

DISEÑO INTEGRADO DE REACTORES DE MEZCLA COMPLETA ENFOQUE MÉTODO HÍBRIDO

Carlos Segura¹, Jesús Ceballos¹, Irina León²
¹Petroquímica de Venezuela, ²Universidad de Carabobo
seguracar@gmail.com,

RESUMEN. Se estableció el algoritmo para la solución de problemas de programación no lineal entera mixta con ecuaciones algebraico diferenciales, se plantearon todos los aspectos necesarios que describen el sistema, como criterios para el diseño de control y el modelado matemático, en conjunto con restricciones lógicas, para luego realizar el diseño integrado de reactores mezcla completa mediante el uso de los métodos híbridos de optimización "métodos heurístico mas método de búsqueda del gradiente" (Técnica de recocido simulado + gradiente), finalmente se desarrolla e implementa el algoritmo en Matlab 2006. Se demuestra que el empleo de recocido simulado facilita el diseño del sistema porque no necesita puntos de partida para la optimización, al emplear la población inicial aleatoria aproximándose lo más posible a la solución óptima. El método del gradiente garantizó la convergencia del algoritmo hacia el óptimo global. Se determinó que la disposición de los reactores en serie es la óptima por presentar un diseño más económico (\$ 184.705), que la disposición de los reactores en paralelo (\$ 299.232) presentando esta última un mejor efecto en la amortiguación de la perturbación y un mejor desempeño que el diseño en paralelo.

Palabras claves: Diseño Integrado, Recocido Simulado, Métodos Híbridos de Optimización

INTEGRATED DESIGN OF CONTINUOUS STIRRED TANK REACTOR APPROACH HYBRID METHOD

ABSTRACT. It sets the algorithm for solving nonlinear programming problems with mixed integer differential algebraic equations, it set all aspects necessary to describe the system as criteria for the control design and mathematical modeling, in conjunction with logical constraints to developed the integrated design of continuous stirred tank reactor using hybrid optimization methods " heuristic methods plus gradient search method" (simulated annealing technique + gradient search), it develops and implements the algorithm in Matlab 2006. Was demonstrated that the use of simulated annealing facilitates the system design because it doesn't requires starting points for the optimization using the initial random population as close as possible to the optimal solution and gradient method makes the algorithm convergence to the global optimum. Was determined that the arrangement of the reactors in series is optimal for presenting a more economical design (\$ 184.705) than parallel reactors arrangement (\$ 299.232), presenting the parallel design a better effect on the damping of the disturbance and better performance

Keywords: Integrated Design, Simulated Annealing, Hybrid Optimization Methods

1. INTRODUCCIÓN

La necesidad de evaluar las características de operabilidad dinámica de los procesos durante las fases de diseño ha sido conocida desde hace tiempo, pero cuantitativamente las aproximaciones para dirigir este tipo de problemas son bastante novedosas, siendo la interacción entre diseño y controlabilidad uno de los temas más relevantes en el diseño de procesos reactivos. Cabe mencionar que en las últimas cinco décadas, se ha venido realizando un esfuerzo significativo dirigido a los estudios algorítmicos y teorías de aplicaciones que surgen del problema de diseño de procesos y control. Las primeras ideas de introducir la controlabilidad en el diseño fueron planteadas por [17], [18] y [19] Nishida e Ichikawa (1974, 1975, 1976) quienes estudiaron sistemáticamente el problema de incluir consideraciones dinámicas y de control dentro del problema de síntesis de procesos que contienen incertidumbres en los parámetros [12] Morari, 1983; [28] y [29] Skogestad y Morari (1987.a, 1987.b); [14] Morari y Zafiriou, (1989); [27] Skogestad, (1991); [30] Skogestad y Wolff (1992), han realizado contribuciones significantes en el análisis de la controlabilidad y en el estudio de la capacidad de adaptación dinámica de los sistemas. Ellos han introducido y analizado magnitudes de controlabilidad para la interacción de las variables y el rechazo de perturbaciones. También han investigado las características inherentes a un proceso que limitan su controlabilidad y han propuesto un procedimiento de síntesis de reguladores que consideran la estabilidad robusta en presencia de incertidumbres en los modelos y acciones en las perturbaciones. [15] Narraway y Perkins (1991) han realizado una recopilación de algunos de los resultados importantes y esfuerzos previos, concernientes a la interacción entre el diseño y el control. Para el problema específico de Diseño Integrado de procesos del sistema descrito por [26] Schweiger y Floudas (1997) fue resuelto mediante métodos de optimización local. Los algoritmos desarrollados y la simulación implementada arrojan resultados que ponen de manifiesto las ventajas del enfoque simultáneo de diseño sobre el enfoque secuencial. Surge así el enfoque sobre el cual se basa el presente trabajo, el Diseño Integrado, denominado así por [5] Gutiérrez y Prada en el año 2003.

Se espera que en un futuro no muy lejano, al determinarse los mejores métodos aplicados a sistemas industriales específicos, el Diseño Integrado sea la base al momento de diseñar nuevos procesos productivos que involucren reacciones químicas. Como contribución a todas las investigaciones que se desarrollan en el marco del Diseño Integrado de Reactores Mezcla Completa, surge el presente trabajo, el cual tiene como objetivo realizar el diseño integrado

