide en tres pasos: (a) determinar la secuencia óptima y las interconexiones; (b) diseñar cada unidad y escoger parámetros de operación; y (c) diseñar de la red de intercambio de calor.

La determinación de la secuencia de destilación mediante AG fue realizada por Stair y Fraga (1995), utilizando un sistema ideal donde la región de optimización era convexa. El diseño de las unidades, selección de parámetros de operación y diseño de la red de intercambio de calor fue propuesta por Fraga y Senos Matias (1996) extendiendo el trabajo a sistemas no ideales e implementaron un AG en paralelo. A continuación se describe su trabajo.

Para este problema consideraron que la estructura óptima ya estaba seleccionada. El método de optimización de la red de intercambio de calor es el método de pliegue y es

incluido en la función objetivo. Para el diseño de las columnas de destilación se utilizó un método corto que, según los autores, no pierde rigurosidad.

El emplear este método permite que los parámetros de operación de las columnas formen parte de la función objetivo. La función objetivo propuesta es no convexa debido a la utilización discreta de servicios (calentamiento y enfriamiento) y a las restricciones propias de la naturaleza de la mezcla no ideal utilizada (Acetona – Benceno – Cloroformo).

La versión de AG utilizada permite que únicamente dos individuos se reproduzcan aumentando el tamaño de población en cada generación. La población se dejaba aumentar hasta un máximo fijo (dos veces el tamaño de población inicial). Al alcanzar el máximo la población era reducida al tamaño inicial de acuerdo a la aptitud. El costo de la evaluación de la función objetivo motiva la implementación en paralelo, de esta forma el proceso únicamente se detiene cuando todos los procesadores están ocupados. El ciclo de selección – cruce - mutación continua aun en el caso que algunos procesadores sigan evaluando individuos. Para cada experimento realizan diez corridas, utilizan una probabilidad de mutación de 0.10, una población inicial de 30 y permiten un máximo de 100 generaciones.

c) Síntesis de Secuencias de Destilación Integradas Energéticamente

Wang et al. (1998) reportan la síntesis y optimización de sistemas de destilación integrados energéticamente. Su implementación tiene dos diferencias mayores con el código del AG simple: (a) utiliza codificación en números reales para la cual define operadores especiales de cruce y mutación; y (b) en una implementación en paralelo se evolucionan sub - poblaciones de manera independiente y la comunicación entre poblaciones se realiza cada determinado número de generaciones mediante cruce.

$$y_1 = \frac{1-t}{2} x_1 + \frac{1+t}{2} x_2; \quad y_2 = \frac{1+t}{2} x_1 + \frac{1-t}{2} x_2$$

El operador de cruce real utilizado, $C(x_1, x_2)$, genera dos hijos (y_1, y_2) a partir de los padres (x_1, x_2) de la siguiente manera:

Donde t es un coeficiente aleatorio de cruce. Este operador se lleva a cabo para cada parámetro codificado. El operador de mutación real utilizado, $Ms(x)$, genera un individuo y_1 , a partir del individuo x_1 de la siguiente manera:

$$y_1 = x_1 + s$$

Donde s es un coeficiente aleatorio de mutación.

Wang et al. proponen dos tipos de comunicación entre sub - poblaciones. (a) Cada sub - población envía cierto número de sus mejores individuos a una sub – población vecina y recibe el mismo número de individuos de otra sub – población vecina. (b) Cada sub – población realiza cruce aleatorio con otra sub – población.

Para probar su implementación Wang et al. implementan las ocho funciones propuestas por De Jong (1975). A partir de estas funciones compara el desempeño de un AG simple y su implementación de acuerdo al número de evaluaciones de la función objetivo obteniendo una disminución de entre el 74% para funciones sencillas hasta 11% para funciones más complicadas. Los parámetros utilizados para esta comparación son 5 individuos, probabilidad de cruce de 0.20, probabilidad de mutación de 0.50, y para la sus operadores utilizó valores de $1 < t < 2$ y $0 < s < 0.10$.

Los autores muestran una clara mejora en AG mejorado contra el AG simple, pero se ha demostrado que los valores de probabilidad de cruce y mutación utilizados están muy lejos del rango que se ha encontrado como más adecuado para problemas de ingeniería química (e.g. Torres, 2000).

En cuanto a la modelación y solución del problema consideran separaciones completas y destiladores simples (una alimentación, dos productos) considerando la presión de operación variable.

Para la optimización de la secuencia de separación proponen una nueva representación de la secuencia mediante un vector, $I(2n-1)$, donde $2n-1$ es el número máximo de secuencias posibles para una separación de n componentes.

Los parámetros de operación a optimizar son agrupados en un vector, $O[m(n-1)]$, donde m es el número de parámetros a optimizar y $(n-1)$ es el número de columnas.

Para la síntesis de la red de intercambio de calor consideran a los condensadores como corrientes frías y a los hervidores como corrientes calientes, además se cuenta con un número finito de servicios calientes y fríos. Con un total de $n-1$ corrientes frías y $n-1$ corrientes calientes se pueden representar el apareamiento de una corriente caliente “ i ” y una corriente fría “ j ” mediante un solo vector, $Q(L)$ de longitud $(n-1)(n-1)$ de acuerdo con la fórmula:

$$L = j + (n-1)(i-1)$$

Donde:

$$i = 1, 2, 3, \dots, n-1.$$

$$j = 1, 2, 3, \dots, n-1.$$

$Q(L)$ representa la cantidad de calor a intercambiar en el apareamiento de una corriente caliente “ i ” con una corriente “ j ”. El Valor de $Q(L)$ va de un rango de 0 a $FQ(L)$ donde $FQ(L)$ representa la carga térmica máxima de ese apareamiento y está dada por:

$$FQ(L) = 0 \quad \text{si } T_i < T_j$$

$$FQ(L) = \min (Q_r(i), Q_c(j)) \quad \text{si } T_i > T_j$$

Donde:

T_i = Temperatura de la corriente caliente (condensador)

T_j = Temperatura de la corriente fría (hervidor)

$Q_r(i)$ = Requerimiento térmico de la corriente caliente (carga térmica del hervidor)

$Q_c(j)$ = Requerimiento térmico de la corriente fría (carga térmica del condensador).

La primera ecuación es la restricción del apareamiento de una corriente caliente y una corriente fría que no cumpla con una diferencia mínima de temperatura. La segunda ecuación limita la transferencia de calor al requerimiento menor de las corrientes apareadas.

Los individuos son representados mediante un vector formado de tres partes. La primera parte, $I(2n-1)$, es entera y representa la secuencia de separación. La segunda, $O[m(n-1)]$, es real y representan los m parámetros de optimización de las columnas de destilación. La tercera parte, $Q[(n-1), (n-1)]$, es real y representa el calor intercambiado entre las corrientes apareadas.

Para la codificación de la primera generación los vectores I y O son generados aleatoriamente. De las condiciones de operación se puede calcular, por métodos cortos, las cargas térmicas de los condensadores y hervidores. El problema es reducido a la síntesis de la red de intercambio de calor y el vector Q es generado aleatoriamente de acuerdo a los límites obtenidos en el paso anterior.

Para la evolución de individuos factibles únicamente se realizará el cruce de dos individuos cuando el vector I sea idéntico para los individuos y este se realizará sobre los vectores O y Q . La mutación se deberá realizar sobre los tres vectores de manera sucesiva.

2.2.2 Principios Básicos de los Algoritmos Genéticos

En esta sección se hace una descripción general de las diferencias entre los AG y la programación matemática así como de los operadores básicos del AG. Se recomienda al lector no iniciado consultar a Goldberg (1989).

Los AG son algoritmos de búsqueda basados en la mecánica de la selección natural y la genética. Combinan la supervivencia del más apto con el intercambio aleatorio de

información (Goldberg, 1989). Los AG difieren en cuatro puntos principales de los métodos de búsqueda y optimización tradicionales:

- Trabajan con los parámetros codificados en cadenas binarias.

En la optimización matemática las variables de optimización son tratadas como números reales. En los AG cada variables es codificada en una cadena de 1's y 0's según un número de bits asignados. La asignación de "n" bits para la codificación de una variable permite que dicha variable tome 2^n valores diferentes. Las variables ya codificadas se agrupan en una sola cadena llamada cromosoma, ver Figura 2-1.

A la representación del cromosoma también se le llama "genotipo" y a las variables reales que se codifican se les llama "fenotipo". El proceso de obtener el fenotipo a partir del genotipo se le llama "decodificación".

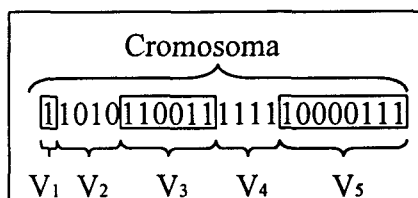


Figura 2-1 Representación de un Cromosoma

- Evolucionan una población no un solo punto de búsqueda.

Los AG optimizan un conjunto de individuos llamado población, ver Figura 2-2.

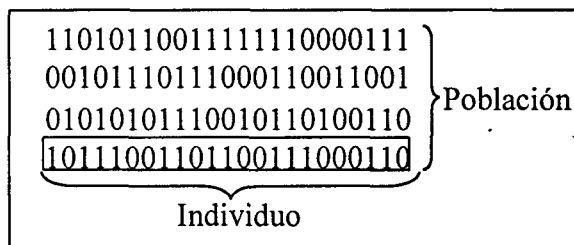


Figura 2-2. Representación de una Población

- Utilizan únicamente información de la evaluación de la función objetivo, no derivadas ni otra información auxiliar.

Para su evolución el AG utiliza únicamente información sobre la evaluación de la función objetivo, ver Figura 2-3, a la cual se le llama "aptitud". Información sobre

derivadas, continuidad y convexidad no es utilizada. Esta característica permite ver a la evaluación de la función objetivo desde el enfoque de caja negra.

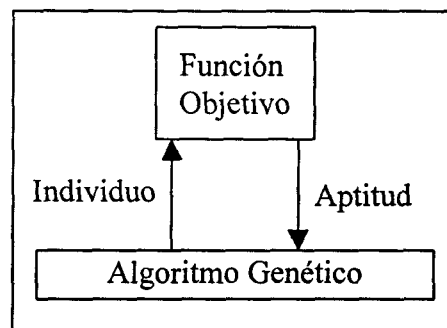


Figura 2-3. Evaluación de la Función Objetivo

- Emplean reglas probabilísticas no determinísticas.

El algoritmo utiliza tres operadores principales para la evolución de la población: selección, cruce y mutación. Estos operadores son probabilísticos y ocurren de acuerdo a una probabilidad asignada a cada evento. El concepto básico de estos operadores se describe a continuación:

Selección:

La selección se hace de acuerdo a la aptitud. A cada individuo se le asigna una probabilidad de selección de acuerdo a su aptitud normalizada, permitiendo que las características de los mejores individuos sean transmitidas a las generaciones siguientes. Los métodos de selección más comunes son la rueda de ruleta y la selección por torneo.

Cruce:

El cruce es el intercambio de información entre dos individuos. Dos individuos del total de individuos seleccionados son escogidos aleatoriamente para realizar el cruce. La probabilidad de cruce, P_c , determina si se efectuará el intercambio de información entre los individuos escogidos. Los métodos de cruce más comunes son el cruce de un solo punto y el cruce circular.

Mutación:

La mutación es el cambio aleatorio de 1's por 0's y viceversa. Una vez efectuada la selección y el cruce, la población es recorrida bit por bit y de acuerdo a la probabilidad de mutación, P_m , se intercambia el valor del bit.

El AG simple se puede representar por el siguiente pseudocódigo (adaptado de García, 1997):

```

INICIO
  Genere Población Inicial
  Calcule la Aptitud de los Individuos
  MIENTRAS CONVERGENCIA = NO
    REPITA (Población/2) VECES
      Realice la Selección
      Realice el Cruce
      Realice la Mutación
    FIN REPETIR
  Genere Nueva Población
  Calcule la Aptitud de la Población
  Calcule la Convergencia
  ¿CONVERGENCIA = SI?
FIN
  
```

Otra manera de representar el AG es mediante el esquema mostrado en la Figura 2-4.

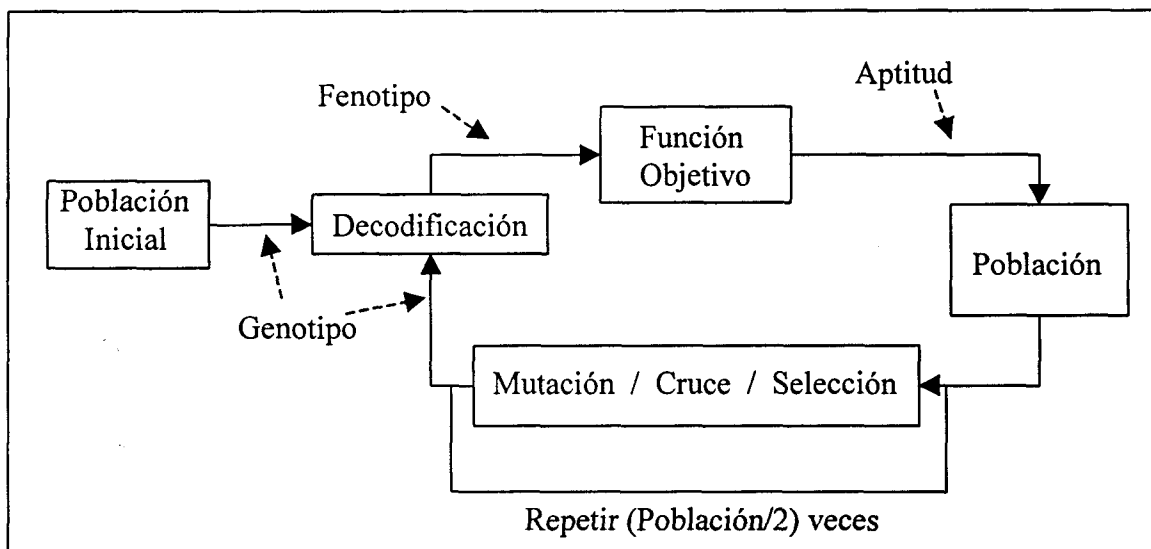


Figura 2-4. Algoritmo Genético Simple

2.2.3 Empleo de Algoritmos Genéticos en Simuladores Modulares de Procesos

Aunque las características del AG permiten utilizar el enfoque de caja negra para la evaluación de la función objetivo, permitiendo utilizar modelos rigurosos en su evaluación, la síntesis de procesos mediante un AG sigue limitada por la generación de estos modelos y los métodos de solución de los mismos.

Para simplificar la tarea de generar los modelos de las operaciones unitarias se han desarrollado simuladores que contienen librerías de modelos y métodos de solución robustos. Los simuladores modulares secuenciales tienen como característica principal el contar con modelos rigurosos de las diferentes operaciones y con métodos rigurosos para la solución de los mismos. En el caso de algún reciclo ya sea de materia, energía o información estos simuladores tienen que iterar para resolver el reciclo.

Para incorporar modelos rigurosos en las estrategia de optimización de procesos se han realizado diferentes trabajos para la implementación de AG en simuladores modulares secuenciales. Varios trabajos se han desarrollado en este tema planteando diferentes esquemas para la interacción del simulador y el optimizador. El primer esquema, propuesto por Gross y Rossen (1998) y Tayal et al. (1999) emplean un simulador interactuando de manera externa con el optimizador a manera un llamado a ejecución. El segundo esquema, propuesto por García (1997), se basa en la estructura del simulador ASPEN. El optimizador se intercala en forma de subrutinas en la secuencia de cálculo del diagrama de flujo.

a) Implementación mediante la Interacción Externa (Gross y Rossen, 1998)

La implementación de un AG en el simulador ASPEN consta de 4 módulos principales.

Módulo de iniciación. Es desarrollado por el usuario utilizando la interface gráfica del ASPEN (Model ManagerTM) para la creación de la superestructura utilizando los mezcladores y divisores para representar las variables binarias. En este módulo los parámetros reales a optimizar por el AG deben ser definidos dentro del simulador al igual que la función objetivo.

Módulo de heurística. En este módulo el espacio de búsqueda en la superestructura es limitado mediante la aplicación de reglas heurísticas eliminando estructuras que son identificadas como no factibles de manera previa y acelerando la convergencia en el espacio de búsqueda restante. Este módulo es responsable de la exclusión de soluciones termodinámica o físicamente no factibles. En el caso de necesitar calcular propiedades termodinámicas es responsable de obtener los datos del simulador. Este módulo es utilizado para la preevaluación de los individuos.

Módulo generador de archivos de entrada (Input files). Este módulo traduce la representación de la superestructura al lenguaje de entrada del simulador pudiendo incluir especificaciones de diseño y procedimientos de optimización para parámetros de proceso.

Módulo de resultados. En este módulo se obtiene el valor de la función objetivo. Durante la simulación se generan gran cantidad de códigos de error y advertencias que pueden significar la violación de alguna restricción, por lo que en este módulo se tiene que dar tratamiento a las restricciones.

