

CAPÍTULO XII

OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS POR COMPUTADORA

Por
Jorge Marcelo Montagna

XII.1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años se han popularizado las aplicaciones de simulación de procesos por computadora. Numerosas aplicaciones para el tratamiento de procesos específicos de diversas industrias (petróleo, petroquímica, alimentos, papel, farmacéutica, etc.), así como la amplia difusión de los paquetes comerciales de simuladores generales reflejan esta tendencia. Sin embargo, la utilización de estas herramientas de simulación para tratar problemas de optimización ha sido la que más se ha demorado. Recién en la década de los 80 hay un esfuerzo continuo que permite la resolución de este tipo de problemas. Hasta ese momento sólo técnicas muy rudimentarias, a través de la resolución de gran número de simulaciones, habían permitido tratar problemas relativamente simples con un alto consumo de recursos computacionales. En general, se trataba de enfoques que separaban la simulación de la optimización. Los métodos de programación matemática rudimentarios requerían la evaluación de distintos puntos, para cada uno de los cuales era necesario resolver una simulación completa. El optimizador era un programa separado que requería al simulador como un subprograma con escasa integración entre ambos. Esto dio lugar a altos requerimientos de cómputo que impidieron la resolución de problemas de optimización de cierta complejidad.

Sin duda se trataba de un tema pendiente pues el formato real en el cual se presentan muchos de los problemas que un ingeniero debe tratar con un simulador es el de optimización, todos los cuales habitualmente representan importantes beneficios económicos. En la mayoría de los casos, a través de consideraciones intuitivas, el ingeniero proponía varios puntos, aprovechaba las facilidades del simulador para evaluar cada alternativa, y seleccionaba el mejor, aceptándolo de algún modo como el “óptimo”, Obviamente esto está muy lejos de significar un enfoque apropiado para optimizar, aunque sí razonable si se tiene en cuenta las limitaciones de los métodos empleados y la precariedad de los recursos disponibles. La disponibilidad de computadoras más rápidas y de estrategias más eficientes ha permitido resolver problemas de optimización adecuadamente.

El ingeniero químico debe tratar problemas de optimización en distintas circunstancias de su actividad:

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - 81999

- a. Desarrollo de procesos: durante la evaluación de alternativas de un proceso, por ejemplo para la evaluación económica de un proyecto, se debe basar la comparación en el óptimo para cada alternativa. Dado que este tipo de problemas se presenta en las primeras etapas de un proyecto, es normal utilizar modelos simplificados al comienzo y dejar los rigurosos para cuando quedan unas pocas alternativas entre las cuales elegir, y se requiere un mayor nivel de detalle.
- b. Diseño de planta: una vez que se ha determinado la configuración de la planta, se utilizan los resultados de los balances de materia y energía para realizar el diseño del proceso y de los equipos, el dimensionamiento de las unidades, la estimación de costos, etc. Son importantes en este tipo de problemas los costos de las unidades y los costos operativos para determinar el diseño óptimo de la planta. Distintas alternativas pueden ser consideradas en este ámbito. Por ejemplo Doering y Gaddy (1997) optimizan la confiabilidad de un proceso.
- c. Operación de la planta: esta es, probablemente, la aplicación más habitual. Sobre una planta existente se trata de optimizar su performance variando sus condiciones operativas. Esto suele estar fundado en una serie de variaciones, por ejemplo:
 - Nivel de la demanda, por motivos estacionales, de cambios de los mercados, etc.
 - Especificaciones del producto.
 - Característica de las alimentaciones al proceso.
 - Búsqueda de nuevas alternativas de producción, buscando reducir costos de servicios, incremento de la producción, etc.

En símbolos, la simulación de un proceso se puede plantear como un sistema de ecuaciones de la forma

$$h(x, u) = 0 \quad (1)$$

donde las variables del mismo han sido separadas en dos conjuntos x y u . Para poder resolver este sistema de ecuaciones es preciso cubrir sus grados de libertad, para lo cual existen muchas alternativas. En particular se ha dividido el conjunto de variables en u , que contiene a las variables seleccionadas para cubrir los grados de libertad, y x , que contiene a las variables cuyo valor se determina como resultado de la simulación. Cada vez que se resuelve la simulación, el conjunto de variables u se tiene un valor predeterminado y fijo. x y u son también denominadas variables de proceso y diseño respectivamente. Matemáticamente podrían ser agrupadas en un único vector, pero desde el punto de vista del ingeniero químico, las variables de proceso son obtenidas como resultado de los balances de materia y energía, mientras

que las variables de diseño son utilizadas por el ingeniero para especificar el diseño del proceso. De acuerdo a la manera en que se cubran los grados de libertad u se tienen los distintos enfoques posibles para resolver la simulación.

En caso de plantearse un problema de optimización, las ecuaciones que modelan el problema pasan a formar parte del conjunto de restricciones del problema de optimización. Se tiene en ese caso un problema del tipo:

(P.1)

$$\text{Min } f(x, y, u) \quad (2)$$

sujeto a

$$h(x, y, u) = 0 \quad (3)$$

$$g(x, y, u) \leq 0 \quad (4)$$

$$c(x, y, u) = 0 \quad (5)$$

donde (2) corresponde a la función objetivo del problema, (3) son las ecuaciones del modelo de simulación, y (4) y (5) son las restricciones de desigualdad e igualdad del problema de optimización, respectivamente. En este caso se ha introducido un nuevo conjunto de variables y , que corresponde al conjunto de variables de decisión, o variables independientes, del problema de optimización. Esto implica que la dimensión de u se ha reducido, ya no es la misma de (1), pues algunos de sus elementos han pasado a formar parte de y . Mientras la simulación de procesos requiere la solución de un sistema de ecuaciones con el mismo número de variables que de ecuaciones, la optimización es un problema más general, en el cual el número de variables excede el número de ecuaciones, de modo que existe la posibilidad de ajuste o “trade-off” para minimizar o maximizar la función objetivo mientras se satisfacen las ecuaciones.

La función objetivo puede adoptar formas muy diversas de acuerdo al tipo de problema de que se trate: maximizar beneficios, minimizar costos, minimizar el consumo de energía, maximizar la obtención de un cierto producto o su pureza, etc. De igual modo para las funciones g y c existen muchas alternativas de acuerdo al modelo que desarrolle el ingeniero, empezando por los límites inferior y superior que puede alcanzar una variable, o restricciones de cota, por ejemplo a la pureza de un producto.

XII.2. EJEMPLOS.

Se presentan a continuación algunos ejemplos para mostrar distintas aplicaciones de optimización (Westerberg, 1981).

XII.2.1. Diseño de un absorbedor

La figura XII.1 muestra el diagrama de un absorbedor. Cuando se diseña un equipo de este tipo, se debe establecer la altura y el diámetro del absorbedor, el caudal de agua requerido, etc. Se pueden plantear distintos criterios a satisfacer. Por ejemplo, un objetivo podría ser encontrar la solución que requiere la mínima inversión en equipamiento y que satisface las restricciones de que al menos el 99% de la acetona y el 99,5% del éter son eliminados. Otra alternativa es encontrar la mínima cantidad de agua requerida para hacer esta tarea en una columna de 15 m de alto. Conociendo ambas respuestas se puede tener una idea de la sensibilidad del diseño a ambos criterios.

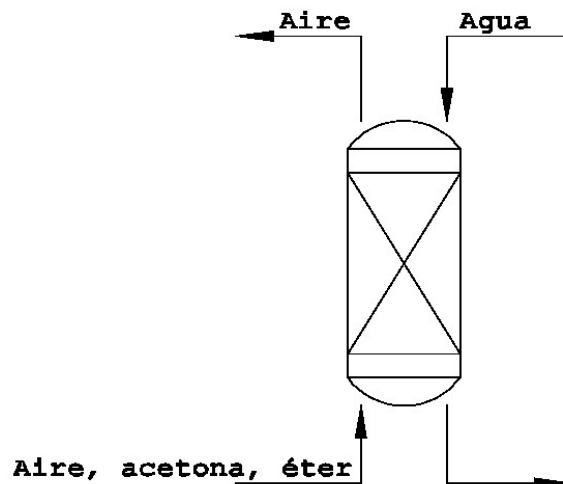


Figura XII.1

Luego de resuelto el problema inicial, se puede plantear otras cuestiones. Por ejemplo, cuánto mejora la eliminación de acetona con un aumento en la inversión de un 10%, o cuánto si se incrementa el agua un 5% sobre el mínimo. Resolver

planteos de este tipo darían márgenes de seguridad al diseño del absorbedor ante posibles modificaciones de la operación, por ejemplo ante consideraciones ambientales. Se tendrían así elementos para aceptar o rechazar la opción del absorbedor.

XII.2.2. Diseño de una planta completa

La figura XII.2 muestra el ejemplo de un flowsheet de una planta completa, en el cual se aumenta la presión de las dos alimentaciones, luego se calientan y finalmente reaccionan para formar el componente D. La segunda alimentación contiene al componente B, un reactivo, y al componente C, un inerte no condensable. Las partes de A y B que no han reaccionado son separadas y recicladas junto con C. El componente C debe ser removido y se incluye una corriente de purga donde la concentración de C está en el máximo en el flowsheet.

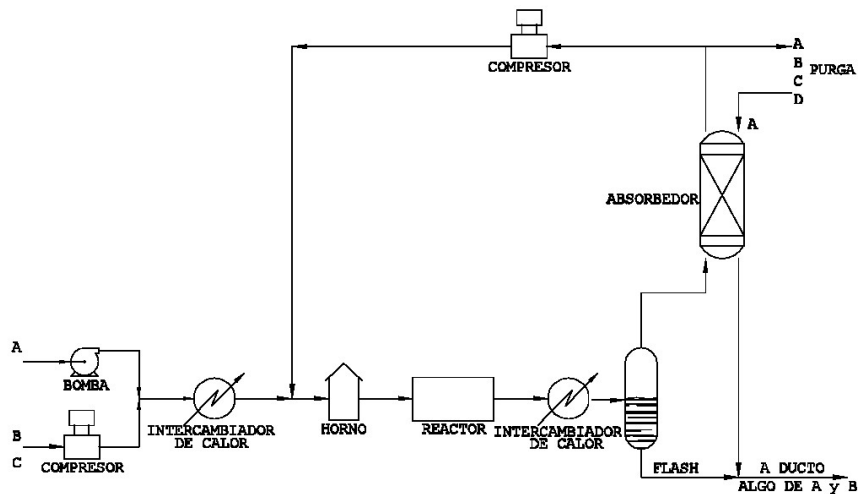


Figura XII.2

Diversas cuestiones debe tratar el diseñador. Por ejemplo determinar el diseño que minimiza la cantidad de D perdida en la purga. Puede también tratar de hallar ciertos objetivos de diseño o un mínimo uso de los servicios. La respuesta a cada una de estas cuestiones da un profundo e importante conocimiento del flowsheet, de los costos asociados y de la sensibilidad del diseño.

XII.2.3. Un problema de optimización con óptimos locales

La figura 3 muestra un problema muy simple. Se trata de dos intercambiadores de calor operando en secuencia sobre una corriente cuyo caudal y temperaturas de entrada y salida son fijas. El objetivo es minimizar el costo de inversión de los dos intercambiadores de calor.

