



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE
SAN NICOLAS DE HIDALGO



FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

**OPTIMIZACIÓN DE DIAGRAMAS DE FLUJO DE PROCESOS A TRAVÉS DE
TÉCNICAS METAHEURÍSTICAS**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA

I.Q. LUIS GERMÁN HERNÁNDEZ PÉREZ

ASESOR

DR. JOSÉ MARÍA PONCE ORTEGA

MORELIA, MICHOACAN, FEBRERO 2018

DEDICATORIA

Les dedico este proyecto de tesis a todas las personas que me brindaron su apoyo y comprensión. Únicamente espero tener la oportunidad de realizar de redituales su esfuerzo algún día, lo aprecio mucho. Con todo lo que implicó esta tesis, he aprendido más de mí mismo que solo la investigación que realicé. Y a pesar de todos los contratiempos y complicaciones, aquí está terminado.

Teniendo en cuenta el poco espacio del que dispongo, nombraré a algunas personas que siempre me han apoyado en los agradecimientos. Espero que se den cuenta de lo que significan para mí y lo mucho que los aprecio.

Quiero dedicarle este trabajo de tesis, primeramente a Dios por concederme la vida y por no abandonarme. Un aspecto importante que suelo no considerar es a las personas que me han brindado su apoyo de muchas formas. Imagino que algún día les pagaré todo su esfuerzo aunque en este momento no encuentre la manera de hacerlo. Espero que con el tiempo, aprenda más a comunicarles mucho que valoro su presencia en lo que quiero hacer. Rápidamente, quiero dedicarle este trabajo a mis profesores y a universidad por hacerme crecer como profesionista. Otra cosa que les quiero aprovechar para mencionar, es que los amo mucho familia, sin ustedes nunca lo habría conseguido.

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. José María Ponce Ortega, por haber aceptado ser mi asesor de tesis y por todo el conocimiento que muy amablemente y con disposición me transmitió.

Al Dr. Fabricio Nápoles Rivera, Dr. Agustí Jaime Castro Montoya, Dr. Luis Ignacio Salcedo Estrada y al Dr. Rafael Huirache Acuña, por la pronta revisión de este trabajo y por sus valiosas observaciones.

Al PhD. Mahmoud El-Halwagi de la Universidad de Texas A&M, por permitirme realizar una parte muy importante de mi proyecto durante mi estancia en Estados Unidos.

Al CONACyT, por haberme dado la oportunidad de formar parte de un proyecto de investigación tan importante y del que estoy orgulloso de haber participado.

Y por supuesto, a mis padres Tomás Gaspar Hernández Camacho y Emilia Pérez García, por brindarme su apoyo y por permitirme realizar este proyecto de tesis. Gracias Diana Cristina Hernández Pérez, por estar siempre ahí para animarme. Y Saúl Domínguez García, por ser un buen amigo y ayudarme en los tiempos difíciles.

ÍNDICE

ÍNDICE DE FIGURAS	vi
NOMENCLATURA	vii
RESUMEN	ix
ABSTRACT	x
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. GENERALIDADES	1
1.2. JUSTIFICACIÓN	5
1.3. OBJETIVOS	6
1.3.1. OBJETIVO GENERAL	6
1.3.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	6
1.4. HIPOTESIS	6
2. MARCO TEÓRICO	7
2.1. SIMULACIÓN DE PROCESOS	7
2.2. SOFTWARE DE SIMULACIÓN	8
2.2.1. ASPEN PLUS®	8
2.2.2. SUPERPRO DESIGNER	9
2.3. MÉTODOS DE BÚSQUEDA	9
2.3.1. CLASIFICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE BÚSQUEDA	10
2.3.2. OPTIMIZACIÓN DETERMINISTA	10
2.3.3. OPTIMIZACIÓN METAHEURÍSTICA	11
2.4. MÉTODOS ESTOCÁSTICOS DE OPTIMIZACIÓN	11
2.4.1. SIMULATED ANNEALING	13
2.4.2. ALGORITMOS GENÉTICOS	16
2.5. ALGORITMOS ESTOCÁSTICOS HÍBRIDOS	19

2.6.	ENLACE ENTRE PROGRAMAS	22
3.	METODOLOGÍA	23
3.1.	SIMULACIÓN DEL PROCESO	24
3.1.1.	SIMULACIÓN DEL PROCESO EN ASPEN PLUS®	26
3.1.2.	FORMULACIÓN MATEMÁTICA	27
3.1.3.	DEFINICIÓN DE LAS FUNCIONES OBJETIVO	29
3.1.4.	FUNCIÓN OBJETIVO ECONÓMICA.....	29
3.1.5.	FUNCIÓN OBJETIVO AMBIENTAL.....	29
3.2.	METODO DE OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA UTILIZADO	30
3.3.	VINCULACIÓN ENTRE EL SIMULADOR DE PROCESOS Y EL ALGORITMO DE OPTIMIZACIÓN	31
3.3.1.	SUBROUTINA PARA VINCULAR ASPEN PLUS® Y MS EXCEL®	32
3.3.2.	ARCHIVOS PARA VINCULAR ASPEN PLUS® Y MS EXCEL®	33
3.3.3.	NOMBRE DE LLAMADO DE LAS VARIABLES DE ASPEN PLUS®	33
3.3.4.	LLAMADO DE LAS VARIABLES DE ASPEN PLUS® A MS EXCEL®	34
4.	RESULTADOS	36
	CONCLUSIONES	40
	BIBLIOGRAFÍA	41

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-1: Clasificación de las técnicas generales de búsqueda y optimización.....	1
Figura 1-2: Diagrama de flujo de la secuencia del algoritmo genético simple.....	3
Figura 2-1: Técnicas de optimización global y clasificación de los métodos de búsqueda.....	10
Figura 2-2: Grafica de costo contra caídas de presión para un caso particular de un intercambiador de calor.	12
Figura 2-3. Ejemplo de una función en la cual los algoritmos estocásticos pueden ser aplicados para encontrar el óptimo global.....	13
Figura 2-4: Estructura general del algoritmo <i>Simulated Annealing</i>	15
Figura 2-5: Estructura general de los algoritmos genéticos.....	17
Figura 2-6: Diagrama de flujo de la secuencia de Algoritmos Genéticos Simples.....	19
Figura 2-7: Diagrama de flujo del algoritmo I-MODE	21
Figura 3-1: Interfaz entre un simulador de procesos y MS Excel® (que contiene un programa de optimización).....	23
Figura 3-2: Planta de Generación de Potencia basada en un Ciclo Rankine con regeneración.....	25
Figura 3-3: Diagrama de flujo del proceso en Aspen Plus®.	26
Figura 3-4: Interfaz Principal de Usuario del Programa I-MODE en MS Excel®.....	31
Figura 3-5: Interfaz entre Aspen Plus® y MS Excel®	32
Figura 3-6: Pseudocódigo para vincular Aspen Plus® y MS Excel®.....	32
Figura 3-7: Archivos necesarios para vincular Aspen Plus® y MS Excel®.....	33
Figura 3-8: Hoja de MS Excel® donde se enviarán los valores de las variables de decisión al simulador de procesos.....	34
Figura 3-9: Hoja de MS Excel® donde se recibirán los valores de las variables de respuesta del simulador.....	35
Figura 4-1: Gráfico de los resultados en el criterio de terminación Chi-cuadrado (ChiTC). ...	37
Figura 4-2: Gráfico de los resultados en el criterio de terminación de estado estable (SSTC). ...	38
Figura 4-3: Gráfico de los resultados en la última generación.....	39

NOMENCLATURA

CB = Costo de la caldera.

CC = Costo de la torre de enfriamiento.

CP = Costo de la bomba.

CT = Costo de la turbina.

COPB = Costo de operación de la caldera.

COPC = Costo de operación de la torre de enfriamiento.

COPP = Costo de operación de la bomba.

COPT= Costo de operación de la turbina.

FCC = Factor de costo de capital

Net Profit = Beneficio neto obtenido.

Np = Factor de costo en la presión de caldera.

Nt = Factor de sobrecalentamiento en la caldera.

Pb = Presión de salida de la caldera.

Pc = Presión de la torre de enfriamiento.

Pp = Presión de descarga de la bomba.

Pt = Presión de salida de la turbina.

Qb = Calor producido en la caldera.

Qc = Calor retirado en la torre de enfriamiento.

Tb = Temperatura de la caldera.

Tc = Temperatura de la torre de enfriamiento.

Tp = Temperatura en la bomba.

Tt = Temperatura de salida de la turbina.

Tsb = Temperatura de saturación en la caldera.

T_{sh} = Temperatura bulbo húmedo.

W_n = Energía eléctrica producida en la turbina.

W_p = Trabajo requerido por la bomba.

RESUMEN

OPTIMIZACIÓN DE DIAGRAMAS DE FLUJO DE PROCESOS A TRAVÉS DE TECNICAS METAHEURÍSTICAS

Por

Luis Germán Hernández Pérez

Ingeniero Químico

Febrero del 2018

Dirigido por: Dr. José María Ponce Ortega

Este trabajo presenta una metodología de optimización multiobjetivo para diagramas de flujo de procesos. El marco propuesto implementa un vínculo entre simuladores de proceso y técnicas metaheurísticas. El enfoque propuesto es general y se puede usar cualquier simulador de procesos y cualquier técnica metaheurística. Esta Tesis muestra la manera de implementar enlaces entre diferentes simuladores de procesos como Aspen Plus®, HYSIS®, Super Pro Designer® y otros, vinculados a técnicas metaheurísticas implementadas en Matlab®, Excel®, C ++ y otros. De esta forma, el marco propuesto permite optimizar cualquier diagrama de flujo del proceso implementado en el simulador de proceso y utilizando la técnica metaheurística, las complicaciones numéricas a través del proceso de optimización pueden ser eliminadas. Además, la metodología presentada permite usar las ecuaciones termodinámicas, de diseño y constitutivas implementadas en el simulador de procesos y de esta forma cualquier proceso puede ser optimizado.

Palabras clave: Diseño óptimo, Optimización metaheurística, Optimización multiobjetivo, Simuladores de procesos, Simulación.

ABSTRACT

**OPTIMIZATION OF PROCESS FLOWSHEETS THROUGH METAHEURISTIC
TECHNIQUES**

by

Luis Germán Hernández-Pérez

Chemical Engineer

February 2018

Directed by: PhD. José María Ponce-Ortega

This work presents a multi-objective optimization framework for optimizing chemical processes. The proposed framework implements a link between process simulators and metaheuristic techniques. The proposed approach is general, and there can be used any process simulator and any metaheuristic technique. This Thesis shows how to implement links between different process simulators such as Aspen Plus®, HYSIS®, Super Pro Designer®, and others, linked to metaheuristic techniques implemented in Matlab®, Excel®, C++, and others. This way, the proposed framework allows optimizing any process flowsheet implemented in the process simulator and using the metaheuristic technique and the numerical complications through the optimization process can be eliminated. Furthermore, the proposed framework allows to use the thermodynamic, design and constitutive equations implemented in the process simulator and this way any process can be implemented.

Keywords: Optimal design, Metaheuristic optimization, Multi-objective optimization, Process simulators, Simulation.

1. INTRODUCCIÓN

En el presente capítulo se presentan tanto las generalidades conceptuales del tema que se desarrolló, así como la justificación, la hipótesis y los objetivos (general y particulares) del mismo.

1.1. GENERALIDADES

Las técnicas generales de búsqueda y optimización se clasifican en tres categorías: enumerativa, determinista y estocástica (Coello-Coello, et al., 2002). La Figura 1-1 muestra ejemplos comunes de cada tipo.

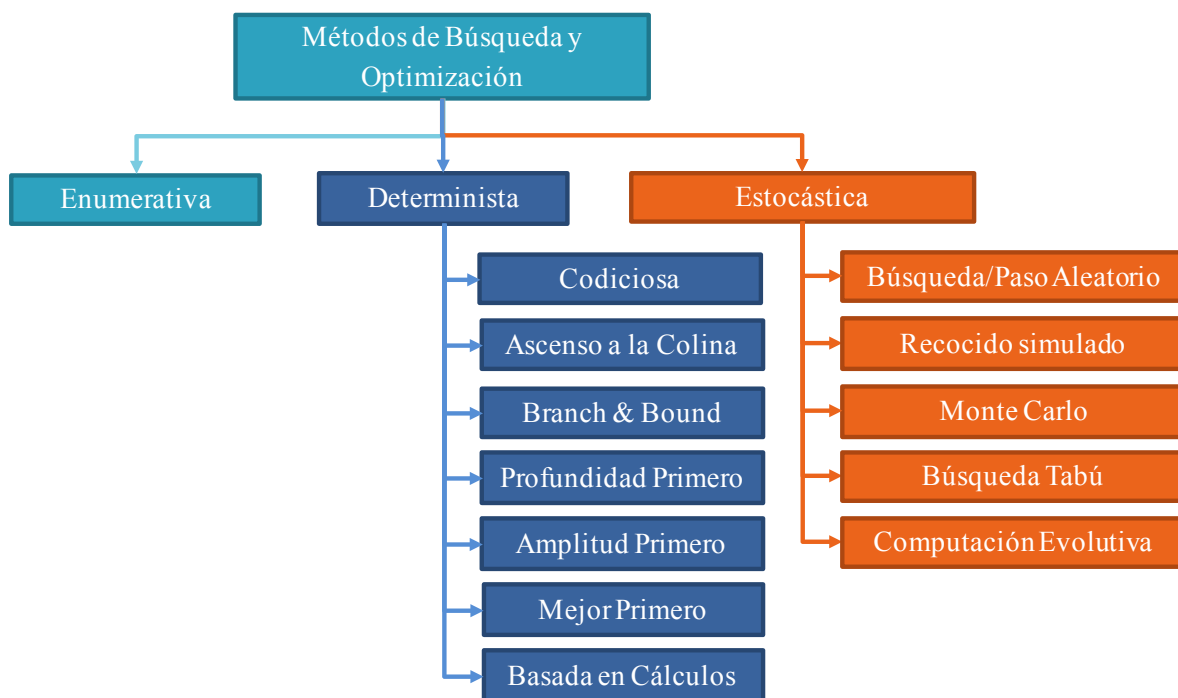


Figura 1-1: Clasificación de las técnicas generales de búsqueda y optimización.

Los métodos deterministas se han utilizado con éxito para resolver una amplia variedad de problemas. Se implementaron modelos de programación matemática convexa para la optimización global para la ingeniería de procesos (Ponce-Ortega, et al., 2012). Los algoritmos deterministas generalmente se aplican para la optimización multiobjetivo para satisfacer todos los objetivos simultáneamente (es decir, maximizar el beneficio anual, al tiempo que se minimiza el impacto ambiental) (Gutiérrez-Arriaga, et al., 2013). Además, se utilizan para la planificación óptima y la selección del sitio de las industrias con objetivos económicos, ambientales y sociales (Santibañez-Aguilar, et al., 2014). La optimización global está comúnmente basada en propiedades y está

formulada como un modelo de programación no lineal de enteros mixtos (MINLP) basada en una superestructura que involucra todas las opciones posibles de interés. (Rubio-Castro, et al., 2012). El diseño óptimo se desarrolla bajo incertidumbre paramétrica con el propósito de analizar posibles cambios (Nápoles-Rivera, et al., 2015). El diseño óptimo se ha utilizado para fines domésticos, por ejemplo, sistemas solares de calentamiento de agua (Sánchez-Bautista, et al., 2015), y para aplicaciones industriales como sistemas de destilación de membrana térmica con integración de calor en plantas de proceso (González-Bravo, et al., 2015). La integración sostenible de los sistemas de trigeneración con redes de intercambiadores de calor se ha optimizado con una programación determinista también (Lira-Barragán, et al., 2014). Sin embargo, estos métodos están limitados a resolver problemas lineales no convexos. Para la implementación de estos métodos de optimización, es necesario abordar todas las ecuaciones que describen el comportamiento del proceso mediante la formulación de un modelo matemático.

Los métodos deterministas a menudo son ineficaces cuando se aplican a un problema duro (NP) u otros problemas de alta dimensión porque están obstaculizados por su requisito de conocimiento del dominio del problema (heurística) para dirigir o limitar la búsqueda en estos espacios de búsqueda excepcionalmente grandes. Debido a que muchos problemas multiobjetivos (MOP) científicos y de ingeniería en el mundo real exhiben una o más de estas características anteriores, las búsquedas estocásticas se desarrollaron como enfoques alternativos para resolver estos problemas irregulares (Coello-Coello, et al., 2002).