Gross et al. plantean el tratamiento de restricciones mediante una función de castigo. La función de castigo puede implementarse mediante un solo valor al ocurrir cualquier error o mediante la aplicación de castigos individuales según el tipo error presentado. La primera estrategia lleva a la reducción de la región factible debido a que los parámetros son restringidos en una forma más severa lo cual puede ocasionar no encontrar una región factible. Mediante la segunda estrategia se crea una topología de la función objetivo que lleva a las regiones donde no existen mensajes de error y resulta útil para encontrar zonas factibles.

Para demostrar la funcionalidad de su implementación plantean la síntesis de secuencias de destilación y síntesis del proceso de hidrodealquilación de tolueno.

Para la síntesis de secuencias de destilación consideran una mezcla de propano, butanos y pentanos (5 componentes), destiladores simples de una alimentación dos productos con presión de 5 atm, un servicio de enfriamiento y uno de calentamiento. Las columnas fueron calculadas rigurosamente en ASPEN y el plato de alimentación fue estimado a partir de ecuaciones de Winn-Underwood-Fenske. Los resultados se compararon con los obtenidos mediante la optimización del plato de alimentación, presión de las columnas y servicios auxiliares. En cada caso se logró una disminución en el costo anualizado al incluir más parámetros de optimización.

El proceso de hidrodealquilación del tolueno fue presentado por Douglas (1988) y se utilizaron los datos y restricciones originales. La solución de este problema lleva a la selección del equipo que minimiza el costo por mol producido.

Esta implementación es clasificada como externa debido a que el control del problema de optimización y síntesis es llevado por el AG el cual interactúa con el simulador en forma de un llamado de ejecución. Los cuatro módulos anteriormente descritos sirven de interfaz entre AG y simulador. Gráficamente esta estrategia se puede representar de acuerdo a la Figura 2-5.

La implementación externa del AG aumenta el tiempo de convergencia de la optimización ya que se tiene que el procedimiento de evaluación de los individuos incluye la generación de archivo de entrada (Input file), procesamiento de datos, cálculo y convergencia del diagrama de proceso. Sin embargo, su paralelización es obvia ya que la ejecución de la simulación es fácil de distribuir.

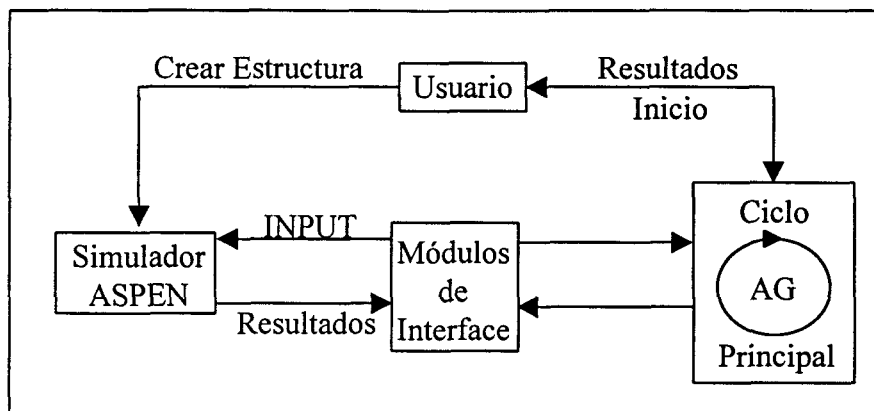


Figura 2-5. Implementación Externa del AG.

Siguiendo el enfoque externo Tayal et al. (1999) reportan la optimización del diseño de intercambiadores de calor acoplando el simulador ST-5 del Instituto de Investigación en Transferencia de Calor (HTRI, por sus siglas en inglés) con un AG. En esta implementación se realizan análisis de vibración y factibilidad asignando castigos a los individuos que no cumplan con los criterios. De acuerdo a las diferentes funciones objetivo estudiadas (minimizar el área o los costos) reportan estrategias consistentes en diferentes valores en los parámetros del algoritmo (tamaño de población, probabilidad de selección, cruce y mutación). Además se incluye el operador de migración el cual sustituye una parte de la población existen por individuos generados aleatoriamente.

Tayal et al (1999) plantean dos formas de mejorar el desempeño del AG: (a) la adaptación al AG de mecanismos como algoritmos híbridos y procesamiento en paralelo; y (b) la optimización de los parámetros del AG. De acuerdo a la segundo opción reportan diferentes mejoras en el desempeño del AG.

b) Implementación mediante la Interacción Interna (García, 1997)

Esta implementación de AG en ASPEN se basa en la modificación de la secuencia de cálculo y la introducción de 4 subrutinas para control del algoritmo de optimización.

La modificación de la secuencia de cálculo incluye el establecimiento de un bloque de sensibilidad (S-1) sobre un parámetro falso que se hace variar hasta igualar el número de generaciones por el tamaño de población. Este bloque de sensibilidad se introduce para la evaluación de todos los individuos evolucionados en el transcurso del algoritmo.

Las subrutinas para el control del algoritmo son de inicialización, inicio de generación, termino de generación y terminación.

Subrutina de inicialización (F-1). Esta subrutina lee los parámetros del AG (tamaño de población, número de variables, probabilidad de cruce y mutación, etc.) y crea los

archivos de control los cuales se accesaran para lectura y escritura el resto de la ejecución. También se encarga de generar la primera generación.

Subrutina de inicio de población (F-2). Se ejecuta una sola vez al comienzo de la generación, se encarga de decodificar los cromosomas y obtener los valores reales de los parámetros de optimización. En ella se controlan las restricciones manejadas por codificación.

Subrutina de fin de población (F-3). Esta subrutina muestra los resultados requeridos para la evaluación de la función objetivo, checa que si se cumplen las restricciones aplicando funciones de castigo en caso necesario y evalúa la función objetivo. Mediante un contador identifica el termino de un población y manda a llamar a la subrutina que realiza los operadores del AG.

Subrutina de terminación (F-4). Al termino de la evaluación de todas las generaciones esta subrutina toma el valor del mejor individuo encontrado y lo despliega en el panel de control de aspen.

La secuencia de cálculo para la implementación del AG estaría dada por:

(F-1)
 (S-1) (F-2) (Bloques de Proceso) (F-3) (Regresar a S-1)
 (F-4)

Para el caso de la minimización de una columna de destilación en la que bloques de proceso son la columna (DSCOL) y el costeo de la misma (CTCOL) y la secuencia de cálculo estaría dada por:

(F-1)
 (S-1) (F-2) (DSCOL) (CTCOL) (F-3) (Regresar a S-1)
 (F-4)

Si en el caso anterior se tuviera que cumplir con alguna especificación de diseño la cual necesitara un bloque de convergencia (CONV) la secuencia de cálculo estaría dada por:

(F-1)
 (S-1) (F-2) (CONV) (DSCOL) (Regresar a CONV)
 (CTCOL) (F-3) (Regresar a S-1)
 (F-4)

Para el manejo de las restricciones se proponen tres alternativas. La primera alternativa es mediante la codificación. Al establecer una codificación adecuada de los parámetros se aseguran que no se generarán individuos que violen las restricciones. El AG puede manejar restricciones de los tipos $L_i < X < L_s$ y $X_1 < X_2 < L_s$ ó $L_i < X_1 < X_2$ (donde L_i es un límite inferior y L_s es el límite superior) de manera natural en la codificación. Otra alternativa es la utilización de funciones castigo las cuales se proponen aplicar

proporcionalmente a la distancia entre el individuo y la restricción de esta manera se puede extraer información de los individuos no factibles y evolucionarlos a individuos factibles. La tercera alternativa es la implementación de restricciones durante la selección de torneo. Al momento de realizar la selección de torneo, cuando un individuo viola alguna restricción automáticamente se selecciona otro individuo que no viole las restricciones. En el caso de que todos los individuos violen restricciones se escoge al de mejor aptitud.

La implementación fue probada utilizando diferentes ejemplos de optimización de equipos individuales (columnas de destilación por métodos cortos y rigurosas además de destilación extractiva) empleando una probabilidad de mutación de 0.009, 0.9 de probabilidad de cruce, selección de torneo binario y 20 de tamaño de población. Un estudio más detallado sobre estos parámetros fue realizado por Torres (2000) definiendo rangos óptimos para cada parámetro.

Esta implementación se considera interna debido a que el control de la optimización se encuentra dentro del ambiente del simulador. Gráficamente esto se puede representar de acuerdo a la Figura 2-6.

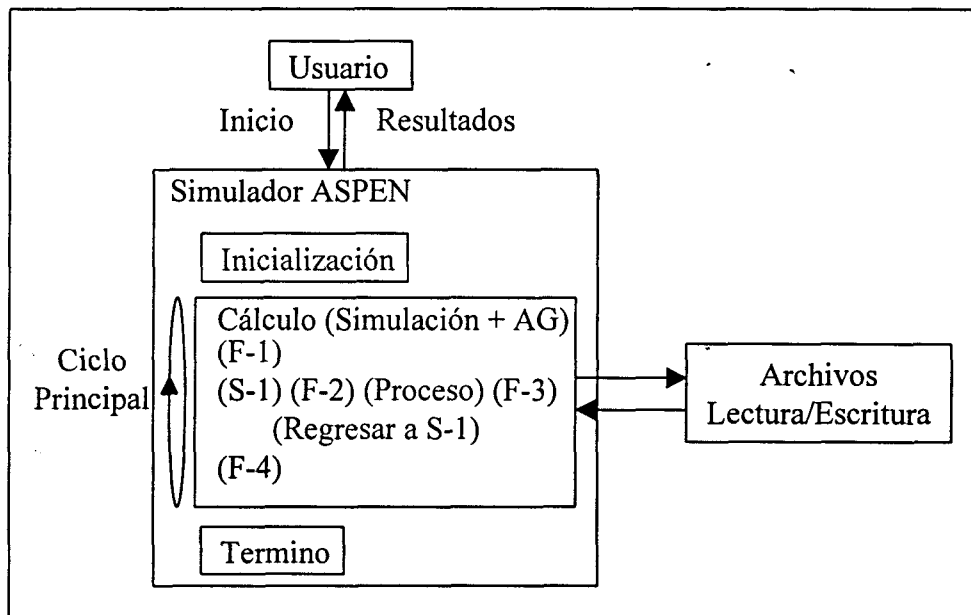


Figura 2-6. Implementación Interna de un AG

La implementación interna es eficiente en cuanto que no requiere creación de archivos de entrada (Input file) e inicialización del simulador (análisis de datos y diagrama de flujo) se realiza únicamente una vez. La implementación de una estrategia de camino no factible para la disminución del tiempo de convergencia es posible debido a que el ciclo de ciclo de convergencia del simulador es ejecutado dentro del AG. Sin embargo, su paralelización es más complicada al requerir coordinar la convergencia de varias

simulaciones dentro de una simulación principal, esto es que dentro de una corrida de ASPEN se distribuyan, ejecuten y coordinen varias corridas.

2.3 Metas Alcanzadas y Futuras Líneas de Investigación para la Síntesis de Procesos

En 1996 Grossmann y Daichendt (1996) realizaron una reseña de los logros más importantes alcanzados en el área de síntesis de procesos. Enfocaron su revisión en cinco áreas de síntesis: (a) diagramas de proceso. Se identificaron dos corrientes de investigación, la descomposición jerárquica y la programación matemática; (b) subsistemas de proceso. Ha sido enfatizada en el manejo de energía y en el entendimiento de la síntesis de sistemas no ideales de separación y sistemas de reacción.; (c) redes de intercambio de calor. Alcanzaron un nivel de madurez mediante el planteamiento y solución de problemas MINLP con la ventaja de poder ser incorporados a la síntesis de otros modelos; (d) secuencias de destilación. Se han desarrollado métodos heurísticos, de enumeración, evolutivos y de análisis termodinámicos para la separación no convencional (separaciones no completas, Petlyuk, agotadores y enriquecedores laterales, enfriadores y calentadores laterales, etc.); (e) redes de intercambio de masa. Surgieron motivadas por aplicaciones de recuperación de desechos y han llegado a la formulación de problemas MINLP y se han extendido a la síntesis de sistemas de destilación integradas energéticamente; y (f) redes de reactores. Han sido sintetizadas a partir de superestructuras de reactores con recirculación en serie y mediante un formulación de problemas MINLP.

Con base a su revisión plantearon ocho líneas de investigación que consideraron las más importantes y retadoras para el desarrollo de la síntesis de procesos.

- Integración de metodologías. Las metodologías existentes que emplean reglas heurísticas, métodos termodinámicos y modelos matemáticos se deberán integrar conceptualmente consistentes y de manera rigurosa.
- Desarrollo de superestructuras a diferentes niveles de abstracción. Superestructuras de distinto grado de complejidad no deberán ser vistas como representaciones diferentes. Sistemáticamente se deberán simplificar las superestructuras de mayor complejidad en superestructuras más básicas y viceversa manteniendo el mismo espacio de factibilidad.
- Generación de nuevas superestructuras para diagramas de proceso. Se deberán generar sistemáticamente superestructuras para procesos que involucren diferentes tipos de actividades o que existan no linealidades incorporando la posibilidad de intensificación.

- Nuevas aplicaciones. La síntesis se deberá extender a la selección de caminos de reacción, diseño de moléculas, diseño de arreglos de tuberías y síntesis de procesos batch.
- Reducción del espacio de búsqueda. Es importante que los problemas de mayor magnitud sean trabajados eficientemente sin sacrificar la optimalidad de la solución.
- Optimización global. Se necesitan desarrollar métodos de optimización relevantes a la síntesis de procesos que aseguren una optimización global y no estén limitados por óptimos locales causadas por no convexidades.
- Manejo de modelos rigurosos. Técnicas que sean capaces de manejar explícitamente modelos rigurosos o que sean compatibles con ellos.
- Síntesis de procesos con múltiples objetivos. La síntesis de procesos deberá permitir la determinación del equilibrio entre diferentes metas propuestas de manera que se puedan incluir criterios de operabilidad, seguridad y aspectos ambientales.

La definición de los logros alcanzados y las metas futuras de la síntesis de procesos se ve influenciada en gran medida en el enfoque de modelación matemática propio de los autores aunque muchos de los logros y metas futuras son compartidas por métodos de optimización no basados en modelación matemática como los AG.

En la actualidad se muchos de estos retos son incorporados en las aplicaciones y desarrollos de nuevas investigaciones.

Se han creado metodologías sistemáticas para la construcción y desarrollo de superestructuras para el planteamiento de problemas de optimización. La aplicación de metodologías para la incorporación de restricciones lógicas (Raman y Grossman, 1992) y la implementación de métodos que permiten manejar implícitamente estas restricciones (Fraga y Senos Matías, 1996; Wang et al., 1998) han reducido el espacio de búsqueda haciendo más eficiente la solución de problemas de optimización permitiendo incorporar modelos cada vez más rigurosos (Dünnebier y Pantelides, 1999). Además, herramientas como los simuladores modulares secuenciales han sido utilizadas para la optimización y síntesis de procesos (Diwekar, 1999; Gross y Rossen, 1998; García, 1997) facilitando la incorporación de estos modelos. De igual forma criterios seguridad, operabilidad e impacto ambiental han sido incorporados al proceso de síntesis, diseño y optimización de procesos. Por último, se han desarrollado métodos matemáticos que no se quedan atrapados en óptimos locales siendo capaces encontrar el óptimo global y en forma paralela métodos no matemáticos plantean algoritmos de búsqueda alternos que han demostrado su efectividad para encontrar el óptimo global.

La utilización de AG y su implementación en simuladores modulares secuenciales permitirá principalmente el desarrollo de las siguientes áreas:

- Nuevas Aplicaciones. Al conservar la característica modular en la implementación del AG, su utilización dentro otros simuladores modulares es de manera directa por lo que el número de aplicaciones es considerablemente mayor comparado con los métodos que interactúan no secuencial con la evaluación de la función objetivo.
- Reducción del espacio de búsqueda. La incorporación de restricciones lógicas y de proceso en la generación de superestructuras y la optimización de procesos se puede realizar de manera implícita en los procesos de codificación y decodificación en la evolución del AG asegurando que los individuos no factibles sean identificados antes de su evaluación.
- Optimización global. Aunque no hay una comprobación rigurosa que asegure la obtención de un óptimo global, las características del AG facilitan que no se quede atrapado en un óptimo local. El partir de una población de individuos expande el área de búsqueda y hace que el AG no sea tan dependiente del valor inicial. La utilización de operadores de cruce y mutación pondera de manera óptima el esfuerzo realizado en el aprovechamiento de la información ya obtenida con la exploración de nuevas regiones de la función objetivo (Gross y Rossen, 1997).
- Manejo de Modelos Rigurosos. Siendo una de las características principales de los simuladores modulares secuenciales, el manejo de modelos rigurosos es una de las ventajas de la implementación de métodos de optimización en estos ambientes. Así mismo, los simuladores proveen de los métodos numéricos necesarios para la evaluación del diagrama de flujo de proceso por lo que el optimizador no requiere en sí mismo lograr la convergencia del proceso.
- Optimización Multiobjetivo. La optimización multiobjetivo puede ser vista como una optimización con restricciones debido a que en ambos casos la función objetivo tiene que cumplir con varias funciones. Debido a que el AG es un método de optimización restringido implícitamente (límites de codificación y decodificación) su formulación hacia una optimización multiobjetivo es atractiva.

