



# INTEGRACION IV

UTN - Facultad Regional Rosario  
Ingeniería Química

2011



Sistemas de elevada dimensión.

Algoritmos de particionado,  
rasgado y ordenamiento.

Arquitectura modular  
secuencial.

**Solución**

**Modelo del proceso**

**Sistema de ecuaciones**

Directa o Bastante complicada

El modelo matemático consiste de: **No lineales** y **Acopladas**

El modelo matemático consiste de relaciones que se establecen para cada equipo que forma parte del sistema

- Balance de cantidad de movimiento
- Balance de materia
- Balance de energía
- Ecuaciones de diseño
- Relaciones termodinámicas y cinéticas
- Especificaciones de variables o restricciones

Estado estacionario  
~~Estado no estacionario~~

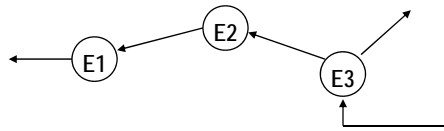
**FLOW SHEET**

**Diagrama de flujo o de proceso**

**Diagrama de flujo de información**

Se supone conocida L

## Definiciones

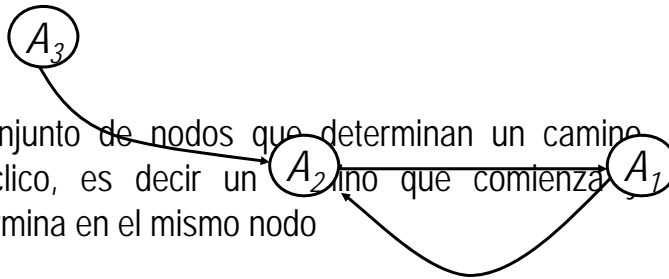


- **Nodo:**

- Predecesores (antecesores): El nodo 3 es antecesor del 2
- Sucesores: El nodo 1 es sucesor del 2

- **Ciclo:**

- conjunto de nodos que determinan un camino cíclico, es decir un camino que comienza y termina en el mismo nodo



Aspectos  
estructurales

Topología del sistema  
de ecuaciones

Método de resolución  
eficiente.

Para sistemas  
de alta  
dimensión

**Particionado en subsistemas  
independientes.**

Al ser resueltos cada uno de ellos en un orden  
particular se obtiene la solución global del  
sistema de ecuaciones dado

## Preprocesamiento

- Particionado: Detección de tramos que contienen ciclos y reducción a pseudonodos que los almacene
- Rasgado: definición de la(s) corriente(s) iteradora(s) de cada pseudonodo
- Ordenamiento: determinación del orden de precedencia de los módulos

## ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE SISTEMAS DE ELEVADA DIMENSIÓN

## Especificaciones de Variables y Grados de Libertad de un Sistema de Ecuaciones

Análisis y Diseño de procesos



Modelo



Sistema de ecuaciones

{  
N variables  
M ecuaciones  
independientes

Existen tres alternativas

- $M > N$  (el sist. esta sobre especificado y no tiene solución)



Debe realizarse un nuevo modelo

- $M = N$  (el sist. esta completamente definido y tiene solución)



- Sist lineal: sol. única
- Sist no lineal: múltiples sol.

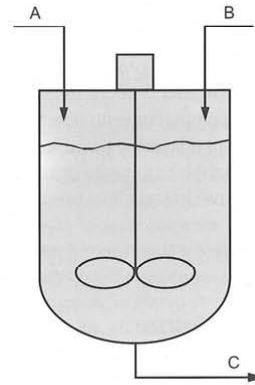
- $M < N$  (para definir el sist. se deben realizar  $N - M$  especificaciones adicionales)



Valores establecidos a las variables de diseño

## Ejemplo 1: Tanque de mezclado

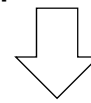
- Balance de materia:  
 $A + B = C$
- Especificaciones de diseño  
 $K = B/A$



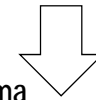
### CASO A:

- Balance de materia:  
 $A + B = C$
- Especificaciones de diseño  
 $K = B/A$
- Restricciones:  
 $A = 1000$   
 $C = 2000$   
 $K = 4$

4 variables  
5 ecuaciones  
independientes



**No tiene solución  
el problema**

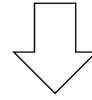


- Problema sobreespecificado
- Inadecuado planteo del modelo
- Eliminar una ecuación

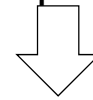
## CASO B:

- Balance de materia:  
 $A + B = C$
- Especificaciones de diseño  
 $K = B/A$
- Restricciones:  
 $A = 1000$   
 $C = 2000$   
 $K = 4$

4 variables  
4 ecuaciones  
independientes



Tiene solución  
única el problema

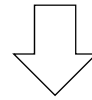


- $B = 4000$
- $C = 5000$

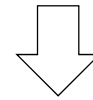
## CASO C:

- Balance de materia:  
 $A + B = C$
- Especificaciones de diseño  
 $K = B/A$
- Restricciones:  
 $A = 1000$   
  
 $K = 4$

4 variables  
3 ecuaciones  
independientes



Tiene infinitas  
soluciones.