de reactores mezcla completa mediante el uso de los métodos de optimización híbridos (Métodos heurísticos mas métodos determinísticos). Existe una bibliografía muy extensa que versa sobre los diferentes algoritmos de optimización convencionales existentes para afrontar la optimización de funciones. Sin embargo, los métodos convencionales de optimización, entre los cuales destacan aquellos basados en la búsqueda del gradiente, se dirigen hacia la solución más próxima siguiendo la dirección en la que el gradiente disminuye o aumenta sin capacidad para discernir entre solución local y global. Como alternativa, durante las dos últimas décadas nuevos métodos heurísticos, entre los cuales destacan el recocido simulado (RS), los algoritmos genéticos (GA) y más recientemente la optimización con enjambre de partículas (PSO). Todas las variantes de los métodos heurísticos probabilístico que utilizan un único punto de partida, a excepción del recocido simulado, tiene unos fundamentos muy sencillos, que se limitan a hacer evolucionar una solución inicial perturbando aleatoriamente los parámetros a optimizar. En lo que respecta al recocido simulado, más conocido en la literatura como *Simulated Annealing* (SA), es un método de optimización global de naturaleza estocástica que imita el proceso natural del recocido de un sólido en busca del estado de mínima energía correspondiente al equilibrio térmico. En metalurgia por ejemplo, la clave reside en enfriar lentamente el sólido previamente fundido para que a cada temperatura se llegue al equilibrio y se recoloquen todos los átomos en los diferentes niveles de energía. Si el enfriamiento se hace correctamente, al final se llega al denominado estado fundamental, en el que las partículas forman retículas perfectas (cristal) y el sistema está en su nivel energético más bajo. En el caso contrario, si se enfría rápidamente, la sustancia resultante puede formar una estructura cristalina con múltiples defectos, con estructuras óptimas restringidas a zonas locales muy concretas. Trasladados estos principios al ámbito de la optimización, [7] Kirkpatrick (1983) propone un método que básicamente conjuga una búsqueda aleatoria que permite los movimientos en cualquier dirección durante las etapas iniciales, con una especie de descenso por gradiente en las últimas iteraciones, cuando la temperatura ya es muy baja y se acerca al valor nulo.

Cuando se trabaja con algoritmos de optimización, se sabe que no existe uno mejor que otro, que simplemente algunos son mejores a los demás en ciertas circunstancias, la mayoría tiene sus ventajas y desventajas claramente marcadas y por ello no es de extrañarse que se haya intentado con éxito desarrollar algoritmos híbridos, es decir, derivados de otros o mezclas que intentan sacarle el mayor provecho a las ventajas de cada uno de ellos.

Históricamente existen algunos ejemplos exitosos, como el caso de [20] Petcu y Faltings, (2007), quienes desarrollaron un algoritmo para optimización combinatoria basado en métodos de búsqueda locales (que solo toman decisiones basados en información local) y métodos completamente inferenciales.

[2] Elhossini (2010) y otros, presentaron una eficiente estrategia basada en PSO (particle swarm optimization) u optimización por enjambre de partículas y sobre el “frente de Pareto” que generalmente se ve en algoritmos evolutivos, para resolver problemas de optimización multiobjetivo.

[10] Martinez T. y Behar A. (2011), utilizaron una estrategia híbrida basada en algoritmos genéticos y en el método simplex para la identificación experimental de sistemas de lazo abierto, obteniendo resultados muy superiores a los obtenidos por métodos convencionales, una estrategia muy similar llamada Algoritmo Simplex Genético realizada por [6] Hongfeng, X (2009). Los Algoritmos Híbridos se han utilizado además para la reconstrucción de imágenes, de acuerdo con [8] Liu C y otros (2009), para el clásico problema del comerciante viajero de [32] Zhou, Q. y otros (2009), y [21] Pirona K en el 2009 utilizo Algoritmos Híbridos para el Diseño Integrado de una red de reactores Mezcla Completa.

Por lo tanto, al escudriñar los conceptos asociados a la optimización, carece de sentido enjuiciar la capacidad de un método de optimización para una aplicación concreta sin abrirse a nuevas configuraciones y combinaciones. Si bien es cierto que la configuración del algoritmo está íntimamente ligada con el tipo de problema a tratar, resulta interesante expandir la investigación modificando las estrategias, los valores de los parámetros e incluso el propio esquema del algoritmo, pues en realidad, esta información convenientemente presentada marca una tendencia que, por lo general, puede ser extrapolada a otros problemas de interés.

En éste trabajo se presenta un estudio al diseño integrado de reactores mezcla completa mediante el uso de los métodos de optimización híbridos (recocido simulado + búsqueda del gradiente). Para el sistema estudiado, los métodos híbridos de optimización son especialmente útiles cuando a partir de los Recocido Simulado se aproxima la solución al óptimo global y el espacio de búsqueda es suficientemente pequeño y numerable, comenzando a trabajar a partir de este punto los métodos locales o de búsqueda exhaustiva, acelerando la convergencia del

problema de optimización. Primero se plantea de manera descriptiva el problema, luego se estudia los antecedentes más relevantes del Diseño Integrado y de los métodos heurísticos tal como recocido simulado, aunados a las bases teóricas que soportan la línea de investigación.

2. MODELO MATEMÁTICO DEL SISTEMA

El sistema a considerar y que se describe a continuación está constituido por dos reactores mezcla completa con chaquetas de enfriamiento, donde ocurre una reacción de primer orden irreversible y exotérmica: $A \longrightarrow B$. Para el sistema se supone que tanto el refrigerante en la chaqueta de enfriamiento como el fluido del proceso en el reactor, están bien mezclados y que la densidad y la capacidad calorífica de ambos no cambia significativamente con la temperatura, el nivel y el área de transferencia de calor en el tanque son constantes, el sistema se encuentra bien aislado y se desprecia la dinámica de transferencia de calor entre las paredes del tanque, antes de perturbar el sistema se supone que el mismo se encuentra operando en estado estacionario. El diagrama de bloques para el proceso en las configuraciones serie y paralelo es el mostrado en la **Figura N° 1**.