CAPITULO 3: Optimización de un Sistema de Destilación Acoplado Energéticamente.

3.1 Antecedentes

En la producción de fibras acrílicas la recuperación de solvente, separación de dimetil formamida (DMF) y agua, consume la mayor parte de la energía del proceso en forma de vapor para los hervidores de las columnas de destilación.

En la actualidad en la planta CRYSEL de CYDSA, en Guadalajara, cuentan con varias líneas de destilación para este propósito. Una línea de destilación está formada por dos columnas acopladas energéticamente de manera que el servicio de vapor de la primera columna se provee por el destilado de la segunda. La primera columna, llamada preconcentradora, tiene una alimentación de una solución de baja concentración DMF. El residuo de esta columna se alimenta a la segunda columna, llamada deshidratadora, para obtener una corriente concentrada de DMF.

Para la optimización de la operación de las líneas de destilación se implementó un algoritmo genético en el simulador comercial ASPEN.

3.2 Modelación del Proceso

Debido a la complejidad de este sistema de destilación acoplado energéticamente el desarrollo del modelo y la optimización se realizó en varias etapas descritas a continuación:

3.2.1 Simulación Rigurosa del Proceso

Para la optimización del proceso se requiere de un modelo que reproduzca el comportamiento del sistema a las condiciones de operación y sea capaz de predecir su comportamiento en el rango de optimización. Este modelo se genera con base en un modelo proporcionado por personal de planta verificando que los datos del modelo correspondan a las características físicas del equipo de proceso para lo cual se consultaron planos de construcción de las columnas e intercambiadores de calor. El diagrama de proceso para el modelo generado se muestra en la Figura 3-1. Para que el modelo representara la operación real del proceso se ajustaron las eficiencias de las etapas de las columnas de destilación y en los coeficientes de transferencia de calor de los intercambiadores.

Mediante el análisis del diagrama de flujo y un algoritmo de corte, el simulador determina que para la solución de este modelo se requieren cuatro corrientes de corte convergidas simultáneamente por el método de Wegstein. Debido a la dificultad para lograr la convergencia, el número de iteraciones permisibles fue aumentado en cada bloque de simulación, como resultado el tiempo de convergencia del modelo es de aproximadamente sesenta minutos.

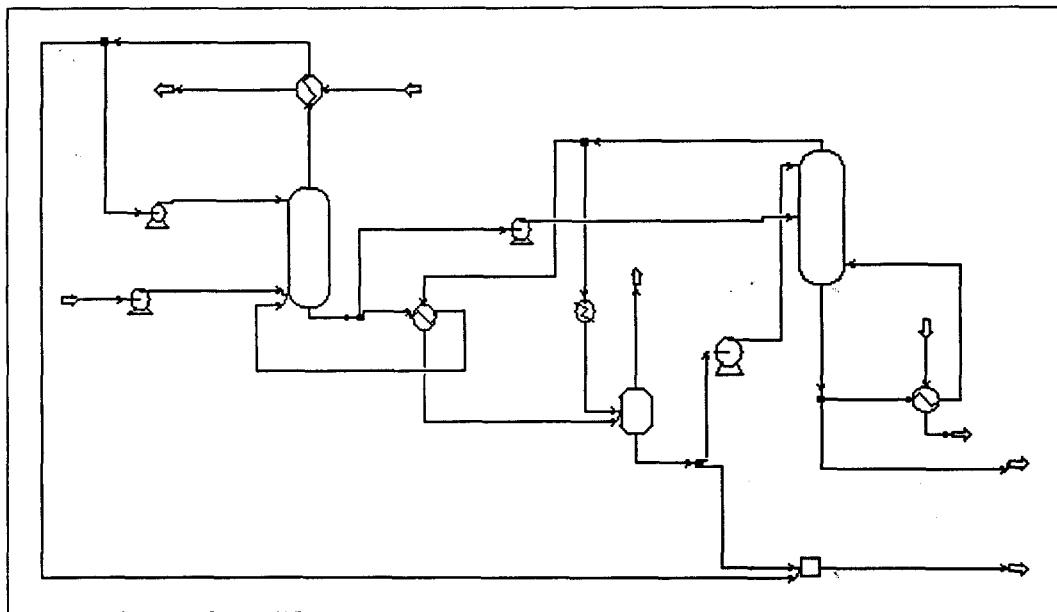


Figura 3-1 Diagrama de Proceso para el Sistema de Destilación.

Para un análisis preliminar del modelo se incluyeron especificaciones de diseño para el condensador de la primera columna y los hervidores. Al agregar las especificaciones de diseño la convergencia del modelo se complica ya que se requiere de un reciclo para la convergencia de cada especificación de diseño. Para disminuir el tiempo requerido, aproximadamente sesenta minutos, para la convergencia del modelo se especifican de forma manual las corrientes de corte, los métodos numéricos para la convergencia de estas y las especificaciones de diseño. De esta manera el tiempo de convergencia se disminuye a aproximadamente veinte minutos ante una inicialización y de cinco a siete minutos ante un cambio de parámetros del modelo. La convergencia del modelo obtenido se lleva a cabo mediante cuatro ciclos, uno externo par las corrientes de corte y tres internos para las especificaciones de diseño.

Para la convergencia externa del sistema se requiere, además de la convergencia de los ciclos internos y externos, la convergencia individual de cada bloque de procesos. Esto se da cuando: i) todas las variables (temperatura, presión y flujos de los componentes) de las corrientes de corte y, ii) todas las variables de los bloques no varían o lo hacen dentro de un intervalo menor a la tolerancia entre dos iteraciones sucesivas; y cuando: iii) todas las especificaciones de diseño son cumplidas. Para que un ciclo externo se considere convergido se requiere que todos sus ciclos internos converjan. Para lograr la convergencia se resuelven iterativamente los bloques incluidos en el reciclo, en el caso de un ciclo interno, este se itera hasta convergencia o un número máximo de iteraciones en cada iteración del ciclo externo.

El número de evaluaciones de la función objetivo requeridas durante la evolución de un AG hace que a pesar de la disminución del tiempo de convergencia alcanzada mediante la definición de las corrientes de corte y los métodos numéricos, esta no sea satisfactoria. Para lograr un tiempo mínimo de convergencia del proceso se analizaron varios factores:

- Número de iteraciones internas para la convergencia en cada bloque de proceso. La convergencia de los bloques RADFRAC de las columnas de destilación y los bloques HEATX de los intercambiadores de calor requiere de iteraciones internas. Estas iteraciones se realizan para cada iteración externa de la convergencia del proceso. Al aumentar el número de iteraciones internas se asegura que el bloque converja en cada iteración externa pero esto incrementa el tiempo de ejecución aun en iteraciones externas donde el proceso no ha convergido. Por otro lado, existe un número mínimo de iteraciones internas necesarias para que el bloque converja y permita la convergencia externa del proceso.
- Inicialización de los bloques. Para la evaluación de un bloque se tiene la opción de inicializarlo, esto es de no tomar los resultados anteriores como aproximaciones iniciales para la iteración actual. Al no inicializar los bloques se disminuye el tiempo de convergencia del bloque cuando las aproximaciones iniciales corresponden a una evaluación que converge o es estable numéricamente. Cuando no se inicializan los bloques y se toman valores iniciales correspondientes a una evaluación que no convergió, puede ocasionar que no converja la iteración actual o que, en el peor de

los casos, además ocurra un error severo y afectar la convergencia de externa o de puntos de evaluación futura. Este efecto puede seguir propagándose de evaluación en evaluación.

- Tolerancia de los métodos de convergencia. Al ser un método numérico iterativo la convergencia se logra cuando los valores de todas las variables convergen de forma individual. Una variable converge cuando su valor en la iteración presente es igual al valor en la iteración anterior en un rango igual a la tolerancia. Una tolerancia muy pequeña resulta en un mayor precisión pero mayor tiempo de convergencia ya que requerirán más iteraciones para que las variables estén dentro de su tolerancia. Una tolerancia mayor resulta en menor tiempo de convergencia pero también en errores por falta de precisión.

3.2.2 Función Objetivo y Manejo de Restricciones

La función objetivo de la optimización de procesos debe ser expresada a través de una función donde se maximice el criterio de rendimiento. Para el sistema de recuperación de DMF donde los equipos, los requerimientos (demanda del producto) y la alimentación al sistema se considera constante la minimización de los costos de operación resulta ser la más adecuada.

Para este sistema los costos de operación a considerar son el costo del vapor, costo de agua de enfriamiento y el costo de energía de las bombas. Debido al alto consumo de vapor y a que su costo es considerablemente mayor al del agua de enfriamiento y al de bombeo se consideró que la función objetivo consideraría únicamente al vapor. Para tener una base de comparación se debe establecer la función objetivo como costo de vapor por kilogramo de producto (por ejemplo: pesos / kilogramo DMF concentrada) si se considera que el costo por kilogramo del vapor es independiente a la cantidad consumida la función se puede expresar como la relación vapor / producto (kilogramo de vapor consumido / kilogramo de DMF concentrada).

El modelo planteado, además de las restricciones implícitas de los bloques de simulación, está sujeto a las restricciones de una concentración de DMF mínima en el producto (residuo de la columna deshidratadora) y una concentración máxima de DMF en los subproductos (destilados de la columna preconcentradora y deshidratadora). Debido a estas restricciones el balance de materia global del sistema queda restringido por lo que la función objetivo puede expresarse únicamente en función del consumo de vapor (kilogramos de vapor). El modelo puede expresarse como:

$$\min S$$

s.a.
restricciones implícitas

$$x_{D1} \leq x_{m\acute{a}x1}$$

$$x_{D2} \leq x_{m\acute{a}x2}$$

$$x_{R2} \geq x_{m\acute{i}n2}$$

Donde las restricciones implícitas son balances de materia y energía, relaciones de equilibrio, ecuaciones de diseño de los bloques, etc.

Debido a que las restricciones sobre la concentración del destilado de ambas columnas son equivalentes y que las corrientes de proceso se mezclan se pueden sustituir por una de la misma forma sobre la fracción másica de la mezcla ($x_m \leq x_{m\acute{a}x}$), de esta forma además se agrega un grado de libertad al problema.

Para el manejo de las restricciones se utilizan funciones castigo sobre el valor absoluto del error tanto para la concentración en el destilado como en el residuo. El peso del castigo se fija considerando que una evaluación con una desviación de igual magnitud a la tolerancia de la simulación sea admitido como factible. De esta manera el modelo se puede expresar como:

$$\min S + k \cdot (E_1 + E_2)$$

s.a.
restricciones implícitas

$$\text{abs}(x_D - x_{m\acute{a}x}) \leq \epsilon$$

$$\text{abs}(x_{R2} - x_{m\acute{i}n2}) \leq \epsilon$$

3.2.3 Optimización del Proceso mediante una Estrategia de Camino Factible

Para la optimización del sistema de destilación se implementó un AG con estrategia de camino factible según el procedimiento descrito por García (1997) . Una estrategia de camino factible es en la cual para la evaluación de la función objetivo, el diagrama de proceso (es decir, la simulación) se itera hasta converger. Esto requiere la convergencia de corrientes de cortes ciclos internos, externos y especificaciones de diseño para cada individuo.

El tiempo de convergencia del modelo y el gran número de evaluaciones requeridas hace que la evolución de un AG en un modelo riguroso sea altamente demandante de tiempo por lo que, aunque la estrategia se implementó y debiera llegar a la convergencia de la optimización, no se evolucionaron más de 150 generaciones.

Para lograr disminuir el tiempo de convergencia del modelo se simplifica el diagrama de proceso sin sacrificar la precisión y representatividad de las condiciones reales. El

condensador de la primera columna se incluye en el bloque de esta especificando una temperatura de reflujo y condensado y una relación de reflujo. De forma similar el hervidor de la segunda columna se incluye en el bloque especificando el flujo de calor (carga térmica) del hervidor. Estas simplificaciones suponen que la transferencia de calor no está limitada por las condiciones físicas de los intercambiadores de calor. El diagrama de proceso se muestra en la Figura 3-2. Al realizar estas simplificaciones ya no se requiere de los ciclos de convergencia para las especificaciones de los intercambiadores de calor por lo que la solución del modelo requiere únicamente de dos corrientes de corte y una especificación de diseño las cuales pueden ser convergidas por un único bloque de convergencia.

Al simplificar del modelo el tiempo de convergencia se reduce a aproximadamente un minuto de manera que, aunque la evolución del AG requiere de varias horas, es factible la convergencia del algoritmo.

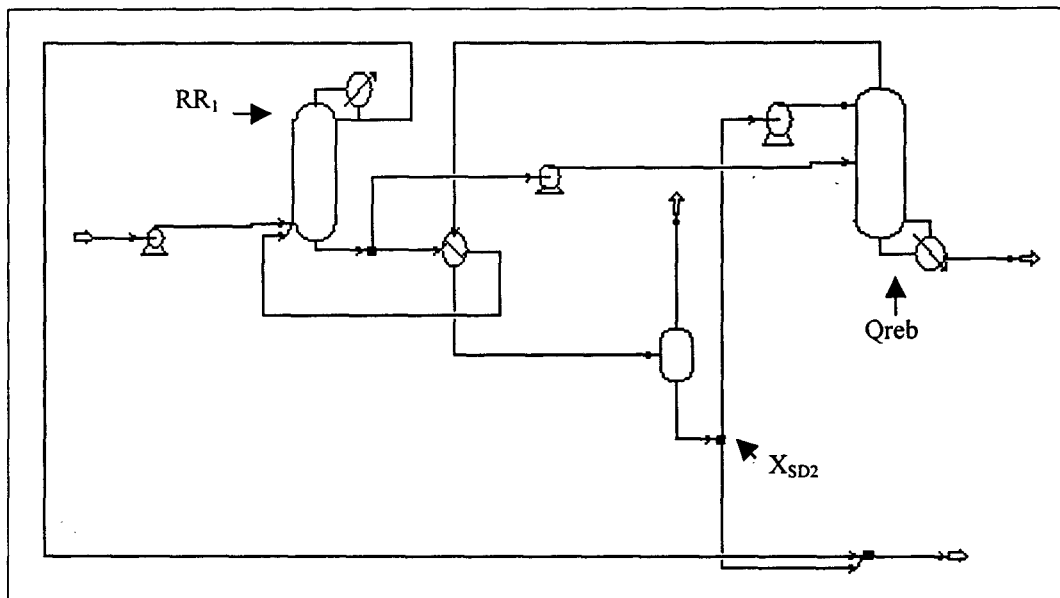


Figura 3-2 Diagrama de Proceso Simplificado para el Sistema de Destilación.

3.2.3.1 Implementación

Para la optimización del diagrama de flujo simplificados se realizaron cinco corridas. Las variables de optimización son: (a) la razón de reflujo de la columna preconcentradora; (b) la fracción de división de flujo equivalente a la razón de reflujo de la columna deshidratadora. La variable a optimizar es la carga del hervidor de la columna deshidratadora. Las corridas se hicieron con 50 individuos y se evolucionaron 100 a 150 generaciones. Estos parámetros se codificaron según la Tabla 3-1.

Tabla 3-1 Codificación de Parámetros
Estrategia de Camino Factible.

Parámetro	L.I.	L.S.	Nposib.	Nbits
RR ₁	0.25	0.35	128	7
X _{SD2}	0.45	0.65	128	7
Q _{reb}	6.5	8.5	128	7

Donde:

RR₁ = Razón de Reflujo de la columna preconcentradora.

X_{SD2} = Fracción de división para divisor de flujo para el destilado de la columna deshidratadora. Es equivalente al reflujo mediante la conversión $X_{SD2} = RR_2 / (RR_2 + 1)$.

Q_{reb} = Carga del hervidor de la columna deshidratadora.

L.I. = Límite Inferior. Valor mínimo que puede tomar el parámetro.

L.S. = Límite Superior. Valor máximo que puede tomar el parámetro.

Nposib. = Número de Posibilidades. Número de valores que puede tomar el parámetro.

Nbits = Número de bits necesarios para codificar Nposib valores, tal que $2^{Nbits} = Nposib$.

En la primer implementación se observó que la convergencia del modelo era muy inestable. Errores de convergencia de un individuo se propagaban a las evaluaciones de los siguientes ocasionando que el AG no se llevara a cabo satisfactoriamente. Para solucionar este problema, se utilizó como primera opción la inicialización de todos los bloques del diagrama de flujo de proceso la cual no fue suficiente para solucionar la propagación de errores.

Al observar los códigos de error desplegados en el panel de control se observó que la causa principal radicaba en la no convergencia de la columna preconcentradora. Las iteraciones de esta columna con una razón de reflujo codificada por el individuo a evaluar no convergían adecuadamente. Para solucionar esto se implementó una especificación de diseño de tal forma que mediante la razón de reflujo se obtuviese un destilado al 0.01% de DMF lo cual corresponde a la composición máxima permisible. De esta forma únicamente se codifican dos parámetros.