- Existen infinitas combinaciones de valores de B, C y K que satisfacen las 3 ecuaciones

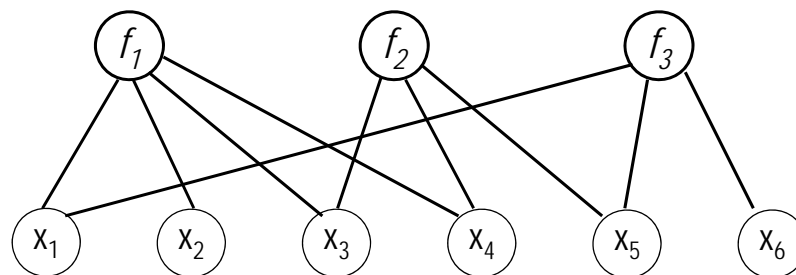
Sea el siguiente sistema de ecuaciones:

$$f_1(x_1, x_2, x_3, x_4) = 0$$

$$f_2(x_3, x_4, x_5) = 0$$

$$f_3(x_5, x_6, x_1) = 0$$

El sistema anterior puede ser representado según el siguiente esquema



$f_f$  Funciones

$x_x$  Variables

— Existe relación entre las variables y las ecuaciones



Dado que existen:

- 6 variables y
- 3 ecuaciones,

Se deben especificar 3 variables para lograr un sistema compatible.

Existen varias opciones para asignar las variables.

Por ejemplo, sea el conjunto especificado:

$$(X_6, X_5, X_4)$$

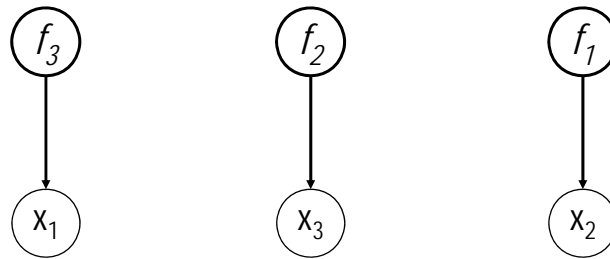
Para el sistema de ecuaciones:

$$f_1(x_1, x_2, x_3, \cancel{x_4}) = 0$$

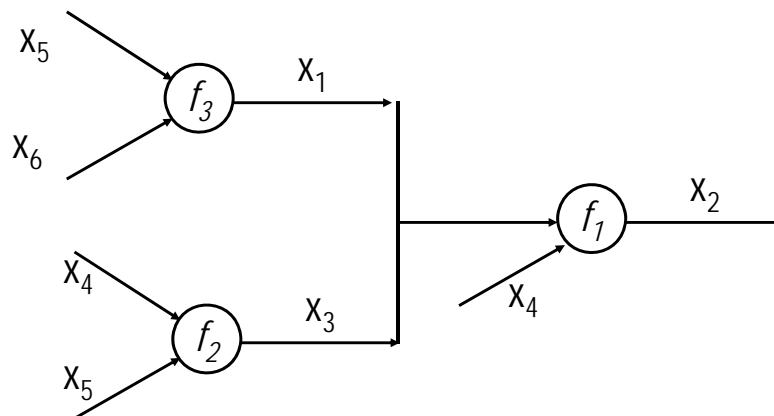
$$f_2(x_3, \cancel{x_4}, \cancel{x_5}) = 0$$

$$f_3(\cancel{x_5}, \cancel{x_6}, x_1) = 0$$

El sistema luego de la asignación de  $(X_6, X_5, X_4)$  como variables especificadas queda reducido a:



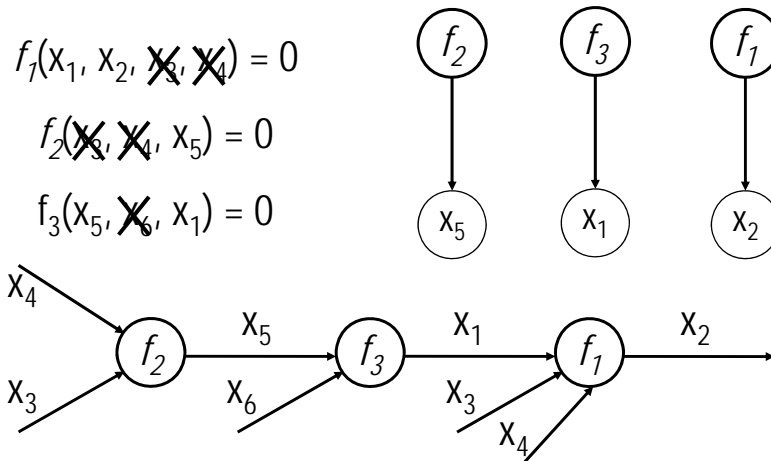
### Orden de resolución



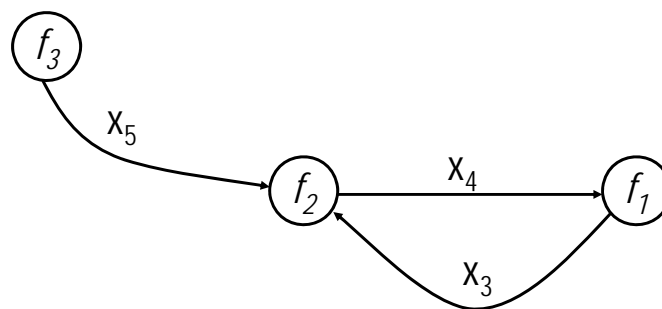
Existe una **secuencia acíclica** de resolución, sin necesidad de iterar, ya que conocidas las variables especificadas se puede resolver en dicha forma

El conjunto de asignaciones anteriores no es el único que puede realizarse.

Si el conjunto especificado fuera  $(X_3, X_4, X_6)$ , se tendría el siguiente esquema de resolución y de asignaciones de variables:



Si el conjunto especificado es  $(X_1, X_2, X_6)$ , se tendría el siguiente esquema de resolución:



Aquí resulta en una secuencia cíclica de resolución, esto es:

- Deberá resolverse simultáneamente  $f_1$  y  $f_2$ , o
- Suponerse un valor para  $x_4$  o  $x_3$  e iterar secuencialmente hasta lograr la convergencia

## Conclusión

- La elección de un conjunto de variables a ser especificadas no es neutra, sino que según como se la realice, el sistema resultante podrá o no ser resuelto secuencialmente,
- Existe un grado de dificultad inherente que depende estrictamente del modo en que se han realizado las asignaciones.
- En sistemas de elevada dimensión es muy difícil deducir cómo especificar dicho conjunto, de manera tal de minimizar el esfuerzo para resolver luego el sistema, por lo que se han propuesto numerosos algoritmos para realizar dicha tarea.