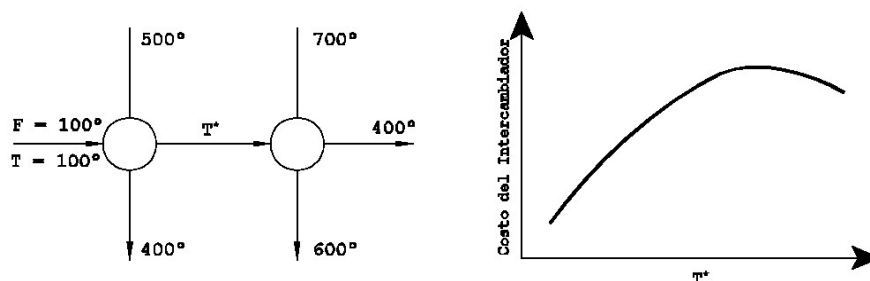


Figura XII.3

La figura 3 muestra, también, el gráfico del costo del área total de los intercambiadores versus la temperatura T^* , el único grado de libertad del problema. Se debe minimizar este costo, que tiene dos mínimos locales en la frontera de la región factible. Un algoritmo de optimización, con mayor o menor dificultad, determina alguno de los óptimos locales, subsistiendo la cuestión de hallar el óptimo global del problema.

XII.3. SIMULACIÓN DE PROCESOS POR COMPUTADORA Y SU RELACIÓN CON OPTIMIZACIÓN. DISTINTOS ENFOQUES

En la simulación de procesos por computadora, cada equipo es representado mediante un sistema de ecuaciones que corresponden a los balances de materia y energía, las ecuaciones de equilibrio, ecuaciones de propiedades fisicoquímicas, etc., como muestra la figura XII.4 (Montagna et al., 1987). De acuerdo a cómo se plantee este sistema de ecuaciones para todos los equipos de la planta se tienen los distintos enfoques para la resolución del problema de simulación de procesos, cada uno con sus ventajas y desventajas. Las diferencias están fundadas en la forma de seleccionar las incógnitas del problema, o de otro modo, en la forma de cubrir los grados de libertad del modelo, y de la posterior forma en que se resuelve el sistema de ecuaciones a partir de la estructura resultante. Este tema ya fue tratado anteriormente, pero conviene repasarlo bajo la perspectiva de la optimización de procesos, pues, siendo éste de algún modo un problema que contiene a la simulación, y por lo tanto de una mayor complejidad, todas las ventajas y desventajas de los distintos enfoques se potencian.

Tal como se señalaba anteriormente, teniendo en cuenta la forma en que se resuelve el sistema de ecuaciones, pero además la manera en que se cubren los grados de libertad del sistema y el nivel de detalle del modelo, surgen los distintos enfoques para la simulación y la optimización de procesos en estado estacionario.

Se pueden distinguir tres enfoques distintos: modular secuencial, global u orientado a las ecuaciones y modular simultáneo (Westerberg et al. (1979), Evans (1981), etc.).

XII.3.1. Enfoque modular secuencial

Desde que se comenzaron a utilizar los simuladores de procesos, este método ha sido el más usado. Se puede afirmar que prácticamente todos los simuladores comerciales e industriales se ajustan a este enfoque. En él se desarrolla una subrutina para cada tipo de equipo, la cual calcula sus corrientes de salida teniendo como datos las de entrada y los parámetros del mismo. Se habla en este caso de modelos orientados a la simulación por su sentido de resolución. En la figura VI.1.a, las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de operación son elegidos para cubrir los grados de libertad del sistema de ecuaciones que modela la unidad. Con todas estas subrutinas se construye una biblioteca de módulos, los cuales son llamados desde un programa principal en un determinado orden o secuencia de modo de resolver todos los equipos que componen la planta. El problema se presenta cuando existen reciclos y no es posible determinar esta secuencia para poder resolver los módulos, pues existen algunos de los cuales no se conocen todas las corrientes de entrada. En estos casos, que son muy comunes a partir de la estructura de los procesos químicos, se recurre a algoritmos de particionado y rasgado. Estos determinan aquellos conjuntos de unidades que deben ser resueltos como un grupo pues corresponden a un reciclo o a varios encadenados por nodos comunes, y luego en cada uno seleccionar un conjunto de corrientes iteradoras o de corte, que una vez rasgadas permiten la resolución de todos los equipos, eliminándose de este modo los reciclos. Con la información anterior resulta sencillo ordenar los equipos en la secuencia de resolución. Luego, teniendo valores iniciales de las corrientes de corte, se recorre repetidas veces dicha secuencia y mediante algún método de convergencia se aproximan los valores propuestos de la iteradoras a los valores correctos.

En el enfoque modular secuencial no existen alternativas. Partiendo de (1), u corresponde a las alimentaciones del sistema y a los parámetros de los equipos no habiendo otra alternativa para su selección. Para la resolución, la convergencia de las corrientes de corte puede plantearse como resolver el sistema

$$z - w(x, z) = 0 \quad (6)$$

donde z son los valores propuestos para las variables de corte y w los valores calculados para las mismas. En realidad z es un subconjunto de las x , especialmente elegido para iterar durante la resolución.

La gran ventaja del enfoque modular secuencial es su gran robustez y confiabilidad. Luego de muchos años de trabajo, el modelo matemático de cada unidad ha sido muy estudiado, y existen por lo tanto programas que realizan el cálculo de manera sumamente eficiente. Sobre el sistema de ecuaciones que representa la operación del equipo, dado que se conoce la forma de cada expresión, se realizan las transformaciones necesarias para reordenarlo y lograr la mejor estructura y luego, de acuerdo a lo obtenido, se aplica un método adecuado de resolución. De este modo se aprovechan las propiedades especiales de un sistema de ecuaciones

determinado para acelerar la convergencia de los módulos. Además, se conoce el comportamiento físico del módulo y los resultados posibles del mismo, lo cual puede ser aprovechado para inicialización, verificación de resultados, consistencia, etc. Es por estas razones que en la mayoría de las operaciones unitarias, y en los distintos niveles de detalle, se ha logrado una notable performance y un alto nivel de desarrollo.

Si se pretende incorporar un nuevo módulo, no existen mayores problemas. En principio la confección de la nueva subrutina se puede hacer aparte, sin afectar el resto del simulador, y realizar sobre la misma todos los tests y verificaciones necesarias. A partir de estos argumentos se puede decir, además, que resulta simple y sencillo construir un simulador que se ajuste a este método de resolución. Se pueden incorporar en cada módulo todos los mensajes de error y advertencias que se desee a partir de un fácil diagnóstico de las fallas durante la ejecución de la simulación. También en cada uno se puede realizar un análisis sobre la consistencia y realidad física de los datos que se ingresan y de los resultados obtenidos.

De lo anterior se deriva que las ventajas del enfoque modular secuencial surgen de una estructura determinada a priori para el flujo de información, la cual coincide con el flujo material en el proceso. Pero esta razón se convierte en la fuente de las desventajas de este enfoque, pues a partir de la rigidez que tiene el flujo de información en la resolución, no es posible plantear ciertos problemas, en particular la optimización que nos ocupa, sin caer en complicadas estructuras iterativas que requieren tiempos de cómputos no realistas. Resulta, por ejemplo, muy costosa la resolución de problemas de diseño en los cuales se imponen algunas especificaciones o condiciones sobre el valor de una corriente o sobre el resultado de un equipo. La primera solución para esto suele ser resolver varias veces la simulación hasta que se cumplan las condiciones. También se suele recurrir a controladores, unidades diseñadas de modo de obtener el valor prefijado, lo cual incrementa el costo de la simulación pues se requieren iteraciones adicionales para la convergencia del controlador. En otras situaciones, las menos, hay ciertos módulos orientados al diseño (bombas con presión de descarga dada, intercambiadores con la temperatura de salida fija, etc) pero no se puede hablar de versatilidad en un simulador de procesos modular secuencial.

Pasamos ahora al problema más complejo: la optimización. La evaluación de los puntos requeridos para la optimización de un proceso implica resolver repetidamente el sistema de ecuaciones que representa la planta. Se debe notar que, como estas ecuaciones están asociadas a los módulos, no es posible acomodarlas para favorecer la optimización. Esto lleva a que el costo de la resolución fuera, en la mayoría de los casos, prohibitivo para problemas reales hasta hace unos pocos años.

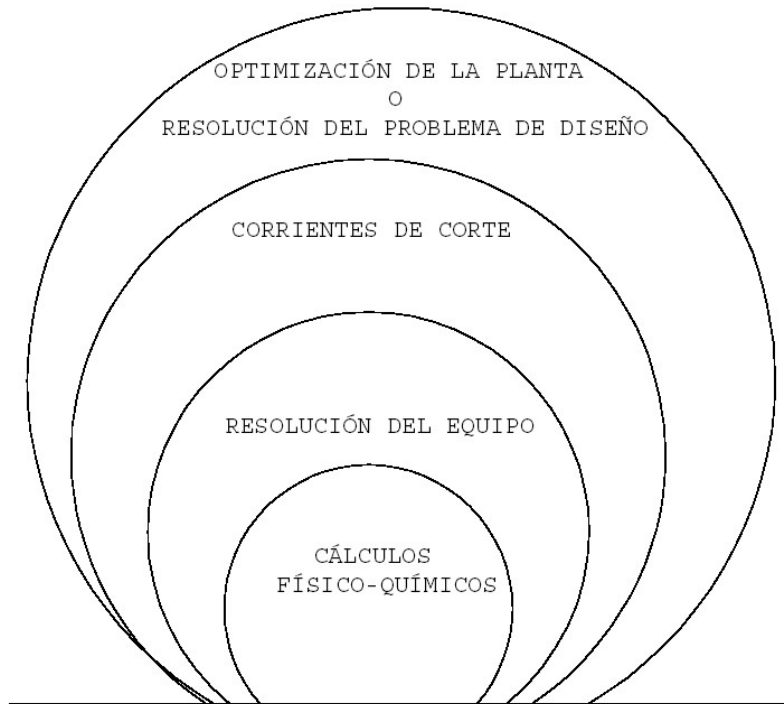


Figura XII.4

La figura XII.4 es clara al respecto: cada iteración buscando un valor determinado para una corriente de salida de la planta requiere un número de iteraciones para converger las corrientes de corte; en cada una de éstas es necesario iterar para resolver cada uno de los módulos que componen la planta, pero, a la vez, cada una de las últimas involucra procedimientos iterativos para obtener los valores de las estimaciones de las propiedades fisicoquímicas. Esta estructura es muy costosa, especialmente si es parte de una función de evaluación en un programa de optimización. Se han propuesto diversas estrategias que intentan superar las limitaciones que imponen los distintos niveles iterativos anidados en una optimización de procesos con el enfoque modular secuencial, que luego serán tratadas.

XII.3.2. Enfoque global

En el enfoque global, o también denominado orientado a las ecuaciones, se modela el proceso resumiendo todas las ecuaciones que describen la planta en un gran sistema (Shacham et al. (1982); Perkins (1983); Biegler (1983)).

La primera etapa en la resolución de una simulación con el enfoque global

es la generación de las ecuaciones que describen el flowsheet. En general se trabaja con una estructura modular, con una subrutina que escribe las ecuaciones para cada tipo de equipo. Muchas veces, dependiendo de la estructura del simulador, también se encarga de las derivadas correspondientes para generar el jacobiano, y de la topología de éste, o sea ubicación de los elementos distintos de cero.