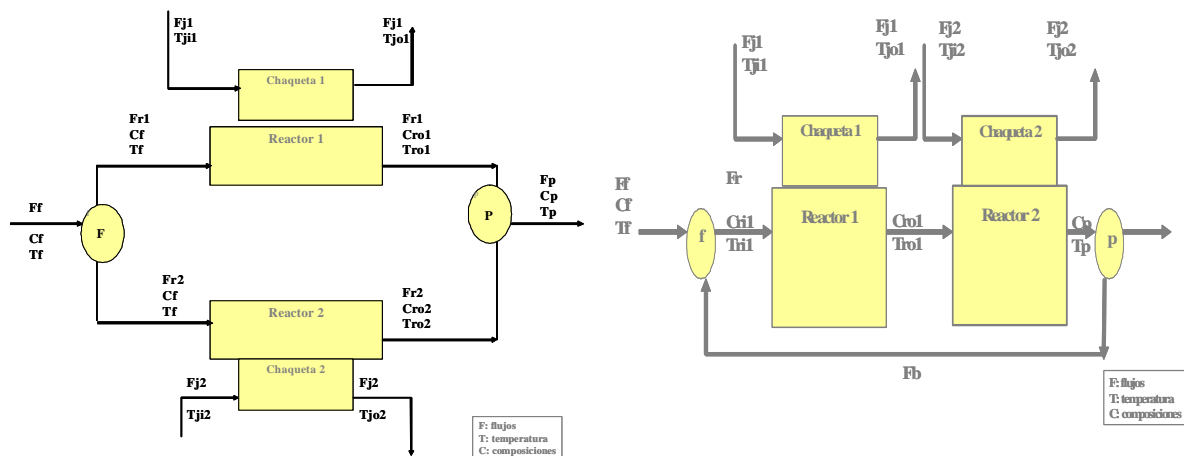


FIGURA N° 1. Diagrama del Proceso

Para que esto sea posible será necesario controlar la temperatura de reacción para lo cual se disponen controladores del tipo proporcional-integral (PI), uno para cada reactor que controlaran el flujo de refrigerante a través de las chaquetas de enfriamiento. Para diseñar el proceso será necesario determinar la configuración de los reactores (serie o paralelo), las dimensiones físicas de las unidades, condiciones de operación y parámetros de entonación del

control que optimicen tanto los criterios económicos como la controlabilidad del proceso y a la vez garantice una operación factible.

El trabajo propuesto se limita a efectuar el Diseño Integrado del sistema antes descrito y estudiado por [26] Schweiger C., Floudas C.,(1997), usando como herramienta un método de optimización global del tipo heurísticos modernos (Recocido Simulado) en conjunto con un método de optimización tradicional del tipo búsqueda local (Método QUASI Newton), se determinarán las dimensiones físicas de las unidades del proceso, condiciones de operación y los parámetros de entonación así como también la relación cuantitativa entre los objetivos económicos del estado estacionario y el objetivo de control de procesos.

Según [26] Schweiger C., Floudas C.,(1997), para el problema de diseño integrado de un sistema como el planteado se presentan diferentes tipos de variables y restricciones. Las variables dinámicas son aquellas tales como composición y temperatura las cuales varían con el tiempo. Las variables de control representan cantidades que pueden ser manipuladas en el tiempo para mantener controladas las variables a niveles especificados, esta se representa por el flujo de refrigerante. Las variables controladas son un subconjunto de las variables dinámicas las cuales tienen un valor deseado o set-point, esta se representa por la temperatura de los reactores. La perturbación está definida por un incremento tipo escalón en la temperatura de entrada de los reactantes, para nuestro caso la función escalón esta definida como se muestra.

$$T_f(t) = \begin{cases} 333,3 \text{ K} \rightarrow t < 0,5\text{h} \\ 333,33 \text{ K} + \Delta_{\text{perturbación}} \rightarrow t \geq 0,5\text{h} \end{cases} \quad (1)$$

La definición de las variables dinámicas y de diseño con las unidades en el sistema Internacional se muestra en las **Tabla 1** y **Tabla 2**.

Es necesario definir los parámetros que son constantes en el proceso como densidades, capacidades caloríficas y costos unitarios de refrigerante. Entre los parámetros que se asumen constantes en el proceso seleccionado se presentan en la **Tabla 3**:

TABLA N° 1. Variables Dinámicas

Notación	Unidades	Descripción
C_{ri1}	kgmol A/ m ³	Concentración a la entrada del primer reactor
T_{ri1}	(K)	Temperatura a la entrada del primer reactor
C_{ro1}	kgmol A/ m ³	Concentración a la salida del primer reactor
T_{ro1}	(K)	Temperatura a la salida del primer reactor
C_p	kgmol A/ m ³	Composición del producto final
T_p	(K)	Temperatura del producto final
k_1	(h ⁻¹)	Velocidad de reacción en el primer reactor
k_2	(h ⁻¹)	Velocidad de reacción en el segundo reactor
I_{Tr1}	(K * h)	Termino integral del PI del primer reactor
I_{Tp}	(K * h)	Termino integral del PI del segundo reactor
μ	(K ² * h)	Objetivo de la controlabilidad (Error Cuadratico Integral)

Fuente: Schweiger C., Floudas C.(1997)

TABLA N° 2. Variables de diseño

Notación	Unidades	Descripción
T_{ro1}^*	(K)	Set-Point temperatura a la salida del primer reactor
T_p^*	(K)	Set-Point Temperatura del producto final
V_{r1}	(m) ³	Volumen del primer reactor
V_{r2}	(m) ³	Volumen del segundo reactor
A_1	(m) ²	Área de intercambio de calor del primer reactor
A_2	(m) ²	Área de intercambio de calor del segundo reactor
D_{r1}	(m)	Diámetro del primer reactor
D_{r2}	(m)	Diámetro del segundo reactor
H_{r1}	(m)	Altura del primer reactor
H_{r2}	(m)	Altura del segundo reactor
V_{j1}	(m) ³	Volumen de la chaqueta de enfriamiento del primer reactor