En general, un sistema de ecuaciones tiene la forma:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 ; i = 1, \dots, M$$

Los grados de libertad del sistema se definen como la diferencia entre el número de variables menos el de ecuaciones:

$$G\ell = (n - M)$$

Se puede fácilmente demostrar que el número de posible combinaciones para asignar los  $G\ell$  grados de libertad responde a la siguiente expresión:

$$NA = C_{G\ell}^n = \binom{n}{G\ell} = \frac{n!}{m! G\ell!}$$

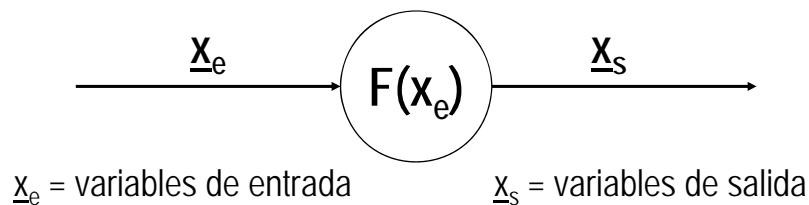
# ARQUITECTURA MODULAR SECUENCIAL

PARTICIONADO, RASGADO Y  
ORDENAMIENTO. ALGORITMOS

## Arquitectura modular secuencial

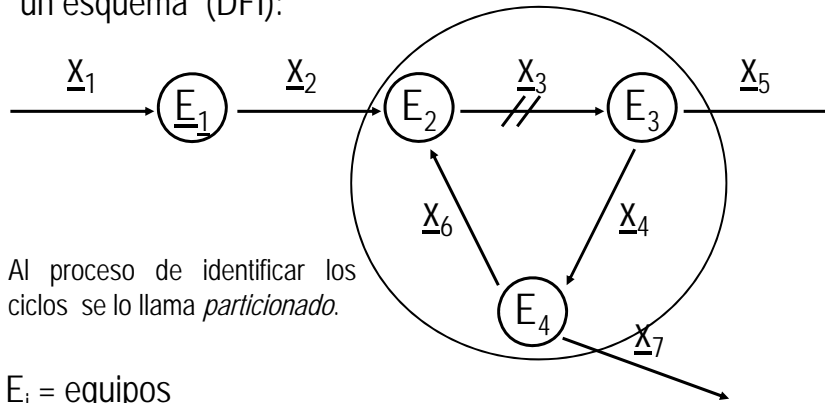
- *Se define un diagrama de flujo de información (DFI) que representa a la planta, identificando subunidades de proceso o subsistemas o módulos específicos*
- *Se define una estrategia de resolución secuencial, mediante el particionado del sistema de ecuaciones de la planta completa*

- Al forzar la partición del sistema global en subsistemas, se pierde gran parte de la flexibilidad original, sacrificando seguramente alternativas óptimas de particionado.
- Es el precio a pagar por utilizar una *guía no matemática*, pero conveniente desde el punto de vista físico o de ingeniería.
- conocemos las variables (generalmente asociadas a las corrientes físicas) de entrada, siendo el objetivo el cálculo las variables (corrientes) de salida.



- Cada módulo debe resolverse por el método más conveniente, fijados los  $\underline{x}_e$ .
- Debe tenerse en cuenta que en los balances de materia y energía, generalmente deben utilizarse métodos para estimar propiedades fisicoquímicas, para el cálculo por ejemplo de las constantes de equilibrio, o entalpías.
- Esto agrega un número importante de ecuaciones y no linealidades.

Dada una planta, compuesta por diversos equipos conectados entre sí, todos representados por su correspondiente sistema de ecuaciones, se puede obtener un esquema (DFI):



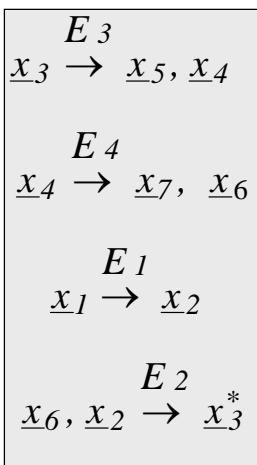
Al proceso de identificar los ciclos se lo llama *particionado*.

$E_i$  = equipos

$\underline{x}_i$  = variables de entrada o salida o "corriente"

*Rasgado*: Corriente o grupo // de variable de iteración

una posible secuencia de resolución sería (se conoce  $\underline{x}_1$ , y se supone conocido además el valor de la corriente  $\underline{x}_3$  - valor supuesto o corriente iteradora):



se comparan los valores  $\underline{x}_3$  y  $\underline{x}_3^*$  en cada iteración hasta lograr que el error satisfaga un criterio especificado, por ejemplo:

$$\| \underline{x}_3^* - \underline{x}_3 \| < 10^{-8}$$

El orden de resolución se llama *orden de procedencia o de resolución*. Las secuencias no necesariamente son únicas. A las corrientes iteradoras se las llama también *corrientes de corte* (en este caso  $\underline{x}_3$ ).