Para la resolución propiamente dicha existen dos estrategias para resolver el gran sistema de ecuaciones algebraicas que ha surgido, las cuales buscan además aprovechar la estructura sumamente rala del mismo. En la primera de ellas se realiza el rasgado del sistema de ecuaciones, o sea, se selecciona un conjunto de variables de modo que proponiendo valores para las mismas, se puedan obtener todas las restantes como resultado de una secuencia de problemas en una variable. Luego se comparan los valores propuestos y los calculados, y se busca la convergencia mediante algún método numérico. Si se quiere, es similar a la convergencia del enfoque modular secuencial sólo que el procedimiento no se realiza sobre todas las variables de ciertas corrientes, sino sobre variables que pueden ser seleccionadas sin ninguna condición.

La otra estrategia que es además la más utilizada, es la de aproximaciones lineales, en la cual se itera sobre todas las variables usando el método de Newton Raphson o algún derivado del mismo.

En el caso del enfoque global, y teniendo presente la ecuación (1), no está predeterminado a priori qué variables están en x y cuáles en u . De esto se deriva la principal ventaja de este enfoque, que es la posibilidad de resolver los problemas de diseño y optimización sin recurrir a estructuras complicadas o forzadas. En el caso de especificaciones de diseño, éstas se incluyen en el sistema de ecuaciones. Además, en el caso de un problema de optimización, el problema puede ser planteado directamente en este formato. Las ecuaciones que modelan el proceso son incluidas como las restricciones del problema, sin ninguna consideración adicional a cómo son resueltas. Esto queda a cargo de la estrategia adoptada para la optimización. Queda claro que la optimización se trata sin ningún condicionamiento sobre como se deben resolver las ecuaciones como ocurría en el enfoque modular secuencial. Así, por ejemplo, no está determinado a priori qué se debe dar como dato, sino que por el contrario, cualquier conjunto de variables que cubra adecuadamente los grados de libertad del sistema puede ser la información suministrada al simulador. Además, en los casos en que el problema está correctamente formulado e inicializado, la resolución de la simulación es más rápida, y esta característica es aún más destacada para la convergencia de una optimización.

Al ganar en flexibilidad en el planteo del problema se pierde robustez, confiabilidad y eficiencia. Al resolver el sistema de ecuaciones, si se produce un error, alternativa muy posible en las primeras etapas, es muy complejo determinar la causa y corregir los elementos necesarios para superarlo. Resulta muy difícil también realizar diagnósticos y análisis de consistencia pues el procedimiento de resolución no guarda ninguna referencia respecto a qué módulo pertenece cada una de las ecuaciones que trata, y menos aún entre qué valores puede variar una solución correcta desde el punto de vista físico-químico. Además, al utilizar métodos del tipo

Newton-Raphson o derivados, es necesario dar valores iniciales para todas las variables del sistema, lo cual, dada la dimensión que enseguida adquieren los sistemas, resulta realmente complicado, pese a que se conozca con profundidad el proceso. Existen simuladores que generan automáticamente esta inicialización, aunque esto no impide que surjan problemas en la convergencia del sistema.

En general, los simuladores que corresponden a este tipo de enfoque, a partir de las ventajas y desventajas citadas, no tienen un importante desarrollo. Realmente cuesta imaginar la resolución global de una planta, incluyendo varias torres resueltas de manera rigurosa. Sin embargo, para problemas de cierta dimensión y más para un caso de optimización, puede resultar una alternativa sumamente ventajosa. Se debe notar finalmente que el desarrollo de un simulador global es una tarea más ardua ante la imposibilidad de desarrollar cada módulo por separado como en el enfoque modular secuencial.

XII.3.3. Enfoque modular simultáneo.

Tratando de aprovechar las ventajas de los dos enfoques ya citados, y de superar sus desventajas, un tercer enfoque ha surgido: el modular simultáneo. El objetivo del mismo es aprovechar los robustos módulos del método modular secuencial, unidos al mejor planteo de los problemas de diseño y optimización, y la mayor velocidad de convergencia del enfoque global. Algunos no ven en este enfoque un nuevo método, sino que por el contrario lo consideran un caso particular de los dos anteriores. Por ejemplo Pierucci et al. (1982), hablan de promover la convergencia del enfoque modular secuencial usando lo que denominan modelos evolucionarios. Por su parte Perkins (1983) habla del enfoque modular simultáneo como un caso particular del global. Para ello se afirma en que el método de Newton-Raphson utilizado para la resolución genera una aproximación lineal, y que el modular simultáneo, con la misma idea, plantea aproximaciones más realistas basadas en modelos físicos. Además las ecuaciones del modular secuencial deberían ser usadas para generar el modelo global, y ciertos procedimientos incorporados en su resolución.

Más allá de estos híbridos esquemas, la base del enfoque modular simultáneo se basa en el uso alternativo de modelos rigurosos y aproximados. Se recorre en primer lugar la secuencia de resolución del enfoque modular secuencial proponiendo valores para las corrientes de corte, y las alimentaciones y los parámetros de equipo si fuera necesario. A partir de los valores obtenidos para todas las corrientes luego de esta pasada por todos los equipos de la planta, se generan los modelos aproximados de todas las unidades. Estos se reúnen en un gran sistema y se resuelven de acuerdo al enfoque global. Con los resultados obtenidos se pueden proponer nuevos valores para las corrientes de corte, alimentaciones y los parámetros de los equipos y se vuelve a iterar sobre la secuencia de resolución. Este procedimiento se repite hasta alcanzar la convergencia.

Una etapa clave en este enfoque es la generación de los modelos aproximados de los equipos, los cuales pueden ser lineales o no lineales. En el primer

caso es más rápida la convergencia del modelo lineal aproximado, pero se requiere un mayor número de iteraciones para la convergencia del método en sí. En el otro caso la convergencia total del sistema requiere menor número de iteraciones, pero cada una de ellas demanda más tiempo. Influye también en este caso la manera en que se generan los modelos aproximados: mediante modelos analíticos reducidos (Jirapongphan (1980), Pierucci et al. (1982)), o a través de perturbaciones numéricas.

Con este enfoque se pueden plantear problemas de diseño y optimización para lo cual hay que incorporar en el modelo global las ecuaciones, y la función objetivo si correspondiera. La solución de este problema, en cuanto a valores de corrientes y parámetros de equipos son cargados para la resolución del modelo riguroso de la planta. De este modo se resuelven simultáneamente la convergencia de las corrientes de corte y el problema de diseño u optimización que se hubiera agregado.

Siguiendo la estrategia de usar alternadamente modelos simples y rigurosos, se tiene una serie de ventajas. En principio, se utilizan los eficientes programas del enfoque modular secuencial, con los cuales se pueden detectar y diagnosticar fácilmente los errores, realizar chequeos de consistencia y sobre todo realizar cálculos de alta complejidad. Además estos generan adecuados valores iniciales para el modelo global.

XII.4. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS CON EL ENFOQUE MODULAR SECUENCIAL

Se han utilizado distintas estrategias para la optimización de procesos con el enfoque modular secuencial. Estas se pueden clasificar en:

- Métodos de caja negra.
- Métodos de camino factible.
- Métodos de camino no factible.
- Métodos híbridos.
- Métodos siguiendo el flujo lógico de información.

Analizaremos estas metodologías con detenimiento dado que en general se trabaja con este enfoque. Más allá de los programas comerciales, la aplicación práctica, por la misma idea de trabajar con operaciones, lleva al desarrollo de módulos que son probados, ajustados y testeada su consistencia. Sin duda que el paso final es su utilización en algún problema de optimización por lo que el empleo de alguna de estas metodologías resulta inmediata.

Además, en general, la utilización de un simulador de este tipo para optimización exige pocas modificaciones: en algunos casos se reemplaza el módulo de convergencia habitual por otro que contemple la optimización, y en otros casos se genera un nuevo módulo externo que “dirige” al simulador. En ambos casos se mantiene la modularidad y las ventajas que la misma conlleva.

XII.4.1. Métodos de caja negra

Fueron los primeros en ser utilizados, a partir de su simplicidad y fácil implementación, aunque su performance es muy pobre. Su nombre deriva del hecho que el simulador es considerado como una caja negra, sin ningún acceso a sus ecuaciones. El optimizador funciona como un módulo exterior, conformando un nuevo nivel iterativo, que por alguna metodología propone distintos puntos sin utilizar ninguna información sobre el proceso para generar nuevos valores para las variables de decisión. El simulador, por su parte, se encarga de evaluar cada uno de ellos. La figura XII.5, de algún modo una nueva versión de la figura XII.4, muestra la estructura básica del problema. Existe una separación entre la simulación y la optimización. Desde el punto de vista de las ecuaciones, por un lado se tiene:

(P.2)

$$\text{Min } f(x, y, u) \quad (7)$$

sujeto a

$$g(x, y, u) \leq 0$$

$$c(x, y, u) = 0$$

y por el otro las ecuaciones (1). (7) se resuelve por algún algoritmo adecuado de acuerdo a la estructura del problema, con la dificultad que la evaluación de cada punto para calcular las distintas funciones implica resolver (1). Normalmente (7) es un problema muy simple, en algunos casos suele ser sin restricciones salvo las cotas para las variables operativas, en el cual se liberan algunas variables que en (1) están fijas en u . La resolución de (7) no tiene dificultades desde el punto de vista matemático del problema de optimización, pero sí demanda tiempos realmente importantes de resolución, y de ahí que se use para casos muy simples, pues para el resto es realmente inaplicable. Siguiendo el esquema de la figura XII.5 se advierte que para cada punto que se propone, el simulador debe realizar la convergencia de las corrientes de corte. Dos de los pocos parámetros sobre los que se puede trabajar en la resolución son los valores iniciales de las corrientes de corte para cada punto propuesto y el error de convergencia de las mismas, con alguna estrategia que varíe

dicho valor según la proximidad al óptimo.

En cuanto a los métodos de resolución utilizados, cualquier método que requiera el cálculo de gradientes demanda mucho tiempo para su cálculo, ya que se debe converger el problema para cada perturbación numérica. En general se trabaja con métodos que responden a patrones de búsqueda. Por ejemplo Friedman y Pinder (1972), en un trabajo pionero en el cual aúnan los resultados alcanzados hasta ese momento en simulación y optimización, utilizan tres métodos. En primer lugar usaron el método simplex, que no se debe confundir con el que se utiliza para programación lineal (realmente no fueron muy ingeniosos para elegir el nombre). Este método trabaja con un patrón de búsqueda que es un poliedro de $n+1$ vértices, donde n es el número de variables de decisión del problema. La función objetivo es evaluada en cada vértice y aquel en el cual se obtiene el peor valor es rechazado y reemplazado por uno nuevo que se genera a partir de los restantes puntos en una dirección opuesta a donde estaba el punto rechazado. Este poliedro se expande y contrae durante la aplicación del algoritmo a fin de mejorar la velocidad de convergencia y de afinar la búsqueda del óptimo en las iteraciones finales.

Otro método utilizado fue el de Hooke and Jeeves basado en dos tipos de movimientos. Por un lado búsquedas exploratorias a lo largo de cada uno de los ejes coordenados a partir de un punto base. Luego de estos movimientos queda determinado un nuevo punto, que unido al punto base inicial determina una línea a lo largo de la cual se realiza el segundo tipo de búsqueda, que como resultado da un nuevo punto base para la próxima iteración.

Los métodos anteriores, pese a tratarse de métodos para problemas multivariados sin restricciones, son combinados con algún tipo de lógica para manejar las restricciones, de modo de proponer puntos que las satisfagan. Es preciso tener en cuenta que habitualmente se trabaja en esta estrategia con problemas con muy pocas restricciones, muchas veces sólo cotas sobre las variables.