Los Algoritmos Genéticos (el diagrama de flujo se presenta en la Figura 1-2) han demostrado ser una alternativa versátil y eficaz para resolver problemas de optimización, pero hay muchas situaciones en las que el algoritmo genético simple no funciona particularmente bien, y se han propuesto varios métodos de hibridación (Gen & Cheng, 1997). Por ejemplo, Wang & Tang (2013) presentan una optimización de operación multiobjetivo del proceso de pirolisis de nafta usando la evolución diferencial paralela. Guo et. al. (2014) usan la evolución diferencial mejorada con parámetros de control auto adaptativos. Ouyang et. al. (2015) desarrollaron un novedoso algoritmo híbrido de migración de poblaciones de múltiples objetivos. Wong et. al. (2016) presentaron un diseño de intercambiadores de calor de carcasa y tubos para múltiples objetivos utilizando un algoritmo genético de clasificación elitista no dominado con criterios de terminación. Vázquez-Castillo (2015) utilizó un enfoque de optimización multiobjetivo para integrar el diseño

y el control en las secuencias de destilación multicomponente. Sharma et. al. (2014) utilizaron el algoritmo NSGA-II con un enfoque de altruismo. Wang & Rangaiah (2016) desarrollaron una aplicación y análisis de métodos para seleccionar una solución óptima del frente óptimo de Pareto obtenido por la optimización multiobjetivo. Holiš et. al. (2013) propusieron un método para resolver problemas de aleación de acero usando algoritmos de evolución SOMA y evolución diferencial. Sharma & Rangaiah (2014) también reportaron un enfoque híbrido para la optimización multiobjetivo y su aplicación a problemas de ingeniería de procesos.

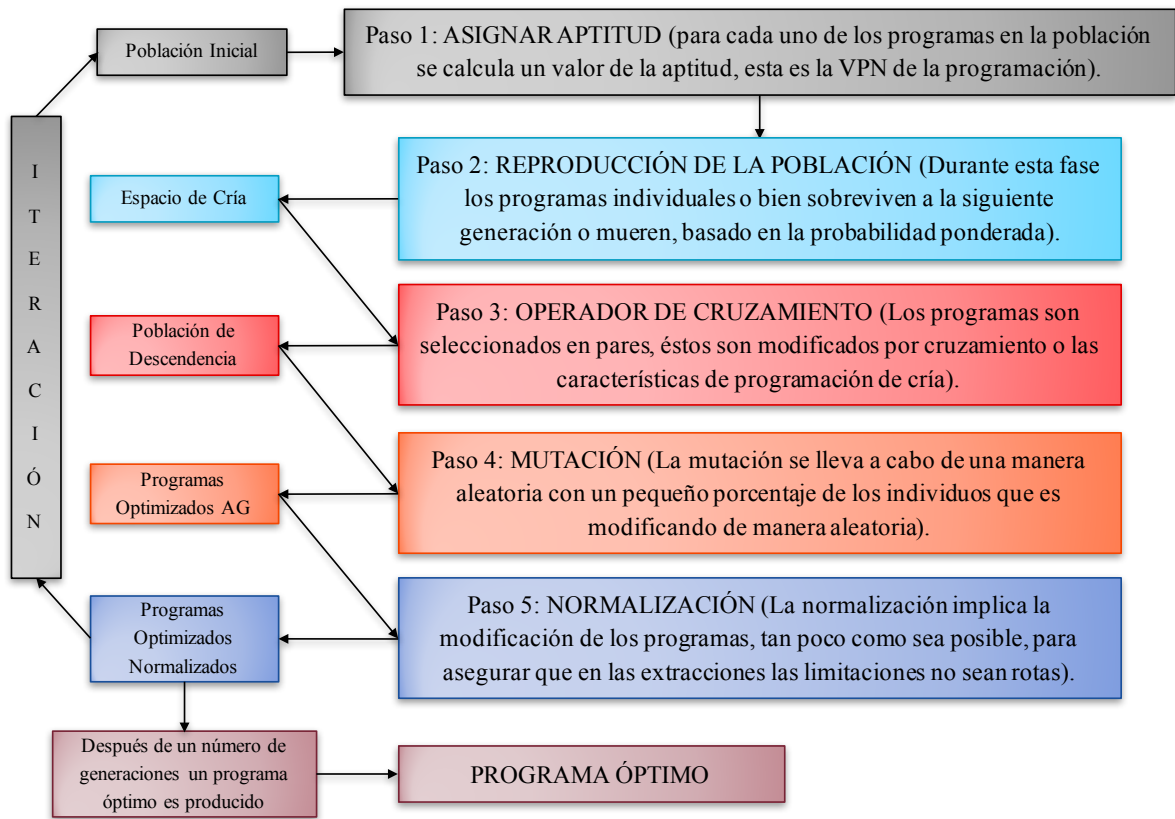


Figura 1-2: Diagrama de flujo de la secuencia del algoritmo genético simple.

En la actualidad, varios simuladores de procesos, como Aspen Plus y Aspen HYSYS, están disponibles en el mercado para simular procesos químicos completos, donde están disponibles unidades de proceso comunes y una base de datos de propiedades para numerosas especies químicas. Sin embargo, los modelos para unidades de proceso menos comunes y/o nuevos no están fácilmente disponibles en los simuladores, pero pueden estar disponibles en la literatura o pueden desarrollarse a partir de principios básicos. El modelo matemático para una nueva unidad de

proceso se puede implementar en Aspen Custom Modeler (ACM), y luego se puede exportar a Aspen Plus o Aspen HYSYS para simular procesos que tienen una nueva unidad de proceso además de unidades de proceso comunes como intercambiadores de calor, compresores, reactores y columnas (Sharma & Rangaiah, 2016). Para el correcto funcionamiento de estas simulaciones, es necesario alimentar el programa con valores que se encuentren dentro de un rango adecuado, lo anterior para evitar errores en el equipo de modo que surjan indeterminaciones debido al comportamiento termodinámico de las sustancias utilizadas y las interconexiones del equipo deben estar correctamente indicadas.

Actualmente, se han reportado numerosas investigaciones en las que se están llevando a cabo simulaciones en Aspen Plus y Aspen HYSYS para analizar procesos industriales. Tal es el caso de Morgan et. al. (2017) quienes utilizaron Aspen HYSYS para la eliminación de CO₂ por absorción de amina de una planta de energía a base de gas. Tang et. al. (2017) reportaron un modelado y simulación de un proceso mejorado de desulfuración a base de amoníaco para el tratamiento de gas de cola Claus. Hauck et. al. (2017) presentaron y evaluaron un modelo de simulación termodinámico en Aspen Plus para una celda de combustible de óxido sólido reversible (RSOFC). Gómez-Ríos et al. (2017) realizaron una comparación de tecnologías de proceso para la producción de quitosano a partir de desechos de cáscara de camarón como un enfoque tecn-económico utilizando Aspen Plus. Pauls et. al. (2016) desarrollaron una simulación de la gasificación aire-vapor de biomasa leñosa en un lecho fluidizado burbujeante usando Aspen Plus como un modelo integral que incluye pirolisis, hidrodinámica y producción de alquitrán. Kaushal & Tyagi (2017) presentaron una simulación avanzada de gasificación de biomasa en un reactor de lecho fluidizado utilizando Aspen Plus. Fernandez-Lopez et al. (2017) realizaron una simulación de la gasificación de desechos animales en un gasificador dual utilizando Aspen Plus.

Recientemente, se han desarrollado simulaciones de procesos para la optimización multiobjetivo basada en algoritmos estocásticos tales como algoritmos genéticos y evolución diferencial con lista tabú. Tal es el caso de Quiroz-Ramírez et. al. (2017) quienes reportaron una selección óptima de materias prima para la producción de biobutanol teniendo en cuenta aspectos económicos y ambientales. Quiroz-Ramírez et al. (2017) también reportaron un enfoque de optimización estocástica multiobjetivo aplicado a una separación del proceso de producción de biobutanol. Medina-Herrera et. al. (2017) presentaron un diseño óptimo de un sistema de

destilación reactiva multiproducto para la producción de silanos. Contreras-Zarazúa et. al. (Contreras-Zarazúa, et al., 2016) realizaron una optimización multiobjetivo que implica propiedades de costo y control en procesos de destilación reactiva para producir carbonato de difenilo. Santibañez-Aguilar et. al. (2016) utilizaron algoritmos estocásticos para el diseño de cadenas de suministro de una biorefinería, teniendo en cuenta objetivos económicos y ambientales. González-Bravo et. al. (2016) desarrollaron una optimización multiobjetivo de plantas de energía de doble propósito y redes de distribución de agua.

Sin embargo, casi todas estas aplicaciones se han realizado utilizando programas o plataformas que no se utilizan fácilmente en la industria. Por otro lado, los ingenieros están familiarizados con MS Excel y lo utilizan tanto en la investigación como en la práctica industrial (Sharma, et al., 2012). Por lo tanto, en este trabajo, se utilizó un programa MOO (EMOO) basado en Excel.

Usando el explorador de variables, que es una herramienta que tiene este simulador de procesos, es posible manipular el valor de las variables que se ingresan y leer los valores de respuesta de otro programa. Por lo tanto, a través de una subrutina de enlace, es posible establecer un enlace entre el programa del simulador y el programa que contiene el algoritmo de optimización.

La contribución del presente trabajo se basa en una estrategia de optimización que permite resolver de forma general la optimización de cualquier proceso simulado mediante software comercial (como Aspen Plus, Aspen HYSIS, SuperPro Designer), esto se logra mediante el uso de la tecnología COM en una subrutina de enlace.

1.2. JUSTIFICACIÓN

Actualmente, no existe una estrategia general de optimización de diagramas de flujo de procesos basada en algoritmos estocásticos. La metodología que se propone en este proyecto de investigación, presenta un marco general para vincular cualquier simulador de procesos con programas externos que contengan algoritmos estocásticos y que permitirán la optimización multiobjetivo de los procesos industriales.

1.3. OBJETIVOS

1.3.1. OBJETIVO GENERAL

Proponer una metodología general de optimización para simulaciones de procesos basada en algoritmos estocásticos.

1.3.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- a) Realizar una simulación de una planta de potencia en el software de simulación Aspen Plus, alimentando dicha simulación con datos reales y obteniendo resultados coherentes.
- b) Emplear diversos algoritmos estocásticos para la optimización de modelos matemáticos en donde las herramientas deterministas no funcionan adecuadamente, esto con la finalidad de probar su efectividad.
- c) Lograr la vinculación entre un software de simulación y un algoritmo estocástico mediante el uso de una sub rutina de vinculación.
- d) Establecer las variables de decisión, las restricciones y las funciones objetivo.
- e) Correr la optimización que consistirá en múltiples y sucesivas simulaciones del proceso seleccionado y analizar los resultados en gráficos de Pareto para determinar las mejores alternativas.

1.4. HIPOTESIS

Una metodología general de optimización para simulaciones de procesos basada en algoritmos estocásticos permitirá resolver numerosos problemas de optimización en donde las herramientas deterministas no son efectivas además de aquellas en las que el planteamiento del modelo matemático resulte muy complicado.

2. MARCO TEÓRICO

Para implementar el vínculo entre cualquier simulador de procesos y las técnicas metaheurísticas, la metodología se ha dividido en tres partes: software de simulación, optimización y enlace, los conceptos involucrados se describen en el presente capítulo.

2.1. SIMULACIÓN DE PROCESOS

Un modelo matemático de un proceso químico es una representación simplificada del comportamiento fisicoquímico del proceso real, que se utiliza para predecir valores de variables de salida para variables de entrada y variables de diseño de proceso (incluidas operaciones). Un modelo se puede usar para los estudios de “qué pasa si” y la solución de problemas del proceso, y tiene muchas aplicaciones para la optimización del proceso, el control del proceso y la capacitación del operador. Los modelos a menudo son difíciles de resolver analíticamente, por lo que en su mayoría se resuelven numéricamente (Sharma & Rangaiah, 2016).

La simulación de procesos permite predecir el comportamiento de un proceso mediante el uso de relaciones de ingeniería básicas, como balances de masa y energía, y equilibrio de fase y químico. Dados datos termodinámicos confiables, condiciones de operación realistas y modelos de equipos rigurosos, se puede simular el comportamiento real de una planta. La simulación de procesos permite ejecutar muchos casos, realizar análisis de "qué sucede si" y realizar estudios de sensibilidad y ejecuciones de optimización. Con la simulación, es posible diseñar mejores plantas y aumentar la rentabilidad en las plantas existentes. La simulación de procesos es útil a lo largo de todo el ciclo de vida de un proceso, desde la investigación y el desarrollo hasta el diseño de procesos y la producción (Aspen Tech, 2015).

El modelado se refiere a todos los pasos para desarrollar y validar un modelo para el proceso, mientras que la simulación se refiere al uso del modelo desarrollado para estudiar el comportamiento/respuesta del proceso para uno o más conjuntos de variables de entrada y diseño. En general, el modelado y la simulación se utilizan para optimizar la operación y el diseño del proceso. La optimización mejora el rendimiento de un proceso al cambiar las condiciones operativas, como la temperatura, la presión y la velocidad de flujo de las secuencias de proceso, pero sin cambiar el diagrama de flujo de ningún equipo o proceso. El reacondicionamiento y modernización de procesos se refiere al rediseño de una planta para el(los) objetivo(s) especificado(s), como un mayor rendimiento, un menor consumo de energía y una calidad

específica del producto. Esto se logra mediante cambios en el equipo existente y/o la adición de equipos nuevos (que conducen a una nueva configuración del proceso) además de cambios en las condiciones de operación (Sharma & Rangaiah, 2016).

2.2. SOFTWARE DE SIMULACIÓN

Un simulador de procesos es un programa informático que permite modelar diferentes procesos según el área de estudio para la que fue diseñado. De esta forma, existen simuladores para procesos industriales, químicos y bioquímicos. Un software de simulación de procesos es la mejor manera de realizar la simulación de procesos industriales, esto se debe a la gran cantidad de ecuaciones y métodos numéricos que se necesitan para una correcta representación y predicción del comportamiento en la realidad.

Además, los simuladores de proceso generalmente están programados para usarse en el sistema operativo de una computadora, por lo que es aconsejable verificar la compatibilidad del software que se usará con el equipo donde va a funcionar. Actualmente, existen varios simuladores de procesos que se distribuyen comercialmente y que ya tienen ecuaciones de modelado para ciertos equipos y métodos numéricos programados para la solución de ecuaciones termodinámicas específicas. Otro aspecto importante del software de simulación comercial es que tienen una base de datos simple con componentes usualmente utilizados en la industria de la transformación, así como sus propiedades fisicoquímicas y termodinámicas.

2.2.1. ASPEN PLUS®

Aspen Plus® es el software de simulación de procesos químicos líder en el mercado utilizado por las industrias a granel, especializadas y bioquímicas para el diseño y la operación (aspentech.com). Las principales ventajas de este simulador consisten en una gran base de datos de compuestos químicos específicos y operaciones unitarias.

Sin embargo, los modelos para unidades de proceso menos comunes y/o nuevas no están fácilmente disponibles en los simuladores, pero pueden estar disponibles en la literatura o pueden desarrollarse a partir de principios elementales. Se puede implementar un modelo matemático para una nueva unidad de proceso en Aspen Custom Modeler (ACM), y luego se puede exportar a (incluido en) Aspen Plus o Aspen HYSYS para simular procesos que tengan una nueva unidad de

proceso además de unidades de proceso comunes como intercambiadores de calor, compresores, reactores y columnas (Sharma & Rangaiah, 2016).

Para el correcto funcionamiento de estas simulaciones, es necesario alimentar el programa con valores que se encuentren dentro de un rango adecuado, lo anterior para evitar errores en el equipo de modo que surjan indeterminaciones debido al comportamiento termodinámico de las sustancias utilizadas y las interconexiones del equipo deben estar correctamente indicadas.

2.2.2. SUPERPRO DESIGNER

SuperPro Designer es un software que facilita el modelado, la evaluación y la optimización de procesos integrados en una amplia gama de industrias (intelligent.com). La razón principal para usar este simulador es porque permite el análisis de procesos bioquímicos que otros simuladores comerciales no incluyen en sus opciones de modelado.

SuperPro Designer es el único simulador de procesos comerciales que puede manejar igualmente procesos continuos y por lotes, así como combinaciones de lotes y continuos.

2.3. MÉTODOS DE BÚSQUEDA

Los conceptos fundamentales correspondientes a la segunda parte de la metodología, es decir, los métodos de optimización, se describirán a continuación.

La palabra óptimo significa "el mejor". La optimización consiste en encontrar el punto óptimo en el que se encuentran los mejores valores para ciertas variables y en el que se logra un objetivo específico. Existen diferentes métodos de búsqueda para lograr la optimización, que se analizarán en profundidad en el capítulo correspondiente.