3.2.3.2 Resultados

En las corridas efectuadas el AG encontró dos puntos "óptimos". El primer punto, obtenido únicamente en una corrida, corresponde a una carga del hervidor de 7.08 MMkcal/hr y una fracción de división de flujo de 0.4564, equivalente a una razón de reflujo de 0.3133. El segundo punto, obtenido en las cuatro corridas restantes, corresponde a una carga del hervidor de 7.98 MMkcal/hr y una fracción de división de

flujo de 0.6263, equivalente a una razón de reflujo de 0.3851. Las condiciones de operación reportadas corresponden a una carga de 7.60 MMkcal/hr y una fracción de división de 0.5700, equivalente a una razón de reflujo de 0.3630, por lo que el primer punto óptimo corresponde a un 6.84% de disminución la carga del hervidor. En contra parte, el segundo punto corresponde a un aumento del 5.00%.

Cada punto óptimo obtenido se evaluó en el modelo riguroso para corroborar el cumplimiento de las restricciones y posibles errores numéricos. El resultado fue satisfactorio en ambos casos.

La convergencia de los parámetros es lograda de forma satisfactoria durante la evolución del AG. Un comportamiento típico de los variables de optimización y su promedio se muestra en las Figuras 3-3 y 3-4.

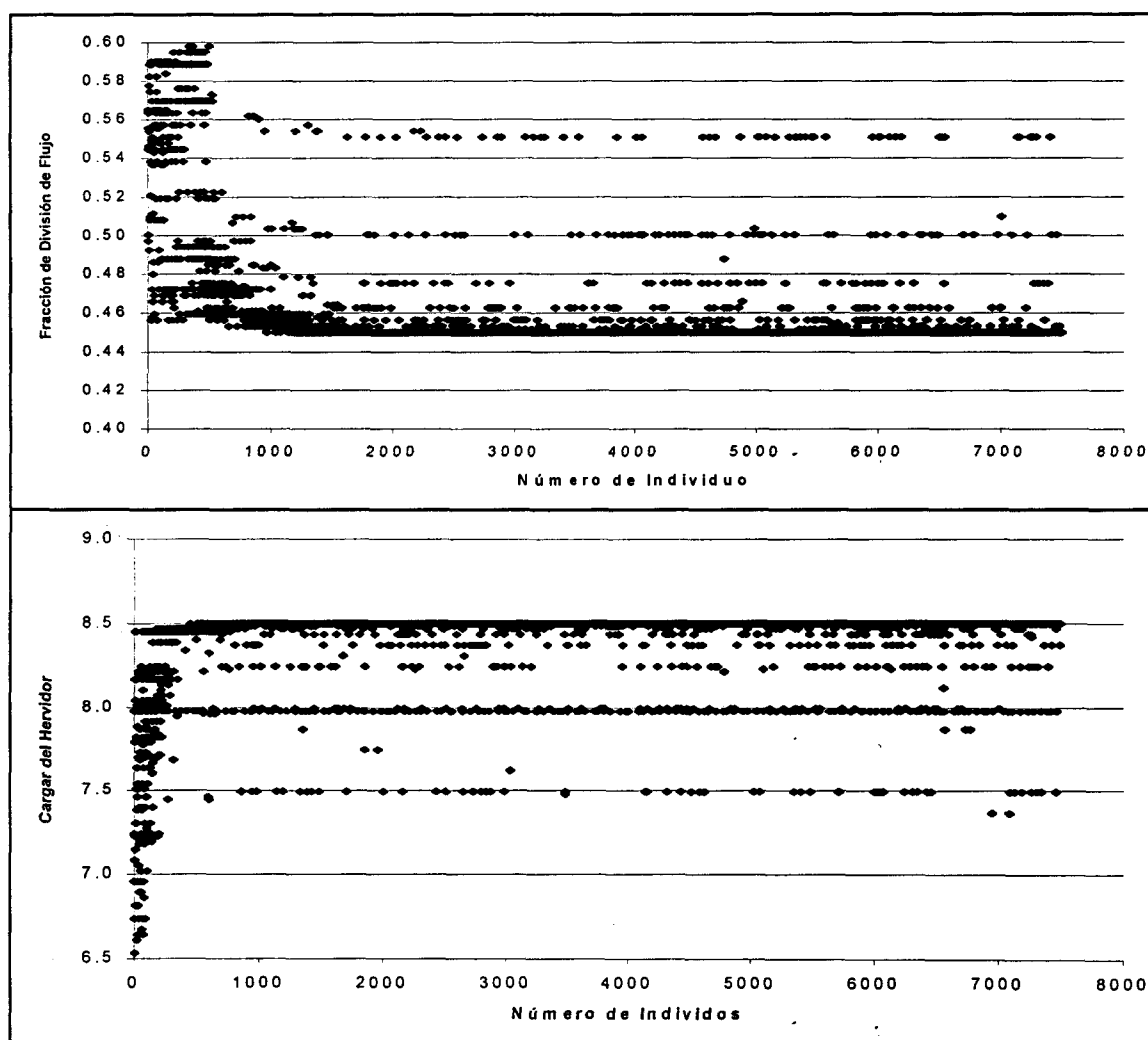


Figura 3-3. Convergencia de las Variables de Optimización.

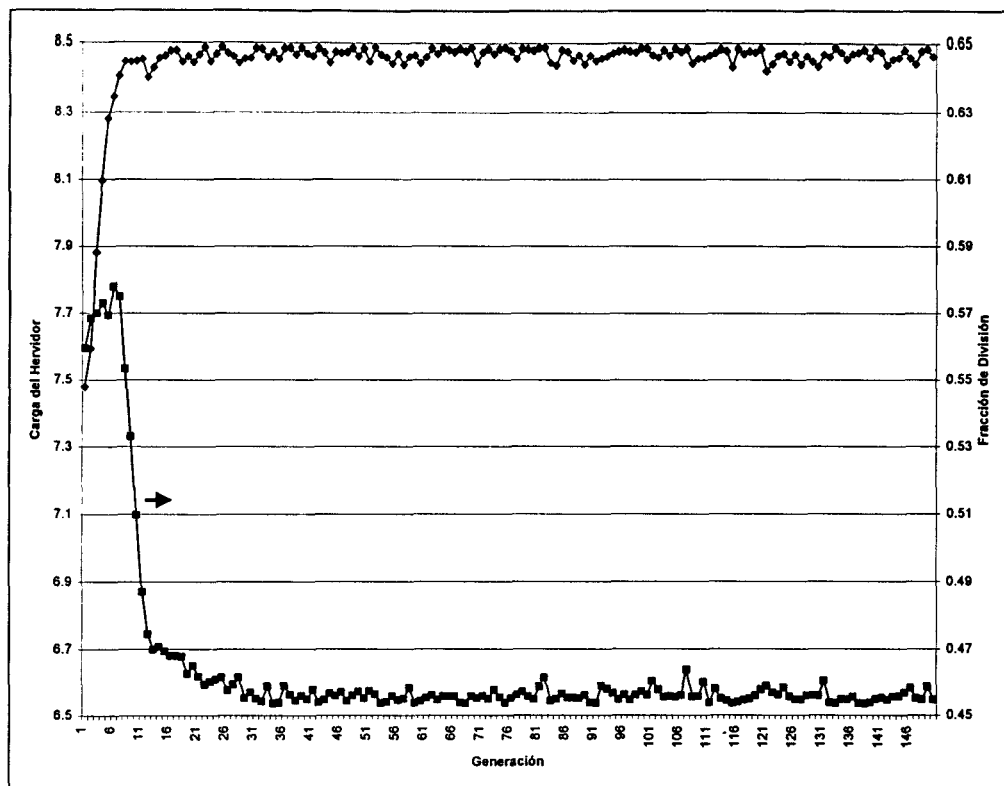


Figura 3-4. Convergencia del Promedio de las Variables de Optimización.

3.2.3.3 Discusión de Resultados

Existen varios puntos a discutir referente a la optimización del sistema de destilación resuelto:

- Evaluación del modelo. El acoplamiento energético de las columnas de destilación hace necesario utilizar métodos numéricos robustos para su solución. Se requiere el ajuste de los parámetros propios de estos métodos de manera que la solución del modelo sea robusta y de resultados confiables. Para la solución de este modelo se propusieron las corrientes de corte especificando la secuencia de solución de manera manual, se agruparon corrientes de corte y especificaciones de diseño de tal forma que el número de iteraciones se minimizara y se ajustaron los valores de los parámetros del método numérico seleccionado. Como resultado, se obtuvo un modelo robusto con un mínimo tiempo de ejecución.
- Estrategias y convergencia del AG. Para la solución de este problema se utilizó un AG simple y los valores de los parámetros recomendados por Torres (2000). Se obtuvieron individuos factibles que minimizan el consumo de energía del sistema. En la evolución del AG se logra la convergencia (fenotípica y genotípica) de las

variables de optimización. Aunque la complejidad del problema resuelto, debida a la rigidez numérica, tener una zona factible limitada, dificulta el estudio de los parámetros y características del AG, se obtuvieron resultados satisfactorios. Se debe considerar que existen estrategias avanzadas, como elitismo, “niche”, algoritmos no generacionales, métodos de selección y cruce, que pudieran mejorar el desempeño del AG.

- Funciones castigo y factibilidad de los individuos. Debido a la pureza requerida el espacio de optimización es pequeño por lo que el problema se puede visualizar como el encontrar individuos factibles (numérica y por restricciones). La utilización de funciones castigo para el manejo de restricciones asegura que el mejor encontrado sea un individuo factible. Sin embargo, el no poder identificar códigos de error en la evaluación del individuo hace necesaria el corroborar la factibilidad numérica del mismo. Funciones de castigo muy drásticas o severas causan problemas de convergencia prematura y no dejan la evolución de individuos factibles. La función de castigo utilizada, proporcional al valor absoluto de error, logra equilibrar el aseguramiento de la factibilidad con la convergencia necesaria. Comparado con un método matemático donde el encontrar una solución depende de partir de un individuo factible, el AG es capaz de evolucionar y encontrar la región factible.
- Topología de la función objetivo. Las dificultades encontradas en la optimización del problema planteado, hacen pensar que la función objetivo es muy sensible a los parámetros de optimización. Por lo que, se efectuó un “mapeo” de la función, ver Figura 3-5, en el cual se aprecian áreas dispersas donde se puede alcanzar una composición en el producto que cumpla con las restricción de pureza. A estas zonas factibles les faltaría cumplir con la restricción de pureza en el destilado, por lo que el área factible está sobrestimada. La topología de la función, con óptimos locales y pendientes tan pronunciadas hacen que la solución al problema se dificulte para cualquier método matemático.

Para explicar la forma de la función objetivo y sus zonas de factibilidad, consideremos que cada columna de destilación tiene una región donde se cumple el balance de materia y energía. Para el problema planteado, en la primer columna estos balances están fijos mediante la especificación de diseño para la composición del destilado y por el acoplamiento de energía de forma que la composición del residuo es la única variable libre. De manera similar, para la segunda columna se tiene que la carga del hervidor y la división de flujo son variables de optimización y las composiciones están fijas por restricciones explícitas. Esto genera que cada una de estas áreas esté completamente definida y delimitada. Ahora bien, el balance de materia y energía del sistema de destilación (ambas columnas) se cumple únicamente en la intersección de las regiones donde se cumple el balance de energía del intercambiador de calor del acoplamiento. A estas restricciones hay que agregar las originadas por la existencia de una carga térmica y razón de reflujo mínimas para cada columna. Además, para la columna deshidratadora, el aumentar la carga térmica del hervidor puede ocasionar que el calor no pueda ser transferido completamente mediante el acoplamiento y generar la formación de la fase vapor en el evaporador

instantáneo (“flash”) que se encuentra justo antes del divisor de flujo para el reflujo de la columna deshidratadora. Al generarse esta fase se tiene un efecto inverso de la carga del hervidor sobre la razón de reflujo (se pensaría que al aumentar la carga del hervidor se pudiera aumentar la relación de reflujo pero en este caso sería inverso).

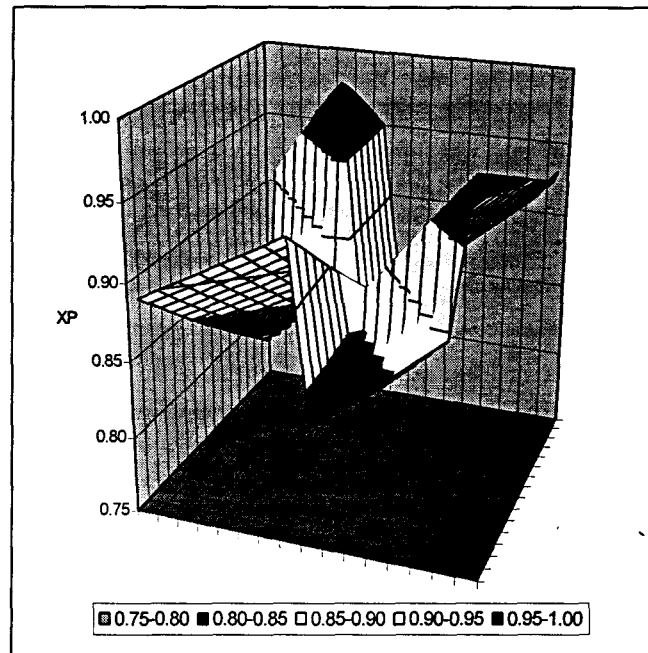


Figura 3-5 Topología de la Función Objetivo

A pesar de las interacciones expuestas anteriormente los AG fueron capaces de encontrar los óptimos locales en las zonas de factibilidad de la función.

3.2.4 Optimización del Proceso mediante una Estrategia de Camino No Factible

Como una alternativa a la estrategia de camino factible se implementa la estrategia de camino no factible. En esta estrategia las corrientes de corte y especificaciones de diseño se convergen de forma simultánea a la optimización. La principal ventaja de la implementación de un algoritmo de camino no factible en un simulador secuencial es la reducción en el tiempo de evaluación del diagrama de flujo de proceso ya que la secuencia de cálculo es lineal. A cambio, el número de evaluaciones de este diagrama aumentan al requerir la evaluación de individuos para la convergencia de las corrientes de corte. Sin embargo, se ha demostrado que el gasto computacional se ve reducido (Biegler, 1985).

Una explicación más completa de la implementación de esta estrategia usando AG en simuladores secuenciales la presenta Torres (2000). En esta implementación, para la

conversión de las corrientes de corte se utilizaron funciones castigo similares a las utilizadas para el manejo de las restricciones. Las variables a considerar para la convergencia de las corrientes de corte deben caracterizar completamente a la corriente. Típicamente se convergen las variables de estado de temperatura y presión y los flujos másicos o molares de todos los componentes presentes en la simulación.

Para el sistema de destilación estudiado las corrientes de corte escogidas son las entradas al intercambiador de calor donde se lleva a cabo el acoplamiento energético. Estas corrientes constituyen las salidas de las columnas por lo que de antemano se sabe que son líquido saturado (fondos de la columna preconcentradora) y vapor saturado (destilado de la columna deshidratadora). Además, debido a que la presión de operación de la comuna deshidratadora se consideró constante la convergencia se simplifica al únicamente necesitar converger los flujos de los componentes. El utilizar esta información sobre las corrientes de corte además de facilitar la convergencia hace más estable al sistema al limitar el espacio de convergencia del intercambiador de calor del acoplamiento.

3.2.4.1 Implementación

La optimización del sistema se realizaron corridas del AG manipulando el número de individuos y el número máximo de generaciones. Se utilizó la selección por torneo con una probabilidad de cruce de 0.95 y una probabilidad de mutación de 0.009. Los parámetros se codificaron de acuerdo a la Tabla 3-2.

Tabla 3-2 Codificación de Parámetros
Estrategia de Camino No Factible.

Parámetro	L.I.	L.S.	Nposib.	Nbits
RR_1	0.25	0.45	1024	10
X_{SD2}	0.45	0.65	1024	10
Q_{reb}	5.5	8.5	1024	10
F_{agua}	8,000	15,000	2056	11
F_{DMF}	8.0	12.0	2056	11

Donde:

RR_1 = Razón de Reflujo de la columna preconcentradora.

X_{SD2} = Fracción de división para divisor de flujo para el destilado de la columna deshidratadora. Es equivalente al reflujo mediante la conversión

$$X_{SD2} = RR_2 / (RR_2 + 1).$$

Q_{reb} = Carga del hervidor de la columna deshidratadora.

F_{agua} = Flujo de agua de la corriente de corte.

F_{DMF} = Flujo de DMF de la corriente de corte.

L.I. = Límite Inferior. Valor mínimo que puede tomar el parámetro.

L.S. = Límite Superior. Valor máximo que puede tomar el parámetro.

Nposib. = Número de Posibilidades. Número de valores que puede tomar el parámetro.

Nbits = Número de bits necesarios para codificar Nposib valores, tal que $2^{Nbits} = Nposib$.

Se implementaron funciones castigo lineales y exponenciales. Para evitar errores por valores que tienden al infinito, en la expresión exponencial se utilizó un castigo máximo cuando el error era mayor o igual a un límite.