Finalmente Friedman y Pinder (1972) utilizan el método de Davidon, Fletcher y Powell (Reklaitis y otros, 1983) en el cual se elige una dirección de búsqueda actualizando una aproximación de la matriz inversa de las derivadas segundas o hessiana en el mínimo.

Dentro de las distintas opciones en cuanto a los métodos de optimización, otro que ha sido usado es la búsqueda aleatoria adaptable (Ballman y Gaddy, 1977; Gaines y Gaddy, 1976). Se basa en generar una dirección de búsqueda a partir de muestreo, y la longitud de paso en esa dirección queda determinada a partir de la historia previa de éxitos y fracasos. Específicamente, si dos pasos sucesivos condujeron a mejoras, la longitud del paso se incrementa. Por el contrario, si dos pasos sucesivos no conducen a mejora se reduce la medida del paso.

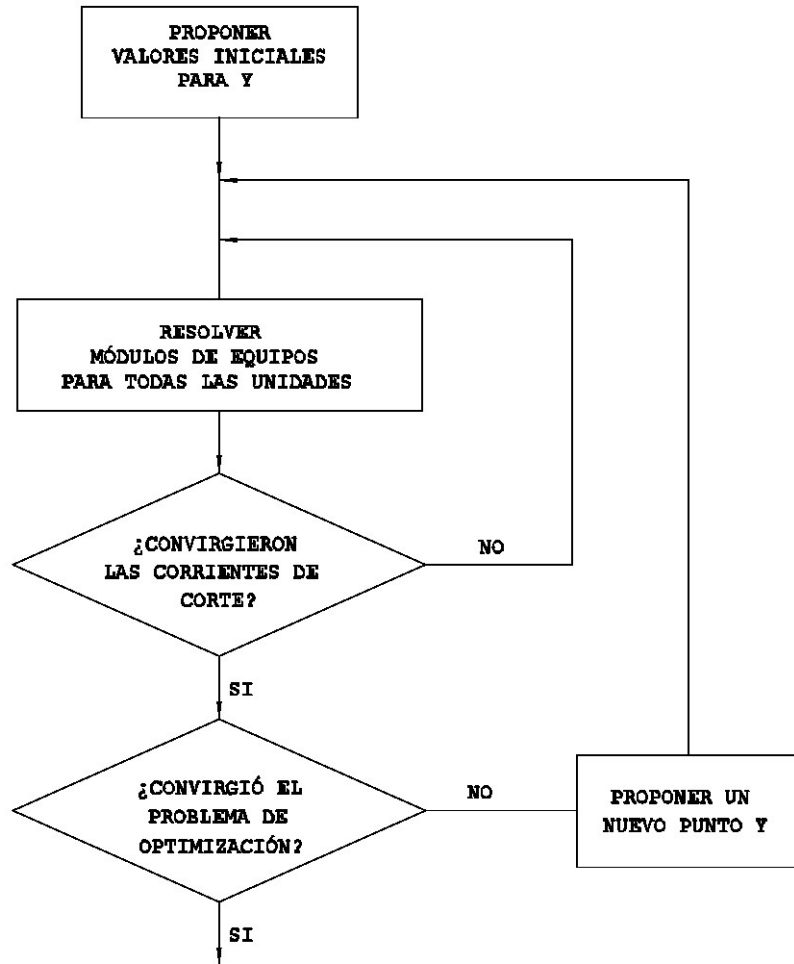


Figura XII.5

Como se señaló al comienzo, la eficiencia de los métodos de caja negra es muy limitada. Una medida usual para evaluar la performance de una optimización es el equivalente de tiempo de simulación (ETS), que se determina como el cociente entre el tiempo total requerido para la optimización y el tiempo que demanda la convergencia de la simulación desde el mismo punto inicial. En el caso de la estrategia de caja negra que estamos analizando se habla de al menos 100 ETS,

(Ballman y Gaddy, 1977), lo cual obviamente impide su aplicación a problemas de gran dimensión. Es interesante tener presente que en este tipo de evaluaciones hay una serie de factores que influyen (punto inicial, error de convergencia, parámetros del método de optimización, etc) y que han sido adecuadamente ajustados. Probablemente en un caso real nos encontramos con tiempos aún mayores.

Más allá de los largos tiempos de resolución requeridos, este tipo de estrategia presenta otro tipo de inconveniente que hay que considerar. Es posible que los puntos propuestos no correspondan a una solución factible del proceso, por lo que el simulador fracasará en su intento de resolver el problema. La devolución de resultados sin sentido, o directamente una parada en la simulación, deben ser apropiadamente contemplados por el optimizador para proponer nuevos puntos.

XII4.2. Métodos de camino no factible

Tal como se señaló en el punto anterior, los métodos de caja negra son de fácil implementación: ni siquiera hay que hacerle alguna modificación al simulador para poder aplicarlo. Si se quiere este tipo de estrategia es razonable, pues la mayor restricción de la simulación con el enfoque modular secuencial es la rígida estructura del flujo de información, atada al flujo de materia en el proceso. El hecho de que para la resolución se mantenga el mismo sentido que tienen las corrientes de la planta, y que éstas además se manejen como una unidad, es una exigente condición cuando se quieren plantear problemas con cierta flexibilidad (Montagna, 1987). Por lo tanto, las posibilidades del optimizador de trabajar sobre la estructura del simulador son muy limitadas: debe atenerse a los módulos disponibles con su correspondiente flujo de información.

Si bien en un principio se estableció el (P1) en el cual se agregaban las ecuaciones (1) que modelaban el proceso al problema de optimización (2)-(5), partiendo de la base que se está trabajando con el enfoque modular secuencial esto debe ser adecuadamente revisado. (1) es un gran sistema de ecuaciones con, en un caso general, varios miles de ecuaciones. Sin embargo, su resolución se reduce a la convergencia de las corrientes de corte, por lo cual ese mismo sistema puede plantearse como (6). (6) es de una dimensión mucho menor: en el orden de 10 a 20 ecuaciones, una por cada variable de corte. Esta resolución se debe a que los valores z son obtenidos como una función implícita luego de resolver (1). Por lo tanto se puede replantear (P1) utilizando lo anterior:

(P3)

$$\text{Min } f(x, y, u)$$

sujeto a

$$h(x, y, u): w(x, y, z, u) = 0 \quad (8)$$

$$g(x, y, u) \leq 0$$

$$c(x, y, u) = 0$$

La diferencia en dimensión de (1) y (8) es tremenda: mientras (1) por su magnitud no podía ser tratado como un solo problema (por lo que hubo que descomponerlo en el enfoque de caja negra), ahora se trata de un problema de una dimensión razonable que puede ser tratado con cualquier algoritmo que manipule restricciones de igualdad no lineales sin exigir su convergencia para cada evaluación de las funciones.

Avancemos un poco más en las implicancias del planteo de (P3). El problema de optimización y de simulación se resuelven simultáneamente. Las condiciones que exigen la convergencia de la simulación son incorporadas a la optimización, por lo que en el óptimo, el cumplimiento de estas restricciones aseguran la convergencia de la simulación. Resolviendo la optimización se está hallando al mismo tiempo la solución de la simulación (figura XII.6).

Una cuestión que queda pendiente, si aún no fue intuita, es el motivo del nombre de este método. Se denomina de camino no factible pues en todas las iteraciones, salvo en la última no se requiere el cumplimiento de las restricciones $h(x, y, u) = 0$. Por lo tanto todos los puntos correspondientes a soluciones intermedias son en general no factibles, o sea no resuelven el modelo del proceso. Recién en el óptimo, el punto obtenido es factible.

Lo anterior es, de algún modo, una dificultad del método descripto. En caso de algún error intermedio y de detención de la resolución, no se cuenta con ninguna solución, que si bien no sería óptima, fuera al menos factible. En este punto hay una ventaja a favor de los métodos de caja negra: salvo en la primera iteración, cuando se produce un error, siempre se cuenta con una solución al menos factible. Por el contrario, como se verá luego, hay grandes diferencias en la velocidad de resolución a favor de los métodos de camino no factible.

Ya se había señalado que en el enfoque modular secuencial no se puede avanzar mucho sobre la estructura de resolución, y por ende del simulador. En el caso de los métodos de camino no factible sólo se modifica el módulo de convergencia.

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Autor: Nicolás J. Scenna y col.

ISBN: 950-42-0022-2 - 81999

Este es reemplazado por uno que resuelve (P3) y ocupa la misma posición en la secuencia de resolución. El resto de la estructura del simulador permanece sin cambios, incluyendo la determinación de las corrientes de corte y la secuencia de resolución.

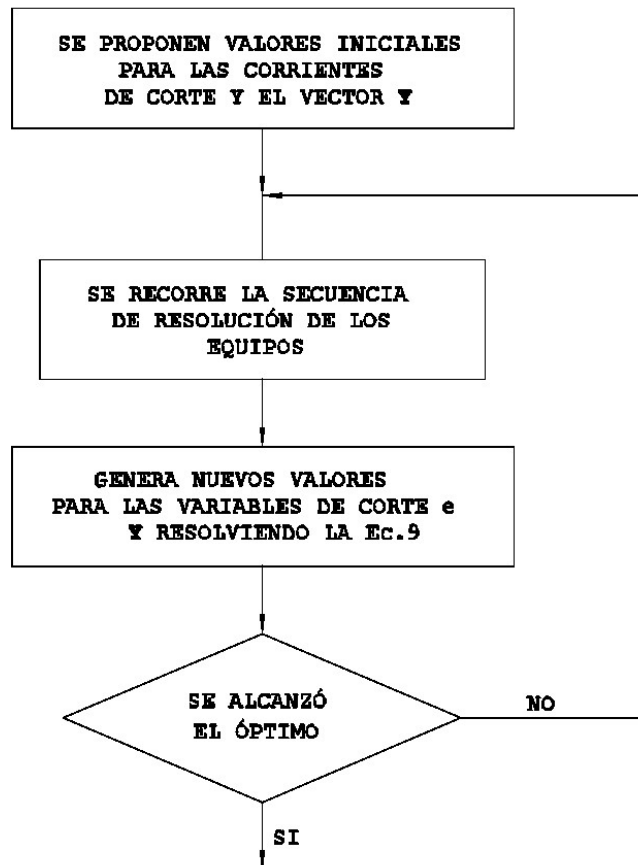


Figura XII.6: Diagrama de bloques de la optimización de procesos por un método de camino no factible.

Los métodos de camino no factible han sido tratados principalmente por Biegler y colaboradores (Biegler y Hughes (1982), Biegler (1985), Biegler y Cuthrell (1985), Lang y Biegler (1987), etc), quienes perfeccionaron esta estrategia, fundamentalmente el algoritmo de optimización utilizado.

Para resolver la optimización el algoritmo habitualmente usado es el de Programación Cuadrática Sucesiva, más conocido por SQP por sus siglas en inglés

(Han (1977), Powell (1978)). Este método en cada iteración minimiza una aproximación cuadrática de la función objetivo, linealizando las restricciones del problema. Se obtiene entonces un programa cuadrático para lo cual se utiliza nada más que información de evaluaciones de las funciones involucradas y de sus gradientes, ya que la matriz hessiana es actualizada mediante expresiones cuasi-Newton que evitan el cálculo de derivadas de un orden mayor. De lo anterior se deriva que en este método una de las actividades que más tiempo consume y que más se ha analizado es el cálculo de los gradientes.