Las variables de decisión corresponden a las que se han determinado previamente y se manipularán para encontrar el punto óptimo. Estas variables deben operar dentro de un rango en el cual ofrecen resultados factibles para los objetivos que se buscan, este es el rango de operación. Además, las variables de decisión pueden estar sujetas a ciertas restricciones que el usuario debe conocer para los procesos estudiados, estas restricciones ayudan a limitar el rango de búsqueda y hacen que la optimización sea más eficiente, reduciendo el tiempo de cálculo.

La función objetivo es una ecuación en la que se refleja el rendimiento del proceso que se está optimizando, se está logrando su valor máximo o mínimo manipulando las variables de disolución y teniendo en cuenta las restricciones de búsqueda establecidas.

2.3.1. CLASIFICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE BÚSQUEDA

Las técnicas generales de búsqueda y optimización se clasifican en tres categorías: enumerativa, determinista y estocástica (Coello-Coello, et al., 2002). La Figura 2-1 muestra ejemplos comunes de cada tipo. Algunos autores clasifican los métodos basados en cálculos en indirectos y directos, y clasifican la computación evolutiva en estrategias de evolución, programación evolutiva, algoritmos genéticos y programación genética (Devlillers, 1996).

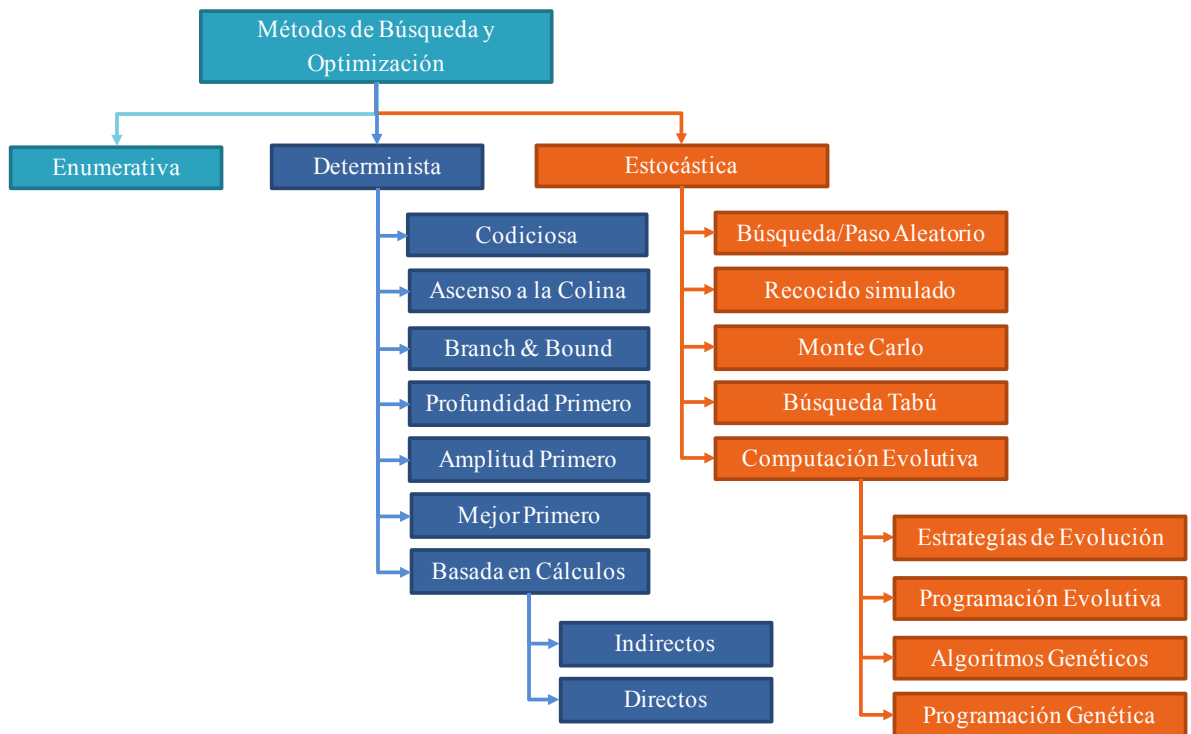


Figura 2-1: Técnicas de optimización global y clasificación de los métodos de búsqueda.

2.3.2. OPTIMIZACIÓN DETERMINISTA

Los métodos deterministas se han utilizado con éxito para resolver una amplia variedad de problemas. Sin embargo, estos métodos están limitados para resolver problemas no convexos y no lineales. Para la implementación de estos métodos de optimización, es necesario implementar todas

las ecuaciones que describen el comportamiento del proceso mediante la formulación de un modelo matemático.

Los métodos deterministas a menudo son ineficaces cuando se aplican a problemas *NP-Complete* u otros problemas de alta dimensión porque están obstaculizados por su requisito de conocimiento del dominio del problema (heurística) para dirigir o limitar la búsqueda en estos espacios de búsqueda excepcionalmente grandes. Debido a que muchos de los problemas científicos y de ingeniería multiobjetivos (MOP) del mundo real que presentan una o más de estas características anteriores, la búsqueda estocástica se desarrolló como enfoques alternativos para resolver estos problemas irregulares (Coello-Coello, et al., 2002).

2.3.3. OPTIMIZACIÓN METAHEURÍSTICA

Para superar algunos inconvenientes asociados a los enfoques de optimización determinística, se han reportado procedimientos de optimización metaheurística (Wang & Tang, 2013; Guo, et al., 2014; Ouyang, et al., 2015; Wong, et al., 2016). Los enfoques de optimización metaheurística imitan algunos procesos de evolución y se basan en simular repetidamente un proceso dado para asignar una función de aptitud para valores dados de los grados de libertad (Sharma & Rangaiah, 2016). De esta forma, se evita la posibilidad de quedar atrapado prematuramente en una solución sub-óptima (Devillers, 1996), se evita la complicación asociada a la forma del modelo de optimización (Sharma & Rangaiah, 2014), principalmente porque éstos se basan en la simulación del proceso, y pueden vincularse fácilmente con los simuladores del proceso para optimizar diferentes hojas de flujo.

2.4. MÉTODOS ESTOCÁSTICOS DE OPTIMIZACIÓN

Existen problemas de optimización de interés industrial los cuales involucran funciones que presentan un gran número de soluciones locales y por lo tanto es muy difícil localizar la solución óptima utilizando técnicas de optimización deterministas. Por ejemplo, considere el caso que se muestra en la Figura 2-2, en el cual se representan en un diagrama la función de costos para el diseño de un intercambiador de calor respecto de las caídas de presión. En este caso podemos ver que se tienen dos soluciones locales, por lo tanto, si utilizamos un procedimiento de búsqueda local (como los descritos en los capítulos anteriores), el algoritmo podría quedar atrapado en la solución

que no presenta el costo mínimo ya que ésta cumple con los criterios de paro de estos algoritmos de optimización.

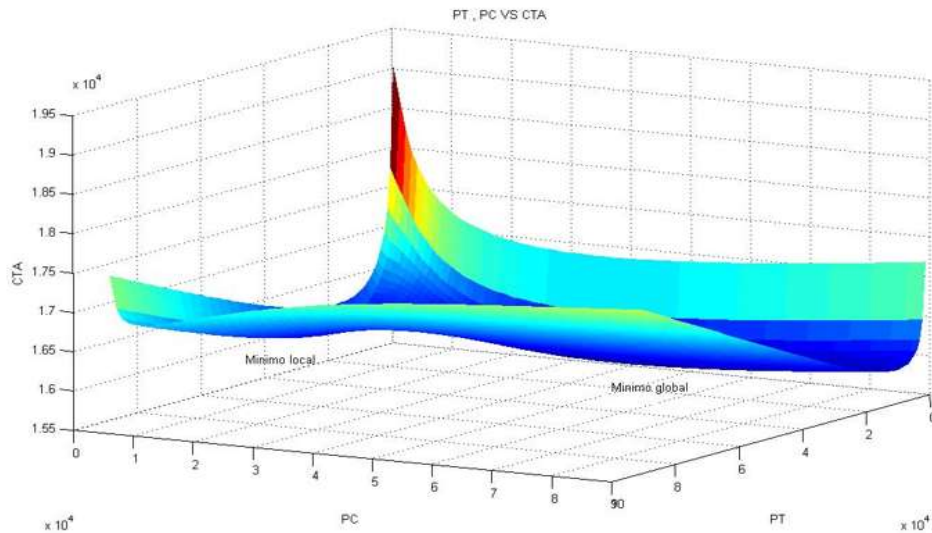


Figura 2-2: Grafica de costo contra caídas de presión para un caso particular de un intercambiador de calor.

Para resolver estos problemas se han propuesto algoritmos de búsqueda estocástica basados en fenómenos naturales tales como *Simulated Annealing* (Kirkpatrick, et al., 1983) y Algoritmos Genéticos (Goldberg, 1989). Estos algoritmos permiten realizar búsquedas en problemas que presentan un gran número de soluciones locales tan complejas como la mostrada en la Figura 2-3.

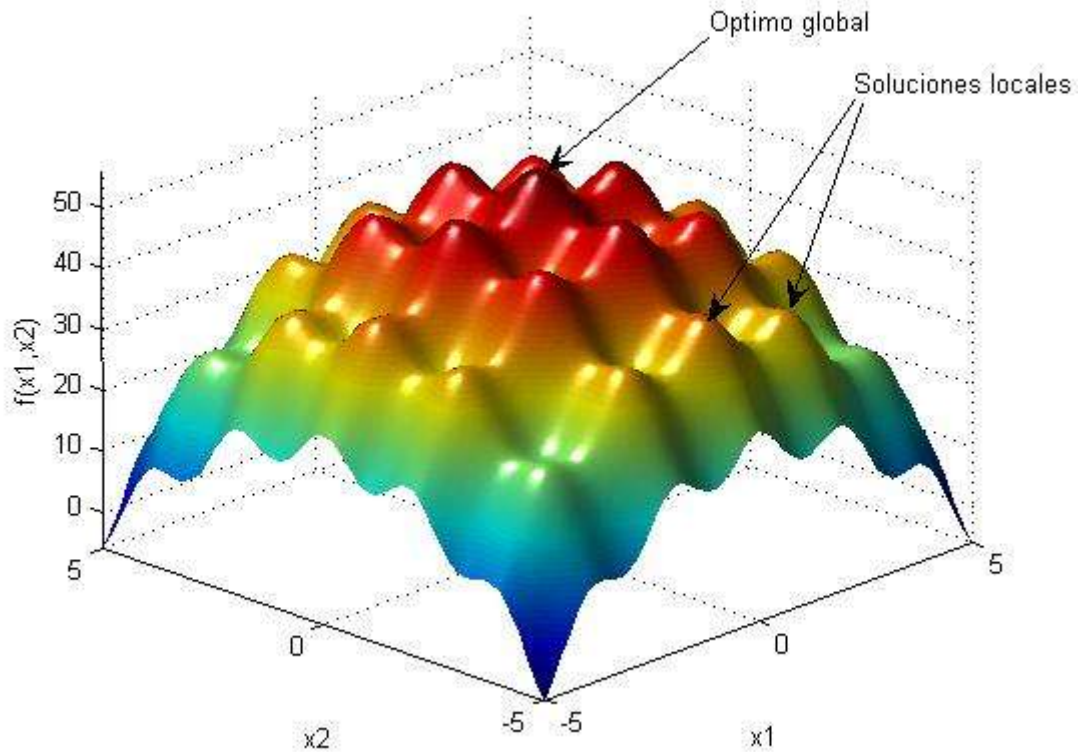


Figura 2-3. Ejemplo de una función en la cual los algoritmos estocásticos pueden ser aplicados para encontrar el óptimo global.

En este capítulo presentamos la estructura general de los algoritmos estocásticos *Simulated Annealing* (SA) y Algoritmos Genéticos (GA). Estos algoritmos se aplican de manera directa a problemas sin restricciones donde el problema consiste en $\text{Min } f(\mathbf{x})$, con límites para las variables, $a \leq \mathbf{x} \leq b$.

2.4.1. SIMULATED ANNEALING

Simulated Annealing (SA) es una búsqueda meta-heurística basada en una analogía del recocido de metales. Para describir este fenómeno, primeramente, considere un sólido con una estructura cristalina que es calentado hasta fundirlo, después el metal fundido es enfriado hasta solidificarlo nuevamente. Si la temperatura disminuye rápidamente, aparecen irregularidades en la estructura cristalina del sólido enfriado, y el nivel de energía del sólido es mucho mayor que una estructura perfectamente cristalina. Si el material es enfriado lentamente, el nivel de energía será mínimo. El estado del sistema a cualquier nivel de temperatura es descrito por el vector de

coordenadas q . A una temperatura dada, mientras que el sistema se mantenga en equilibrio, el estado cambia de manera aleatoria, pero la transición a estados con menor nivel de energía es más probable a bajas temperaturas.

Para aplicar estas ideas a un problema de optimización general, designaremos al estado del sistema q como el objetivo de optimización denotado como x . El nivel de energía corresponde a la función objetivo, $f(x)$. Los pasos básicos del algoritmo de optimización SA son mostrados a continuación (Figura 2-4):

0. Seleccionar un conjunto de valores iniciales para el vector de búsqueda \mathbf{x} , una temperatura inicial T , un límite inferior para la temperatura T^{low} , y un límite para el número máximo de iteraciones L .
1. Hacer $k = 0$
2. Hacer $k = k + 1$
3. Seleccionar de manera aleatoria valores para el vector de incógnitas \mathbf{x}'
4. Si $f(\mathbf{x}') - f(\mathbf{x}) \leq 0$, hacer $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$
5. Si $f(\mathbf{x}') - f(\mathbf{x}) > 0$, hacer $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$ con una probabilidad de $\exp^{-(f(\mathbf{x}') - f(\mathbf{x}))/T}$
6. Si $k \leq L$ regresar al paso 2, en caso contrario continuar con el paso 9
7. Reducir la temperatura $T = cT$, donde $0 < c < 1$
8. Si $T > T^{low}$ regresar al paso 1, en caso contrario terminar con el procedimiento de búsqueda.

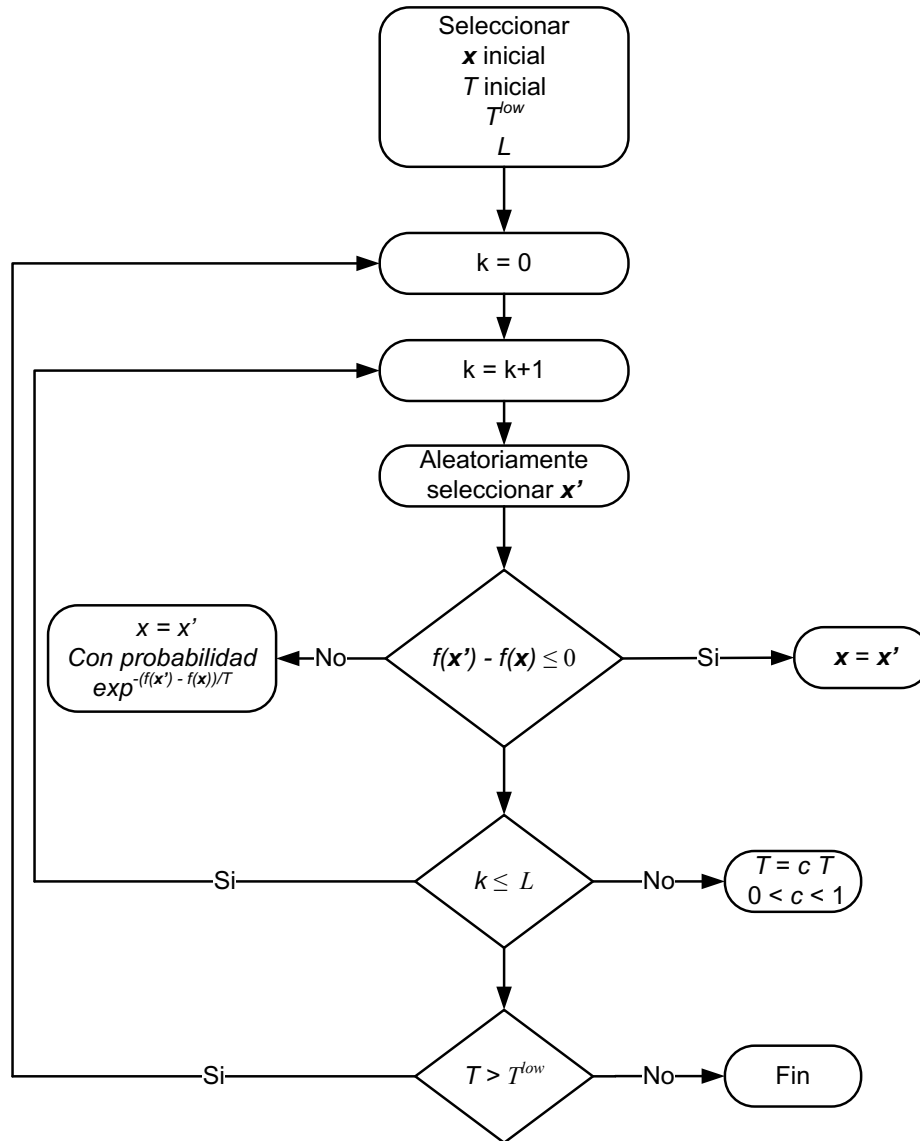


Figura 2-4: Estructura general del algoritmo *Simulated Annealing*

SA depende de la estrategia aleatoria para diversificar la búsqueda. El algoritmo SA básico usa el criterio *Metropolis* para aceptar un movimiento; en este sentido los movimientos en los cuales disminuye la función objetivo siempre son aceptados, mientras que los movimientos que aumentan la función objetivo se aceptan, pero con una probabilidad de $\exp^{-f(x') - f(x)/T}$. Note que cuando T se acerca a cero, la probabilidad de que se acepte un movimiento en la que la función objetivo aumenta es cero. Así, cuando la temperatura es alta, muchos movimientos en los cuales aumenta la función objetivo son aceptados, de esta manera el método previene que sea atrapado prematuramente en una solución local.