TABLA N° 2. Continuación

Notación	Unidades	Descripción
V_{j2}	(m^3)	Volumen de la chaqueta de enfriamiento del segundo reactor
F_r	(m^3 / h)	Flujo de reacción
F_b	(m^3 / h)	Flujo de recirculación
F_p	(m^3 / h)	Flujo del producto final
F_{jn1}	(m^3 / h)	Flujo nominal de la chaqueta de enfriamiento del reactor 1
F_{jn2}	(m^3 / h)	Flujo nominal de la chaqueta de enfriamiento del reactor 2
k_{j1}	$(m^3 / (h * K))$	Ganancia del PI del primer reactor
k_{j2}	$(m^3 / (h * K))$	Ganancia del PI del segundo reactor
τ_{j1}	(h)	Tiempo de integración del PI del primer reactor
τ_{j2}	(h)	Tiempo de integración del PI del segundo reactor

Fuente: Schweiger C., Floudas C.(1997)

Tabla N° 3. Parámetros que se asumen constantes en el problema

Descripción	Parámetro	Valor
Calor de reacción	ΔH	-1666,67 Kcal/Kgmol
Coeficiente de transferencia de calor	U	75,60 Kcal
Energía de activación	E/R	8375 K
Constante cinética velocidad de reacción	Ko	40,8 hr ⁻¹
Densidad del líquido	ρ	800,92 Kg/m ³
Capacidad calorífica del líquido	Cp	0,75 Kcal / (Kg.K)
Densidad del refrigerante	ρ_j	997,95 Kg/m ³
Capacidad calorífica del refrigerante	Cj	1.0 Kcal / (Kg.K)
Flujo de alimentación	F _f	2,83 m ³ /hr
Composición de la alimentación	C _f	16,02 Kgmol A/ m ³
Temperatura de la alimentación	T _f	333,33 K
Temperatura de entrada del refrigerante	T _{ji}	294,44° R
Costo del refrigerante	Cost	1,32x10 ⁻⁴ \$/ m ³

Fuente: Schweiger y Floudas. (1997)

El planteamiento matemático del proceso según balances de materia:

Minimizar

$$\text{cost}_{\text{total}} = 1916,9 \cdot D_{r1}^{1,066} \cdot (H_{r1})^{0,802} + 1916,9 \cdot D_{r2}^{1,066} \cdot (H_{r2})^{0,802} + 131,8 \cdot (F_{j1} + F_{j2}) \quad (2)$$

$$\frac{d\mu}{dt} = (T_{ro1} - T_{ro1}^*)^2 + (T_p - T_p^*)^2 \quad (3)$$

Sujeto a:

$$F_r = F_f + F_b \quad (4)$$

$$F_r = F_p + F_b \quad (5)$$

$$F_f \cdot C_f + F_b \cdot C_p = F_r \cdot C_{ri1} \quad (6)$$

$$T_f \cdot F_f + T_p \cdot F_b = T_{ri1} \cdot F_r \quad (7)$$

$$V_{r1} \cdot \frac{dC_{ro1}}{dt} = F_r \cdot C_{ri1} - F_r \cdot C_{ro1} - k_1 \cdot C_{ro1} \cdot V_{r1} \quad (8)$$

$$V_{r2} \cdot \frac{dC_p}{dt} = F_r \cdot C_{ro1} - F_r \cdot C_p - k_2 \cdot C_p \cdot V_{r2} \quad (9)$$

$$V_{r1} \cdot \frac{dT_{ro1}}{dt} = F_r \cdot T_{ri1} - F_r \cdot T_{ro1} - \frac{U \cdot A_1}{\rho \cdot C_p} \cdot (T_{ro1} - T_{jo1}) - \frac{\Delta H}{\rho \cdot C_p} \cdot k_1 \cdot C_{ro1} \cdot V_{r1} \quad (10)$$

$$V_{r2} \cdot \frac{dT_p}{dt} = F_r \cdot T_{ro1} - F_r \cdot T_p - \frac{U \cdot A_2}{\rho \cdot C_p} \cdot (T_p - T_{jo2}) - \frac{\Delta H}{\rho \cdot C_p} \cdot k_2 \cdot C_p \cdot V_{r2} \quad (11)$$

$$V_{j1} \cdot \frac{dT_{jo1}}{dt} = F_{j1} \cdot T_{j1} - F_{j1} \cdot T_{jo1} + \frac{U \cdot A_1}{\rho_j \cdot C_{pj}} \cdot (T_{ro1} - T_{jo1}) \quad (12)$$

$$V_{j2} \cdot \frac{dT_{jo2}}{dt} = F_{j2} \cdot T_{j2} - F_{j2} \cdot T_{jo2} + \frac{U \cdot A_2}{\rho_j \cdot C_{pj}} \cdot (T_p - T_{jo2}) \quad (13)$$

$$k_1 = k_0 \cdot e^{\frac{-E}{R \cdot T_{ro1}}} \quad (14)$$

$$k_2 = k_0 \cdot e^{\frac{-E}{R \cdot T_p}} \quad (15)$$

$$C_p \leq 0,4 \quad (16)$$

$$\frac{D_{ri}}{H_{ri}} \geq 3 \quad (17)$$

La expresión matemática para el volumen del reactor y el área de transferencia de calor es la siguiente:

$$V_{r1} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{r1}^2 \cdot H_{r1} \quad (18)$$

$$V_{r2} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{r2}^2 \cdot H_{r2} \quad (19)$$

$$A_1 = \pi \cdot D_{r1} \cdot H_{r1} \quad (20)$$

$$A_2 = \pi \cdot D_{r2} \cdot H_{r2} \quad (21)$$

La expresión matemática para el volumen de la chaqueta de enfriamiento se representa a través de:

$$V_{j1} = A_1 \cdot \frac{1}{3} ft \quad (22)$$

$$V_{j2} = A_2 \cdot \frac{1}{3} ft \quad (23)$$

La ecuación matemática que relaciona las variables controladas y manipuladas está dada por la estructura de un controlador clásico PI como se muestra a continuación:

$$\frac{dI_{Tro1}}{dt} = T_{ro1} - T_{ro1}^* = 0 \quad (24)$$

$$\frac{dI_{Tp}}{dt} = T_p - T_p^* = 0 \quad (25)$$

$$F_{j1} = F_{jn1} + k_{j1} \cdot (T_{ro1} - T_{ro1}^*) + \frac{k_{j1}}{\tau_{j1}} \cdot I_{tro1} \quad (26)$$

$$F_{j2} = F_{jn2} + k_{j2} \cdot (T_p - T_p^*) + \frac{k_{j2}}{\tau_{j1}} \cdot I_{tp} \quad (27)$$