En cada iteración i el método SQP resuelve un problema de la siguiente forma, que es una aproximación de (P3):

(P4)

$$\text{Min}_d \nabla f(y_i, z_i)^T d + \frac{1}{2} d^T B d$$

sujeto a:

$$\begin{aligned} h(y_i, z_i) + \nabla h(y_i, z_i)^T \cdot d &= 0 \\ g(y_i, z_i) + \nabla g(y_i, z_i)^T \cdot d &\leq 0 \end{aligned} \quad (9)$$

$$c(y_i, z_i) + \nabla c(y_i, z_i)^T \cdot d = 0$$

$$\begin{bmatrix} y_i^l \\ z_i^l \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + d \leq \begin{bmatrix} y_i^u \\ z_i^u \end{bmatrix}$$

En (P4) se han tenido en cuenta sólo las variables del problema de optimización. El subíndice refiere a la iteración, mientras que los supraíndices l y u hacen referencia a las cotas inferiores y superiores. B es una aproximación de la matriz hessiana que se calcula mediante la fórmula BFGS, a partir de actualizaciones cuasi-Newton (Dennis y Moré (1977)).

Resolviendo el problema cuadrático (P4) se tiene una dirección de búsqueda d . El próximo paso es una búsqueda univariable a lo largo de esta dirección d , que minimiza una función de penalidad que de algún modo mide la mejora en la función objetivo y la infactibilidad de las restricciones. Un ejemplo de función de penalidad es:

$$P(y, z) = f(y, z) + \sum_j t_j \max[0, g_j(y, z)] + \sum_k s_k |h_k(y, z)| + \sum_r s_r |c_r(y, z)| \quad (10)$$

donde t_j , s_k y s_r son factores de peso determinados a partir de los resultados del P4. En la iteración i :

$$\begin{aligned} t_j^i &= \min \left[t_j^{i-1}, \frac{1}{2} (u_j + t_j^{i-1}) \right] \\ s_k^i &= \min \left[s_k^{i-1}, \frac{1}{2} (v_k + s_k^{i-1}) \right] \\ s_r^i &= \min \left[s_r^{i-1}, \frac{1}{2} (v_r + s_r^{i-1}) \right] \end{aligned} \quad (11)$$

donde u_j , v_k y v_r son los multiplicadores de Kuhn-Tucker obtenidos en la solución de (P4).

Los puntos indicados son evaluados a lo largo de d , a partir del punto inicial de la iteración i :

$$\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + \lambda d \quad (12)$$

Como resultado se obtiene la longitud del paso λ a lo largo de d , con lo cual

$$\begin{bmatrix} y_{i+1} \\ z_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + \lambda d \quad (13)$$

el nuevo punto inicial para la iteración siguiente es:

Luego comienza una nueva iteración a partir del punto inicial (12).

Uno de los puntos centrales en cuanto a la performance de este método está referido al cálculo de los gradientes requeridos en (9). La forma de calcularlos más directa es mediante perturbaciones numéricas. Para esto es preciso tener en cuenta

que una vez perturbada una variable del problema de optimización no es preciso resolver de nuevo todos los equipos de la secuencia de cálculo, sino sólo desde donde afecta la variable perturbada hasta el final de la secuencia de cálculo. Esto se realiza para las variables de las corrientes de corte z y para las variables de decisión del problema de optimización y preserva la estructura de módulos “caja negra” del enfoque modular secuencial. Otra alternativa para el cálculo de los gradientes es la inclusión en cada módulo de los gradientes analíticos, lo cual obliga a analizar todas las posibles relaciones entre funciones y variables. De algún modo una completa especificación de los gradientes tiende a destruir la idea de que cada módulo es un desarrollo independiente, que se ajusta y prueba separadamente. Se requieren cambios en el sistema ejecutivo o lógica central del simulador para manipular las matrices jacobianas. A cambio de lo anterior se obtiene una performance superior, que en algunos casos ha sido estimada entre el 50% y el 70% del tiempo de cómputo requerido usando perturbación directa (Biegler, (1985)). Estos ahorros son más importantes si las variables de decisión e iteradoras se encuentran al comienzo de la secuencia de resolución. En cada caso particular se deberían pesar adecuadamente las ventajas y desventajas de ambas estrategias de cálculo de gradientes.

Otros temas vinculados a la performance de este enfoque son referidos al método SQP. Dentro de este ámbito se pueden distinguir tres temas (Biegler y Cuthrell, 1985):

1. Problema cuadrático (P4)
2. Búsqueda univariable (10)
3. Procedimiento de escalado

Los dos primeros son obvios, pero interesa destacar la importancia del tercero para una correcta convergencia. Para ello conviene aclarar la idea del escalado. Este refiere a que las magnitudes de todos los elementos del modelo a ser optimizado estén en un determinado rango. Por un lado está el escalado de las variables y por otro el de las restricciones.

En un caso ideal todas las variables deberían estar en un cierto rango para asegurar que los vectores de búsqueda tomen valores razonables. Si alguna variable no cumple con esta condición se la reemplaza por una nueva variable, que es igual a la anterior multiplicada por una constante apropiada, de modo que quede bien escalada. De igual modo se trabaja con las restricciones. Se puede analizar la sensibilidad de las restricciones con respecto a cambios en las variables. Además se pueden revisar los gradientes. Es conveniente que todas las restricciones tengan una sensibilidad similar a cambios en los valores de las variables y que los gradientes de las restricciones caigan en el mismo rango de valores. Esto permitirá considerar de igual modo las violaciones de las restricciones y evitar problemas numéricos. Para superar los inconvenientes que pudieran surgir se multiplican las restricciones por

constantes adecuadas.

Una dificultad que presenta es que no existe un procedimiento general, y que por el contrario se advierte una alta dependencia con el problema. Por ejemplo una recomendación es que los valores absolutos de los gradientes sean escalados de modo de obtener valores entre 10 y 100. Pero también existen otras que sobre diferentes ejemplos andan mejor. De todos modos se trata de un tema que debe ser considerado con atención en cualquier implementación. Las aproximaciones de la matriz hessiana, los cálculos de gradientes aproximados y los errores de redondeo pueden conducir al fracaso si no se escala adecuadamente el problema.

XII.4.3. Métodos de camino factible

La presentación de los métodos de camino factible se simplifica a partir de los anteriores. Partamos de la base que al igual que en los métodos de camino no factible, no se realiza una descomposición absoluta entre el problema de optimización y el de simulación. Por el contrario, también se incorporan al problema de optimización las restricciones de igualdad que exigen la convergencia de las corrientes de corte. Se tiene entonces el problema (P3), con las mismas consideraciones que se hicieron en el punto anterior.

Básicamente estos métodos reciben el nombre de camino factible basados en que en cada iteración se convergen las corrientes de corte, o sea se cumplen las restricciones $h(x, y, u) = 0$. Se podría pensar que es lo mismo que los métodos de caja negra. La diferencia estriba en que en estos métodos de camino factible no hay una disociación entre los problemas de simulación y optimización. Por el contrario, en el método iterativo empleado para la proposición de nuevos puntos se tiene en cuenta la información de los resultados de la simulación a través de los valores de las corrientes de corte (figura XII.7).

Existen dos métodos principales: la variante factible completa (VFC) y la variante factible reducida (VFR), ambas debidas a Biegler y Hughes (1985). En ambas se comienza iterando sobre todo el flowsheet hasta alcanzar la convergencia de las corrientes de corte. Ambos utilizan el método de Programación Cuadrática Sucesiva. La diferencia radica en que en la VFC se incluyen en la aproximación cuadrática de (P3) las variables y y z , manteniendo la misma notación que en el punto anterior. Claramente se obtiene de nuevo (P4). Esto implica que en las sucesivas iteraciones se propondrán nuevos valores iniciales para las variables de diseño y , y para las de corte z . Siempre se debe tener presente que el número de restricciones de h (convergencia de las corrientes de corte) en este planteo es sensiblemente menor al número de ecuaciones que modelan el proceso. En la VFR, se obtienen sólo los gradientes con respecto a y , y el programa cuadrático no incluye las restricciones h . Se trata de un problema de menor dimensión, lo cual se refleja en d : para la VFC tiene una dimensión $n+m$, donde n es el número de variables de diseño y m el de variables de corte. Para la VFR tiene sólo n elementos. La VFR mantiene información respecto al proceso, partiendo de que los valores de y que se utilizan

satisfacen la restricción $h(x, y, u) = 0$ (o mejor dicho aproximadamente igual si se tiene en cuenta el error de convergencia). Además en el cálculo de los gradientes se tiene en cuenta la dependencia respecto a las variables de corte. Por ejemplo:

$$\nabla_{y,t} = \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) - \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right) \left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)^{-1} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)$$

y lo mismo para los gradientes de c y g .

Respecto a la parte estructural, la adaptación de un simulador modular secuencial a este método es también muy simple y conserva su rígida estructura: directamente se programa la VFC o la VFR como módulos que se ubican en el simulador en reemplazo del habitual módulo de convergencia. Para el cálculo de los gradientes, todos los comentarios efectuados en el punto anterior son válidos, al igual que las consideraciones sobre la aplicación del SQP. Merece en este caso especial atención la determinación de los factores de perturbación, en los cuales se debe tener presente no tomar valores demasiado pequeños para evitar que los errores de convergencia de las corrientes de corte afecten la evaluación de los gradientes.

Biegler y Hughes (1985) realizan una interesante comparación entre los métodos vistos hasta ahora. Más allá que estos números no son suficientes para sacar conclusiones generales, muestran una tendencia. Sobre un ejemplo particular, usando la medida antes citada de equivalentes en tiempo de simulación (ETS), resulta que la estrategia más demandante es la de caja negra con alrededor de 200 ETS, lo cual confirma las suposiciones que se pudieron haber hecho. Las estrategias de camino factible y no factible rondan entre 20 y 40 ETS. En el caso de camino factible, la VFR muestra una performance superior a la VFC. Otra comparación (Kisala y colaboradores, 1987) brinda también valores que no permiten establecer conclusiones definitivas entre ambas estrategias, aunque presentan una resolución en el tiempo requerido de solución: entre 5 y 6 ETS.

Los trabajos señalados no muestran diferencias importantes entre los métodos de camino factible y no factible. Hay circunstancias que afectan la performance de ambos. El esfuerzo de plantear la aproximación cuadrática es similar, fundamentalmente el cálculo de los gradientes. La estrategia de camino no factible requeriría (no siempre) la resolución de un mayor número de iteraciones y por ende de problemas cuadráticos, aunque cada una de estas iteraciones sería más breve que en el caso de camino factible pues no se requiere la convergencia de la simulación. Donde sí se advierte una ventaja es en el caso de errores en la obtención de la solución: en la estrategia de camino factible siempre tenemos algún punto convergido sobre el cual podemos sacar conclusiones y hacer cambios. Para camino no factible, en caso de error la información generada hasta ese punto sirve de muy poco.