2.4.2. ALGORITMOS GENÉTICOS.

Los algoritmos genéticos (GA) son técnicas de búsqueda estocástica basados en el mecanismo de la selección natural y en la genética. Los GA son particularmente útiles en problemas no convexos o que incluyen funciones discontinuas. Los GA difieren de las técnicas de optimización convencional ya que en lugar de tener una solución inicial (valores para el vector de variable de optimización \mathbf{x}), tenemos un conjunto de soluciones para el vector de búsqueda llamadas población. Cada individuo de la población es llamado un cromosoma, el cual representa una solución para el problema. Los cromosomas evolucionan a través de iteraciones sucesivas las cuales son llamadas generaciones. Durante cada generación, los cromosomas son evaluados, usando alguna forma de medir sus capacidades. Para crear la siguiente generación, los nuevos cromosomas son llamados descendientes, los cuales son creados ya sea combinando dos cromosomas de la generación actual usando la operación de fusión o modificando un cromosoma de forma aleatoria usando la operación de mutación. La nueva generación es creada seleccionando, de acuerdo al valor de sus capacidades, los padres y descendientes, y rechazando otros para mantener el tamaño de la población constante. Los cromosomas más capaces tienen una mayor probabilidad de ser seleccionados. Después de varias generaciones, el algoritmo converge al mejor cromosoma, el cual probablemente represente la solución óptima del problema o una solución cercana a la óptima. Para explicar esto de manera detallada, designemos $P(t)$ y $C(t)$ como los padres y descendientes de la generación actual t ; la estructura general de los algoritmos genéticos (Figura 2-5) es descrita de la siguiente manera;

0. Hacer $t = 0$
1. Inicializar $P(t)$
2. Evaluar $P(t)$
3. Recombinar $P(t)$ para producir $C(t)$
4. Evaluar $C(t)$
5. Seleccionar $P(t+1)$ de $P(t)$ y $C(t)$
6. Hacer $t \leftarrow t+1$
7. Si se cumple uno de los criterios de convergencia terminar, en caso contrario regresar al paso 3

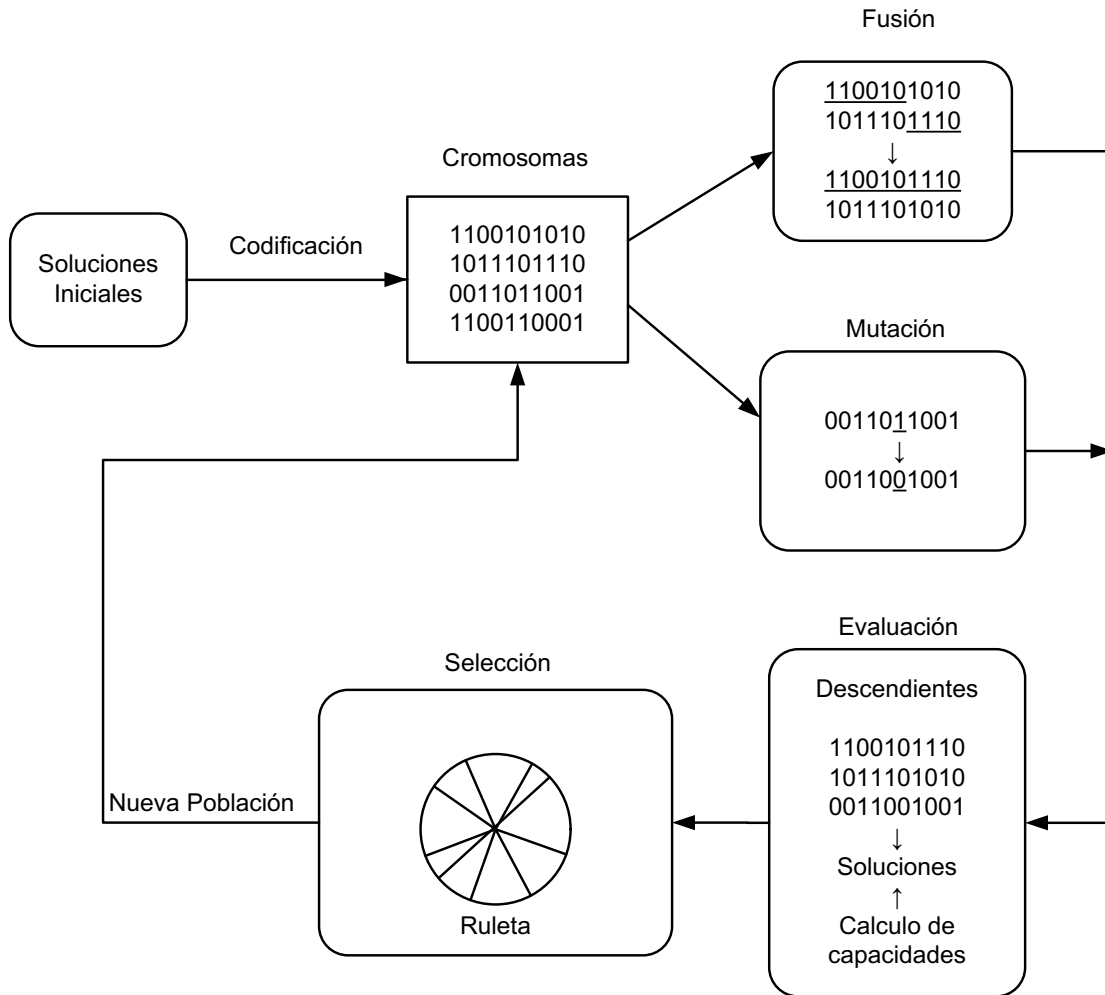


Figura 2-5: Estructura general de los algoritmos genéticos.

Usualmente, la población inicial es seleccionada de manera aleatoria. La recombinación típicamente involucra las operaciones de fusión y mutación para producir los descendientes. En realidad, existen solamente dos tipos de operaciones en los algoritmos genéticos: (a) Operaciones genéticas (fusión y mutación); y (b) la operación de evolución (selección).

Los operadores genéticos simulan el proceso genético hereditario para crear los nuevos descendientes en cada generación. La operación de evolución imita el proceso de la evolución *Darwiniana* para crear las poblaciones de generación en generación.

La fusión es el principal operador genético. Este opera sobre dos cromosomas a la vez y genera los descendientes combinando características de dos cromosomas. La manera más sencilla para llevar a cabo la operación de fusión es seleccionando de manera aleatoria un punto de corte y

generar un descendiente combinando el segmento de un padre a la derecha del punto de corte y el segmento del otro padre del lado izquierdo del punto de corte.

Este método funciona correctamente con la representación de los genes a través de cadenas de bits, por ejemplo, con variables binarias. El comportamiento general de los algoritmos genéticos depende en gran medida, de la efectividad de la operación de fusión usada.

La proporción de fusión (designada como p_c) es definida como la fracción del número de descendientes producidos en cada generación respecto del tamaño total de la población (usualmente designada como pop_size). Esta fracción controla el número esperado de cromosomas $p_c \times pop_size$ que experimentan la operación de fusión. Un número alto de la proporción de fusión permite la exploración de un mayor espacio de solución y reduce la posibilidad de instalarse en un falso óptimo; pero si esta proporción es demasiado alta, podría resultar en un desperdicio de tiempo de cómputo en la exploración de regiones no prometedoras del espacio de soluciones.

La mutación es una operación fundamental, la cual produce cambios aleatorios espontáneos en varios cromosomas. Una manera sencilla para realizar la operación de mutación consiste en alterar uno o más genes. En los algoritmos genéticos, la operación de mutación juega un rol crucial en (a) reponer los genes perdidos de la población durante el proceso de selección para que se puedan combinar en un nuevo contexto o (b) proporcionan genes que no fueron considerados en la población inicial.

La proporción de mutación (designada por p_m) es definida como el porcentaje de individuos de la población generados por mutación. La proporción de mutación controla los nuevos genes introducidos en la población para ser probados. Si es muy baja, muchos genes que pudieran ser útiles nunca serán probados; pero si es muy alta, existirán muchas permutaciones aleatorias, los descendientes iniciaran a perder su parecido con los padres, y el algoritmo perderá la habilidad de aprender históricamente en el proceso de búsqueda.

Los criterios de convergencia para los algoritmos genéticos son los siguientes: (a) Si se excede el número máximo de generaciones, (b) si el tiempo de cómputo máximo es alcanzado, (c) si la solución óptima es localizada, o (d) si no existen mejoras en generaciones sucesivas o respecto del tiempo de cómputo.

2.5. ALGORITMOS ESTOCÁSTICOS HÍBRIDOS

Los algoritmos genéticos (el diagrama de flujo se presenta en la Figura 2-6) han demostrado ser un enfoque versátil y efectivo para resolver problemas de optimización, pero hay muchas situaciones en las que el algoritmo genético simple no funciona particularmente bien, y se han propuesto varios métodos de hibridación (Gen & Cheng, 1997).

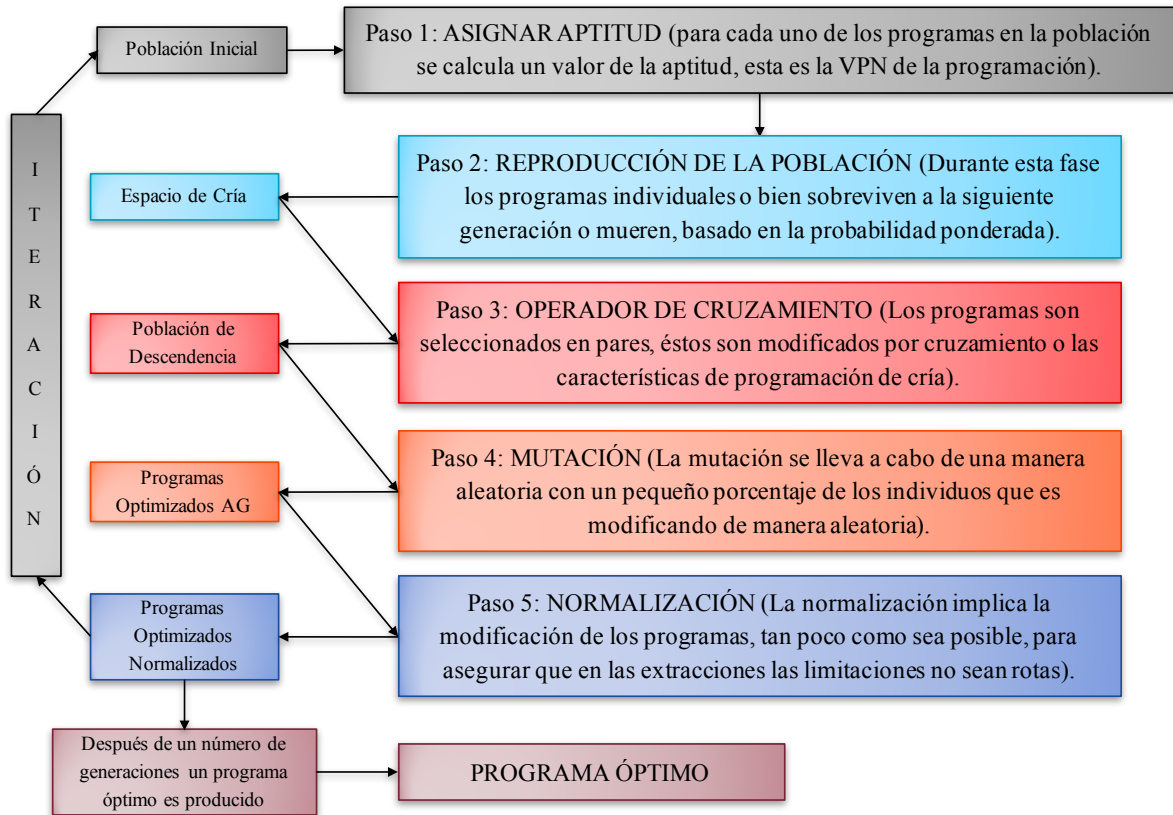


Figura 2-6: Diagrama de flujo de la secuencia de Algoritmos Genéticos Simples

Sin embargo, casi todas estas aplicaciones se han realizado utilizando programas / plataformas que no se utilizan fácilmente en la industria. Por otro lado, los ingenieros están familiarizados con MS Excel y lo utilizan tanto en la investigación como en la práctica industrial (Sharma, et al., 2012). Por lo tanto, un programa MOO (EMOO) basado en Excel puede representar una buena alternativa para desarrollar algoritmos de optimización estocástica.

Sharma y Rangaiah (2013), desarrollaron un algoritmo de evolución diferencial multi-objetivo mejorado con un criterio de terminación para optimizar los procesos químicos, que trabaja con un criterio de terminación utilizando las soluciones no dominadas obtenidas como el proceso

de búsqueda. El método híbrido de optimización multi-objetivo es la Evolución diferencial multi-objetivo mejorada (I-MODE por sus siglas en inglés, Improved Multi Objective Differential Evolution).

En el I-MODE (cuyo diagrama de flujo se presenta en la

), una población de individuos NP se inicializa aleatoriamente dentro de los límites de las variables de decisión. Luego, los valores de los objetivos y las restricciones se calculan para cada individuo de la población inicial. El Taboo List Size (TLS) es la mitad del tamaño de la población, y Taboo List (TL) se llena aleatoriamente con el 50% de individuos de la población inicial, los individuos iniciales también se identifican como individuos objetivo (i). Se genera un individuo de prueba para cada individuo objetivo mediante mutación y cruzamiento en tres individuos seleccionados al azar de la población inicial / actual / principal. Los elementos del vector mutante compiten con los del vector objetivo, con una probabilidad C_r para generar un vector de prueba. La comprobación de tabú se implementa en el paso de generación del vector de prueba de MODE-TL, y el individuo de prueba se genera repetidamente hasta que está lejos de cada individuo en el TL en una distancia específica llamada Taboo Radius (T_r). La distancia euclidiana entre el individuo de prueba y cada individuo en TL se calcula en el espacio normalizado de las variables de decisión para aceptar el individuo de prueba. Después de eso, los objetivos y las restricciones se calculan para el individuo de prueba aceptado temporalmente. El individuo de prueba se almacena en la población infantil y se agrega a TL. Después de generar las personas de prueba para todos los individuos objetivo de la población actual, la clasificación no dominada de las poblaciones combinadas, actual e infantil, seguidas por el cálculo de la distancia de concentración, si es necesario, se realiza para seleccionar los individuos para la próxima generación (G). Los mejores individuos NP se utilizan como población en la generación posterior.