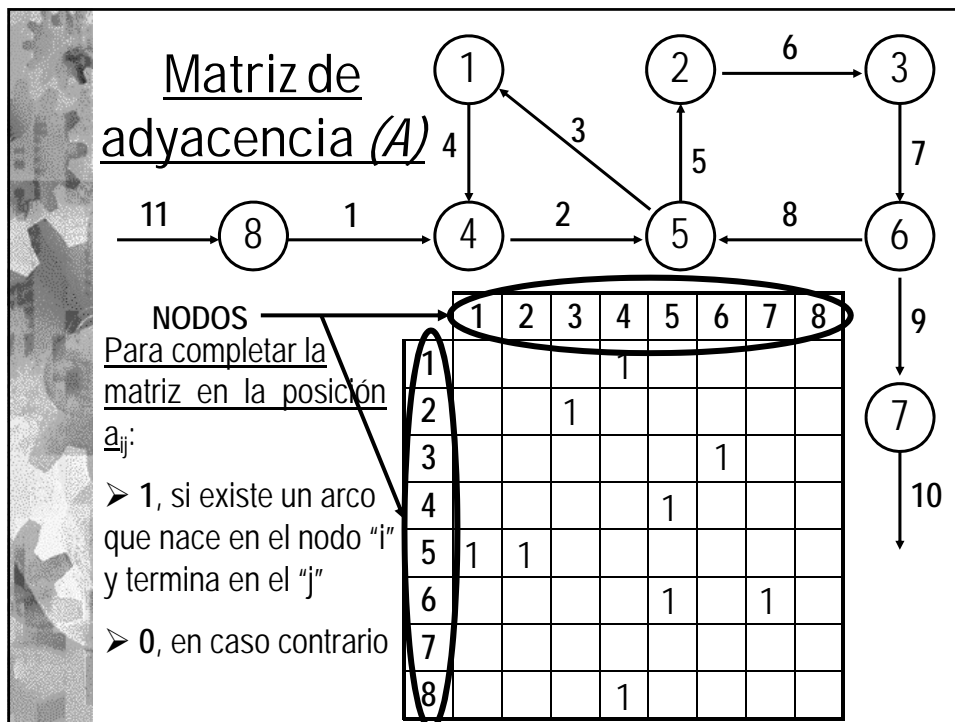
➤ Como vimos, la estructura modular secuencial surge como consecuencia de una asignación que se orienta según los módulos de equipos o bien las relaciones físicas en el proceso, contrariamente al *flujo de información matemático* inherente a las relaciones entre las variables y funciones, según la estructura del sistema.

➤ Estrategias:

- el problema global se resuelve simultáneamente y para ello se particiona en subsistemas con un criterio que da prioridad a la estructura (*orientado a ecuaciones*)
- Resolver los equipos o módulos según una secuencia guiada por las interacciones físicas, (aplicar un *criterio modular secuencial*)

## Algoritmo de particionado de Keham y Shacham





Algoritmo de particionado de Keham y Shacham

- Introduce la *matriz de índices "I"*.
- Esta se define como una matriz de  $m$  filas (siendo  $m$  el número de elementos no nulos de "A") y dos columnas.
- Para una fila dada:
  - Contiene todos los nodos que dispongan de sucesor inmediato
  - La columna de la derecha contiene dicho sucesor inmediato.
- Keham y Shacham propusieron un algoritmo basado en la *matriz de índices* que logra ubicar los ciclos

La matriz de índices correspondiente a la matriz de adyacencias (o al grafo) anterior, es la siguiente

$I =$

1	4
2	3
3	6
4	5
5	1
5	2
6	5
6	7
8	4

Una segunda reducción se logra eliminando los nodos:

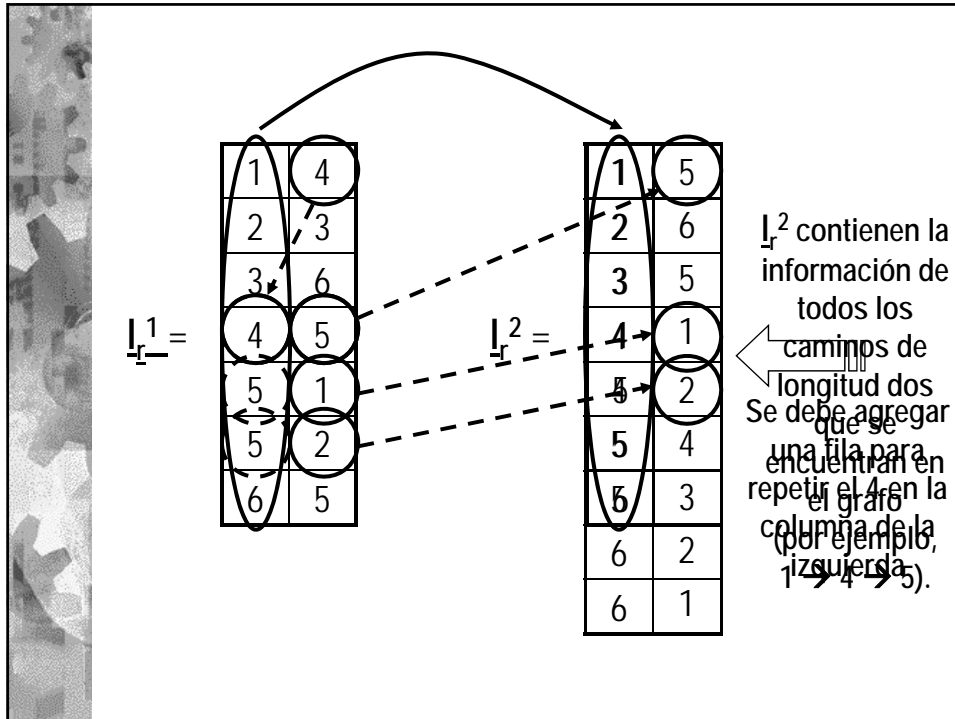
➤ **de entrada:** aquellos que no tienen antecesores inmediatos (en la matriz figuran en la columna de la izquierda y no en la columna de la derecha)

➤ **de salida:** aquellos que no tienen sucesores y figuran en la columna de la derecha pero no en la izquierda

Este paso permite la eliminación de información irrelevante y la creación de la matriz reducida " $I_r$ "

A continuación se computan las sucesivas potencias de  $I_r$  (por ejemplo,  $I_r^2$ ), de la siguiente manera:

- Se toma cada elemento de la columna izquierda de la matriz anterior y se lo escribe nuevamente en la columna izquierda de la *matriz potencia*
- En la columna de la derecha de la matriz potencia se ubica el nodo sucesor inmediato del que se encontraba en la columna derecha en la matriz anterior.