Las siguientes expresiones se tomaron de la publicación de “A. Floudas 1997 Interaction of Desing and Control Optimization with Dynamic Models [26]”, la función objetivo se relaciona con los costos de diseño y utilidades a través de la siguiente expresión matemática:

$$\text{cost}_{cap} = 19169 \cdot D_{r1}^{1,066} \cdot (H_{r1})^{0,802} + 19169 \cdot D_{r2}^{1,066} \cdot (H_{r2})^{0,802} \quad (28)$$

$$\text{cost}_{util} = 32,77 \cdot (F_{jn1} + F_{jn2}) \quad (29)$$

$$\text{cost}_{total} = \text{cost}_{cap} + 4 \cdot \text{yr} \cdot \text{cost}_{util} \quad (30)$$

$$\text{cost}_{total} = 19169 \cdot D_{r1}^{1,066} \cdot (H_{r1})^{0,802} + 19169 \cdot D_{r2}^{1,066} \cdot (H_{r2})^{0,802} + 131,8 \cdot (F_{jn1} + F_{jn2}) \quad (31)$$

Para mejorar las respuestas dinámicas del sistemas se tienen que tomar en cuenta ciertos criterios de diseño de ajuste de controladores que relacionen la sobremodulación que no es más que el grado al que la respuesta inicial sobrepasa el valor final, también el índice de disminución que es un criterio muy común para el control de procesos, con frecuencia se especifica un índice de disminución de un cuarto. Para lograr esto se tiene que agregar al sistema una restricción no lineal que relacione la respuesta de las temperaturas para ambos reactores con respecto a los valores máximos, mínimos y nominales que estas variables puedan tomar para una perturbación dada, la ecuación matemática que representa esta restricción no lineal es la siguiente

$$\alpha \cdot (T_{ro1 \max} - T_{ro1}^*) \leq (T_{ro1}^* - T_{ro1 \min}) \quad (32)$$

$$\alpha \cdot (T_{ro2 \max} - T_{ro2}^*) \leq (T_{ro2}^* - T_{ro2 \min})$$

Donde representa el índice o razón de disminución de la cresta inicial (máxima) con respecto a la cresta mínima de cada respuesta. Para llevar a cabo el diseño integrado del sistema propuesto fue necesario agregar ciertas restricciones, algunas lógicas como la no existencia de flujos o dimensiones negativas, relación entre la altura y el diámetro (ver inecuación numero 17) de los reactores, otras son para cumplir ciertas condiciones de proceso dentro del diseño integrado, entre estas tenemos la relación entre el flujo nominal y el flujo dinámico máximo del refrigerante (Variable manipulada) para que el diseño se enmarque dentro de la norma

“PDVSA N° K-332 Control Valve”, la cual establece que el diseño final de una válvula de control debe estar sujeto a la apertura a la cual tiene que trabajar para un determinado flujo nominal en la variable manipulada [17 – 90] %.

$$\begin{aligned} F_{jn1} &\geq 0,3F_{j1\max} \\ F_{jn2} &\geq 0,3F_{j2\max} \end{aligned} \quad (33)$$

Esta restricción representa intrínsecamente la relación existente entre los costos de utilidades y el diseño del proceso.

3. RESULTADOS

El objetivo primordial que se persigue con el diseño del proceso objeto de estudio es determinar las dimensiones físicas óptimas (diámetro y altura) de los reactores mezcla completa y los parámetros de entonación del controlador asociados al control de la temperatura del sistema para que se lleve a cabo efectivamente la reacción. El diseño que se propone obtener es óptimo tanto a los criterios económicos como a la controlabilidad del proceso garantizando una operación factible.

Definiendo los términos empleados en la resolución del problema se tiene que los objetivos están representados por “El Costo total” que representa explícitamente el diseño del proceso y “El error cuadrático integral” (ISE), el cual se denota con el la letra “ μ ” y esta en función de la suma de los errores entre la temperatura de los reactores y su respectivos set-point. El costo total es una función del costo de capital y el costo de utilidad. El costo de capital está determinado por el diámetro y la altura de los reactores, así como el costo de utilidad se relaciona con el flujo de agua de enfriamiento. El ISE se representa a través de una ecuación diferencial que involucra las temperaturas del reactor y sus set-points. El objetivo de la controlabilidad dinámica es la minimización del ISE.