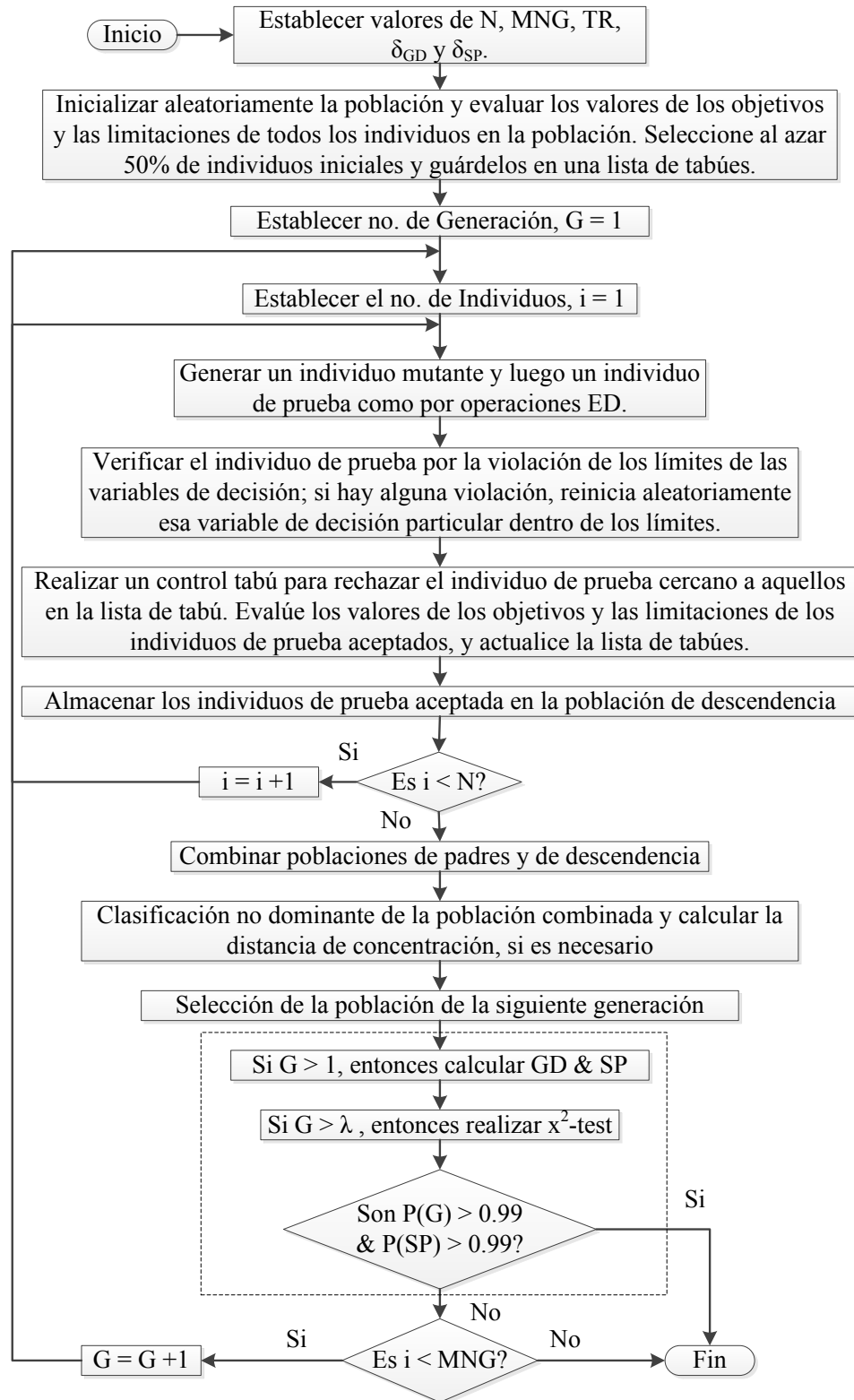


Figura 2-7: Diagrama de flujo del algoritmo I-MODE

2.6. ENLACE ENTRE PROGRAMAS

La tercera parte de la metodología propuesta corresponde al vínculo entre programas, siendo este un paso esencial para lograr la optimización de procesos simulados en software comercial. Esto implica algunos términos generales que se describen a continuación.

Cuando se menciona la palabra enlace en este texto, se refiere a la relación entre programas con el propósito de controlar o enviar y recibir datos obtenidos en diferentes programas. El vínculo entre los programas puede establecerse mediante el uso de herramientas internas de algunos de los programas o mediante las instrucciones de un tercer programa.

Visual Basic para Aplicaciones (VBA) es el lenguaje del sistema operativo Microsoft (MS) (Windows) que se utiliza para aplicaciones de programa. Muchos de los programas y complementos que se usan en Windows se desarrollan en este lenguaje, por lo que existen elementos comunes que se pueden manipular a través de esta plataforma. La tecnología Microsoft COM (Modelo de Objetos Componentes) en la familia de sistemas operativos Microsoft Windows permite que los componentes de software se comuniquen (microsoft.com), es por esta razón que es la tecnología utilizada para lograr el vínculo entre el software de simulación y el programa en el que se basa el algoritmo de optimización. Los detalles del uso de la tecnología COM se describirán en el capítulo correspondiente.

Recientemente, se informaron algunos enfoques para optimizar diferentes procesos basados en simuladores de procesos y vinculados con diferentes enfoques de optimización. Por ejemplo, Woinaroschy (2009) desarrolló una simulación y optimización de la producción de ácido cítrico con SuperPro Designer utilizando una interfaz cliente-servidor. Es de destacar que no se ha reportado un marco general para vincular cualquier simulador de procesos a cualquier técnica de optimización metaheurística. De esta manera, en esta Tesis se presenta un marco general para vincular cualquier simulador de procesos a los enfoques de optimización metaheurística para optimizar los diagramas de flujo de proceso. El enfoque propuesto implementa un vínculo entre el simulador de procesos (Aspen Plus, Aspen HYSYS, SuperPro Designer, etc.) a un algoritmo de optimización (puede ser una evolución diferencial multi-objetivo con una lista tabú implantada en MS Excel u otras técnicas metaheurísticas implementadas en otro software), que se puede vincular a través de un software COM a través de Visual Basic para Aplicaciones (VBA).

3. METODOLOGÍA

Para implementar el vínculo entre cualquier simulador de procesos y las técnicas metaheurísticas, la metodología se ha dividido en tres partes: software de simulación, optimización y enlace, y los pasos a seguir se describen a continuación.

La implementación del enfoque de optimización global implica una plataforma híbrida, que vincula el software Simulator y Microsoft Excel mediante la implementación de una tecnología de módulo de objetos componentes (COM) (el diagrama de flujo se presenta en la Figura 3-1).

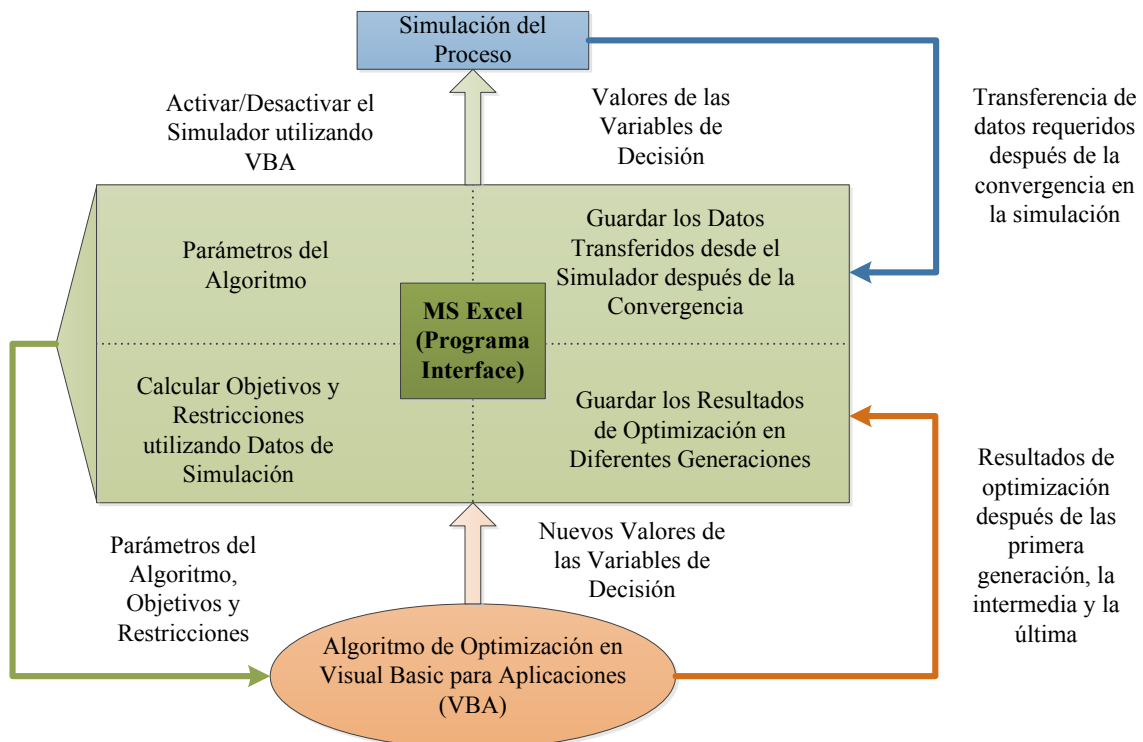


Figura 3-1: Interfaz entre un simulador de procesos y MS Excel® (que contiene un programa de optimización).

Se puede implementar una interfaz cliente-servidor basada en tecnología COM. Con la tecnología COM, es posible agregar código para que las aplicaciones se comporten como un servidor de automatización de enlace e incrustación de objetos (OLE). El uso de los métodos de esta biblioteca para interactuar con otras aplicaciones de Windows (como Excel) requiere el uso de un lenguaje de scripting común, y Visual Basic para Aplicaciones (VBA) se puede usar en este caso. Una interfaz entre Excel y Aspen Plus, basada en tecnología COM, que utiliza scripts de Excel-VBA (Birnbbaum, 2005) puede ser implementada.

Durante el proceso de optimización, se envía un vector de decisión de variables de diseño desde Excel a Aspen Plus (por ejemplo), en este simulador de procesos se obtienen cálculos rigurosos para los datos que identifican un diseño de proceso particular (p. Ej., temperatura y presión en la caldera), fracción dividida en el divisor, etc.) a través de la resolución de los equilibrios de fase junto con el conjunto completo de balances de masa y energía. Estos datos se devuelven desde Aspen Plus a Excel para el cálculo de las funciones objetivas, los valores obtenidos para las funciones objetivo se evalúan y se generan nuevos vectores de variables de diseño de acuerdo con el procedimiento estocástico de este método.

3.1. SIMULACIÓN DEL PROCESO

Para ilustrar la aplicación del método descrito, se toma como ejemplo el problema de optimización multiobjetivo de la planta de energía de vapor regenerativa con sobrecalentamiento y recalentamiento que se muestra en la Figura 3-2. Consiste en una etapa de recalentamiento de vapor y dos calentadores de agua de alimentación cerrados con desagües conectados en cascada hacia atrás que funcionan a diferentes niveles de presión. Cada calentador de agua de alimentación es un intercambiador de calor que recibe vapor sangrado de la turbina y alimenta agua o agua líquida subenfriada a alta presión del condensador. La corriente de agua pasa a través de precalentadores alimentados con vapor sucesivos de las turbinas y la condensación hace que el calor fluya a la corriente de alimentación de la caldera para precalentar. A medida que el vapor sangrado se condensa en cada calentador de agua de alimentación, pasa a través de una válvula reductora de presión para fluir a una región de presión más baja, como el siguiente calentador de agua de alimentación a baja presión o el condensador. En el condensador, el agua de refrigeración proporcionada por una torre de enfriamiento húmedo elimina el calor residual del vapor de escape de la turbina al nivel de presión más bajo de la planta, dejando agua líquida subenfriado o condensado para su reutilización en el ciclo. Luego del condensador se coloca una bomba para suministrar agua a la caldera a través de los calentadores de agua de alimentación cerrada de tres presiones altas. La caldera genera vapor de agua a alta presión sobrecalentado del agua de alimentación de la caldera mediante la combustión del gas natural. El vapor de alta presión sobrecalentado de la caldera se usa para generar energía eléctrica en turbinas HP, IP y LP.

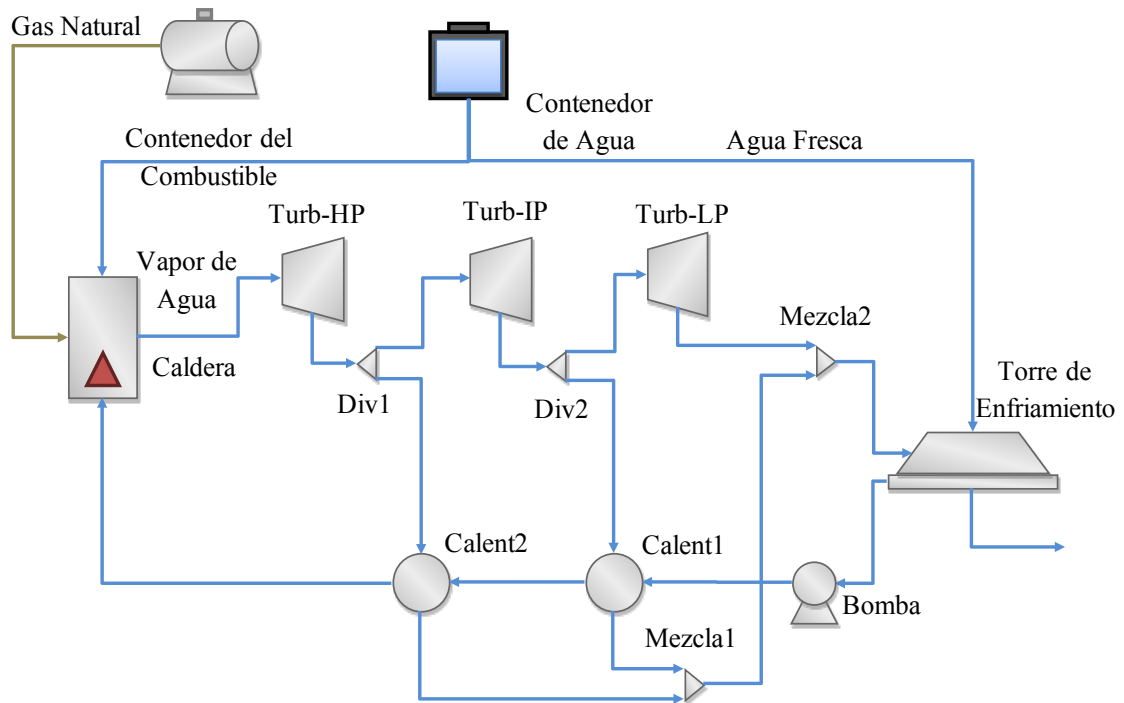


Figura 3-2: Planta de Generación de Potencia basada en un Ciclo Rankine con regeneración.

En este ejemplo, se abordó la optimización económica y ambiental simultánea de las centrales de vapor de recalentamiento regenerativo para generación eléctrica como la ilustrada en la Figura 3-2. Dada la configuración de la planta, temperatura, presión y caudal de la corriente de salida de la caldera y la corriente de alimentación al condensador, la temperatura de salida de la corriente caliente en el condensador, la disminución de la temperatura de la corriente caliente en ambos precalentadores, presión de la bomba, temperatura y presión de la caldera, fracción dividida de ambos divisores y disminución de presión en las turbinas de HP, IP y LP.

La solución del problema se define mediante un conjunto de diseños óptimos denominado conjunto óptimo de Pareto (es decir, el conjunto de las mejores soluciones posibles entre los objetivos considerados). Cada una de estas alternativas de solución logra una combinación única de beneficios e impacto ambiental. Para cada solución del conjunto de Pareto del problema, el objetivo es determinar los valores óptimos de la temperatura y la presión en la caldera, la disminución de presión en las turbinas HP, IP y LP, la presión en la bomba y la fracción dividida

en ambos divisores, así como la combinación óptima de fuentes de energía que maximiza al mismo tiempo el beneficio y minimiza el impacto ambiental de la planta (Gutiérrez-Arriaga, et al., 2013).

3.1.1. SIMULACIÓN DEL PROCESO EN ASPEN PLUS®

El primer paso corresponde a la simulación del proceso, es decir, establecer los equipos y las conexiones de las corrientes que relacionan las unidades de proceso bajo las condiciones específicas de cada uno que permiten ofrecer una representación del proceso. Para este propósito, se utilizó Aspen Plus®, que es el software de simulación de procesos químicos líder del mercado utilizado por las industrias a granel, especializadas y bioquímicas para el diseño y la operación (aspentech.com). Las principales ventajas de este simulador consisten en una gran base de datos de compuestos químicos específicos y operaciones unitarias. El diagrama de flujo del proceso en Aspen Plus® para un plan de energía de vapor simple para generación eléctrica basado en el ciclo de Rankine regenerativo se muestra en la Figura 3-3.