De la implementación de una estrategia de camino no factible se obtienen las siguientes conclusiones:

- El modelo es más robusto ante la evaluación de individuos numéricamente no factibles. La evaluación de la función objetivo es más rápida.
- Los factores de peso del castigo de la función objetivo son determinantes en el sentido de la convergencia de la optimización. Aunque el factor de peso de las variables de corte debiera ser mayor que el de las restricciones de manera que solamente se permitan la evolución de individuos operativamente factibles, cuando este valor es demasiado grande puede sesgar la optimización hacia la convergencia de estas variables y darle poco peso a las demás variables.
- La convergencia de las corrientes de corte se logra cumpliendo la tolerancia relativa especificada (0.1%).
- Los parámetros optimizados convergen a diferentes valores conforme la evolución del algoritmo genético. Sin embargo, no se obtuvieron resultados que cumplan con las restricciones de composición para el producto.

Para una implementación exitosa de una estrategia de este tipo se sugiere el estudio de los siguientes puntos:

- Funciones de Castigo. La forma y la magnitud de las funciones de castigo son fundamentales en la obtención de la información para la optimización de las variables de operación y convergencia de las corrientes de corte por lo que se deben plantear diferentes alternativas y seleccionar la más adecuada para este tipo de problemas.
- Corrientes de Corte. La selección de la corriente de corte se llevó a cabo de acuerdo al comportamiento del modelo en la estrategia de camino factible lo cual no es necesariamente la mejor opción para esta estrategia por lo que se debe considerar la selección de diferentes corrientes de corte.
- Parámetros del AG. Los valores utilizados son los típicos propuestos por Torres (2000) para problemas básicos resueltos estrategias de camino factible y camino no

factible, debido a la complejidad de este problema estos parámetros se deben afinar. El tamaño de población, método de selección, método y probabilidad de cruce, y probabilidad de mutación son los parámetros básicos a estudiar. También se pueden implementar estrategias mas complicadas como AG no generacionales, niche y elitismo.

CAPITULO 4: Síntesis de Secuencias de Destilación.

4.1 Antecedentes

El primer paso para la optimización de secuencias de destilación es la generación de la superestructura que contenga todos los posibles diagramas de flujo de proceso. Para la generación de las mismas se han desarrollado diferentes metodologías donde las variables estructurales se representan con mezcladores y divisores.

En ambientes modulares la representación y evaluación de estas superestructuras mediante diagramas de flujo sencillos y con pocos reciclos es eficiente aún utilizando modelos rigurosos debido a que el simulador cuenta con los métodos numéricos necesarios para su solución. Para diagramas de flujo de proceso para la separación de mezclas multicomponentes esta evaluación se vuelve cada vez más complicada debido a los reciclos que cada mezclador y divisor generan. Además, debido a que la mayoría de las corrientes estarán “secas”, se generan códigos de error que no permiten la convergencia de los mismos.

Para la síntesis de secuencias de destilación óptimas se plantea su optimización a partir de la generación de una superestructura. Sin embargo, para evitar los problemas encontrado en ambientes modulares al aumentar el número de componentes a separar se propone utilizar una nueva estrategia de representación y evaluación de las secuencias de destilación.

Para demostrar la factibilidad de la estrategia propuesta se plantea el problema de la separación completa de una mezcla multicomponente para lo cual se pueden utilizar destiladores convencionales (una entrada, dos salidas líquidas) con presión de operación fija y sin integración energética.

4.2 Optimización de la Secuencia de Destilación Utilizando una Superestructura

La optimización de la secuencia de destilación se realizó utilizando la superestructura generada para una mezcla de cuatro compuestos y mediante un AG. A continuación se describen el trabajo realizado.

4.2.1 Creación de la Superestructura

La generación de una superestructura que contenga todas las estructuras posibles para la separación de una mezcla multicomponente es una tarea que aunque sistemática es complicada. Con el aumento de los componentes a separar, se incrementa el número de variables de decisión y para su representación en un ambiente modular secuencial, aumenta el número de los separadores y mezcladores necesarios para representar todas las variables estructurales de decisión. Los bloques requeridos para una destilación completa son:

- Un divisor para la corriente de alimentación principal hacia cada uno de los destiladores.
- Un mezclador para la alimentación de cada destilador.
- Un mezclador para cada producto a separar exceptuando el componente más volátil y el más pesado los cuales se obtienen únicamente en la primer y última columna respectivamente.
- Un divisor para el destilado de cada columna exceptuando a la que realice el primer corte. Cada divisor se debe conectar, mediante una corriente, a los mezcladores a la entrada de las columnas que realicen cortes superiores.
- Un divisor para el residuo de cada columna exceptuando a la que realice el último corte. Cada divisor se debe conectar, mediante una corriente, a los mezcladores a la entrada de las columnas que realicen cortes inferiores.

Esto se puede expresar como :

$$N_B = 4 \times (N_C - 1)$$

Donde:

N_B = número de bloques (mezcladores y divisores)

N_C = número de compuestos a separar.

Además, se debe considerar el número de corrientes presentes en la superestructura:

- Una alimentación general.
- Una alimentación para cada columna, N_C-1 .
- Una corriente por producto a separar, N_C .
- Un destilado de cada columna exceptuando la primer columna, N_C-2 .
- Un residuo de cada columna exceptuando la última columna, N_C-2 .
- Recirculaciones del destilado de cada columna hacia las columnas que realicen cortes superiores, Sumatoria desde 1 hasta (N_C-2) .
- Recirculaciones del residuo de cada columna hacia las columnas que realicen cortes inferiores, Sumatoria desde 1 hasta (N_C-2) .

Esto genera un gran número de corrientes de las cuales solamente una de cada recirculación, de cada destilado y de cada residuo pertenecerá a la secuencia, las demás estarán vacías. Junto con el aumento de las corrientes, en un ambiente modular, se generan ciclos de convergencia el cual tiene que ser resuelto en cada evaluación de la función objetivo.

Para realizar la separación completa de una mezcla de cuatro compuestos la superestructura generada se muestra en la Figura 4-1.

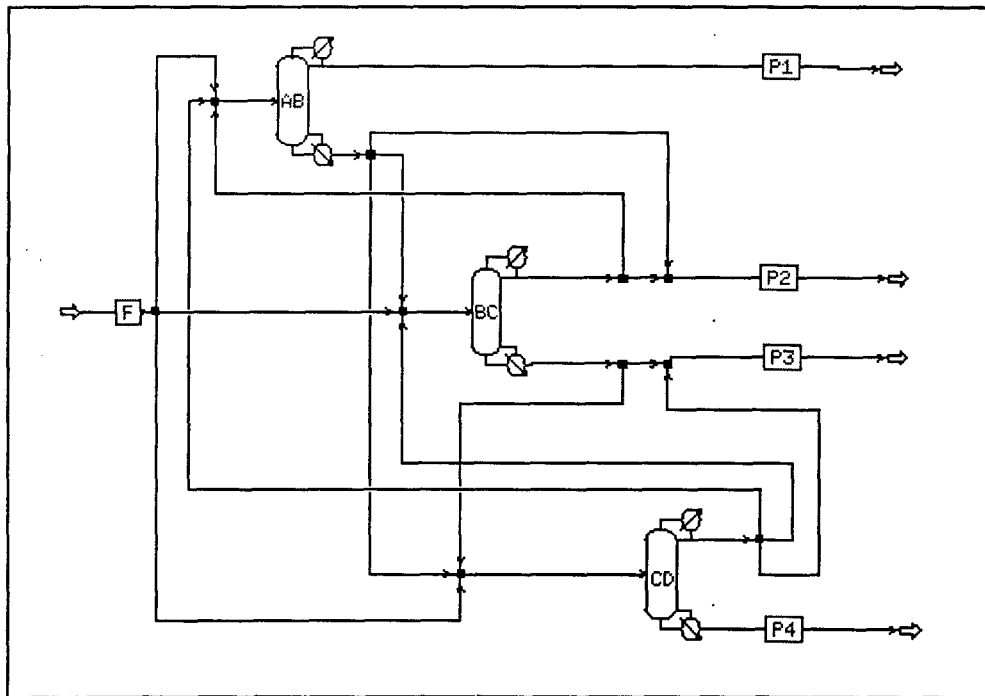


Figura 4-1. Superestructura para la Separación Completa de Cuatro Componentes.

Además de la creación del diagrama de flujo de proceso, para la evaluación de cada secuencia se requiere especificar a cada divisor de flujo cuál de las corrientes no estará vacía. En el caso de la separación completa, las fracciones de división de flujo son variables binarias. Para el caso de separaciones no completas, es posible que una corriente se divida en dos o más corrientes lo que originaría que estas variables no sean binarias sino variables reales en el rango cero a uno. Al especificar la fracción de flujo hacia cada corriente se debe de omitir la fracción hacia una corriente de manera que no se sobre especifique el problema. Para el caso de la separación de cuatro componentes, donde se tienen cinco secuencias diferentes, la especificación de los divisores se puede representar según la Tabla 4-1.

Tabla 4-1. Especificación de los Divisores de Flujo

Divisor de:	Fracción de Flujo				
	1	2	3	4	5
Corriente					
Alimentación General					
FA1	1	1	0	0	0
FA2	0	0	1	0	0
Residuo C-AB					
R12	1	0	0	1	0
R13	0	1	0	0	0
Destilado C-BC					
P2	1	1	0	1	0
Residuo C-BC					
P3	0	1	0	1	1
Destilado C-BC					
R31	0	0	0	1	0
R32	0	1	0	0	1

Nomenclatura:

Secuencias: 1 = {A/B, B/C, C/D}, 2 = {A/B, C/D, B/C} 3 = {B/C, A/B - C/D}, 4 = {C/D, A/B, B/C}, 5 = {C/D, B/C, A/B}. C-AB = Columna para el corte A/B. C-BC = Columna para el corte B/C. C-CD = Columna para el corte C/D. FA1 = Alimentación hacia C-AB. FA2 = Alimentación hacia C-BC. R12 = Recirculación de C-AB hacia C-BC. R13 = Recirculación de C-AB hacia C-CD, R31 = Recirculación de C-CD hacia C-AB. R32 = Recirculación de C-CD hacia C-BC. P2 = Corriente hacia el producto 2. P3 = Corriente hacia el producto 3.

Para las fracciones de flujo: 1 = Corriente "llena". 0 = Corriente "vacía".

A través de la superestructura, su interconexión y la especificación de las fracciones de flujo en cada divisor, se puede evaluar el diagrama de flujo de proceso para cualquier secuencia posible en la separación de cuatro componentes.

4.2.2 Implementación del Algoritmo Genético

La implementación del AG se realizó según la estrategia propuesta por García (1997) utilizando métodos rigurosos modelados con el bloque RADFRAC.

Se codificaron la secuencia, el número de etapas ideales y la etapa de alimentación. La codificación empleada se muestra en la Tabla 4-2. Para la codificación de los parámetros, su decodificación y re-interpretación se utilizó el planteamiento expuesto en la estrategia propuesta (Sección 4.3)

Se realizaron experimentos con tamaños de población de 10, 15, 25 y 50 evolucionando hasta un máximo 50 ó 100 generaciones, ver Tabla 4-3. Se utilizó una probabilidad de cruce 0.95 y una probabilidad de mutación de 0.01.

Tabla 4-2. Codificación de las Variables de Optimización

Parámetro	L.I.	L.S.	Nposib	Nbits
S ₁	1	3	4	2
S ₂	1	3	4	2
S ₃	1	3	4	2
N ₁	16	31	16	4
N ₂	22	37	16	4
N ₂	21	36	16	4
NF ₁	30	80	64	6
NF ₂	30	80	64	6
NF ₃	30	80	64	6

S₁ = Primer corte en la secuencia, S₂ = Segundo corte en la secuencia, S₃ = Tercer corte en la secuencia. N₁ = Número de etapas ideales para el corte AB. N₂ = Número de etapas ideales para el corte BC. N₃ = Número de etapas ideales para el corte CD. NF₁, NF₂, NF₃ = Porcentaje de las etapas ideales que corresponde al plato de alimentación para su respectivo corte.

Es importante aclarar que aunque la codificación y decodificación, puede en algunos casos arrojar valores reales para las variables de número de etapas y etapa de alimentación, la optimización se realiza con variables enteras ya que antes de la evaluación los valores reales se transforman en valores enteros al truncar los decimales (una manera alterna sería redondeando al entero más próximo).

La alimentación se tomó como una mezcla de 3 lbmol/hr de butano, 5 lbmol/hr de pentano, 5 lbmol/hr de hexano y 3 lbmol/hr de heptano a 212 °F y 150 psia. Para cada columna se especificó, mediante una especificación de diseño interna en el bloque RADFRAC, una recuperación del 99% del componente clave ligera en el destilado y de 99% del componente clave pesada en el residuo. Los separadores operan a 140 psia sin considerar caída de presión. Para modelar el equilibrio se utilizó la opción de Peng-Robinson.

Se consideraron los costos fijos para la columna, condensador y hervidor y los costos de operación por consumo de agua (US \$0.0005 por libra) y de vapor (US \$0.005 por libra). La función objetivo es el minimizar el costo anual depreciando el equipo linealmente a 10 años.

Tabla 4-3. Diseño de Experimentos

Número de Experimento	Tamaño de Población	Número de Generaciones
1	10	50
2	15	50
3	25	50
4	50	50
5	10	100
6	15	100
7	25	100
8	50	100

4.2.3 Resultados y Discusión de Resultados

Los resultados obtenidos en una optimización mediante AG son un poco diferentes a los obtenidos mediante cualquier método matemático. Estas diferencias radican en las características propias del AG como la evolución de una generación no de un solo punto.

Uno de las diferencias más importantes es la falta de una heurística de paro única. En la práctica, un AG es evolucionado hasta un número máximo de generaciones sin que esto implique necesariamente el haber encontrado el óptimo. Al evolucionar una población de individuos, el AG encuentra un “óptimo” para cada generación y se espera que en cada generación se encuentren mejores “óptimos”.

La manera en que un AG ya no será capaz de encontrar (producir) individuos mejores es cuando la población completa representa a un mismo individuo. A esto se le denomina convergencia. La convergencia puede ser evaluada a nivel genotipo (convergencia genotípica), es decir, comparando a los individuos bit por bit, o a nivel fenotipo (convergencia fenotípica) mediante la comparación de los valores reales de los parámetros.

Por otra parte, cuando se utiliza un AG generacional, el mejor individuo de cada generación no está necesariamente presente en la siguiente generación, esto es debido a que puede modificarse por los operadores de cruce o mutación. En este caso, el individuo “óptimo” debe ser guardado de manera externa para conocer su valor y los parámetros que codifican. Al utilizar un AG no generacional, por ejemplo mediante la opción de

elitismo, se le asignan al menos una copia del mejor individuo a la siguiente generación, de esta manera el individuo óptimo está necesariamente presente en la última generación. Esto hace más fácil lograr la convergencia final hacia el óptimo, sin embargo, también puede ocasionar problemas de convergencia prematura.

Por estas razones que para realmente encontrar el óptimo hay que verificar que se haya alcanzado la convergencia, aunque en la práctica, alcanzar una convergencia del 100% es imposible debido al operador de mutación.

La evaluación de la convergencia no es necesaria cuando el número de individuos tiende a infinito. Algunas técnicas utilizadas para evitar la evaluación de la convergencia son el aumento en la probabilidad de mutación e inicialización de la población junto con el aumento del número de generaciones. Estas estrategias son equivalentes a realizar corridas en serie partiendo de una población conocida. Otro caso donde la evaluación de la convergencia puede no tener efecto es en funciones muy planas donde el valor óptimo tiene puntos cercanos con evaluaciones muy similares.

En los casos donde la evaluación de la función objetivo es computacionalmente costosa y no se dispone del tiempo requerido para seguir las estrategias anteriores es necesario considerar criterios de convergencia.

Algunos puntos básicos sobre la convergencia son:

- Para los problemas donde existe reinterpretación la evaluación de la convergencia genotípica no resulta productiva. Al realizar la reinterpretación diferentes cromosomas pueden representar a un mismo individuo lo cual con lo que primero se alcanzaría la convergencia fenotípica.
- La evaluación de convergencia fenotípica debe realizarse comparando el valor o los parámetros del mejor individuo encontrado. Para una estrategia generación el mejor individuo no corresponde necesariamente al mejor individuo de la generación.
- Si el valor de la función objetivo converge sin que los parámetros converjan, se debe considerar la posibilidad de tener múltiples óptimos. Si se descarta esta posibilidad, el efecto de los parámetros sobre la función objetivo es muy pequeño o la función es muy plana. Se recomienda verificar la función objetivo, especialmente si se cuentan con funciones castigo para el manejo de restricciones.
- Si se alcanza la convergencia antes del tiempo máximo permisible, incrementa la probabilidad de mutación o el número de individuos. Alternativamente puede inicializar la población cada cierto número de generaciones. Existe la posibilidad de sufrir de convergencia prematura. Si se converge al mismo valor se puede considerar como óptimo.
- Para lograr explotar las características del AG es importante fijar adecuadamente los límites para las variables de optimización. Utilizar límites más amplios al principio

de la optimización puede lograr una mejor exploración de la función objetivo. Disminuir el rango de búsqueda en el transcurso de la optimización puede lograr mayor definición en el valor óptimo.