Para resolver el problema multiobjetivo se convierte uno de los objetivos en restricción ($obj_j \leq \varepsilon$), en éste caso el error cuadrático integral pasa a formar parte de las restricciones no lineales del problema, lo que implica resolver el problema (MIOCP) a diferentes valores de ε que van desde el óptimo controlable hasta el óptimo económico, en este punto el problema multiobjetivo se convierte en un problema de programación no lineal entera mixta con ecuaciones algebraico diferenciales MINLP-DAE. La restricción del control del sistema sería entonces:

$$\mu \leq \varepsilon \quad (34)$$

De esta manera se determinan un conjunto de soluciones que indican la interacción entre el diseño y el control del proceso. Lo que convierte nuestro planteamiento matemático en una programación entera mixta es la topología del mismo, la cual puede ser en paralelo o en serie, para tratar este problema se decidió estudiar ambas topología para luego establecer las comparaciones de una con respecto a la otra, tanto desde el punto de vista económico como desde el punto de vista de su comportamiento dinámico ante perturbaciones, por esta razón nuestro problema pasa a ser una programación no lineal con ecuaciones algebraico diferenciales NLP-DAE, en la **Figura N° 2**, se muestra el algoritmo para la resolución de este tipo de planteamiento matemático:

FIGURA N° 2. Algoritmo para resolver problemas NLP-DAE

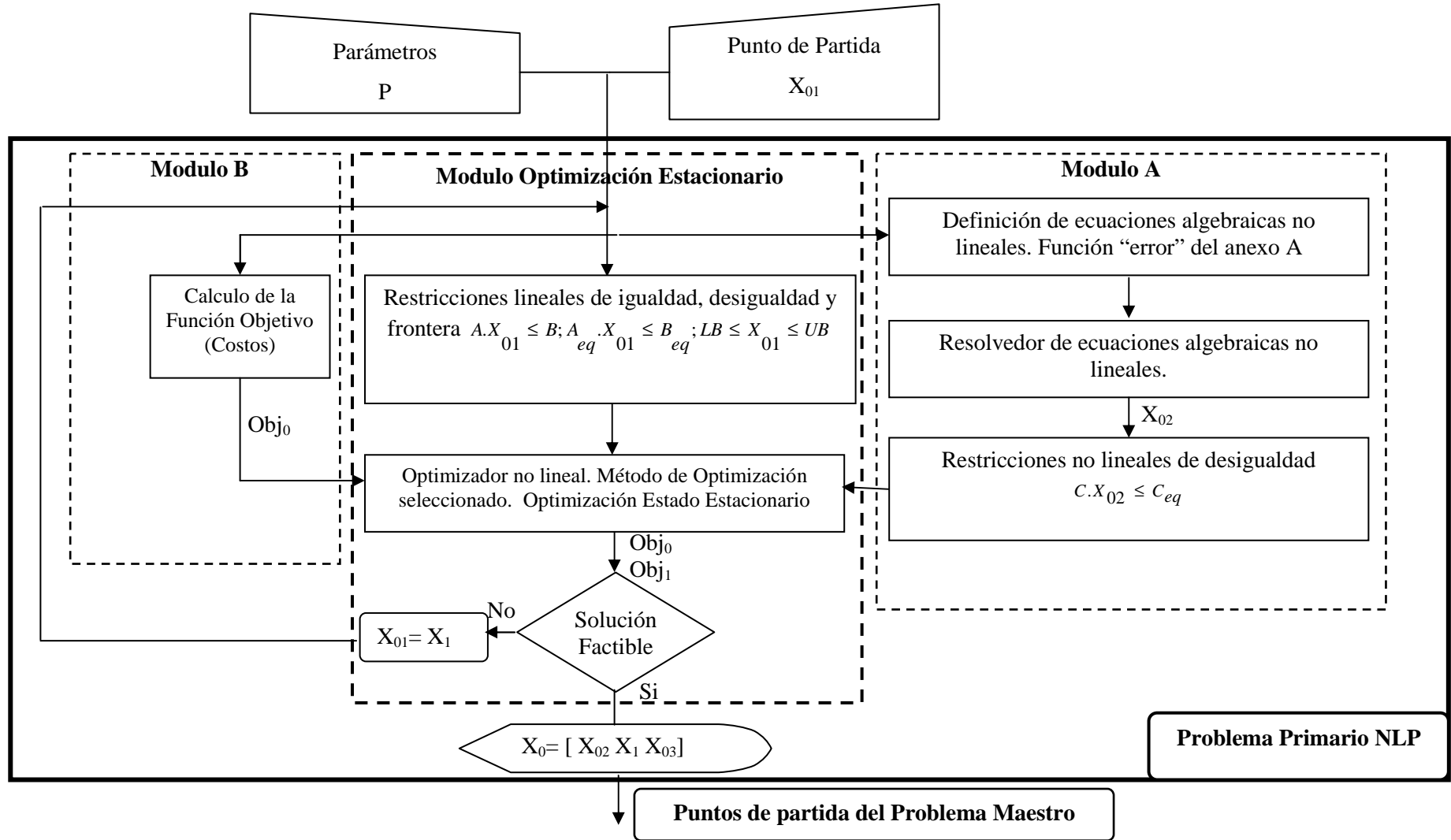
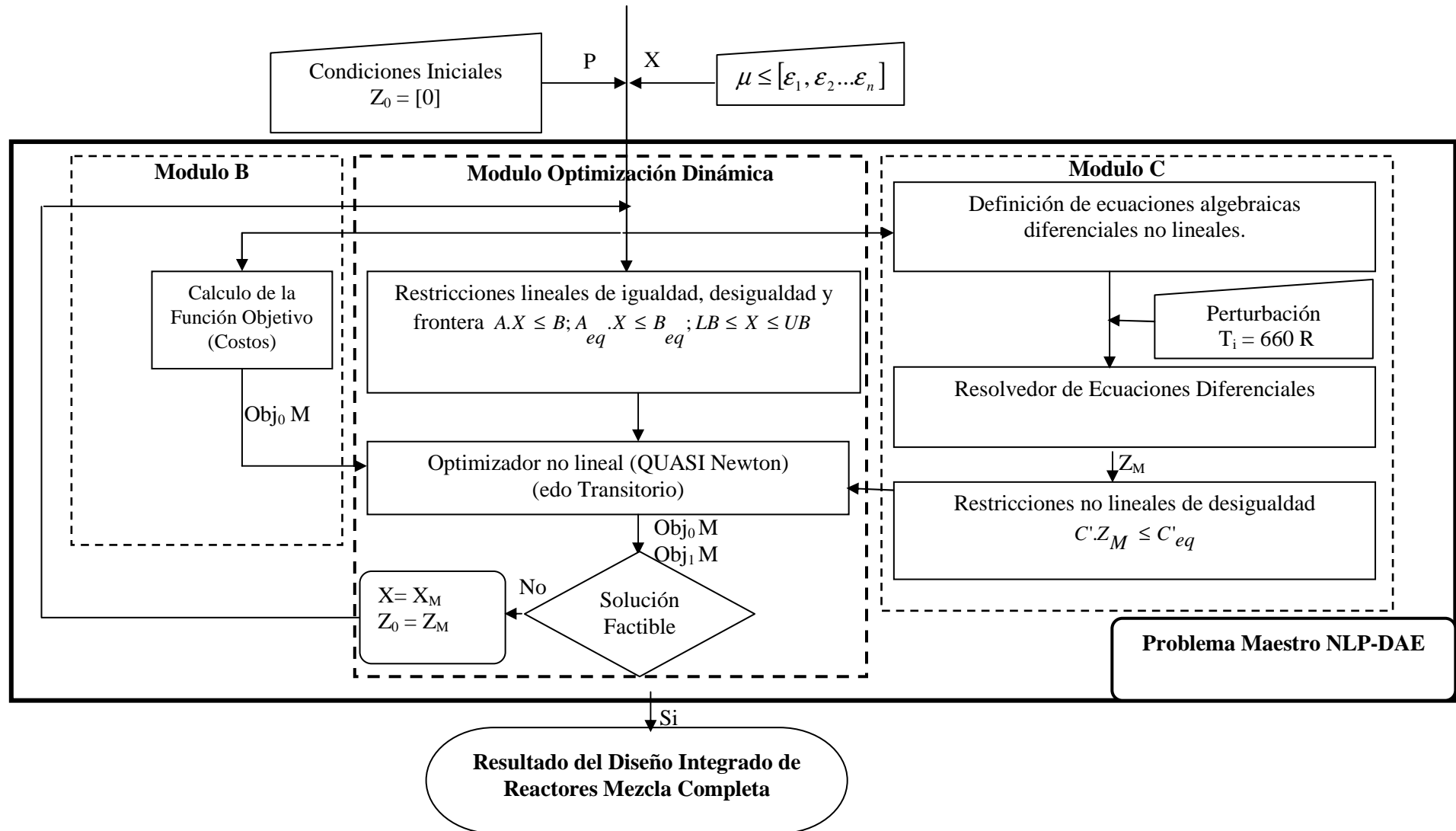