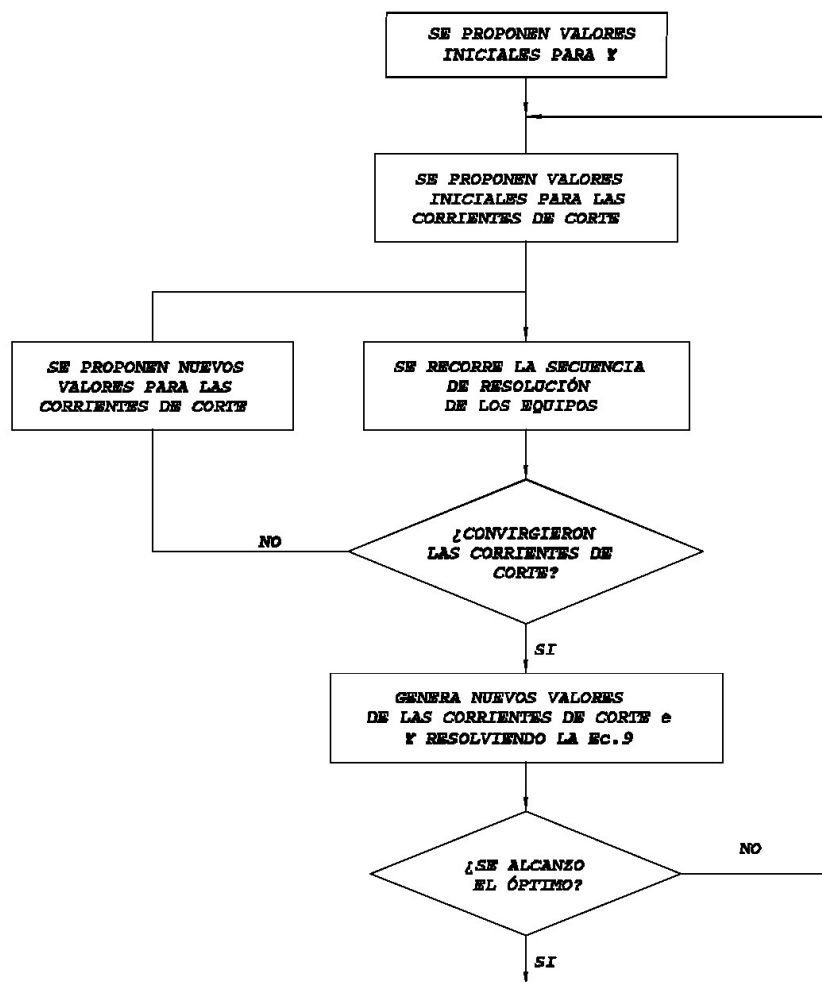


Figura XII.7: Diagrama de bloques de la optimización de procesos por un método de camino factible.

XII.4.4. Métodos híbridos

Si se analizan a fondo las estrategias de camino factible, en particular la VFC, y las de camino no factible, se las puede pensar como variantes de un mismo algoritmo. Todos los pasos son idénticos, el método de resolución, etc, salvo un detalle: el número de iteraciones que se realizan sobre la secuencia de resolución de los módulos del problema. Esto está relacionado al error exigido: mientras que en camino factible se requiere un valor muy pequeño, en camino no factible este valor

no tiene ninguna condición. Como se vio previamente ambos métodos tienen sus ventajas y desventajas.

Kisala y colaboradores (1987) presentan una alternativa que denominan método híbrido, que es una variante intermedia entre camino factible y no factible. Todos los pasos son similares a los anteriores salvo que se establece una tolerancia para la convergencia de las corrientes de corte que es un valor intermedio entre los extremos antes citados, la cual además no es fija sino que puede ajustarse durante la resolución de la optimización. Otra alternativa es ajustar el número de iteraciones sobre la secuencia de resolución.

Como resulta evidente, la implementación de esta estrategia está en las mismas condiciones que sus antecesoras, tanto a nivel de ajustes en la arquitectura del simulador, como de consideraciones a tener en cuenta sobre el método de programación cuadrática sucesiva que se usa en la resolución.

Se supone que el método híbrido tiene una superior performance que sus dos antecesores dado que no requiere la convergencia de las corrientes de corte como en la VFC. También supera algunos inconvenientes que presentaba la estrategia de camino no factible cuando se hacía la búsqueda univariable sobre la dirección d obtenida como solución de la aproximación cuadrática.

Un tema de discusión en esta metodología es referida a la tolerancia admitida en cada punto de la búsqueda univariable. Dado que en cada evaluación el error varía, se modifica la forma de la función de penalidad utilizada. Existen distintas alternativas: desde converger las corrientes de corte una vez que se ha determinado la longitud del paso en lugar de hacerlo en todos los puntos, hasta exigir que en cada punto se realice la convergencia de las corrientes de corte a una tolerancia previamente determinada, con lo cual se torna despreciable el aporte de los errores en la convergencia de las corrientes de corte a la función de penalidad. También aquí hay variantes según sea la exigencia en la tolerancia de la convergencia de las corrientes de corte.

En cuanto a la performance de esta estrategia, sus autores presentan una leve mejora frente a las dos previas, aunque no son diferencias significativas como para establecer conclusiones definitivas. Se presentan tiempos de resolución de alrededor de 4 ETS para el mismo caso citado al final de 4.3.

XII.4.5. Métodos siguiendo el flujo lógico de información

La rígida formulación de los problemas del enfoque modular secuencial da lugar a una serie de desventajas surgidas a raíz de la estructura iterativa anidada requerida como muestra la figura XII.4. Esto obliga a un importante esfuerzo para su resolución.

Una forma de superar las dificultades del enfoque modular secuencial, reteniendo al mismo tiempo sus ventajas, es eliminar las restricciones que exigen que las corrientes tengan en la resolución la misma dirección que físicamente tienen en el proceso. Se plantean entonces dos conceptos: por un lado está el Diagrama de Flujo Material de Información (DFMI) en el cual los arcos tienen la misma dirección que

las corrientes de materiales, o sea el habitual flowsheet. Por otro lado tenemos el Diagrama de Flujo Lógico de Información (DFLI) que corresponde a un grafo en el cual se le asigna un sentido a sus arcos de modo de facilitar la resolución, aprovechando la información disponible (Montagna, 1987).

El algoritmo Secuencia Lógica de Resolución (SLR) permite encontrar las direcciones para los arcos en el DFLI resolviendo un programa lineal entero que asegura que cada unidad pueda ser resuelta y toma en cuenta cualquier restricción adicional que surja a partir del conocimiento que tiene el ingeniero sobre el modo de reducir la estructura iterativa del problema (Montagna e Iribarren, 1988). La aplicación de este algoritmo a un proceso de síntesis de amoníaco (Kisala y colaboradores, 1987) que muestra la figura XII.8 permite pasar de un DFMI con una corriente de corte a un DFLI acíclico.

La implementación de la resolución sobre el DFLI requiere la incorporación de nuevos programas a la biblioteca de módulos. Estos contemplan nuevas opciones sobre el DFLI, en las cuales los grados de libertad son cubiertos no sólo por las corrientes de entrada al equipo sino también por cualquier conjunto de corrientes que sea matemáticamente factible. En general, trabajando sobre el DFMI pueden existir distintas opciones de un equipo utilizando diferentes conjuntos de parámetros, pero las corrientes de entrada a la unidad siempre son datos. Trabajando sobre el DFLI el conjunto de corrientes que son dato puede variar dependiendo de las direcciones asignadas en la configuración final obtenida luego de aplicar el algoritmo SLR. Se tienen, por lo tanto, diferentes estructuras matemáticas del sistema de ecuaciones si se cubren los grados de libertad de otra manera. Esto obliga a cambiar el método de resolución, que posiblemente tenga otra performance. Montagna (1993) concluye que hay casos muy disímiles. Por ejemplo en el caso de sumadores, divisores, bombas e intercambiadores de calor, las resoluciones sobre el DFMI y sobre el DFLI son similares, como fácilmente se puede derivar analizando los modelos correspondientes. Esto no sucede con otros equipos. Algunos módulos nuevos sobre el DFLI pueden presentar una performance superior a los tradicionales, pero esto no siempre es cierto. En el caso de una columna de destilación se pasa de un tiempo de cómputo de 6,17 segundos de CPU sobre el DFMI a 2,40 segundos sobre el DFLI. Otros casos muestran reducciones similares en el tiempo, además de un menor requerimiento de recursos computacionales.

Si se aplica la estrategia descripta a problemas de optimización se pueden obtener interesantes resultados en muchos casos. En principio, si se utiliza el algoritmo SLR se obtendrá una estructura del DFLI con un menor número de corrientes de corte que en el DFMI, lo cual reducirá la dimensión del problema de optimización. Además, aplicando adecuadamente el algoritmo SLR es posible establecer que condiciones sobre determinadas corrientes sean datos del problema, y no que se manejen como restricciones. Esto permite eliminar restricciones y reducir la estructura del modelo de optimización. Todo esto normalmente redundará en la reducción en el tiempo de cómputo requerido y posibilitará el tratamiento de problemas más complejos. Además, la configuración obtenida para el DFLI es

independiente de la estrategia de optimización que se adopte, sea factible, no factible o algún método híbrido. De todos modos hay que señalar la dependencia de este enfoque del caso particular que se trate y la disponibilidad para el mismo de módulos orientados al problema testeados y confiables.

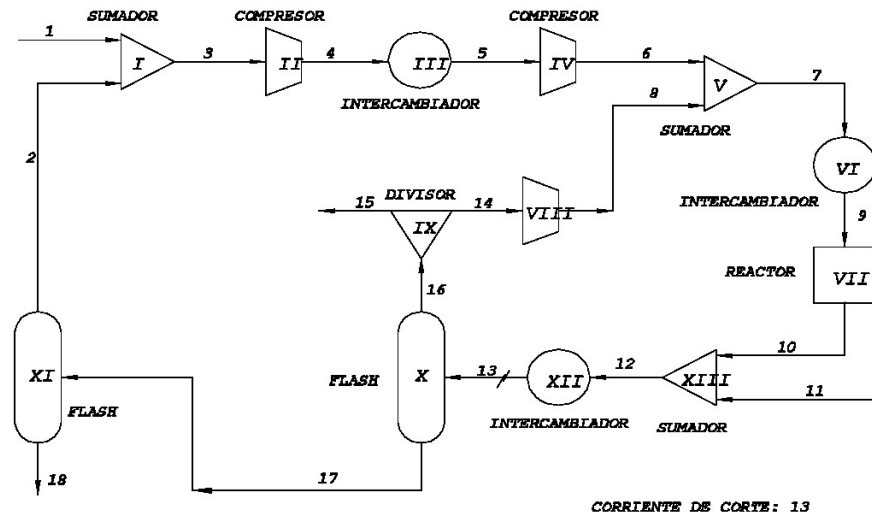
XII.5. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS CON EL ENFOQUE GLOBAL

Tal como se señaló en el punto XII.3.2 el enfoque global surge como respuesta a las limitaciones de la estrategia modular secuencial para tratar problemas de diseño y optimización, fundamentalmente a la necesidad de resolver repetidas veces la simulación, con la alta demanda en tiempo de cómputo que esto implica.