- El último recurso para asegurar la convergencia hacia el óptimo debe de ser el aumento del tamaño de población y del número máximo de generaciones.

En el caso de la síntesis de secuencias de destilación, es importante lograr la convergencia en los tres tipos de variables a optimizar: variables estructurales (secuencia), variables de diseño (diámetros, áreas, etc.) y variables de operación (temperatura, presión, etc.). La convergencia en todas estas variadas necesariamente lleva a la convergencia en la función objetivo y de esta forma se encontraría un óptimo global.

En los experimentos realizados se verificó la convergencia realizando gráficas en las cuales se aprecie el comportamiento fenotípico de los parámetros. El alcanzar cierto grado de convergencia fenotípica, sería una heurística de paro más adecuada comparada con el número máximo de generaciones, aunque su evaluación podría llegar a no ser eficiente. Las gráficas realizadas se ejemplifican en las Figuras 4-2, 4-3 y 4-4, todas ellas para el experimento ocho.

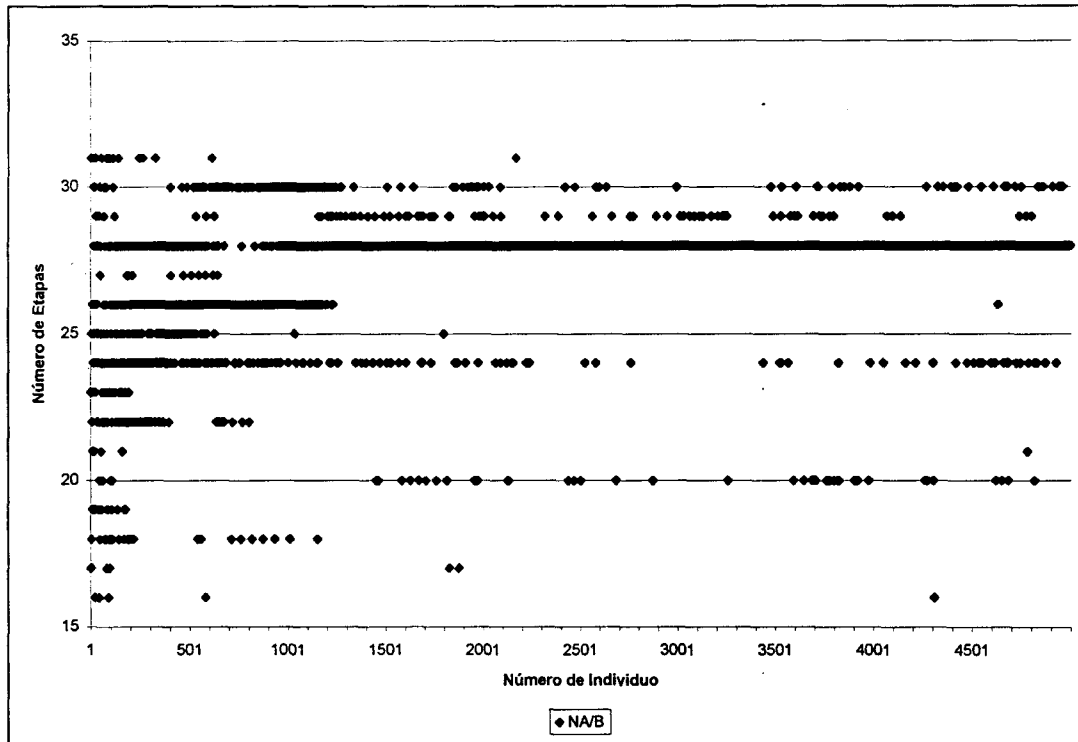


Figura 4-2. Convergencia del Número de Etapas para el Corte A/B.

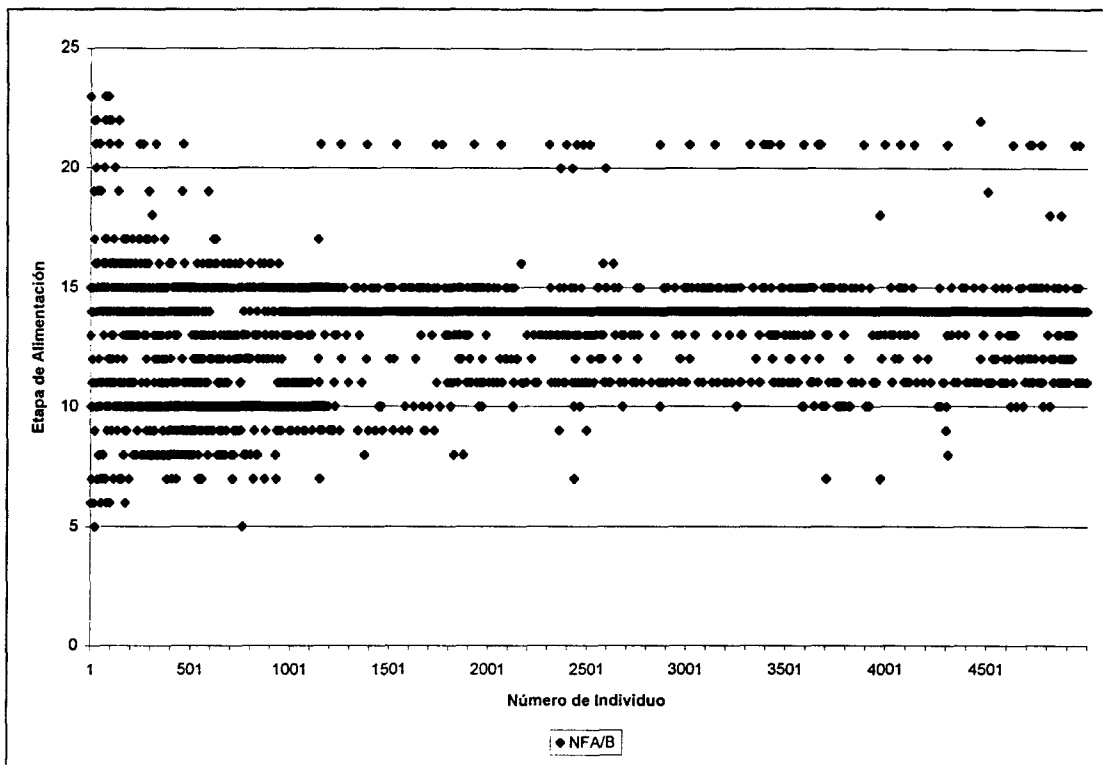


Figura 4-3. Convergencia de la Etapa de Alimentación para el Corte A/B.

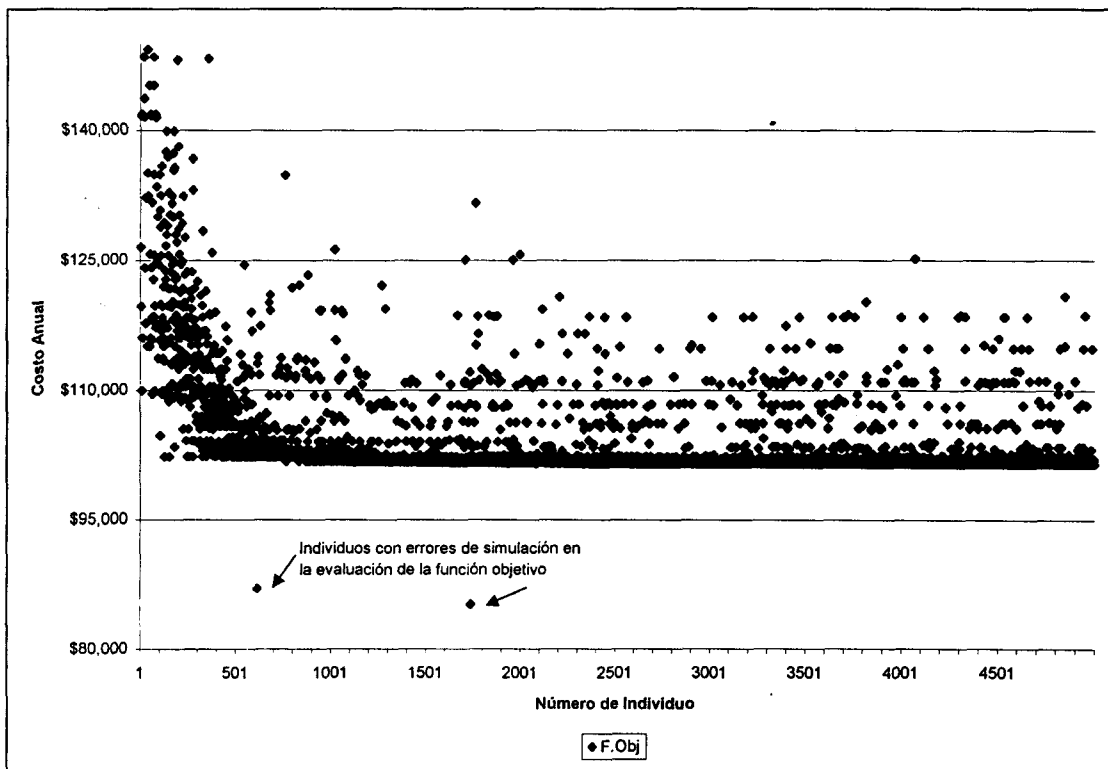


Figura 4-4. Convergencia de la Función Objetivo.

En las Figuras 4-2 y 4-3 se observa como los valores de las variables de optimización, en la primera generación se encuentran dispersas en un rango y que conforme se evoluciona el AG las variables se concentran hacia el valor óptimo que corresponde a 28 etapas ideales y la etapa de alimentación igual a 14. De esta forma se aprecia que la convergencia fenotípica se alcanza de manera satisfactoria. De igual forma, en la Figura 4-4 apreciamos que un valor óptimo se alcanza en la generación 32, sin embargo, la convergencia no se da hacia este valor. Esto se debe a que la convergencia de la simulación de ese individuo en particular convergió a un valor inestable, al re-evaluar el individuo este converge a un valor semejante a las evaluaciones de los individuos vecinos. De la misma figura observamos que el contar con una heurística de paro y de evaluación de convergencia puede ahorrar tiempo ya que el mejor individuo se alcanza en las primeras generaciones.

Los mejores individuos encontrados para los experimentos realizados se muestran en la Tabla 4-4. Resultados más detallados se encuentran en la Tabla 4-5, 4-6 y 4.7.

Tabla 4-4. Mejores Encontrados para los Experimentos Realizados.

No. de Exp.	Secuencia	$N_{A/B}$	$NF_{A/B}$	$N_{B/C}$	$NF_{B/C}$	$N_{C/D}$	$NF_{C/D}$	Función Objetivo US\$/año
1	B/C, A/B - C/D	23	13	31	16	34	16	102,616
2	B/C, A/B - C/D	28	14	31	15	36	17	101,592
3	B/C, A/B - C/D	23	12	31	15	36	17	101,701
4	B/C, A/B - C/D	28	14	31	15	36	17	101,561
5	B/C, A/B - C/D	28	14	31	15	36	17	101,592
6	B/C, A/B - C/D	28	14	31	15	36	17	101,561
7	B/C, A/B - C/D	23	12	31	15	36	17	101,701
8	B/C, A/B - C/D	28	14	31	14	36	17	101,473

Tabla 4-5. Resultados de Diseño y Operación de la Columna A/B

Exp	RR	Q _C MBTU/hr	Q _R MBTU/hr	Diametro ft	Altura ft	A _C ft ²	A _R ft ²
1	3.96	112.76	116.99	1	78.75	24.02	9.51
2	3.07	92.55	96.76	1	95.25	19.72	7.87
3	3.82	109.64	113.85	1	77.25	23.36	9.26
4	3.15	94.39	98.66	1	95.25	20.11	8.02
5	3.07	92.55	96.76	1	95.25	19.72	7.87
6	3.07	92.55	96.76	1	95.25	19.72	7.87
7	3.82	109.64	113.84	1	77.25	23.36	9.26
8	3.07	92.55	96.76	1	95.25	19.72	7.87

Tabla 4-6. Resultados de Diseño y Operación de la Columna B/C

Exp	RR	Q _C MBTU/hr	Q _R MBTU/hr	Diametro ft	Altura ft	A _C ft ²	A _R ft ²
1	2.04	210.83	279.77	1.5	108.75	24.88	51.54
2	2	208.12	277.06	1.5	107.25	24.56	51.05
3	2.01	208.12	277.06	1.5	107.25	24.56	51.05
4	1.94	203.34	272.72	1.5	111.75	24	50.17
5	2	207.96	276.9	1.5	107.25	24.54	51.02
6	2	207.96	276.9	1.5	107.25	24.54	51.02
7	2	207.96	276.9	1.5	107.25	24.54	51.02
8	2	207.97	276.9	1.5	107.25	24.54	51.02

Tabla 4-7. Resultados de Diseño y Operación de la Columna C/D

Exp	RR	Q _C MBTU/hr	Q _R MBTU/hr	Diametro ft	Altura ft	A _C ft ²	A _R ft ²
1	4.11	232.24	234.81	1.5	117.75	14.15	108.52
2	3.8	218.29	220.85	1.5	123.75	13.3	102.08
3	3.8	218.04	220.6	1.5	123.75	13.29	101.96
4	3.8	218.04	220.6	1.5	123.75	13.29	101.96
5	3.8	218.04	220.6	1.5	123.75	13.29	101.96
6	3.8	218.04	220.6	1.5	123.75	13.29	101.96
7	3.8	218.04	220.6	1.5	123.75	13.29	101.96
8	3.8	218.4	220.6	1.5	123.75	13.29	101.96

Al comparar los experimentos realizados se aprecia que se logra identificar la estructura (secuencia de separación) para todos los casos. Bajo las condiciones estudiadas y los rangos de optimización la secuencia {B/C, A/B - C/D} es identificada como óptima, sin embargo, podemos notar que el número de etapas para el corte C/D se encuentra en su

límite superior por lo que si se modifica el rango de optimización podría encontrarse otro conjunto de parámetros óptimos, incluyendo una nueva secuencia óptima.

En cuanto a las variables de diseño, número de etapas y etapa de alimentación para el caso de este planteamiento, se puede observar que son muy parecidas. Debido a que se especificó un porcentaje de recuperación para cada componente en las columnas de destilación, la convergencia de las variables de operación (razón de reflujo y cargas térmicas) está ligada a la convergencia que el número de etapas y la etapa de alimentación. En los experimentos realizados se puede observar que la variable que la columna que realiza el corte AB es que realiza la distinción entre las diferentes condiciones de operación encontradas. El cambio de número de etapas y del plato de alimentación hacen que la razón de reflujo se modifique en alrededor del 25% y aumente la carga del condensador en 25%. Comparando los experimentos siete y ocho, y considerando que la función objetivo es prácticamente la misma se puede deducir que el cambio en la función objetivo por incrementar la altura de la columna se ve recompensada por la disminución en los servicios y en el área de los intercambiadores de calor, por lo que ambas configuraciones se pueden configurar como óptimas. Considerando que los costos de los servicios pudieran incrementarse a futuro, se podría considerar a la opción de 28 etapas como la más atractiva.

En los experimentos cuatro y ocho, en los cuales se hace un mayor número de evaluaciones de la función objetivo, se encontraron valores que aunque se reportaron como óptimos, al evaluarlos individualmente se identificaron problemas de convergencia y que realmente su aptitud no corresponde al óptimo. Estos errores, originados por las especificaciones de diseño para la recuperación de los componentes claves, se propagan a los bloques de costeo de la columna de destilación (corte A/B) y originan la disminución del costo total anual. Como alternativa se reportó al mejor individuo factible cuya evaluación numérica sea estable .

Se realizó un experimento considerando una recuperación del 99.9% de cada componente. El óptimo reportado corresponde a la secuencia {B/C, A/B- C/D} con un costo anual de US \$132,632.

La primera columna tiene 31 etapas y se alimenta en la etapa 15; las variables de operación son: razón de reflujo de 4.63, carga del condensador de 126.5 MBTU/hr y carga del hervidor de 130.3 MBTU/hr; las variables de diseño son: diámetro de 1.0 ft, altura de 108 ft, área del condensador de 27.6 ft² y área del hervidor de 10.68 ft².

La segunda columna tiene 40 etapas y se alimenta en la etapa 19; las variables de operación son: razón de reflujo de 2.40, carga del condensador de 234.3 MBTU/hr y carga del hervidor de 303.5 MBTU/hr; las variables de diseño son: diámetro de 1.5 ft y altura de 141.75 ft, área del condensador de 27.79 ft² y área del hervidor de 56.54 ft².

La tercer columna consta de 50 etapas y se alimenta en la etapa 22; las variables de operación son: razón de reflujo de 4.22, carga del condensador de 237.5 MBTU/hr y

carga de hervidor de 240.0 MBTU/hr; las variables de diseño son: diámetro de 1.5 ft y altura de 176.25 ft, área del condensador de 14.46 ft² y área del hervidor de 115.77 ft².