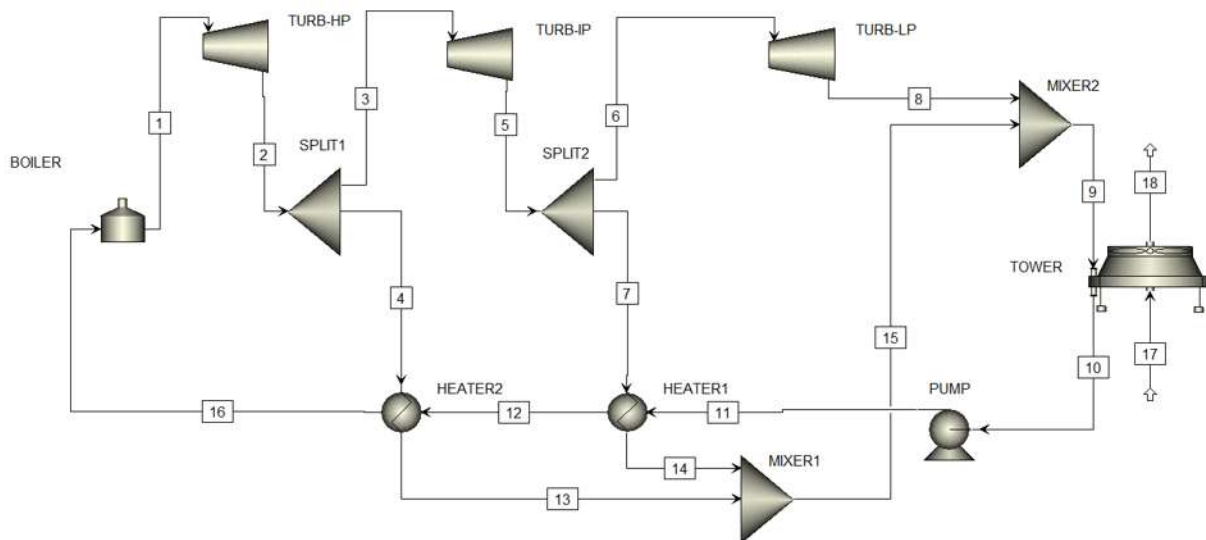


Figura 3-3: Diagrama de flujo del proceso en Aspen Plus®.

Las funciones objetivas económicas y ambientales se definieron a través de una formulación matemática del problema a considerar. La aplicación de simuladores de ingeniería química y bioquímica no se incluyó hoy en la búsqueda de soluciones óptimas. Debido a este hecho, es necesario el uso de un algoritmo de optimización multi-objetivo que debe ser estocástico (por

ejemplo, algoritmo genético (GA) y evolución diferencial (DE)). Se desarrolló una aplicación cliente-servidor útil para llamar al simulador Aspen Plus® repetitivamente para varios conjuntos de variables de entrada.

Para la primera simulación, se usaron los siguientes valores: una temperatura de 580 °C, una presión de 38 atm y un flujo total de 1000 ton / día para la corriente de salida de la caldera. La temperatura de salida del chorro en el condensador es igual a 100 °C, la temperatura del chorro disminuye 10 °C en el primer precalentador y 100 °C en el segundo, la presión de la bomba de 40 atm, la temperatura de 600 °C y la presión de 40 atm en la caldera. La fracción dividida es 0.8 en ambos divisores, y la presión disminuye a 20 atm, 10 atm y 5 atm en las turbinas HP, LP y LP, respectivamente.

3.1.2. FORMULACIÓN MATEMÁTICA

En este paso, la optimización multi-objetivo de las plantas de energía a vapor contiene dos funciones objetivas que incluyen el beneficio bruto anual y el impacto ambiental que deben satisfacerse simultáneamente. Para este propósito, los valores de las variables de respuesta se usaron para calcular el rendimiento de las funciones objetivo usando las siguientes ecuaciones tomadas de (Gutiérrez-Arriaga, et al., 2015). El principal beneficio del uso de biocombustibles (es decir, gas natural) como fuentes de energía en plantas de energía de vapor es la reducción de las emisiones netas de CO₂ (es decir, el impacto ambiental general). Sin embargo, un menor impacto ambiental se asocia con un menor beneficio bruto anual de la planta. Esto plantea un problema de optimización multi-objetivo desafiante de las plantas de energía de vapor donde el impacto medioambiental global debe ser minimizado, al tiempo que se maximiza el beneficio bruto anual del sistema. El ingreso total se calcula con el valor negativo de la energía eléctrica producida por las turbinas HP, IP y LP (WT) en kW y el precio de la energía eléctrica (PkWh) de \$ 0,1039 / kWh. El tiempo de operación (tOP) se estableció en un promedio de 24 horas durante 360 días.

Primero, es necesario calcular la temperatura de saturación en la caldera (T_{sb}), que se calcula en °C usando la Ecuación 3-1 comenzando con el valor de la presión de la caldera (P_b) expresada en atm:

$$T_{sb} = 13.8P_b^{0.2264} \quad (3-1)$$

Para calcular la temperatura de bulbo de la caldera (T_{sh}) en °C, utilizamos la Ecuación 3-2 que introduce la temperatura de funcionamiento de la caldera (T_b) en °C:

$$T_{sh} = T_{sb} + T_b \quad (3-2)$$

Además, son necesarios dos factores adimensionales para calcular el costo de capital de la caldera, el factor de recalentamiento de la caldera (N_t) y el factor de costo en la presión de la caldera (N_p), que se calculan mediante las Ecuaciones 3-3 y 3-4, respectivamente.

$$N_t = 1.5 \times 10^{-6} T_{sh}^2 + 1.13 \times 10^{-3} T_{sh} + 1 \quad (3-3)$$

$$N_p = 7 \times 10^{-4} P_b + 1 \quad (3-4)$$

El valor del costo de capital de la caldera (CB) se obtiene mediante la Ecuación 3-5 utilizando los factores adimensionales y el calor neto requerido en la operación de la caldera ($Q_{netboiler}$) en kW:

$$CB = \frac{3 \cdot N_t \cdot N_p \cdot Q_{netboiler}^{0.77}}{3412.14} \quad (3-5)$$

Mientras que el costo de la bomba (CP) se calcula a través de la Ecuación 3-6 utilizando el valor del trabajo realizado en la bomba (WP) en kW:

$$CP = 475.3 + 34.95 \cdot WP - 0.0301 \cdot WP^2 \quad (3-6)$$

Otro costo está en el asociado a la turbina (CT), que se encuentra para el uso de la Ecuación 3-7 comenzando con la energía eléctrica producida por las turbinas HP, IP y LP (WT) en kW:

$$CT = 2.237 \cdot WT^{0.41} \quad (3-7)$$

The cost of the cooling tower (CC), given in Equation 3-8, is calculated using the heat removed from the cooling tower (Q_c) in kW:

$$CC = 43 \cdot Q_c^{0.68} \quad (3-8)$$

El costo para operar la bomba ($COPP$) es el consumo de energía eléctrica en el funcionamiento de este equipo en kW, que se calcula mediante la Ecuación 3-9 comenzando con el trabajo realizado en la bomba (WP):

$$COPP = \frac{WP \cdot 0.1039 \cdot 8640}{0.6} \quad (3-9)$$

Los costos de operación de la caldera (COPB) y la torre de enfriamiento (COPC) se toman de los costos de los servicios utilizados, estas son variables que Aspen Plus® proporciona especificando el tipo de utilidad y el costo unitario de todos: para la caldera, es el gas natural con un costo unitario de 0.8552 \$ / kg, y para el agua de la torre de enfriamiento se usó como una utilidad de enfriamiento con un costo unitario de \$/kg. El factor de costo de capital (CCF) se toma en cuenta para plantas termoeléctricas con un valor de 0.1.

3.1.3. DEFINICIÓN DE LAS FUNCIONES OBJETIVO

La ganancia anual bruta (que se debe maximizar) y el impacto ambiental (por minimizar) de las plantas de energía a vapor se toman como los dos objetivos que se optimizarán simultáneamente. A continuación, presentamos las ecuaciones utilizadas para calcular estas funciones objetivas.

3.1.4. FUNCIÓN OBJETIVO ECONÓMICA

La función objetivo económica consiste en la maximización del beneficio anual bruto, que representa la diferencia entre el ingreso total y el costo anual total de la planta de energía de vapor. El rendimiento de la función objetivo económica se calcula de forma repetitiva utilizando las ecuaciones presentadas a partir de las variables de respuesta obtenidas por el software de simulación. La función objetivo económica se expresa en la Ecuación 3-10:

$$\text{Net Profit} = (-WT \cdot PkWh \cdot t_{op}) - (CB + CP + CT + CC) \cdot CCF - (COPP + COPB + COPC) \quad (3-10)$$

3.1.5. FUNCIÓN OBJETIVO AMBIENTAL

En este estudio, la función objetivo ambiental es minimizar las emisiones de CO₂ asociadas con la generación de electricidad en las centrales eléctricas que utilizan el gas natural como fuente primaria de energía.

Aspen Plus® puede calcular las emisiones de CO₂ utilizando la norma US-EPA-Rule-E9-5711 como fuente de datos del factor de emisión de CO₂ con un valor de 2.3e-07 kg / cal para el gas

natural. Suponemos un factor de eficiencia de fuente de energía de CO₂ de 0.85 y comenzando con el calor necesario en la caldera, que es una variable de respuesta calculada por Aspen Plus después de ejecutar la simulación de la planta de energía, podemos calcular la emisión total de CO₂.

3.2. METODO DE OPTIMIZACIÓN ESTOCÁSTICA UTILIZADO

El método híbrido de optimización multi-objetivo, es decir, Evolución diferencial multi-objetivo mejorada (I-MODE) desarrollado por Sharma y Rangaiah (2013), se utiliza como algoritmo estocástico para la optimización del proceso en este ejemplo. Este algoritmo de evolución diferencial multi-objetivo mejorado funciona con un criterio de terminación utilizando las soluciones no dominadas obtenidas como el proceso de búsqueda.

Se seleccionaron ocho variables de decisión e introdujeron un valor para el límite inferior y superior. Los valores de las variables de decisión seleccionadas para los límites inferior y superior, respectivamente, son 590 °C y 610 °C para la temperatura de operación en la caldera, 38 atm y 42 atm para la presión en la caldera, 18 atm y 22 atm para la disminución de presión en la turbina HP, 8 atm y 12 atm para la disminución de presión en la turbina IP, 4 atm y 6 atm para la disminución de presión en la turbina LP, 38 atm y 42 atm para la presión en la bomba y 0.7 y 0.9 para la fracción dividida en ambos divisores. Todas las variables de decisión se seleccionaron como variables continuas y el valor inicial para cada una fue la mitad entre el valor mínimo y el máximo posible. La optimización se desarrolló sin ninguna restricción de desigualdad. Estos valores de las variables de decisión se introducen en la interfaz de usuario del programa principal del I-MODE, como se muestra en la Figura 3-4.

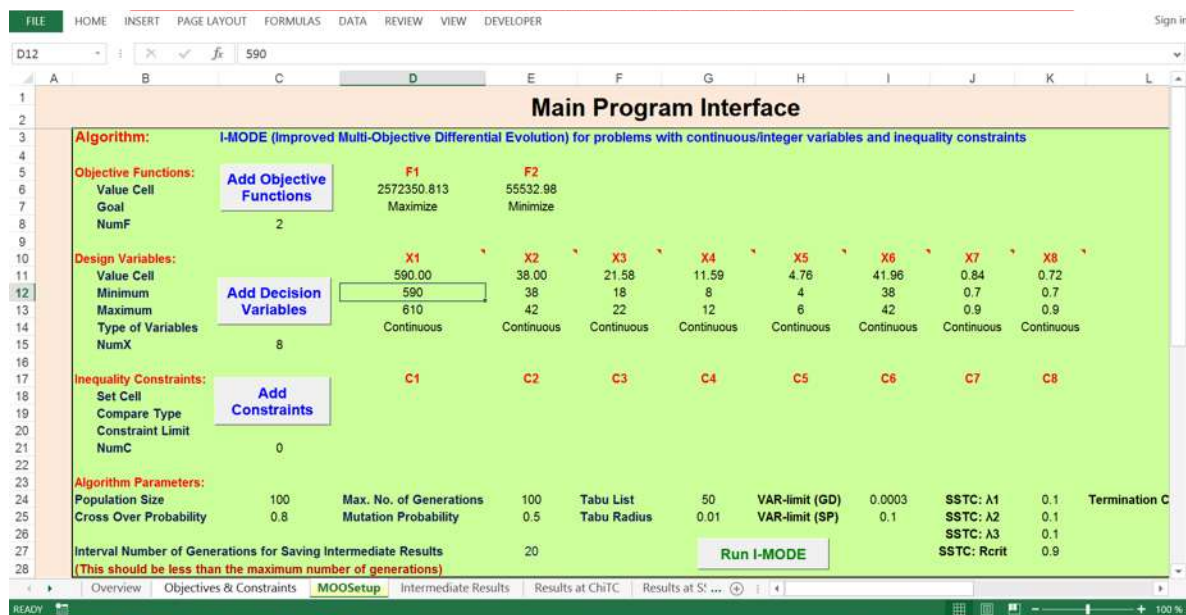


Figura 3-4: Interfaz Principal de Usuario del Programa I-MODE en MS Excel®.

Para el proceso de optimización, en este caso de estudio, los valores de los parámetros asociados al algoritmo I-MODE utilizado son los siguientes: Tamaño de población (NP) de 100 individuos, Número de generaciones (GenMax) de 100, Taboo List size (TLS) de 50 individuos, Taboo Radius (TR) de 0.01, fracciones de cruce (Cr) de 0.8 y fracciones de mutación (F) de 0.5. Estos valores de los parámetros asociados al uso del algoritmo también se introducen en la interfaz de usuario del programa principal del I-MODE, como se muestra en la Figura 3-4.

3.3. VINCULACIÓN ENTRE EL SIMULADOR DE PROCESOS Y EL ALGORITMO DE OPTIMIZACIÓN

Se puede establecer una interfaz entre el software de simulación de procesos Aspen Plus® y MS Excel®, como se puede ver en la Figura 3-5.

Este tipo de comunicación directa entre el software de simulación de procesos y el programa que contiene el algoritmo de optimización presenta múltiples ventajas que se pueden reflejar directamente en los recursos informáticos, como el tiempo de cálculo.

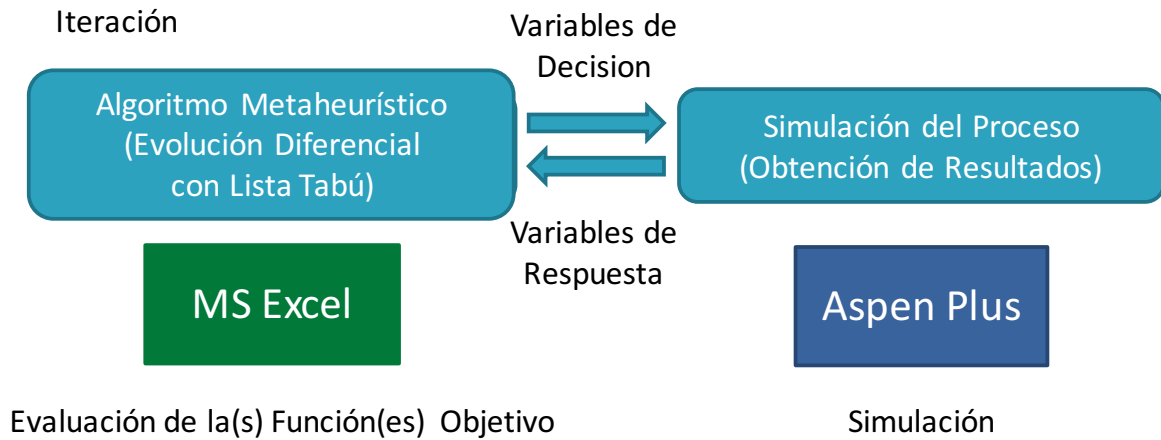


Figura 3-5: Interfaz entre Aspen Plus® y MS Excel®.

3.3.1. SUBROUTINA PARA VINCULAR ASPEN PLUS® Y MS EXCEL®

Para realizar el enlace exitoso entre el software de simulación de proceso Aspen Plus y un programa que tiene las herramientas de optimización estocástica utilizando MS Excel® como un programa enlazador, es necesario seguir los pasos descritos por las sintaxis generales para el código utilizado, que se muestra en la Figura 3-6



Figura 3-6: Pseudocódigo para vincular Aspen Plus® y MS Excel®.

3.3.2. ARCHIVOS PARA VINCULAR ASPEN PLUS® Y MS EXCEL®

Antes de comenzar, necesita dos archivos para realizar el enlace (que se muestra en la Figura 5 12). El primero, el archivo de respaldo de Aspen Plus que corresponde a los datos de la simulación de procesos elaborados previamente. El segundo archivo será del programa enlazador MS Excel®, que incluirá una rutina que llamará a las variables del simulador, colocando valores de entrada y leyendo las variables de respuesta. Para este enlace directo, no se requiere ningún otro archivo de programa optimizador, ya que el algoritmo de optimización estocástica se encuentra dentro del programa enlazador MS Excel.