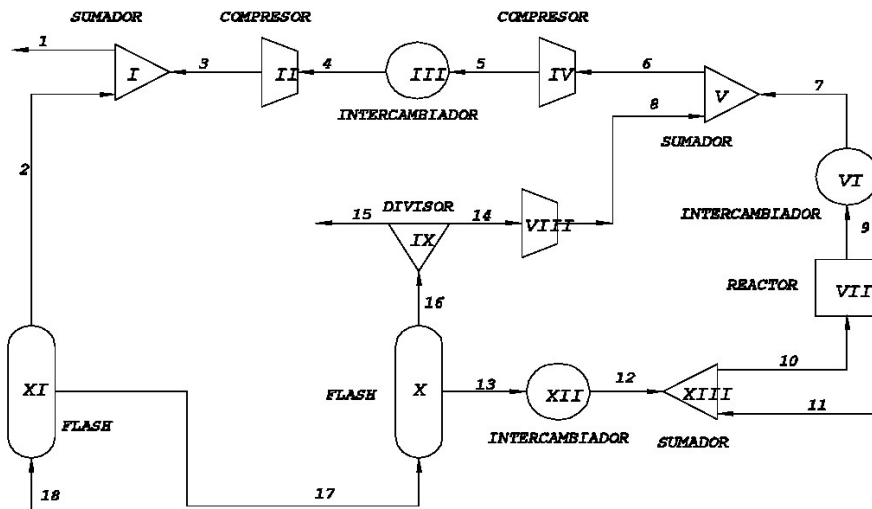
Un primer uso del enfoque global u orientado a las ecuaciones es utilizando modelos lineales para representar el proceso. Cada unidad es modelada a través de una matriz de transformación que convierte la corriente de entrada a las corrientes de salida. Un tratamiento especial se da al sumador (Agarwall et al. (1978), Sood et al. (1979)). El rango de la matriz de coeficientes puede ser fácilmente chequeado para ver si el problema está bien planteado, o es consistente. Obviamente que el esfuerzo computacional requerido para resolver el problema es muy bajo. El planteo de problemas de diseño y optimización es simple y se alcanza la solución óptima de manera simple. En algunos casos se han incluido algunas restricciones no lineales para representar ciertas especificaciones (Sood y Reklaitis, 1979).

El planteo de problemas lineales fue abandonado, en general, por sus limitaciones para modelar el proceso. Sirvió como base a otras estrategias que, a partir de modelos no lineales del proceso, generaban aproximaciones lineales para obtener una estimación de la solución del problema no lineal. Fue el primer paso para la resolución global de plantas completas. Merece citarse como un caso aparte, pues muchas de sus características no concuerdan con las de los casos habituales de utilización de este enfoque, cuando se recurre a ecuaciones no lineales.

En general, la generación del modelo de optimización del proceso se sigue haciendo usando módulos. Cada uno incorpora las ecuaciones correspondientes, y en muchos casos hace lo propio con los gradientes. En ciertos casos se utiliza también manipulación algebraica automática para adecuar las ecuaciones a las necesidades del problema. Todas las ecuaciones son ensambladas en un gran sistema. No existen limitaciones, cuando se construye este sistema para ver a ciertas variables como entradas o salidas. El ingeniero puede seleccionar aquellas variables que desea especificar, y plantear una función objetivo y restricciones sin afectar la estructura de la resolución. Es en este punto donde se advierte una de las principales ventajas de este enfoque con respecto al anterior: la libertad para configurar su modelo sin que estas decisiones afecten significativamente la resolución.



a) DFMI



b) DFLI

Figura XII.8: Proceso de síntesis de amoníaco.

Una vez planteado el problema se tiene un modelo no lineal, para el que pueden usarse distintos algoritmos. Se puede afirmar que se ha perdido la relación con el proceso y se trata de un problema estándar de programación matemática, que dificultosamente puede ser retornado a su origen, salvo cuando se finaliza la resolución a diferencia del anterior enfoque en el que siempre se guarda referencia de los módulos. Un primer inconveniente es la inicialización de las variables (normalmente varios miles) que no puede quedar a cargo del ingeniero, sino que debe ser automática. Abarca a todas las variables, incluso las internas de las unidades. En este punto se puede usar algún tipo de ejecución de módulos simples de inicialización. También se sugiere la ejecución de una simulación completa. Desde ese momento y hasta el final de la resolución, se trata de un problema matemático, con ninguna relación respecto al proceso. Si la resolución es exitosa, la solución se alcanzará más rápidamente que en otros enfoques. Si no es así, será difícil determinar la fuente de los errores, si estos se deben a inconvenientes propios del método matemático utilizado, a una mala inicialización, o a un problema mal planteado. Puede que el algoritmo haya iterado sobre valores de las variables sin ningún significado físico.

Los algoritmos que se pueden utilizar cubren un amplio espectro, según la descripción del capítulo previo. Por un lado se puede hablar de algoritmos o paquetes genéricos válidos para cualquier problema (por ejemplo Murtagh (1982) presenta el uso de MINOS) y, por otro lado, es común que para problemas particulares se desarrollen estrategias específicas que, aprovechando características del problema, permitan su resolución eficiente (por ejemplo particionando o descomponiendo a las restricciones).

Finalmente, es importante destacar que la dimensión de los problemas tratados con este enfoque es sensiblemente menor que los tratados con el previo, por un motivo muy simple: la capacidad de los métodos para resolver programas no lineales. Sin embargo, el tiempo de cómputo en aquellos que se resuelven es menor: se habla de alrededor de 3 ETS.

XII.6. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS CON EL ENFOQUE MODULAR SIMULTÁNEO.

El objetivo del enfoque modular simultáneo, como se señaló previamente, es aprovechar las ventajas del enfoque global, fundamentalmente su flexibilidad para plantear problemas de diseño y optimización, y las del enfoque secuencial modular, en cuanto a trabajar con módulos detallados, altamente confiables y consistentes, de las operaciones involucradas en el proceso. Dentro de este grupo se han incluido muchas estrategias que cuesta agruparlas bajo un esquema común, salvo por el hecho de que no caen en los dos enfoques previos.

La figura XII.9 muestra la estructura de una estrategia bajo el enfoque modular simultáneo para tratar un problema de optimización. Se trabaja con dos tipos de modelos: por un lado están los rigurosos, correspondientes a los habitualmente encontrados en un simulador modular secuencial, incluyendo su algoritmo de

resolución. Por otro lado están los modelos simples, que corresponden a una versión aproximada de la operación. Dado este carácter, incluye menos variables y ecuaciones que el riguroso, aunque siempre tiene en cuenta a las correspondientes a las corrientes de entrada y salida y a las de diseño. Algunas veces se denomina reducidos a estos modelos simples. Este modelo reducido se construye a partir de una solución del modelo riguroso en un punto base a partir de la cual se determinan sus parámetros. Una condición que debe cumplir es tener idéntica solución en el punto base.

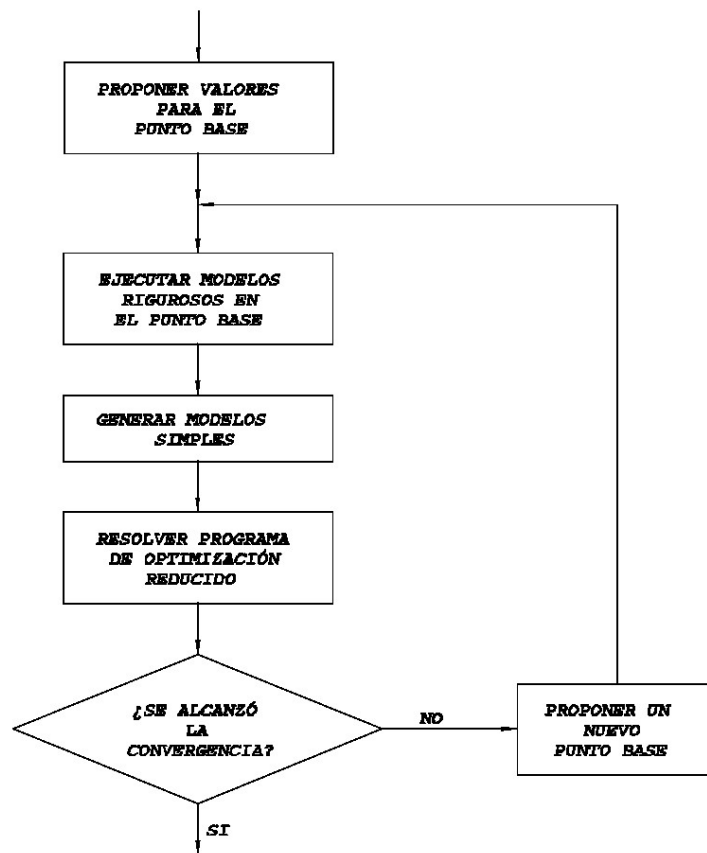


Figura XII.9

Una vez que se han generado los modelos simples para todas las unidades, se conforma un gran modelo de optimización incluyendo todas las unidades, las especificaciones de diseño y las cotas para las variables. Es preciso tener en cuenta

que una de las condiciones que deben cumplir los modelos simples es que los jacobianos asociados se evalúen analíticamente, sin requerir cálculos auxiliares iterativos (por ejemplo de propiedades fisicoquímicas).

Resolviendo este modelo de optimización se obtiene un nuevo punto base, a partir del cual se generarán nuevos modelos reducidos y así sucesivamente. Básicamente se distinguen dos niveles de iteración: uno externo para resolver los modelos rigurosos en los distintos puntos base, y otro interno en la resolución del programa de optimización compuesto por los modelos simples. En este último caso conviene señalar por lo dicho en el punto XII.5, que la inicialización de este programa global es muy sencilla a partir de la solución de los modelos rigurosos, y que al trabajar sobre un modelo reducido se torna ventajoso el enfoque orientado a las ecuaciones.

Las iteraciones continúan hasta que no existen modificaciones significativas en los puntos bases que se generan.

La eficiencia de los algoritmos en este enfoque depende en gran medida de los modelos reducidos que se disponga para las distintas operaciones unitarias. Estos deberían ser generados con el menor número posible de resoluciones del modelo riguroso, deberían ser tan aproximados como fuera posible sobre el mayor rango que se pueda, pero siempre manteniendo la simplicidad. Las aproximaciones lineales cumplen en parte estos objetivos, pues no presentan una buena performance. En general, los autores prefieren modelos no lineales simples generados a partir de representaciones conocidas en la ingeniería química para las operaciones unitarias. Pese a que la resolución en cada punto base puede demandar más tiempo, la performance general es superior (Jiraponghpan (1980), Pierucci (1982), Kisala et al. (1987), Chen y Stadtherr (1985)).

De la descripción anterior se advierten las ventajas de este enfoque: se siguen utilizando los módulos rigurosos, e incluso la descripción del proceso se hace en función a los mismos. Además se tienen las ventajas del enfoque global en cuanto al planteo del problema y la velocidad de resolución.

Ejemplo

Aquí analizaremos brevemente un ejemplo clásico en la literatura, para ejemplificar el uso de un simulador modular secuencial a los efectos de optimizar un proceso dado. Este caso está tomado de (Kisala y col., 1989), y a su vez fue propuesto por primera vez por Parker (1978).

El flowsheet simplificado de un proceso de síntesis de amoníaco (más detalles pueden encontrarse en Kisala (1985)) se muestra en la figura XII.10.

El objetivo para este problema (función objetivo) es maximizar el beneficio neto, calculándolo en función de rutinas de costo contenidos en un simulador modular secuencial (en el trabajo citado se ha utilizado ASPEN-PLUS).

Como puede observarse en la figura XII.10, la temperatura del reactor (que afecta la conversión y determina la energía a introducir al sistema), el nivel de presión de ambos equipos flash (que determina la proporción que se recicla sin

comprimir), el nivel de presión al que se comprime en la primera y segunda etapa (que se iguala a la presión de la corriente reciclada a alta presión) son variables de significativa importancia en la economía del proceso.