Para implementar el ejemplo anterior, se deben de aumentar los límites de las variables de optimización ya que se requieren más etapas para la separación deseada, sin embargo al aumentar las etapas se empieza a tener problemas de hidráulica en las columnas. Otro punto a considerar es el número de iteraciones requeridas en el bloque RADFRAC que también se debe incrementar. Se observó que el aumento en el porcentaje de recuperación se refleja en el aumento de la complejidad de la convergencia de los bloques y del diagrama de flujo.

4.3 Optimización utilizando la Estrategia Propuesta

La optimización de secuencias de destilación mediante un AG en ambientes modulares secuenciales utilizando una superestructura es factible y se ha comprobado que se pueden obtener resultados satisfactorios. Sin embargo, su aplicación se ve limitada al tener que generar una superestructura diferente para cada caso particular (número de componentes), además, cada vez se hace más complejo el especificar los divisores de flujo para la evaluación de una secuencia específica.

Para evitar estos problemas, se propone una nueva estrategia para la evaluación de las secuencias basada en la evaluación sucesiva de un único bloque y el seguimiento y asignación de la alimentación al bloque y sus productos.

4.3.1 Estrategia Propuesta

La estrategia propuesta consiste en cuatro puntos principales:

(a) La codificación de la secuencia y los parámetros de operación.

El cromosoma que codifica a un individuo está dividido en dos partes. La primer parte codifica la secuencia de separación. Para la separación de una mezcla de N_c componentes representados por A, B, C..., N_c , se requieren N_c-1 separadores los cuales realizan igual número de cortes posibles (A/B, B/C, C/D... N_{c-1}/N_c). De esta manera se requieren N_c-1 valores para definir una secuencia de separación. Los cortes son numerados de manera que al corte A/B se le asigna el número uno y al N_{c-1}/N_c el N_c-1 . Una separación directa representada por $\{1, 2, 3, 4..., N_{c-1}\}$ sería equivalente a la secuencia $\{A/B, B/C, C/D, D/E... N_{c-1}/N_c\}$. En el caso de que el número de bits asignados codifiquen un mayor número de cortes, se decodifiquen cortes no existentes o si al decodificar se repite algún corte este será re-interpretado.

La segunda parte del cromosoma representa los valores de los parámetros de operación de las columnas de destilación. Debido a que estos parámetros están en función directa de los componentes a separar (clave ligera y clave pesada) se prefiere ordenarlos en función al número de corte y no al número en la secuencia. El número de bits necesarios para codificar cada parámetro depende del parámetro y el rango. La codificación de un individuo se ejemplifica en la Figura 4-2.

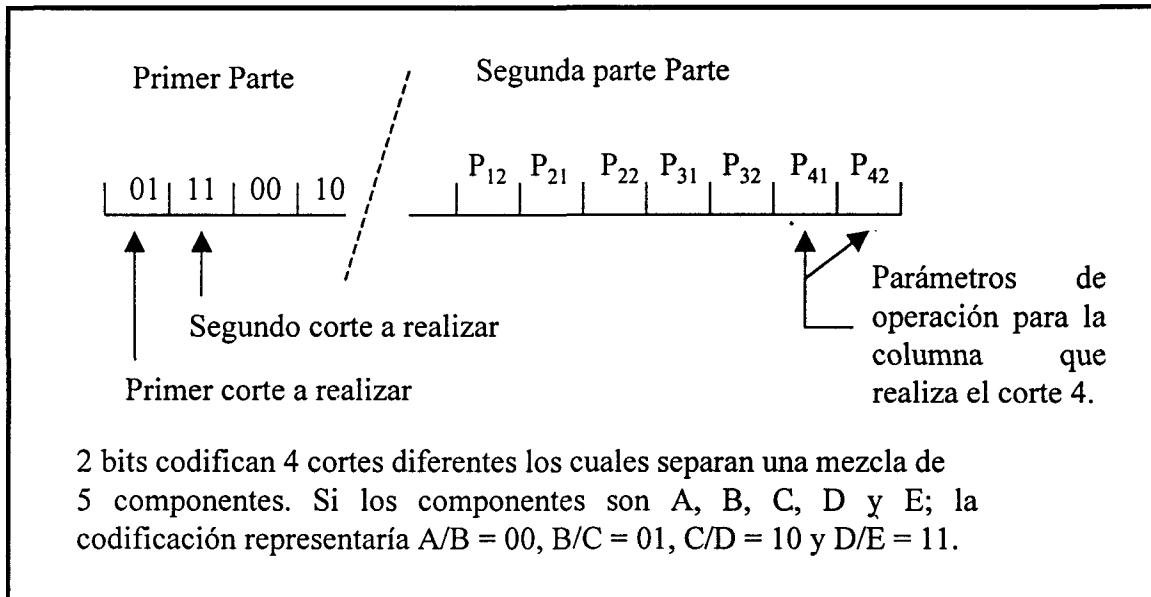


Figura 4-2. Codificación de la Secuencia de Destilación y los Parámetros de Operación

(b) La decodificación de la secuencia y los parámetros de operación.

Para la evaluación del individuo, los cromosomas binarios deben ser decodificados para ser asignados a las variables del simulador. Debido a la codificación utilizada, la secuencia resultante de esta decodificación puede tener cortes repetidos, por ejemplo $\{2, 2, 4, 1\}$, para obtener una secuencia válida de esta decodificación se requiere una metodología para la re-interpretación de manera que la secuencia final a evaluar no contenga cortes repetidos, correspondiendo al ejemplo anterior sería $\{2, 3, 4, 1\}$. Este re-interpretación tiene que ser sistemática ya que para que el procesamiento de los "esquemas" contenido en los cromosomas sea útil en la búsqueda del óptimo se debe ser consistente en la evaluación de la función objetivo.

La re-interpretación de la secuencia se hace en según el siguiente procedimiento:

- Asignar la secuencia inicial (con posible repetición de cortes) como secuencia final.
- Identificar un corte repetido.

- Identificar un corte faltante.
- Asignar el lugar del corte repetido al corte faltante.

La re-interpretación de la secuencia de destilación sigue pseudo-código siguiente:

```
HACER DE I=1 A Nc-1
  Secuencia_final(i) = Secuencia_inicial(i)
  Auxiliar(Secuencia_inicial(i)) = 1
CONTINUAR

HACER DE I=1 A NC-1
  HACER DE J=I+1 A NC-1
    SI (Secuencia_final (I) IGUAL A Secuencia_final(J))
      HACER K=1 A INC-1
        SI (Auxiliar(J) DIFERENTE A 1)
          Secuencia_final(J) = K
          Auxiliar(K) = 1
          IR A 100
        TERMINA SI
      TERMINA HACER
    TERMINA SI
  100 CONTINUAR
  TERMINA HACER
TERMINA HACER
```

Otra parte importante en la evaluación del individuo es la asignación de los parámetros de operación de los separadores. A diferencia de los componentes claves, la codificación de los parámetros no depende de la secuencia por lo que su asignación depende de su posición únicamente.

(c) La asignación de Destilado y Residuo como Producto o Alimentación.

Para poder utilizar un único bloque para representar la secuencia de columnas de destilación es necesario llevar el control de la secuencia y asignar el destilado y el residuo de las columnas evaluadas como producto o alimentación para las columnas siguientes en la secuencia en evaluación.

El control de la secuencia se realiza mediante un archivo de trabajo que contiene la información del corte en turno, la secuencia a evaluar y la alimentación, el destilado, el residuo de cada columna evaluada y de los productos obtenidos.

Con esta información se utilizan reglas determinísticas para asignar el destilado y el residuo de cada columna a un producto o a la alimentación para las columnas siguientes en la secuencia. Las reglas utilizadas para la asignación son las siguientes:

Asignación como Producto:

- El destilado del primer corte es el producto uno.
- El residuo del último corte (N_c-1) es el producto N_c .
- El destilado del Corte C_i/C_{i+1} se asigna como producto i cuando ya se realizó el corte inmediato superior (C_{i-1}/C_i).
- El residuo del Corte C_{i-1}/C_i se asigna como producto i cuando ya se realizó el corte inmediato inferior (C_i/C_{i+1}).

Asignación como Alimentación:

- El destilado del corte C_j/C_{j+1} es la alimentación para el para el siguiente corte en la secuencia, C_j/C_{j+1} , con $j < i$.
- El residuo del corte C_j/C_{j+1} es la alimentación para el para el siguiente corte en la secuencia, C_j/C_{j+1} , con $j > i$.

(d) La implementación dentro del AG.

Para la implementación de esta estrategia se requiere la evaluación del bloque que representa la columna N_c-1 veces por cada individuo (secuencia), esto se hace a través de un ciclo. Para la inicialización, control de la secuencia y asignación de parámetros se requieren tres subrutinas que se incorporan a la secuencia de cálculo del diagrama de flujo de proceso.

Las subrutinas necesarias, FS-1, FS-2 y FS-3, tienen las siguientes funciones:

- Subrutina FS-1. Crea el archivo de trabajo asignando ceros a todos sus valores e inicializa el contador para las secuencias.
- Subrutina FS-2. Lee la secuencia a evaluar y el contador de turno. Si la secuencia está empezando, asigna el valor de cero a todo el archivo de trabajo. Si la secuencia está en evaluación, lee el archivo de trabajo y asigna la alimentación y los parámetros de proceso al bloque de simulación correspondiente al turno para que este sea evaluado.
- Subrutina FS-3. Lee la secuencia en evaluación y el contador de turno. Si la secuencia está en evaluación, obtiene los resultados (corrientes de destilado, residuo y costos) y los asigna al archivo de trabajo. Si la secuencia se ha terminado, obtiene los resultados y los integra con el archivo de trabajo para la asignación de la función objetivo a toda la secuencia evaluada.

Existen dos formas en que estas subrutinas se pueden acoplar a la secuencia de cálculo del diagrama de flujo y a la optimización mediante el AG:

- Acoplamiento interno. En el acoplamiento interno, se utiliza un bloque de sensibilidad (S-2) exclusivamente para el control de la evaluación de una secuencia. La secuencia de cálculo sería como sigue:

F-1	Subrutina del AG. Inicializa archivos del AG.
FS-1	Subrutina de la secuencia. Inicializa archivos de la secuencia.
S-1	Bloque de sensibilidad del AG. Es el contador de individuos y generaciones para la evolución del AG.
F-2	Subrutina del AG. Toma los valores del individuo a evaluar y los asigna a la secuencia.
S-2	Bloque de sensibilidad de la secuencia. Es el contador para la evaluación de la secuencia. Se ejecuta N_C-1 veces
FS-2	Subrutina de la secuencia. Lee el contador de la secuencia y asigna los valores del archivo de trabajo para la evaluación del bloque de destilación.
COLUMNA	Bloque de proceso. Se ejecuta con los parámetros asignados por FS-2.
FS-3	Subrutina de la secuencia. Toma los resultados de bloque de proceso y los incorpora al archivo de trabajo. Si la secuencia termina asigna el valor de la función objetivo.
Regresar a S-2	Termina de evaluarse una secuencia.
F-3	Subrutina del AG. Toma los resultados para el individuo y los asigna como aptitud. Si es el caso ejecuta los operadores del AG.
Regresar a S-1	Termina de evaluarse el AG.
F-4	Subrutina del AG. Toma los resultados del AG y los despliega en pantalla.

Esta estrategia se representa, según la simbología del simulador ASPEN, como:

```

F-1
FS-1
S-1
F-2 S-2 FS-2 COLUMNA FS-3 S-2 <---
F-3 S-1 <---
F-4
    
```

- Acoplamiento externo. En el acoplamiento externo se utiliza en mismo bloque de sensibilidad (S-1) para la evolución del AG y para la evaluación de una secuencia, para esto se requiere que este se modifique para que varíe N_c-1 veces más (correspondiente a la evaluación de la secuencia), es decir hasta $N_{pop} \times N_{gen} \times (N_c-1)$ (N_{pop} = tamaño de población, N_{gen} = número de Generaciones, N_c = número de componentes). También se requiere introducir un contador para el número de columnas ya evaluadas en cada secuencia, este contador permitirá que las subrutinas F-2 y F-3 se ejecuten una vez por secuencia (cada N_c-1 veces). La secuencia de solución para este caso estaría dada por:

F-1	Subrutina del AG. Inicializa archivos del AG.
FS-1	Subrutina de la secuencia. Inicializa archivos de la secuencia.
S-1	Bloque de sensibilidad del AG. Es el contador de individuos y generaciones para la evolución del AG y el contador de turno para la evaluación de la secuencia.
F-2	Subrutina del AG. Si el contador de turno equivale a empezar una secuencia, toma los valores del individuo a evaluar y los asigna a la secuencia. De lo contrario no se ejecuta.
FS-2	Subrutina de la secuencia. Lee el contador de la secuencia y asigna los valores del archivo de trabajo para la evaluación del bloque de destilación.
COLUMNA	Bloque de proceso. Se ejecuta con los parámetros asignados por FS-2.
FS-3	Subrutina de la secuencia. Toma los resultados de bloque de proceso y los incorpora al archivo de trabajo. Si la secuencia termina asigna el valor de la función objetivo.
F-3	Subrutina del AG. Si el contador de turno equivale a finalizar una secuencia, toma los resultados para el individuo, los asigna como aptitud y si coincide con el término de una generación ejecuta los operadores del AG. De lo contrario no se ejecuta.
Regresar a S-1	Termina de evaluarse el AG.
F-4	Subrutina del AG. Toma los resultados del AG y los despliega en pantalla.

Esta estrategia se representa, según la simbología del simulador ASPEN, como:

F-1
 FS-1
 S-1
 F-2 FS-2 COLUMNA FS-3
 F-3 S-1 <---
 F-4

Para ambos acoplamientos, la última modificación requerida es la introducción de la subrutina de re-interpretación en la subrutina F-2, donde se asignan los parámetros del AG para que sean tomados para la evaluación del individuo.

4.3.2 Una Posible Implementación

Para evitar problemas al especificar varios ciclos en la secuencia de cálculo del simulador se prefiere una implementación externa. Para el diseño de las columnas de destilación se utilizarían bloques rigurosos (por ejemplo RADFRAC) con una recuperación del 99% para los componentes clave. Debido a que los componentes clave no están fijos en la columna sino que varían conforme se va evaluando la secuencia, no es posible utilizar las especificaciones de diseño internas del bloque. En su lugar, se utilizarían especificaciones de diseño externas las cuales tienen que converger simultáneamente para cada separación evaluada.

Las especificaciones de diseño a utilizar tendrían como objetivo ("spec") una función que relacionaba la separación en evaluación con su recuperación a través de una variable binaria. Esta función se expresa como:

$$\%Recup = I_{A/B}R_A + I_{B/C}R_B + I_{C/D}R_C + I_{D/E}R_D + I_{D/E}R_E$$

Donde:

%Recup = porcentaje de recuperación objetivo ("spec").

$I_{J/K}$ = variable binaria para el corte J/K.

R_J = porcentaje de recuperación del componente J.

Para el caso de la recuperación del componente ligero en el destilado, para el corte A/B únicamente la variable $I_{A/B}$ vale uno, de manera similar para el corte J/K únicamente la variable $I_{J/K}$ vale uno. De una forma análoga se puede obtener la expresión para la recuperación del componente pesado.

La convergencia de estas especificaciones de diseño es complicada por lo que, en vez de utilizar una columna, conviene utilizar cinco columnas de destilación pero, a diferencia del ejemplo anteriormente resuelto no estarían interconectadas y se utilizarían las mismas subrutinas para el control de la secuencia y la asignación de los productos. El inconveniente de esta estrategia sería la múltiple evaluación de los bloques de las columnas, por otra parte la ventaja principal es que al asignar a cada columna un corte

específico las especificaciones de diseño se pueden hacer internamente haciendo que la convergencia sea rápida.

CAPITULO 5: Conclusiones y Recomendaciones.

5.1 Conclusiones

En el presente trabajo se aplicó un AG para la optimización de un sistema de destilación acoplado energéticamente utilizando modelos rigurosos para la evaluación de la función objetivo. Además, se implementó un AG para la optimización de secuencias de destilación para lo cual se generó una nueva codificación de la secuencia y un método sistemático para su decodificación.

La optimización de sistemas de destilación acoplados energéticamente es un problema difícil desde el punto de su solución numérica ya que el acoplamiento energético origina que las variables de proceso interactúen fuertemente. Los requerimientos en las composiciones restringen de tal forma al proceso que la región factible es muy pequeña. Aún así, la implementación de realizada fue capaz de partir de soluciones no factibles y encontrar valores óptimos. La estrategia de implementación utilizada, basada en la propuesta de García (1997), permite que su implementación sea factible y relativamente sencilla, esto es debido a que la interacción con el simulador se hace de manera sistemática y no requiere su adaptación para cada tipo de problemas.

En la implementación del AG mediante una estrategia de camino factible, la evaluación de la función objetivo requiere del mayor esfuerzo computacional debido a la necesidad de la convergencia del diagrama de flujo de proceso para cada individuo. Para disminuir

los requerimientos computacionales se ajustaron los parámetros de los métodos de convergencia y la especificación de las corrientes de corte.

Se realizaron cinco experimentos en los cuales en uno de ellos se obtuvo un punto factible óptimo y en los demás se obtuvo un punto factible que no resultó óptimo. En estos experimentos se utilizó un tamaño de población de 50 individuos y se evolucionaron 100 ó 150 generaciones. En los cinco experimentos la convergencia final se dio hacia un individuo no factible.