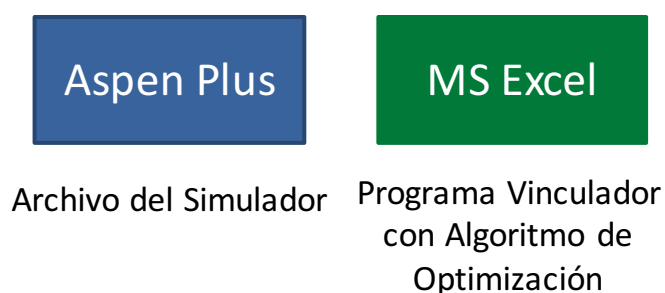


Figura 3-7: Archivos necesarios para vincular Aspen Plus® y MS Excel®.

Una vez que se ha corroborado que tiene los archivos esenciales para implementar el enlace, podemos comenzar con la explicación de los pasos a seguir, que se describen en las secciones siguientes.

3.3.3. NOMBRE DE LLAMADO DE LAS VARIABLES DE ASPEN PLUS®

Una vez que se ha declarado la ruta del archivo de respaldo de la simulación del proceso, procedemos con la declaración de variables de decisión y variables de respuesta en el programa del enlazador. Para hacer esto, necesitamos abrir el archivo que contiene la simulación en Aspen Plus y seleccionar la pestaña "Personalizar" y elegir la opción "Variable Explorer"

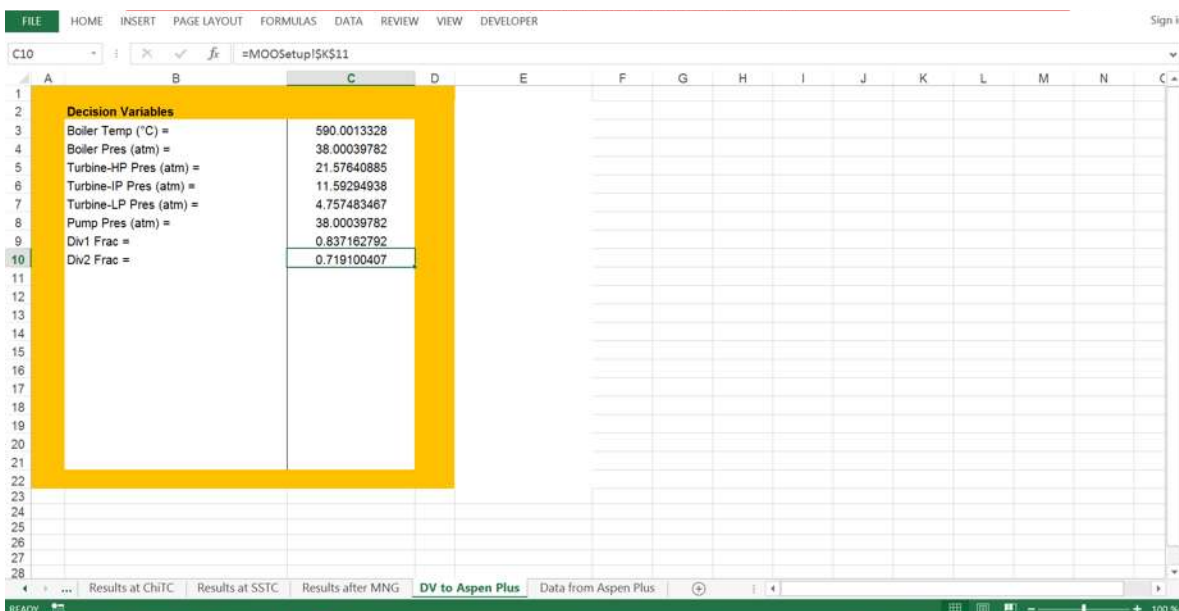
Luego, verá un árbol de opciones donde procedemos a encontrar el nombre de la variable que usa Aspen Plus® Variable Explorer y que corresponde a la variable de proceso que queremos vincular. El usuario debe mirar el árbol del explorador de variables, la variable que quiere ser como una variable de decisión o como una variable de respuesta. Para encontrar la variable deseada, se sigue una secuencia lógica de búsqueda según el equipo o flujo al que pertenece esta variable.

Como estamos seguros de que es la variable buscada, copiamos el contenido del valor correspondiente al atributo "Llamar".

Una vez que haya copiado el nombre de la variable con la que la tecnología COM hará la llamada, proceda a abrir nuevamente la sub-rutina del enlace y busque la parte en la que están asignadas las variables, aquí se pega el nombre de la variable para la llamada.

3.3.4. LLAMADO DE LAS VARIABLES DE ASPEN PLUS® A MS EXCEL®

Para el enlace adecuado entre el software del simulador de procesos (Aspen Plus para este ejemplo) y el algoritmo de optimización estocástica (el I-MODE en este caso), es necesario seguir la metodología mencionada anteriormente. Es recomendable agregar dos hojas más de MS Excel, la primera para los valores de las variables de decisión que se enviarán al simulador (Figura 3-8), y la segunda para los valores de las variables de respuesta que se recibirán del simulador (Figura 3-9).



Decision Variables	
Boiler Temp (°C) =	590.0013328
Boiler Pres (atm) =	38.00039782
Turbine-HP Pres (atm) =	21.57640885
Turbine-IP Pres (atm) =	11.59294938
Turbine-LP Pres (atm) =	4.757483467
Pump Pres (atm) =	38.00039782
Div1 Frac =	0.837162792
Div2 Frac =	0.719100407

Figura 3-8: Hoja de MS Excel® donde se enviarán los valores de las variables de decisión al simulador de procesos.

Variable	Value
Boiler Q (Gcal/h) =	23.347
Turb-HP W (KW) =	-1908.44105
Turb-IP W (KW) =	-1218.93381
Turb-LP W (KW) =	-950.518542
Tower Q (Gcal/h) =	19.8888048
Pump W (KW) =	55.4363429
Boiler Cost (\$) =	928854.514
Tower Cost (\$) =	2107.31372
Turb W (KW) =	-4078
Temp_Sat_Boiler (°C) =	31.67398439
TSH =	622
NT =	2.282213408
NP =	2730027.847
Power Factor 1 =	136.01
Power Factor 2 =	3073.19
Boiler Inv (\$) =	745031.3484
Turb Inv (\$) =	8155.786804
Tower Inv (\$) =	12.10631548
Pump Inv (\$) =	2320.297222
Pump Op Cost (\$) =	82941.63879
Net Profit 1 (Cost - \$) =	2572350.813
Net Profit 2 (CO2 - Ton/y) =	55532.97894

Figura 3-9: Hoja de MS Excel® donde se recibirán los valores de las variables de respuesta del simulador.

Como se puede ver, las ecuaciones adicionales de la formulación matemática deben introducirse en la hoja de MS Excel que se muestra en la Figura 3-9. Después de eso, debe establecerse el vínculo interno apropiado entre las variables de decisión, las variables de respuesta y las funciones objetivo. Luego, ejecute el I-MODE desde la interfaz de usuario del programa principal.

4. RESULTADOS

Esta sección presenta los resultados del método de optimización multi-objetivo aplicado al estudio de caso descrito en este capítulo. Todas las ejecuciones se obtuvieron de una CPU Intel® Core i7-4700MQ a 2,4 GHz, computadora de 32 GB, el tiempo de computación requerido para obtener las soluciones óptimas de Pareto varió de 10 a 15 minutos.

La estrategia propuesta produce los conjuntos de Pareto que aparecen en la Figura 4-1 a la Figura 4-3, en ellas se muestra la solución óptima generada de acuerdo con el procedimiento estocástico de este método. Los tres diagramas presentados diferentes dependen de los criterios de terminación. Las gráficas de Pareto mostradas se obtuvieron a partir de las variables de decisión seleccionadas, sus valores para los límites inferior y superior y los valores para los parámetros asociados con el algoritmo I-MODE utilizado presentado en la sección 0.

Los resultados para el criterio de terminación Chi-cuadrado (ChiTC) se muestran en la Figura 4-1, que converge en 37 generation. En este gráfico, se pueden ver cuatro puntos importantes (A, B, C y D). En el punto A se muestra el valor mínimo para las emisiones de CO₂ (0 ton / año), pero este punto tiene un beneficio bruto de 2,922,390 \$ / año, que es bajo. En el punto B y el punto C, se pueden ver valores aceptables para ambas funciones objetivas (emisiones de CO₂ de 369,344 ton / año con un beneficio bruto de 10,624,510 \$ / año para el punto B y emisiones de CO₂ de 385,858 ton / año con un beneficio bruto de 17,891,507 \$ / año para el punto C). Y el punto D muestra el valor máximo para la ganancia bruta (30,330,600 \$ / año), pero este punto también tiene el valor máximo para las emisiones de CO₂ (483,497 ton / año). Después del análisis de la gráfica que se muestra en la Figura 4-1, se concluyó que el mejor punto es C porque ofrece un mejor beneficio bruto que el punto B con un incremento mínimo en las emisiones de CO₂.

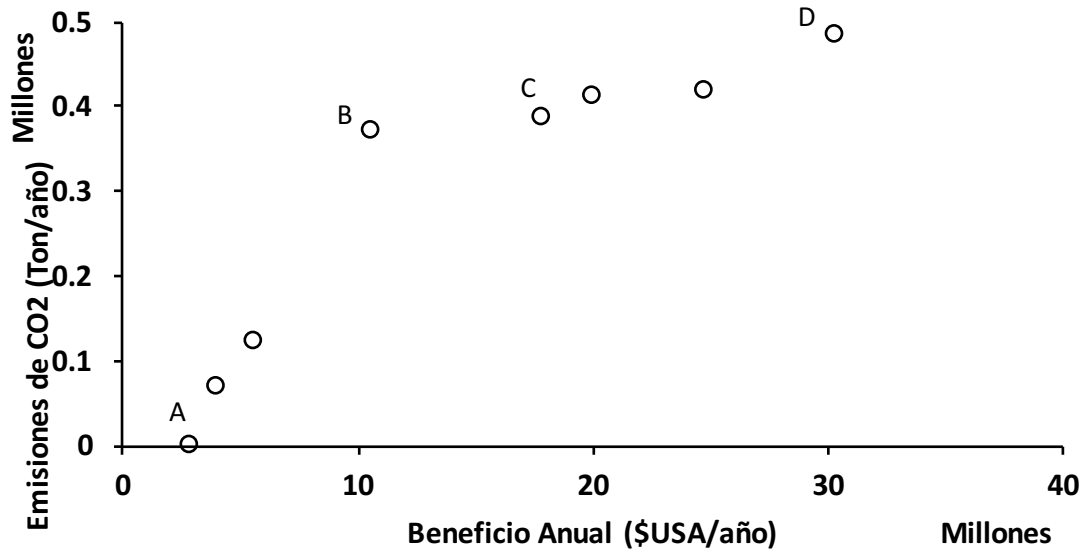


Figura 4-1: Gráfico de los resultados en el criterio de terminación Chi-cuadrado (ChiTC).

Los resultados para el criterio de terminación de estado estable (SSTC) se muestran en la Figura 4-2, que converge en 53 generaciones. En este gráfico, se pueden ver cuatro puntos importantes (A, B, C y D). En el punto A se muestra el valor mínimo para las emisiones de CO₂ (0 ton / año), pero este punto tiene un beneficio bruto de 3,975,780 \$ / año, que es bajo. En el punto B y el punto C se pueden ver valores aceptables para ambas funciones objetivas (emisiones de CO₂ de 361,757 ton / año con un beneficio bruto de 13,161,987 \$ / año para el punto B y emisiones de CO₂ de 370,516 ton / año con un beneficio bruto de 18,896,151 \$ / año para el punto C). Y el punto D muestra el valor máximo para la ganancia bruta (30,330,600 \$ / año), pero este punto es también el valor máximo para las emisiones de CO₂ (483,497 ton / año). Después del análisis del gráfico que se muestra en la Figura 4-2, se concluyó que el mejor punto es C porque ofrece un mejor beneficio bruto que el punto B con un incremento mínimo en las emisiones de CO₂.

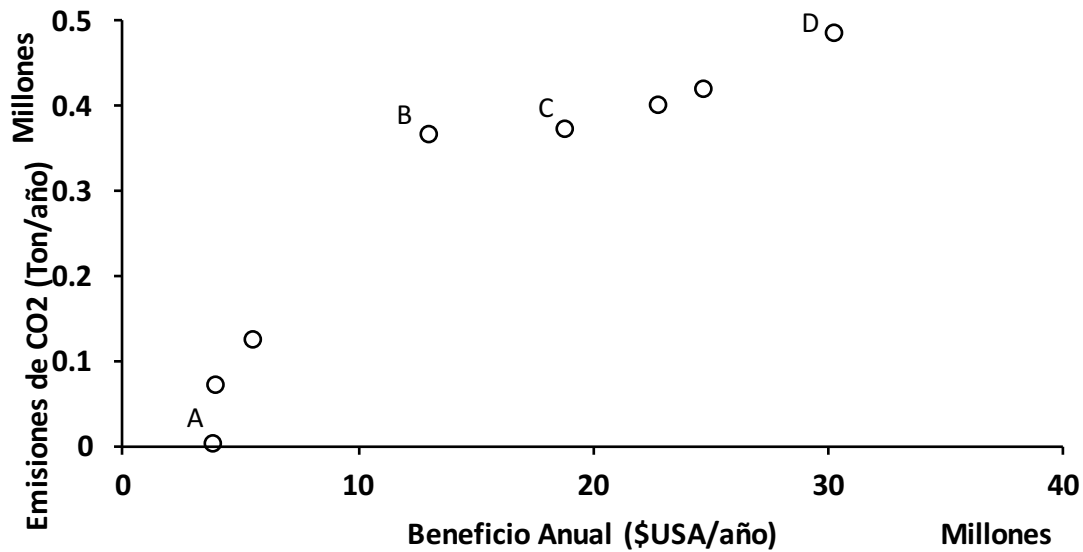


Figura 4-2: Gráfico de los resultados en el criterio de terminación de estado estable (SSTC).

Y los resultados para la última generación se muestran en la Figura 4-3. En este gráfico, se pueden ver cuatro puntos importantes (A, B, C y D). En el punto A se muestra el valor mínimo para las emisiones de CO₂ (0 ton / año), pero este punto (igual que en el gráfico mostrado en la Figura 4-2 tiene un beneficio bruto de 3,975,780 \$ / año, que es bajo. El punto B muestra valores no muy diferente del punto A (emisiones de CO₂ de 18,597 ton / año con un beneficio bruto de 5,868,030 \$ / año). En el punto C y el punto D se pueden ver valores aceptables para ambas funciones objetivas (emisiones de CO₂ de 126,794 ton / año con un beneficio bruto de 30,194,163 \$ / año para emisiones de C y CO₂ de 130,249 ton / año con un beneficio bruto de 39,687,071 \$ / año para el punto D). El punto D muestra el valor máximo de la ganancia bruta y el valor máximo de las emisiones de CO₂ también, pero este punto no es muy diferente al punto C en el valor de las emisiones de CO₂ y ofrece un incremento considerable en el valor del beneficio bruto. En base a esto, se concluyó que el mejor punto es D.

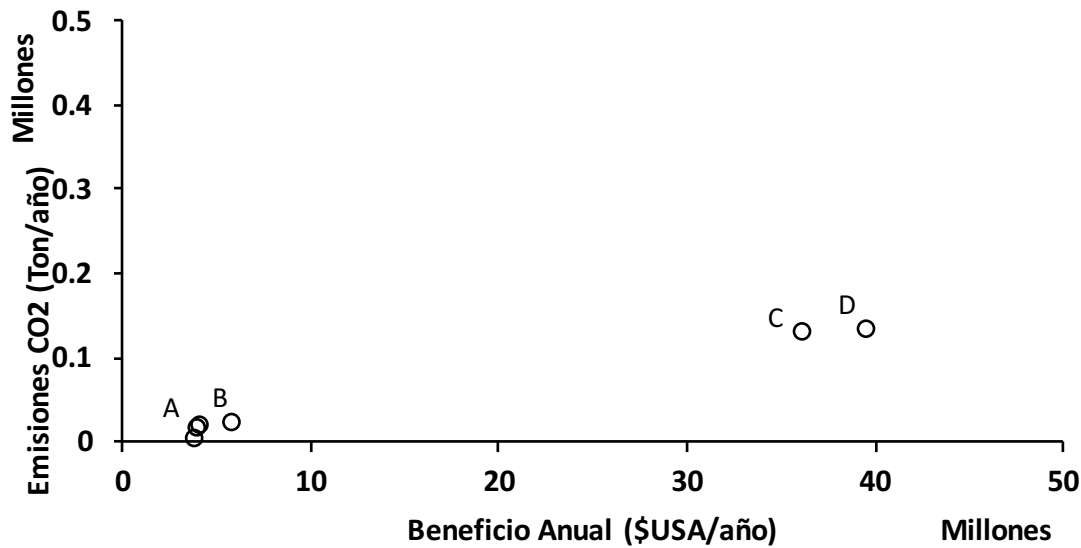


Figura 4-3: Gráfico de los resultados en la última generación.