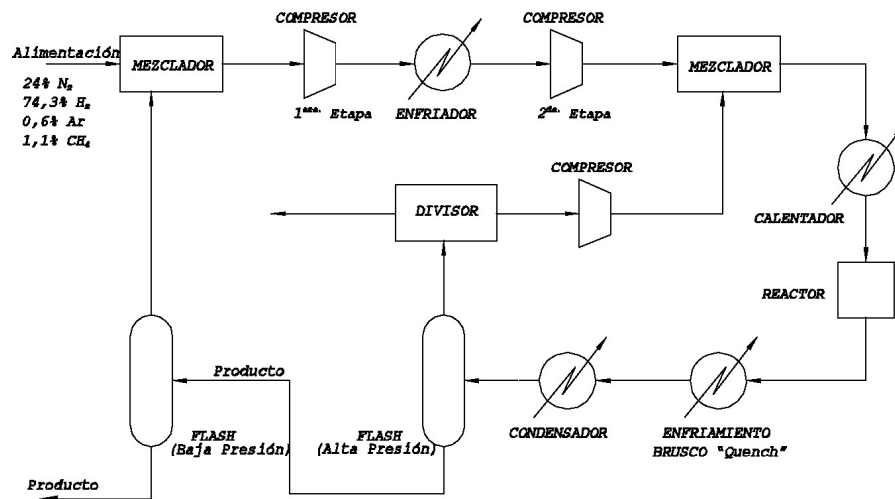


Figura XII.10:

Por otra parte, existen restricciones operativas y funcionales que deben considerarse. Por ejemplo, la cantidad de NH₃ que permitimos que se deseché en la corriente de purga, el título (fracción de vapor/líquido) admisible en los compresores, temperaturas admisibles para los materiales, la especificación del producto (composición admisible), etc. Todas estas consideraciones se traducen en una serie de restricciones de igualdad y desigualdad a acoplar a la función objetivo de costo.

En el trabajo citado se presenta una tabla destacando las variables tenidas en cuenta para la optimización, y sus respectivas cotas (mínima y máxima) permitidas, y las restricciones de igualdad y desigualdad especificadas. Vemos que todas ellas siguen los criterios expuestos en el párrafo anterior. En la tabla se indican además los valores obtenidos en el óptimo.

TABLA

Variables	Cota Mín.	Cota Máx.	Valor en el óptimo
1. Temperatura del reactor (°F)	600	1000	866
2. Presión corriente reciclo (psi)	2900	4310	2908
3. Temperatura en el precalentador (F)	400	900	400
4. Flash alta presión (presión psia)	2850	4265	2850
5. Flash baja presión (presión psia)	147	1000	147
6. Presión en el compresor (primera etapa- psia)	600	1000	600
7. Presión en el compresor (segunda etapa- psia)	2900	4310	2908
8. Temperatura en el interenfriador (°F)	100	200	200
9. Fracción de partición (divisor)	0.05	0.12	0.05
10. Temperatura del "Quench" (°F)	73	100	73
11. Temperatura del condensador (° F)	-40	140	-30.8

Restricciones de Igualdad

1. Reactor Adiabático ($Q = 0$).
2. La presión de la segunda etapa debe ser igual a la presión de la corriente de recirculación a alta presión.

Restricciones de Desigualdad

- El amoníaco desechado en la purga debe ser menor o igual a 2 Lb-mol/hr.
- Fracción de vapor en la corriente de entrada a la segunda etapa de compresión debe ser mayor o igual a 99%.
- La presión del flash (alta presión) debe ser al menos 4 atm. menor que la salida del compresor de la alimentación (2da. Etapa).
- La corriente producto debe contener al menos 99% de NH_3 ($X_{\text{NH}_3} \geq 0.99$).

Para la solución de este problema, los autores analizaron diversos métodos tales como camino factible, camino no factible, y por último, métodos híbridos. Si bien esta última estrategia es la más conveniente, resulta interesante remarcar que se debe, en el mejor caso, evaluar el flow-sheet (simulación) 88 veces. Esto indica el consumo de tiempo de cómputo asociado al problema. Aquí vale recordar que al incorporar a un simulador modular secuencial una función objetivo definimos un

problema de optimización y automáticamente activamos, además de los niveles de optimización locales (a nivel de módulos fisicoquímicos y de equipo) y los correspondientes al DFI (corrientes iteradoras), *los referidos al problema de optimización.*

Si bien algunas estrategias de optimización evitan converger la planta completa (DFI) en cada iteración, lo cierto es que el número de evaluaciones se incrementa sustancialmente respecto a un problema de simulación clásico. Los métodos híbridos (simuladores “two-tier”), o más aún, los orientados a ecuaciones, reducen el esfuerzo de cómputo, pero en general no están disponibles en el mercado con mucha fluidez, por lo menos en el presente, siendo desarrollados para cada caso en particular.

EJERCICIOS

- 1.- Plantear ejemplos de problemas de optimización sobre una misma planta que correspondan a distintas fases de su ciclo de vida.
- 2.-
 - a) Plantear un modelo de optimización conceptual para el diseño de un equipo. Identificar las variables de decisión, la función objetivo, las restricciones y los parámetros del programa.
 - b) Analizar si es posible establecer distintos criterios de performance para el mismo problema y como quedan en cada caso la función objetivo y las restricciones.
 - c) Estudiar si es posible incluir simultáneamente todos estos criterios en la función objetivo. Analizar alternativas.
- 3.- Ídem 2 pero para el diseño de una planta completa. En este caso estudiar si es posible plantear el problema con distintos niveles de detalle, y los requerimientos de información para cada variante.
- 4.- Ídem 2 pero para optimizar la operación de una planta dada.
- 5.- Para cada uno de los problemas planteados en los puntos previos analizar las ventajas de usar los distintos enfoques vistos para la resolución, teniendo en cuenta la dimensión del problema, las características de las ecuaciones (lineales o no lineales), la necesidad de resolver repetidas veces el problema, facilidades para la inicialización, etc.
- 6.- Analice las dificultades de implementar un optimizador con el enfoque modular secuencial siguiendo el flujo lógico de información.

BIBLIOGRAFÍA

- Agarwall, J.C., J.V. Klumpar y F.D. Zybert; A simple material balance model; Chem. Engng. Progr., 74, p. 68 (1978).
- Ballmann, S.H. y J.L. Gaddy; Optimization of Methanol Process by Flowsheet Simulation; Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 16, p. 337 (1977).
- Biegler, L.T.; Improved Infeasible Path Optimization for Sequential Modular Simulators. I: The Interface; Computers and Chem. Engng., 9, p. 245-256 (1985).
- Biegler, L.T.; Simultaneous Modular Simulation and Optimization, Proceedings of the Second International Conference on Foundations of Computer-Aided Process Design, Ed. A. W. Westerberg and H.H. Chien, CACHE (1983).
- Biegler, L.T. y J.E. Cuthrell; Improved Infeasible Path Optimization for Sequential Modular Simulators. II: The Optimization Algorithm; Computers and Chem. Engng., 9, p. 257-267 (1985).
- Biegler, L.T. y R.R. Hughes; Infeasible Path Optimization with Sequential Modular Simulators; AIChE J., 28, p. 994-1002 (1982).
- Biegler, L.T. y R.R. Hughes; Feasible Path Optimization with Sequential Modular Simulators; Computers and Chem. Engng., 9, p. 379-394 (1985).
- Chen, H.S. y M.A. Stadtherr; A simultaneous modular approach to process flowsheeting and optimization; AIChE J., 31, p. 1843-1856 (1985).
- Dennis, J.E. y J.J. Moré; Quasi-Newton methods, motivation and theory; SIAM Rev., 19, p. 46-899 (1977).
- Doering, J.F. y J.L. Gaddy; Optimal Process Availability with Flowsheet Simulation; Trabajo presentado en el 83° National Meeting of AIChE, Houston (1977).
- Evans, L.B.; "Advances in Process Flowsheeting Systems", Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design, Editado por R.S.H. Mah y W.D. Seider, Engineering Foundation, Nueva York, p. 425-469 (1981).
- Friedman P. y K.L. Pinder; Optimization of a Simulation Model of a Chemical Plant; Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 11, p. 512 (1972).
- Gaines, L.D. y J.L. Gaddy; Process Optimization by Flow Sheet Simulation; Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 15, p. 207 (1976).
- Gallier, P.W. y T.P. Kisala; Process Optimization by Simulation; Chem. Engng. Progress, Agosto, p. 60-66 (1987).
- Han, S.P.; A globally convergent method for nonlinear programming; J. Optimization Theory Applic., 22, p. 297 (1977).
- Jirapongphan, S.; Simultaneous Modular Convergence in Process Flowsheet Optimization; Ph.D. Thesis, Massachusetts Institute of Technology (1980).
- Kisala, T.P., R.A. Trevino-Lozano, J.F. Boston y H.I. Britt; Sequential Modular and Simultaneous Modular Strategies for Process Flowsheet

- Optimization; *Comput. Chem. Engng.*, 11, p. 567-579 (1987).
- Lang. Y.D. y L.T. Biegler; A Unified Algorithm for Flowsheet Optimization; *Comput. and Chem. Engng.*, 11, p. 143-158 (1987).
 - Montagna, J.M.; Estrategias para la simulación de procesos con el enfoque modular secuencial; Tesis doctoral, Universidad Nacional del Litoral (1987).
 - Montagna, J.M.; Problem-Oriented Modules for Process Simulation. Resolution Strategies for Simulation and Optimization; *The Canadian J. of Chem. Engng.*, 71, p. 634-641 (1993).
 - Montagna, J.M. y O.A. Iribarren; Optimal Computation Sequence in the Simulation of Chemical Plants; *Comput. Chem. Engng.*, 12, p. 71-79 (1988).
 - Montagna, J.M., H.P. Leone, T.R. Melli, A.R. Vecchiatti y R.L. Cerro; SIMBAD: A Process Simulator Linked to a DBMS. Part 1: The Executive System; *Computers and Chem. Engng.*, 11, p. 63 (1987).
 - Murtagh, B.A.; On the simultaneous solution and optimization of large-scale engineering systems; *Computers and Chemical Engineering*, 6, p. 1-5 (1982).
 - Perkins, J.D.; Equation-Oriented Flowsheeting; trabajo presentado en FOCAPD-83, Snowmass, Colorado, EEUU (1983).
 - Pierucci, S., M. Ranzi y G. Biardi; Solution of Recycle Problems in a Sequential Modular Approach; *AIChE J.*, 28, p. 820 (1982).
 - Powell, M.J.D.; A fast algorithm for nonlinearly constrained optimization, *Lecture Notes in Math.*, # 630, p. 144, Springer, Berlin (1978).
 - Shacham, M., S. Macchietto, L.F. Stutzman y P. Babcock; Equation oriented Approach to Process Flowsheeting, *Comp. and Chem. Engng.*, 6, p. 79 (1982).
 - Sood, M.K., G.V. Reklaitis; Solution of material balances for flowsheets modelled with elementary modules: the constrained case; *AIChE J.*, 25, p.220 (1979).
 - Sood, M.K., G.V. Reklaitis y J.M. Woods; Solution of material balances for flowsheets modelled with elementary modules: the unconstrained case; *AIChE J.*, 25, p. 209 (1979).
 - Trevino-Lozano, R.A.; Simultaneous modular concept in chemical process simulation and optimization; Ph.D Thesis, Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (1985).
 - Westerberg, A.W.; Optimization in Computer Aided Design, *Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design*, Editado por R.S.H. Mah y W.D. Seider, Engineering Foundation, Nueva York, p.149-184 (1981).
 - Westerberg, A.W., H.P. Hutchison, R.L. Motard y P. Winter; *Process Flowsheeting*, Cambridge University Press, Cambridge (1979).