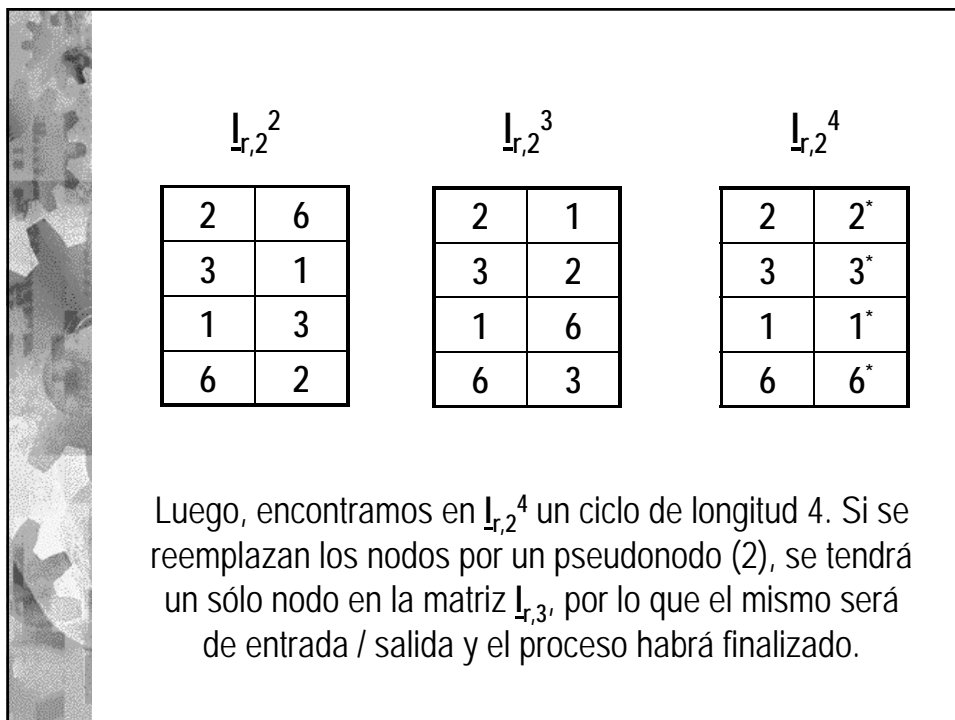
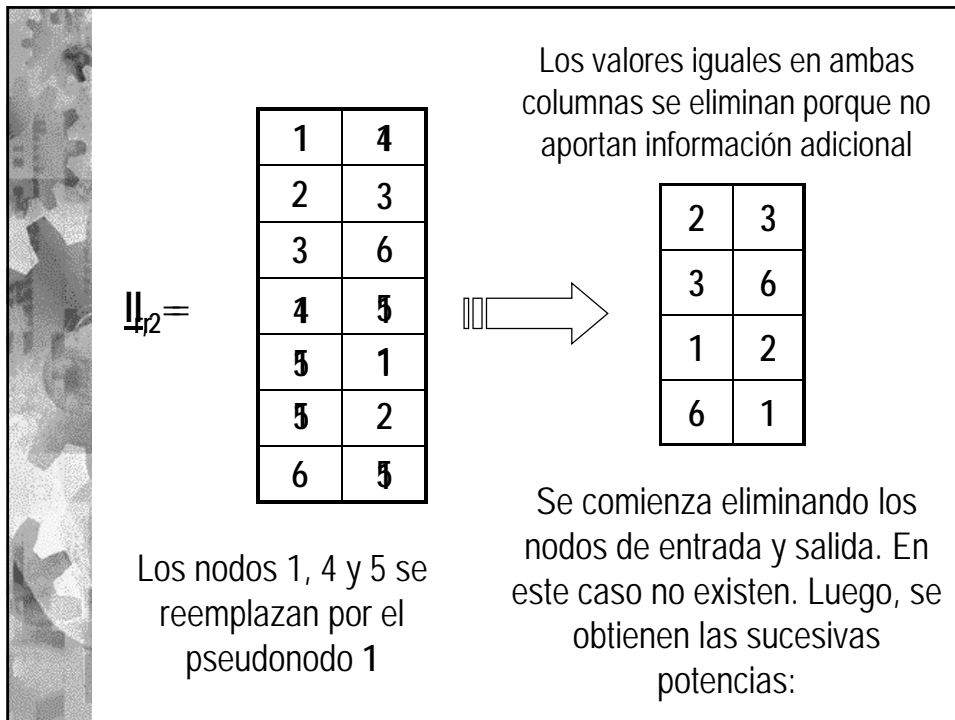
Para obtener  $I_r^3$  se procede tomando, por ejemplo, el primer valor en  $I_r^2$  (primer fila = 1) y se recorren los correspondientes sucesores (en la matriz  $I_r$ ) del nodo colocado a la derecha, en este caso 5.