Un esfuerzo para disminuir los requerimientos de tiempo en la evolución del AG, es la implementación de una estrategia de camino no factible. En esta estrategia se convergen, de forma simultánea a la optimización, las variables de corte. El diagrama de flujo de proceso se simplifica y la evaluación del diagrama de flujo de proceso es más rápida y numéricamente estable.

Para el manejo de las restricciones se utilizaron funciones castigo, lineales y exponenciales. Estas son determinantes para la convergencia del AG tanto para la estrategia de camino factible como para la de camino no factible.

Sin embargo, en los experimentos realizados no se logró la convergencia a un punto factible de operación; la solución del problema no parece ser el número de individuos o generaciones ya que en experimentos realizados se logra la convergencia de las corrientes de corte y variables de optimización. En la implementación de una estrategia de camino no factible el efecto más importante a considerar es el de las funciones castigo ya que deben equilibrar el peso entre la convergencia de las variables de corte y la convergencia del algoritmo hacia un valor óptimo.

También se analizó la síntesis de secuencias de destilación en ambientes modulares. Para lo cual se requiere la construcción del diagrama de flujo donde las variables estructurales se representan mediante divisores de flujo. En este trabajo se dan los pasos para generar la superestructura para la separación completa de una mezcla multicomponente y se implementa un AG para la selección y diseño óptimo de la secuencia de separación. Además, se propone una nueva estrategia para la codificación y decodificación sistemática de las variables estructurales y de diseño.

La estrategia propuesta fue evaluada al resolver el problema de la separación completa de una mezcla multicomponente. En experimentos donde se manipuló el tamaño de población y el número máximo de individuos se obtuvo el mínimo costo anual en los casos con tamaño de poblaciones de cincuenta individuos.

Durante el desarrollo de los experimentos se apreció que la falta de un criterio real convergencia o heurística de paro aumenta significativamente el requerimiento computacional. De igual forma, en cuanto se utilicen estrategias generacionales, la convergencia del algoritmo no es necesariamente hacia el mejor individuo encontrado por lo que se debería utilizar algún tipo de estrategia no generacional para aplicación de un criterio convergencia fenotípica.

El principal problema encontrado para en la utilización de una superestructura para la síntesis de secuencias de destilación es el incremento de los bloques de proceso y corrientes para su interconexión conforme aumentan los componentes a separar. En ambientes modulares, este aumento origina reciclos que deben ser convergidos para cada evaluación la función objetivo con el agravante que la mayoría de las corrientes en el diagrama de flujo son corrientes "secas". Para evitar estos problemas se plantea una estrategia para la evaluación de las secuencias sin realizar la interconectividad entre los bloques, esto es mediante el control y la asignación del destilado y residuo como productos o alimentación a los separadores de la secuencia. La implementación propuesta, mediante una única columna, se ve limitada por el tipo de especificaciones de diseño que se requieren debido a la variación de los componentes claves para cada separación por lo que, como segunda propuesta, se plantea la evaluación de múltiples columnas de destilación sin interconexiones.

5.2 Recomendaciones

Para explotar al máximo las herramientas presentadas en este trabajo para la solución de problemas en ingeniería química se hacen las siguientes recomendaciones:

- El problema más importante en la aplicación de los AG a los ejemplos resueltos es la falta de un criterio de convergencia. En otros planteamientos, donde la evaluación de la función objetivo es sencilla, el aumento del número de individuos y del tamaño de población resulta ser eficiente para solucionar este problema. En los casos resueltos, donde la limitante siempre fue la evaluación de la función objetivo, es necesario el desarrollar un método eficiente para utilizar los resultados de la evaluación de la convergencia del AG en la evolución del AG.
- Con el fin de hacer más eficiente la evaluación de diagramas de flujo de proceso más complejos, se requiere el estudio del efecto de utilizar diferentes corrientes de corte y de la selección y ajuste de diferentes métodos numéricos para la convergencia de los reciclos.
- Para mejorar el desempeño del AG se recomienda estudiar la aplicación de estrategias y operadores avanzados del AG. Estas estrategias permitirían una mejor exploración de la función objetivo y un mejor procesamiento de los "esquemas óptimos" con el fin de encontrar mayor número individuos factibles. Para la convergencia del algoritmo hacia un óptimo se recomienda la utilización de alguna estrategia no generacional como elitismo.
- Para implementar estrategias de camino no factible se requiere obtener el conjunto de parámetros, no solo el tamaño de población y el número de generaciones, sino las estrategias que permitan encontrar individuos factibles.

- En el caso de optimización con restricciones, es necesario el estudio y ajuste de las funciones castigo, esto es de mayor importancia en la estrategia de camino no factible, ya que se requiere balancear no sólo la importancia de la minimización de la función objetivo con el cumplimiento de las restricciones sino que también se requiere lograr la convergencia de las variables de corte.
- De forma paralela al planteamiento de problemas más complejos de síntesis de secuencias de destilación, no se debe de olvidar que se requiere el ajuste de los parámetros del AG.
- En el ejemplo de síntesis de secuencias de destilación se observa que, debido a los flujos utilizados, el diámetro de las columnas se encuentra en el valor nominal mínimo por lo que el costo de las columnas no refleja el efecto del reflujo. Para poder analizar este efecto, se puede aumentar el flujo de alimentación.
- Al realizar una nueva corrida para la solución del problema presentado con un nuevo flujo de alimentación (15 lbmol/hr de butano, 20 lbmol/hr de pentano, 20 lbmol/hr hexano y 15 lbmol/hr de heptano), se obtuvo la misma secuencia de separación (B/C, A/B – C/D), sin embargo, el diseño de cada columna varió. Para minimizar el costo de las columnas, se observa en la nueva solución óptima un incremento del número de etapas, disminuyéndose la razón de reflujo. Los nuevos parámetros óptimos de diseño y operación son: Columna A/B: 33 etapas, alimentando en la etapa 16, razón de reflujo de 2.44, carga del condensador de 390 MBTU/hr, carga del hervidor de 408 MBTU/hr, diámetro de 2.0 ft, altura de 113.5 ft, área del condensador de 83.46 ft² y área del hervidor de 33.15 ft². Columna B/C: 35 etapas, alimentando en la etapa 16, razón de reflujo de 1.67, carga del condensador de 804 MBTU/hr, carga del hervidor de 1,108 MBTU/hr, diámetro de 3.0 ft, altura de 122.25 ft, área del condensador de 98.8 ft² y área del hervidor de 214.25 ft². Columna C/D: 44 etapas, alimentando en la etapa 21, razón de reflujo de 3.70, carga del condensador de 856 MBTU/hr, carga del hervidor de 868 MBTU/hr, diámetro de 2.5 ft, altura de 155.25 ft, área del condensador de 52.18 ft² y área del hervidor de 405.08 ft². Estas condiciones representan un costo total anual de US \$345,920.

BIBLIOGRAFIA

- Aggarwal A. y C. A. Floudas. Synthesis of General Distillation Sequences - Non Sharp Separations. *Computers Chem. Engng.* **14**, 6, 631 (1990).
- Aggarwal A. y C. A. Floudas. Synthesis of Heat Integrated Non Sharp Distillation Sequences. *Computers Chem. Engng.* **16**, 2, 89 (1992).
- Agrawal R. Synthesis of Distillation Column Configurations for a Multicomponent Separation. *Ind. Eng. Chem. Res.* **35**, 1059 (1996).
- Agrawal R. y A. Fidkowski. On the Use of Intermediate Reboilers in the Rectifying Section and Condenser in the Stripping Section of a Distillation Column. *Ind. Eng. Chem. Res.* **35**, 2801 (1996).
- Androulakis I. P. y V. Venkatasubramanian. A Genetic Algorithm Framework for Process Design and Optimization. *Computers Chem. Engng.* **15**, 4, 217 (1991).
- Bernal-Haro L., C. Azzaro-Pantel, S. Domenech y L. Pibouleau. Design of Multipurpose Batch Chemical Plants Using a Genetic Algorithm. *Computers chem Engng.* **22**, S777 (1998).
- Biegler L. T. Improved Infeasible Path Optimization for Sequential Modular Simulators - I The Interface. *Computers chem Engng.* **9**, 3, 245 (1985).
- Biegler L. T. y J. E. Cuthrell. Improved Infeasible Path Optimization for Sequential Modular Simulators --II: The Optimization Algorithm. *Computers chem Engng.* **9**, 3, 257 (1985).
- Biegler L. T. y R. R. Hughes. Feasible Path Optimization with Sequential Modular Simulators. *Computers chem Engng.* **9**, 4, 379 (1985).
- Castell C. M. L., R. Lakshmanan, J. M. Skilling y R. Bañares-Alcántara. Optimisation of Process Plant Layout using Genetic Algorithms. *Computers chem Engng.* **22**, S993 (1998).
- DeJong D. A. An Analysis of the Behavior of a class of Genetic Adaptive Systems. Tesis de Doctorado. Universidad de Michigan, An Arbor, Michigan. 1975.
- Diwekar U. y E. Rubin. Parameter Design Methodology for Chemical Processes Using a Simulator. *Ind. Eng. Chem. Res.* **33**, 292 (1994).

- Diwekar U., I. E. Grossmann y E. Rubin. An MINLP Process Synthesizer for a Sequential Modular Simulator. *Ind. Chem. Eng. Res.* **31**, 313 (1992).
- Diwekar U. y E. Rubin. Efficient Handling of the Implicit Constraint Problem for the ASPEN MINLP Synthesizer. *Ind. Eng. Chem. Res.* **32**, 2006 (1993).
- Douglas J. M. *Conceptual Design of Chemical Processes*. McGraw-Hill Chemical Engineering Series: New Jersey, NY. 1988.
- Dünnebier G. y C. Pantelides. Optimal Desing of Thermally Coupled Distillation Columns. *Ind. Eng. Chem. Res.* **38**, 162 (1999).
- Duran M. A. y I. E. Grossmann, An outer-approximation algorithm for a class of mixed-integer nonlinear programs. *Math. Prog.* **36**, 307 (1986).
- Edwards K., T. F. Edgar y V. I. Manousiouthakis. Kinetic Model Reduction using Genetic Algoritms. *Computers chem Engng.* **22**, 1-2, 239 (1998).
- Floquet P., L. Pibouleau y S. Domenech. Separation Sequence Synthesis: How to use Simulated Annealing Procedure. *ESCAPE 2*. S81 (1992).
- Floquet P., S. Domenech y G. Pibouleau. Combinatorics of Sharp Separation Synthesis: Generating Functions and Search Efficiency Criterion. *Ind. Eng. Chem. Res.* **33**, 440 (1994).
- Floquet P., S.Domenech, L. Pibouleau y M. Aly. Some Complements in Combinatorics of Sharp Separation Systems Synthesis. *AICHE Jl.* **39**, 6, 975 (1993).
- Fraga E. y K. McKinnon. CHIPS: A Process Synthesis Package. *Chem Eng. Res. & Des.* **72**, 389 (1994).
- Fraga E. y T. Senos Matias. Synthesis and Optimization of a Nonideal Distillation System Using a Parallel Genetic Algorithm. *Computers Chem. Engng.* **20**, S79 (1996).
- García S. Implementación de un Algoritmo Genético en un Simulador Modular Secuencial. Tesis de Maestría. ITESM, Campus Monterrey. 1997.
- Gert-Jan A. F. y Y. A. Liu. Heuristic Synthesis and Shortcut Design of Separation Processes Using Residue Curve Maps: A review. *Ind. Eng. Chem. Res.* **33**, 2505 (1994).
- Geoffrion A. M., Generalized Benders Decomposition. *J. Optimizat. Theory Applic.* **10**, 237 (1972).
- Goldberg, D. E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. Addison-Wesley: Reading, MA. 1989.

- Gross, B. y P. Roosen, Total Process Optimization in Chemical Engineering with Evolutionary Algorithms. *Computers Chem. Engng.* **22**, S229 (1998).
- Grossmann I. E. Mixed-integer Nonlinear Programming Techniques for the Synthesis of Engineering Systems. *Res. Engng. Des.* **1**, 205 (1990).
- Grossmann I. E. y M. Daichendt. New Trends in Optimization-Based Approaches to Process Synthesis. *Computers Chem. Engng.* **20**, 6-7, 665 (1996).
- Hu Z., B. Chen y X. He. Heuristic Synthesis for Multicomponent Products with Simple and Sharp Separators. *Computers Chem. Engng.* **17**, 4, 379 (1993).
- Hugget, A., P. Sébastian y J.-P. Nadeau. Global Optimization of a Dryer by Using Neural Networks and Genetic Algorithms. **45**, 6 , 1227 (1999)
- Kocis G. R. y I. E. Computational Experience with DICOPT solving MINLP Problems in Process Systems Engineering. *Computers chem Engng.* **13**, 307 (1989).
- Kocis G. R. y I. E. Grossmann. Global Optimization of Nonconvex MINLP problems in Process Synthesis. *Ind. Engng. Chem. Res.* **27**, 1407 (1988).
- Kocis G. R. y I. E. Grossmann. Relaxation Strategy for the Structural Optimization of Process Flow Sheets. *Ind. Engng. Chem. Res.* **26**, 1869 (1987).
- Kravanja, Z y I. E. Grossmann. PROSYN-An MINLP Process Synthesizer. *Comput. Chem. Eng.* **14**, 1363 (1990).
- Linnhoff B., H. Dunford y R. Simth. Heat Integration of Distillation Columns into Overall Processes. *Chem. Engng Sci.* **38**, 1175 (1983)
- Moros R., H. Kailes, G. Rex y St. Shaffafrczyz. A Genetic Algorithm for Generating Initial Parameter Estimations for Kinetic Models of Catalytic Processes. *Chem. Comp. Eng.* **20**, 1257, (1996).
- Nishida N., G. Stephanopoulos y W. Westerberg. A review of Process Synthesis. *AICHE Jl.* **27**, 231 (1981).
- Park T. Y y G. Froment. A Hybrid Genetic Algorithm of the Estimation of Parameters in Detailed Kinetic Models. *Computers Chem. Engng.* **22**, S103 (1998).
- Paules G. E. y C. A. Floudas. Stochastic Programming in Process Synthesis: A Two Stage Model with MINLP Recourse for Multiperiod Heat-Integrated Distillation Sequences. *Computers Chem. Engng.* **16**, 3, 189 (1992).

-
- Paules G. E. y C. A. Floudas. APROS: Algorithm Development Methodology for Discrete-Continuous Optimization Problems. *Ops. Res. J.* **37**, 902 (1989).
- Pham Q. T. Dynamic Optimization of Chemical Engineering Processes by an Evolutionary Method. *Computers chem Engng.* **22**, 7-8, 1089 (1998).
- Raman R. y I. E. Grossmann. Integer Logic and Heuristic Knowledge in MINLP Optimization for Process Synthesis. *Computers Chem. Engng.* **16**, 155 (1992).
- Reneume J-M. F., B. Koehret y X. Joulia. Optimal Process Synthesis in a Modular Simulator Environment: New Formulation of the Mixed-Integer Nonlinear Programming Problem. *Ind. Eng. Chem. Res.* **34**, 4378 (1995).
- Reneume J-M., X. Joulia y B. Koehert. Development of a Process Synthesizer in a Modular Environment. *Computers Chem. Engng.* **19**, S33 (1995a).
- Ryoo H. S. y Sahinidis N. V. Global Optimization of Nonconvex NLP's and MINLP's with Applications in Process Design. *Computers chem Engng.* **19**, 551 (1995).
- Stair C. y E. Fraga. Optimization of Unit Operating Conditions for heat Integrated Processes using Genetic Algorithms. *Proceedings I. Chem. E. Research. IChE.* 95 (1995).
- Tayal M., Y. Fu, U. Diwekar, Optimal Design of Heat Exchangers: A Genetic Algorithm Framework.. *Ind. Eng. Chem. Res.* **38**, 456 (1999)
- Torres G. Tesis de Maestría. ITESM, Campus Monterrey. 2000.
- Upreti S. y K. Deb. Optimal Design of an Ammonia Synthesis Reactor Using Genetic Algorithms. *Computers Chem. Engng.* **21**, 1, 87 (1997).
- Viswanathan J. y I. E. Grossmann. A Combined Penalty Function and Outer approximation Method for MINLP. *Computers Chem. Engng.* **14**, 7, 769 (1990).
- Viswanathan J. y I. E. Grossmann. An Alternative MINLP Model for Finding the Number of Trays Required for a Specified Separation Objective. *Computers Chem. Engng.* **17**, 9, 949 (1993).
- Wang C., H. Quan y X. Xu. Optimal Design of Multiproduct Batch Chemical Process Using Genetic Algorithms. *Ind. Eng. Chem. Res.* **35**, 3560 (1996).
- Wang K., Y. Qian, Y. Yuan, P. Yao. Synthesis and Optimization of heat Integrated Distillation Systems using an Improved Genetic Algorithm. *Computers Chem. Engng.* **23**. 125 (1998)

Centro de Información-Biblioteca



30002005827399