El algoritmo I-MODE proporciona los valores óptimos para todas las variables de decisión. Los valores óptimos de las variables de decisión seleccionadas después de ejecutar la optimización son los siguientes: 590 ° C para la temperatura de operación en la caldera, 38.00 atm para la presión en la caldera, 21.58 atm para la disminución de presión en la turbina HP, 11.59 atm para la disminución de presión en la turbina IP, 4.76 atm para la disminución de presión en la turbina LP, 41.96 atm para la presión en la bomba y 0.84 y 0.72 para la fracción dividida en el primer y segundo divisor, respectivamente.

El valor óptimo de la función objetivo económica, que consiste en la maximización de la ganancia bruta anual es de \$ 2,572,350 / año. El valor óptimo de la función objetivo ambiental, que consiste en la minimización de todas las emisiones de CO₂, asociadas con la generación de electricidad en las centrales eléctricas que utilizan el gas natural como fuente primaria de energía, es de 55,532 ton / año.

CONCLUSIONES

- Este documento ha presentado un marco general para la optimización de procesos químicos a través de un enlace de software entre cualquier simulador de procesos y un algoritmo de optimización metaheurística implementado en Excel a través de Visual Basic. La estrategia de solución desarrollada para resolver el problema multi-objetivo consiste en la simulación de procesos en Aspen Plus y una interfaz cliente-servidor basada en tecnología COM para llamar repetitivamente al software de simulación para varios conjuntos de variables de entrada.
- En este trabajo, se utilizó un método híbrido de optimización multi-objetivo, a saber, la Evolución Diferencial Multi-Objetivo Mejorada, que trabaja con un criterio de terminación utilizando las soluciones no dominadas obtenidas a medida que progresa la búsqueda. El algoritmo I-MODE determina el valor óptimo para cada variable de decisión seleccionada en un límite inferior y superior.
- La metodología propuesta se aplicó a una planta de generación de energía Rankine regenerativa-recalentada como estudio de caso, que simultáneamente considera los aspectos económicos y ambientales. La función de objetivo económico explica la maximización del beneficio bruto, mientras que la función objetivo ambiental consiste en minimizar la emisión global de gases de efecto invernadero.
- La planta de generación de energía tomada como ejemplo, consiste en una caldera, turbinas HP, IP y LP, una bomba de agua de alimentación, dos precalentadores de agua de alimentación y una torre de enfriamiento como condensador. Las variables de decisión seleccionadas fueron la temperatura y presión de funcionamiento en la caldera, la disminución de presión en las turbinas HP, IP y LP, la presión en la bomba y la fracción dividida en ambos divisores. Los resultados dependen del criterio de terminación, que puede ser el criterio de terminación Chi-cuadrado, el criterio de terminación de estado estable y la última generación.
- El método propuesto demostró ser una alternativa eficiente para resolver problemas complejos. En general, proporciona buenas soluciones para una amplia gama de problemas de optimización complejos para los que los métodos de búsqueda tradicionalmente deterministas fallan.

BIBLIOGRAFÍA

Abdelhady, F., Bamufleh, H. S., El-Halwagi, M. M. & Ponce-Ortega, J. M., 2015. Optimal design and integration of solar thermal collection, storage and dispatch with process cogeneration systems. *Chemical Engineering Science*, pp. 156-167.

Ahmadi, P. & Dincer, I., 2011. Thermodynamic and exergoenvironmental analyses, and multi-objective optimization of a gas turbine power plant. *Applied Thermal Engineering*, October, 31(14-15), pp. 2529-2540.

Ahmadi, P., Dincer, I. & Rosen, M. A., 2011. Exergy, exergoeconomic and environmental analyses and evolutionary algorithm based multi-objective optimization of combined cycle power plants. *Energy*, October, 36(10), pp. 5886-5898.

Aspen Tech, 2015. *Aspen Plus User's Guide, V8.8*. s.l.:Aspen Technology Inc..

Bamufleh, H. S., Ponce-Ortega, J. M. & El-Halwagi, M. M., 2013. Multi-objective optimization of process cogeneration systems with economic, environmental, and social tradeoffs. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 15(1), pp. 185-197.

Bamufleh, H. S., Ponce-Ortega, J. M. & El-Halwagi, M. M., 2013. Multi-objective optimization of process cogeneration systems with economic, environmental, and social tradeoffs. *Clean Techn Environ Policy*, pp. 185-197.

Birnbaum, D., 2005. Excel VBA Programming for the Absolute Beginner. *Thomson Course Technology PTR*.

Carvalho, M., Serra, L. M. & Lozano, M. A., 2011. Optimal synthesis of trigeneration systems subject to environmental constraints. *Energy*, 36(6), pp. 3779-3790.

Coello-Coello, C. A., Van-Veldhuizen, D. A. & Lamont, G. B., 2002. *Evolutionary Algorithms for Solving Multi-Objective Problems*. New York: Kluwer Academic.

Contreras-Zarazúa, G. y otros, 2016. Multi-objective optimization involving cost and control properties in reactive distillation processes to produce diphenyl carbonate. *Computers & Chemical Engineering*, 13 December.

-
- Devillers, J.**, 1996. *Genetic Algorithms in Molecular Modeling*. San Diego: Academic Press.
- Fernandez-Lopez, M., Pedroche, J., Valverde, J. & Sanchez-Silva, L.**, 2017. Simulation of the gasification of animal wastes in a dual gasifier using Aspen Plus. *Energy Conversion and Management*, May, Volumen 140, p. 211–217.
- Franco-Sepúlveda, G., Branch-Bedoya, J. W. & Jaramillo-Álvarez, P.**, 2012. PLANNING OF OPEN PIT MINES THROUGH STOCHASTIC OPTIMIZATION. *Boletín de Ciencias de la Tierra*, Issue 31, pp. 107-113.
- Fuentes-Cortés, L. F., Santibañez-Aguilar, J. E. & Ponce-Ortega, J. M.**, 2016. Optimal design of residential cogeneration systems under uncertainty. *Computers & Chemical Engineering*, Volumen 88, pp. 86-102.
- Gen, M. & Cheng, R.**, 1997. *Genetic Algorithms & Engineering Design*. Ashikaga: John Wiley & Sons.
- Goldberg, D. E.**, 1989. Genetic Algorithms and Walsh Functions: Part I, A Gentle Introduction. *Complex Systems*, Volumen 3, pp. 129-152.
- González-Bravo, R. y otros**, 2015. Optimal design of thermal membrane distillation systems with heat integration with process plants. *Applied Thermal Engineering*, 22 January, Volumen 75, p. 154–166.
- González-Bravo, R., Nápoles-Rivera, F., Ponce-Ortega, J. M. & El-Halwagi, M. M.**, 2016. Multiobjective Optimization of Dual-Purpose Power Plants and Water Distribution Networks. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 5 October, 4(12), pp. 6852-6866.
- Gómez-Ríos, D., Barrera-Zapata, R. & Ríos-Estepa, R.**, 2017. Comparison of process technologies for chitosan production from shrimp shell waste: A techno-economic approach using Aspen Plus. *Food and Bioproducts Processing*, May, Volumen 103, pp. 49-57.
- Guo, H. y otros**, 2014. Differential evolution improved with self-adaptive control parameters based on simulated annealing. *Swarm and Evolutionary Computation*, December, Volumen 19, pp. 52-67.

Gutiérrez-Arriaga, C. G. y otros, 2015. Industrial waste heat recovery and cogeneration involving organic Rankine cycles. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 17(3), pp. 767-779.

Gutiérrez-Arriaga, C. G., Serna-González, M., Ponce-Ortega, J. M. & El-Halwagi, M. M., 2014. Sustainable integration of algal biodiesel production with steam electric power plants for green house gas mitigation. *Sustainable Chemical Engineering*, pp. 1388-1403.

Gutiérrez-Arriaga, C. G., Serna-González, M., Ponce-Ortega, J. M. & El-Halwagi, M. M., 2013. Multi-objective optimization of steam power plants for sustainable generation of electricity. *Clean Techn Environ Policy*, pp. 551-556.

Hauck, M., Herrmann, S. & Spliethoff, H., 2017. Simulation of a reversible SOFC with Aspen Plus. *International Journal of Hydrogen Energy*, 13 April, 42(15), p. 10329–10340.

Hock, W. & Schittkowski, K., 1981. *Test examples for nonlinear programming codes..* New York: Springer-Verlag.

Holiš, M. y otros, 2013. Solving Steel Alloying Using Differential Evolution and SOMA. *Computer Information Systems and Industrial Management*, Volumen 8104, pp. 453-464.

Kaushal, P. & Tyagi, . R., 2017. Advanced simulation of biomass gasification in a fluidized bed reactor using ASPEN PLUS. *Renewable Energy*, February, Volumen 101, p. 629–636.

Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D. & Vecchi, M. P., 1983. Optimization by Simulated Annealing. *Science*, 13 May, 220(4598), pp. 671-680.

Lira-Barragán, L. F., Ponce-Ortega, J. M., Guillén-Gosálbez, G. & El-Halwagi, M. M., 2016. Optimal Water Management under Uncertainty for Shale Gas Production. *Industrial & Engineering Chemistry Research*.

Lira-Barragán, L. F., Ponce-Ortega, J. M., Serna-González, M. & El-Halwagi, M. M., 2014. Sustainable Integration of Trigeneration Systems with Heat Exchanger Networks. 16 January, 56(7), p. 2732–2750.

Lira-Barragán, L. F., Ponce-Ortega, J. M., Serna-González, M. & M El-Halwagi, M., 2014. Sustainable Integration of Trigeneration Systems with Heat Exchanger Networks. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Volumen 53, pp. 2732-2750.

Medina-Herrera, N., Tututi-Avila, S., Jiménez-Gutiérrez, A. & Segovia-Hernández, J. G., 2017. Optimal design of a multi-product reactive distillation system for silanes production. *Computers & Chemical Engineering*, 16 1.

Morgan, J. C. y otros, 2017. Thermodynamic Modeling and Uncertainty Quantification of CO₂-Loaded Aqueous MEA Solutions. *Chemical Engineering Science*, 29 April.

Nápoles-Rivera, F. y otros, 2015. Optimal design of macroscopic water networks under parametric uncertainty. *Journal of Cleaner Production*, 1 February, Volumen 88, p. 172–184.

Ouyang, A. y otros, 2015. A Novel Hybrid Multi-Objective Population Migration Algorithm. *International Journal of Pattern Recognition and Artificial Intelligence*, February.29(01).

Pauls, J. H., Mahinpey, N. & Mostafavi, . E., 2016. Simulation of air-steam gasification of woody biomass in a bubbling fluidized bed using Aspen Plus: A comprehensive model including pyrolysis, hydrodynamics and tar production. *Biomass and Bioenergy*, Diciembre, Volumen 95, p. 157–166.

Ponce-Ortega, J. M., Nápoles-Rivera, F., El-Halwagi, M. M. & Jiménez-Gutiérrez, A., 2012. An optimization approach for the synthesis of recycle and reuse water integration networks. *Clean Technologies and Environmental Policy*, February, 14(1), pp. 133-151.

Ponce-Ortega, J. M., Serna-González, M. & Jiménez-Gutiérrez, A., 2009. Use of genetic algorithms for the optimal design of shell-and-tube heat exchangers. *Applied Thermal Engineering*, 29(2), pp. 203-209.

Quiroz-Ramírez, J. J. y otros, 2017. Multiobjective Stochastic Optimization Approach Applied to a Hybrid Process Production–Separation in the Production of Biobutanol. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 10 2, 56(7), pp. 1823-1833.

Quiroz-Ramírez, J. J. y otros, 2017. Optimal Selection of Feedstock for Biobutanol Production Considering Economic and Environmental Aspects. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 6 April, Volumen 5, p. 4018–4030.

Rubio-Castro, E. y otros, 2012. Global optimization in property-based interplant water integration. *AIChE Journal*, 3 July, 59(3), p. 813–833.

Sánchez-Bautista, A. d. F. y otros, 2015. Optimal design of domestic water-heating solar systems. *Clean Technologies and Environmental Policy*, March, 17(3), p. 637–656.

Sandler, S. I., 2015. *Using Aspen Plus in Thermodynamics Instruction*. 1st Edition ed. Hoboken(New Jersey): John Wiley & Sons.

Santibañez-Aguilar, J. E., González-Campos, J. B. & Ponce-Ortega, J. M., 2014. Optimal planning and site selection for distributed multiproduct biorefineries involving economic, environmental and social objectives. *Journal of Cleaner Production*, 15 February, Volumen 65, p. 270–294.

Santibañez-Aguilar, J. E., Morales-Rodríguez, R., González-Campos, J. B. & Ponce-Ortega, J. M., 2016. Stochastic design of biorefinery supply chains considering economic and environmental objectives. *Journal of Cleaner Production*, 10 November, Volumen 136, p. 224–245.

Santibañez-Aguilar, J. E., Morales-Rodríguez, R., González-Campos, J. B. & Ponce-Ortega, J. M., 2016. Stochastic design of biorefinery supply chains considering economic and environmental objectives. *Journal of Cleaner Production*.

Serra, L. M. y otros, 2009. Polygeneration and efficient use of natural resources. *Energy*, 34(5), pp. 575-586.

Sharma, S., Nabavi, S. R. & Rangaiah, G. P., 2014. Jumping Gene Adaptations of NSGA-II with Altruism Approach: Performance Comparison and Application to Williams–Otto Process. En: J. Valadi & P. Siarry , edits. *Applications of Metaheuristics in Process Engineering*. s.l.:Springer International Publishing, pp. 395-421.

Sharma, S. & Rangaiah, G. P., 2013. An improved multi-objective differential evolution with a termination criterion for optimizing chemical processes. *Computers & Chemical Engineering*, 13 September, Volumen 56, pp. 155-173..

Sharma, S. & Rangaiah, G. P., 2014. Hybrid Approach for Multiobjective Optimization and Its Application to Process Engineering Problems. En: J. Valadi & P. Siarry, edits. *Applications of Metaheuristics in Process Engineering*. s.l.:Springer International Publishing, pp. 423-444.

Sharma, S. & Rangaiah, G. P., 2016. Mathematical Modeling, Simulation and Optimization for Process Design. En: G. P. Rangaiah, ed. *Chemical Process Retrofitting and Revamping: Techniques and Applications*. Singapur: John Wiley & Sons, Ltd, pp. 99-128.

Sharma, S., Rangaiah, G. P. & Cheah, K. S., 2012. Multi-objective optimization using MS Excel with an application to design of a falling-film evaporator system. *Food and Bioproducts Processing*, 30 April, 90(2), pp. 123-134.

Tang, Y. y otros, 2017. Modeling and simulation of an improved ammonia-based desulfurization process for Claus tail gas treatment. *The Royal Society of Chemistry*, 25 February.

Vázquez-Castillo, J. A., Segovia-Hernández, J. G. & Ponce-Ortega, J. M., 2015. Multiobjective Optimization Approach for Integrating Design and Control in Multicomponent Distillation Sequences. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 24 November, 54(49), p. 12320–12330.

Valdés, M., Durán, M. D. & Rovira, A., 2003. Thermo-economic optimization of combined cycle gas turbine power plants using genetic algorithms. *Applied Thermal Engineering*, December, 23(17), pp. 2169-2182.

Valdés, M. & Rapún, J. L., 2001. Optimization of heat recovery steam generators for combined cycle gas turbine power plants. *Applied Thermal Engineering*, August, 21(11), pp. 1149-1159.

Wang, X. & Tang, L., 2013. Multiobjective operation optimization of naphtha pyrolysis process using parallel differential evolution. *Industrial & Engineering Chemistry Research*.

Wang, Z. & Rangaiah, G. P., 2016. Optimization, Application and Analysis of Methods for Selecting an Optimal Solution from the Pareto-Optimal Front obtained by Multiobjective. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 16 December.p. 560–574.

Woinaroschy, A., 2009. Simulation and Optimization of Citric Acid Production with SuperPro Designer using a Client-Server Interface. *CHIM*, Volumen 9, pp. 979-983.

Wong, J. Y., Sharma, S. & Rangaiah, G. P., 2016. Design of shell-and-tube heat exchangers for multiple objectives using elitist non-dominated sorting genetic algorithm with termination criteria. *Applied Thermal Engineering*, 25 January, Volumen 93, p. 888–899.

PÁGINAS ELECTRÓNICAS

1. aspentech.com
2. intelligent.com
3. mathworks.com
4. microsoft.com