1	1*
1	2
2	5
3	1
3	2
4	4*
5	5*
5	3
6	3
6	4

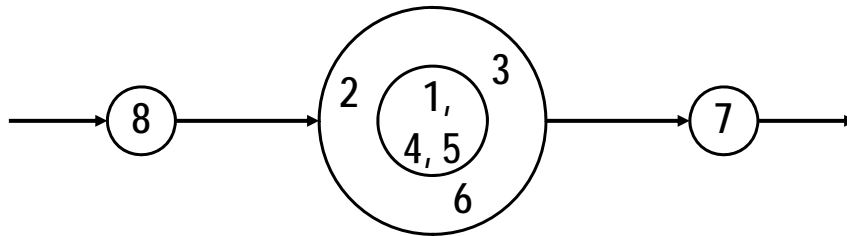
Cuando se obtienen en una fila valores iguales en las dos columnas, existe un camino que nace y termina en el nodo en cuestión

Aquí obtenemos, además de los caminos de longitud 3, tres nodos (\*) que pertenecen a un camino cíclico de longitud 3.

El algoritmo prosigue asignando los nodos a un pseudonodo (1) que los engloba. Luego se reemplazan en  $I_r$  por 1 para luego iniciar nuevamente el proceso (a partir de  $I_{r,2}$ ).



## Gráficamente



Se puede observar que se obtienen los ciclos y un orden de resolución.

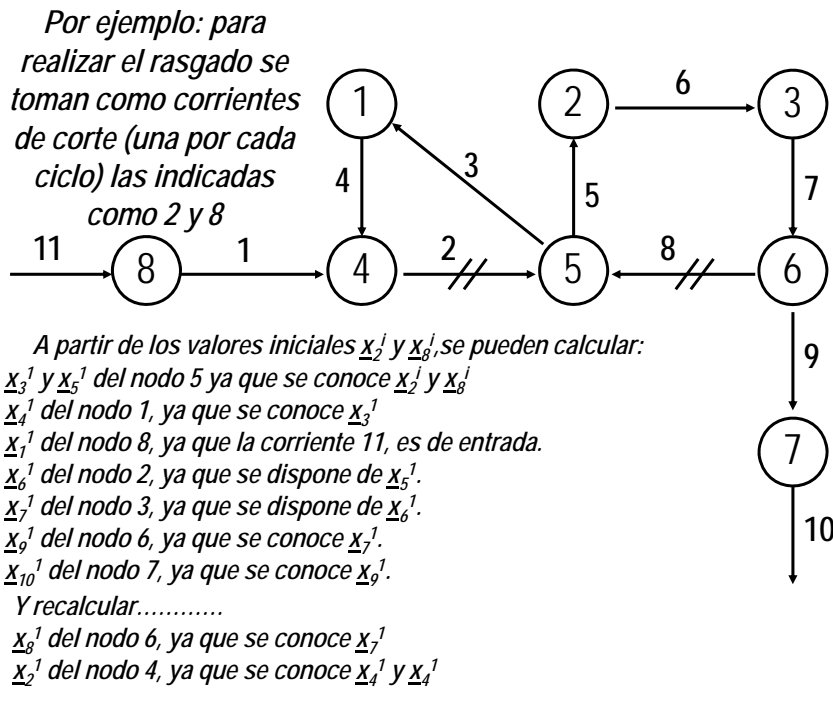
No obstante, se sabe que para resolver cada ciclo hay que designar una corriente iteradora. El criterio para decidir cada una de ellas no se obtiene de este algoritmo.

## En síntesis, el procedimiento aplicado por el algoritmo es:

- Eliminar los nodos de entrada y salida (obtener  $I_r$ ).
- Calcular las sucesivas potencias de  $I_r$ . Para ello se reemplazan los sucesores de los nodos en la matriz a elevar por los sucesores de los mismos (en el grafo, o en  $I_r$ ), colocándolos en la matriz resultado. Si hubiese más de un sucesor, se debe proceder para cada uno de ellos.

# RASGADO DEL DIAGRAMA DE FLUJOS O GRAFO

- *El resultado de aplicar los algoritmos de particionado es detectar los ciclos, de tal manera de transformar el grafo original en una secuencia lineal. Esta secuencia puede tener subgrafos cíclicos. Luego, se deberá resolver cada subproblema (linealizar un grafo cíclico).*
- *La técnica de rasgado consiste en detectar las corrientes de corte que permitan que cada subgrafo cíclico pueda ser resuelto, esto es, detectar las corrientes de corte que permitan que cada subgrafo cíclico pueda ser solucionado mediante una técnica iterativa.*
- *Asignar una corriente de corte es similar a definir una nueva corriente de entrada a la planta, sólo que sus valores son supuestos y sirven para generar una secuencia que permita resolver todas las ecuaciones del sistema, tantas veces como sea necesario hasta lograr convergencia*



- Si bien obtuvimos todos los valores asociados a las variables de todas las corrientes, éstos pertenecen a la primera iteración.
- Se debe verificar si los valores calculados  $\underline{x}_2^1$  y  $\underline{x}_8^1$  coinciden con los supuestos  $\underline{x}_2^i$  y  $\underline{x}_8^i$  dentro del margen de error especificado.
  - Si lo hacen, finaliza el cálculo.
  - De lo contrario, y aplicando sustitución directa, se proponen nuevos valores, generando una secuencia tal que finaliza cuando se obtiene el criterio de error deseado.
- si bien es simple identificar las corrientes de corte en un grafo sencillo, no resulta equivalente con cientos de nodos y/o corrientes.
- Luego, se necesita un método sistemático, implementable en computadora, que permita tal selección.

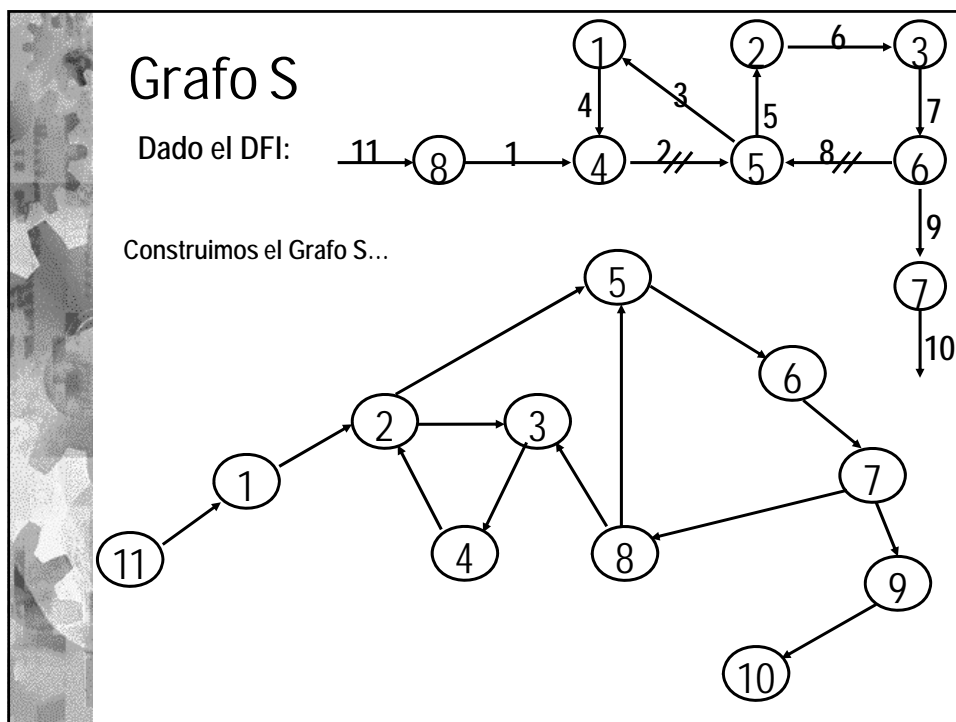
- *Dado que se trata de un particionado de ecuaciones, lo lógico resultaría pensar en un criterio que minimice el esfuerzo de cálculo. Pero, no existen tales criterios o lineamientos sin conocer en detalle el problema a resolver.*
- *El problema es que el algoritmo debe tratar casos generales, por lo que debiéramos obtener criterios universales.*

- *Si se supone que todas las corrientes poseen la misma cantidad de variables, es lógico pensar que se deben buscar el mínimo número de corrientes de corte para linealizar el ciclo (debido a que ello implica el mínimo número de variables iteradoras).*
- *Sin embargo, no está demostrado que un número mayor de corrientes de corte implique mayor esfuerzo de cómputo. No obstante, se puede asumir que así será en la mayoría de los casos.*
- *El algoritmo debería permitir que el usuario le introduzca pesos penalizando ciertas corrientes y favoreciendo otras, de tal manera de recorrer las alternativas considerando tales criterios*



# ALGORITMO DE BARKELEY Y MOTARD (1972)

- *El algoritmo propuesto por Barkeley y Motard tiene como objetivo el rasgado de los subgrafos cíclicos para obtener un conjunto de corte con el menor número de corrientes iteradoras.*
- *Este algoritmo se basa en el concepto de grafo de corrientes (S) o grafo dual. Éste se logra intercambiando los roles, esto es, los nodos ahora son las corrientes y los arcos se obtienen a través del flujo de información en el DFI.*
- *Para obtener el grafo S correspondiente a un diagrama de flujo de información:*
  - *El primer paso es incorporar tantos nodos como corrientes existan.*
  - *Luego, se vinculan éstos según el sentido de la información que circula entre las corrientes en el grafo original.*



### Grafo S

*Es evidente que al manipular el grafo S ahora se lo hace sobre las corrientes (nodos), y dado que se buscan las corrientes de corte, se comprende la utilidad de la transformación del algoritmo propuesto por Barkeley y Motard*

### *Nodo dominado.*

Se dice que un nodo cualquiera  $n_i$  en  $S$  es dominado por otro  $n_j$  si  $n_j$  es el único antecesor inmediato de  $n_i$ .

Los autores proponen un proceso de reducción de  $S$  mediante el procedimiento de englobar (engullir o fundir) los nodos dominados por sus dominantes sin perder la información en el grafo  $S$ .

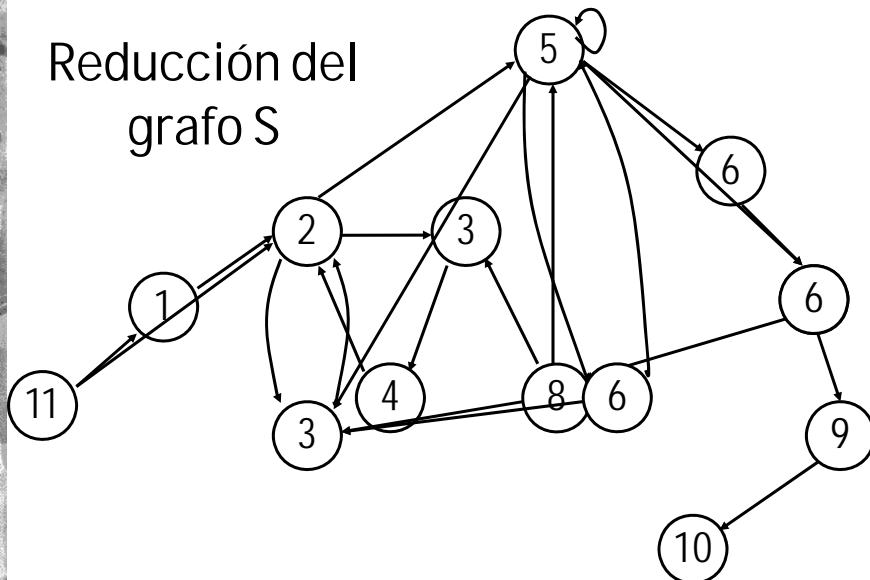
Por ejemplo,

el *nodo 1* es dominado por el *11*,

el *4* lo es por el *3* y

el *7* por el *6*.

Reducción del  
grafo  $S$



- Se puede observar que no puede reducirse más el grafo S, ya que:
  - el nodo 2 tiene más de un antecesor, el 11 y el 3.
  - Y lo mismo sucede con 5 y el 3.
- Aquí se introduce un nuevo concepto, el de autociclo, que es precisamente la particularidad que presenta el nodo 5 que están en ciclo con él mismo, al ser antecesor y sucesor de sí mismos simultáneamente.

- *Este hecho está íntimamente relacionado con la definición de rasgado o corriente de corte, ya que por definición, cada corriente puede ser calculada sólo si se conocen las entradas al equipo (nodo) del cual sale; y si una corriente forma un autociclo, esto implica que no puede calcularse en el DFI si no se conoce su valor previamente, o lo que es lo mismo, si no se procede al rasgado del ciclo al cual pertenece.*
- *Para este ejemplo, las corrientes 2 y 5 conforman un conjunto de corrientes de corte de tamaño mínimo.*
- *Como se puede deducir en función del proceso de reducción, no necesariamente el conjunto (2,5) es el único resultado, ya que se podrían obtener otros.*

- Previamente se había propuesto el conjunto (2,8), que a los efectos prácticos (asumiendo que todas las corrientes tienen la misma cantidad de variables, y no disponiendo de ninguna otra información del problema específico), resultará equivalente al conjunto (2,5).
- Obviamente una vez que se han logrado las corrientes iteradoras se puede proponer una secuencia de resolución (ordenamiento).

Hay situaciones especiales o particulares que se deben contemplar.

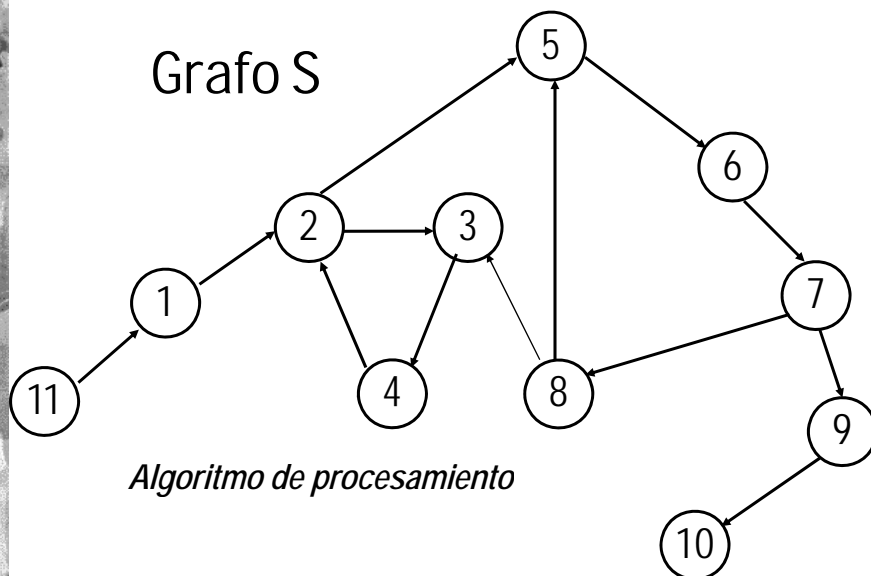


*Aquí, no existen nodos en los cuales se encuentre un único antecesor, por lo que no puede ser reducido. A este caso se lo llama ciclo de dos corrientes y sólo puede ser resuelto (reducir) cortando una de las corrientes.*

*Si se presenta una sucesión de varios ciclos, en general, es conveniente cortar corrientes intermedias que permitan rasgar más de un ciclo simultáneamente.*

## Resumiendo

- El algoritmo consiste en los siguientes pasos:
  - Reducción de los nodos del grafo hasta detectar *autociclos* o ciclos de dos corrientes.
  - Elección del conjunto de corrientes de corte, según el criterio expuesto.



Para la implementación computacional es conveniente trabajar con una lista que contenga la información de los nodos y sus antecesores inmediatos.

Nodo	Antecesor
1	11
2	1, 4
3	2, 8
4	3
5	2, 8
6	5
7	6
8	7
9	7
10	9

Nodos con un sólo antecesor inmediato

Se eliminan de la lista esos nodos y se los reemplaza por sus dominantes

Nodo	Antecesor
2	11, 3
3	2, 5
5	2, 5

¿existen en la lista de nodos un autociclo?

En la tabla figuran a la izquierda y derecha en la misma fila

Nodo	Antecesor
2	2


Se selecciona el nodo como corriente de corte y luego se lo elimina de la tabla. (nodo 5)

Al eliminar 2 (autociclo), queda la lista vacía

Dos corrientes de corte 2 y 5



## ETAPA DE ORDENAMIENTO

- 
- Una vez que se han obtenidos los ciclos y se han rasgado, debe ordenarse el conjunto de nodos en la forma en que serán resueltos.
  - En general, con la información que proveen los algoritmos ya vistos (los subgrafos cíclicos y las corrientes de corte que los linealizan), es posible por inspección en las listas disponibles (pasos intermedios en cada algoritmo) ordenar los nodos según la secuencia de resolución que imponen las corrientes iteradoras seleccionadas.



# Ejercicio de Aplicación 1