FIGURA N° 2. Continuación



En la figura N° 3 se presenta la estructura algorítmica en forma de Diagrama de bloques para un mejor entendimiento del mismo:

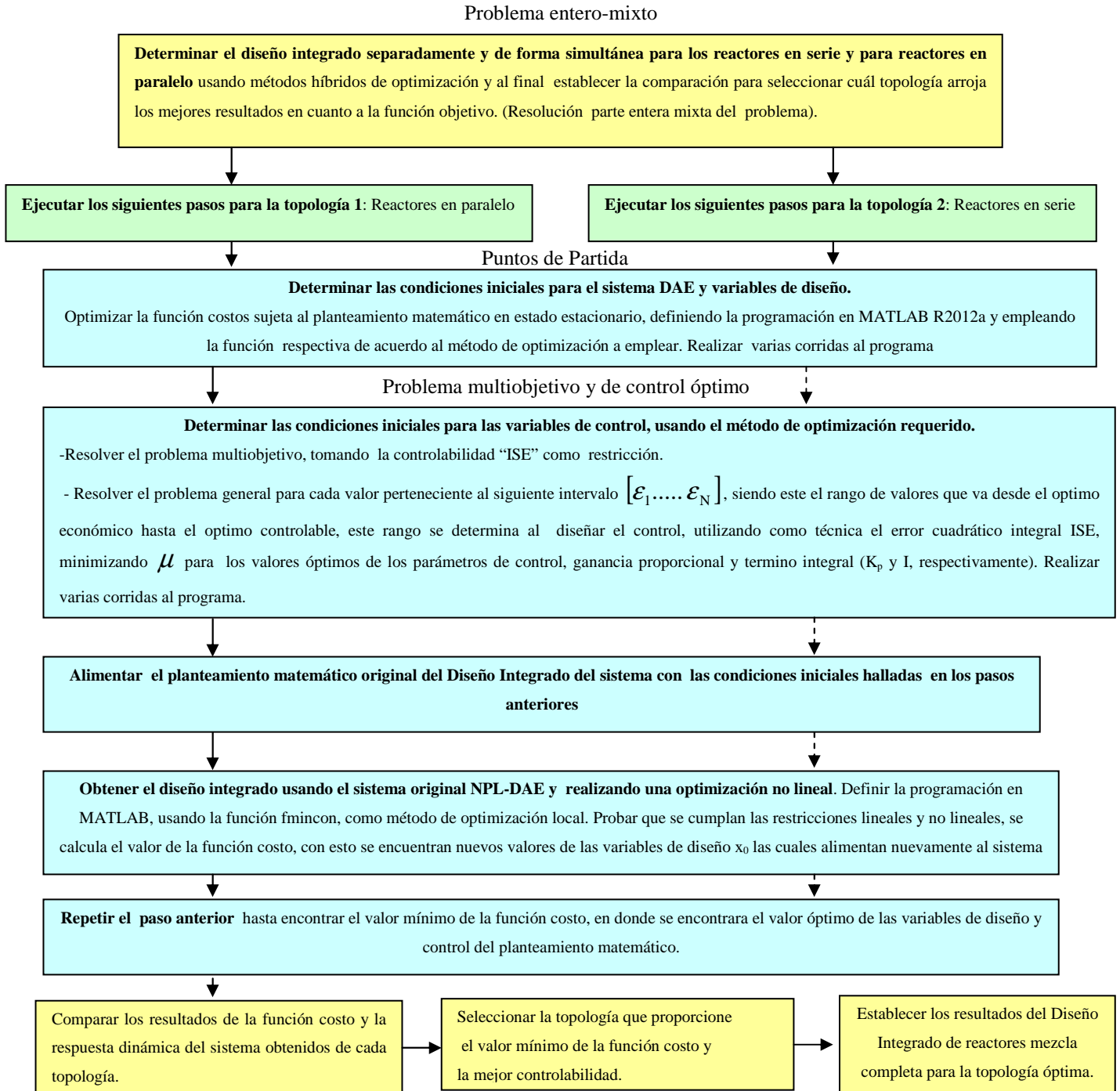


FIGURA N° 3. Diagrama de Bloques de la estructura algorítmica para la resolución del problema de Diseño Integrado de dos reactores mezcla completa.

A continuación se presentan los resultados del diseño Integrado del sistema en estudio mediante algoritmos híbridos (Recocido Simulado + gradiente) para ambas topologías.

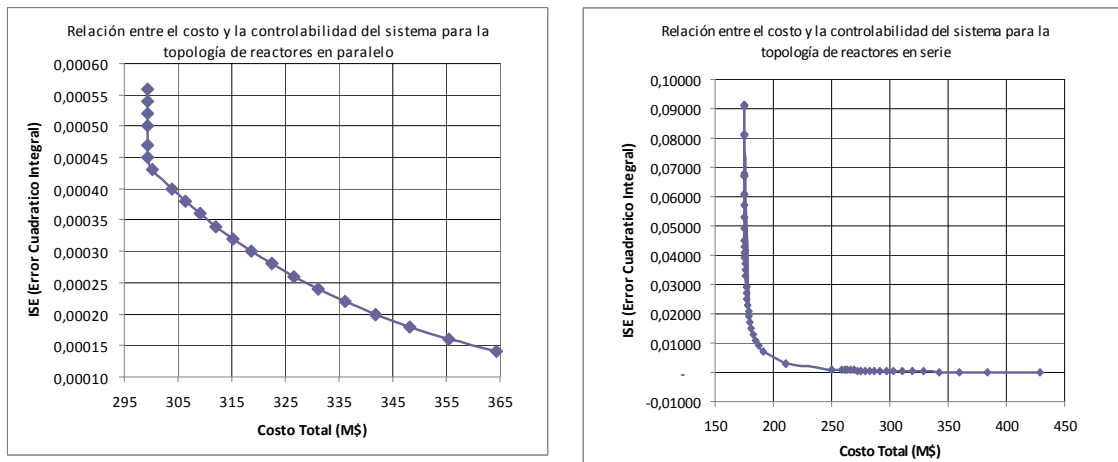


FIGURA N° 4: Costos total de diseño Vs ISE (Diseño Integrado métodos Híbridos Recocido Simulado + Gradiente).

Para la corrida del diseño integrado se evalúan distintos valores de ϵ (ypsilon) de controlabilidad tanto para la topología de reactores en paralelo como para la topología de reactores en serie, dentro de los rangos ya encontrados. Es posible construir las siguientes gráficas de la relación entre el costo y la controlabilidad del sistema (Ver Figura N° 4), que van desde el valor óptimo económico de ϵ hasta el valor óptimo de controlabilidad. Esto se hace para encontrar los valores que proporcionen un equilibrio tanto en los objetivos económicos como en los objetivos de control. Es obvio que a menor error cuadrático integral los costos totales del diseño final se incrementan, porque ejercer un mejor control sobre el sistema involucra aumento en los costos de utilidad (costos por refrigerante) que lógicamente repercuten en el costo total. Los costos totales, en el caso de la topología de reactores en paralelo, se comienzan a elevar considerablemente cuando $\epsilon = 0,00015$, siendo el valor óptimo considerado $\epsilon = 0,00045$ y para el caso en serie los costos totales se incrementan a partir de $\epsilon = 0,0010$ aproximadamente, tomándose como óptimo $\epsilon = 0,011$, es por esta razón que estos valores representan el resultado del diseño integrado del sistema reactivo objeto de estudio. Como se observa, para el caso de la topología de reactores en paralelo es posible tener un control más riguroso al lograr seleccionar un valor de ϵ más bajo que en el caso de la disposición de reactores en serie, esto se debe principalmente a que en el resultado del diseño integrado en paralelo la dimensión de uno de los reactores es prácticamente despreciable en comparación con el diseño en serie. Ver **Tabla N°4**.

TABLA N° 4. Comparación de las topologías en paralelo y serie Diseño Integrado método híbrido
(Recocido Simulado + SQP)

Variables/Parámetros	Topología	
	Paralelo	Serie
Optimización en estado dinámico		
Costo capital (\$)	293.945,26	179.467,32
Costo utilidad (\$)	5.286,62	5.237,29
Costo total (\$)	299.231,88	184.704,61
Parámetros óptimos de diseño		
Hr1 (m)	2,40	1,52
Hr2 (m)	0,15	0,99
Fb (m ³ /h)	0	0
Dr1 (m)	7,21	4,55
Dr2 (m)	0,30	2,96
Fjn1 (m ³ /h)	1,11	1,03
Fjn2 (m ³ /h)	0,028	0,28
Parámetros óptimos de control		
kj1 (m ³ /h.K)	54,94	11,64
kj2 (m ³ /h.K)	50,90	13,47
Tauj1 (h)	0,273	0,348
Tauj2 (h)	1,72	0,797
Resultados estado estacionario		
Fr1 (m ³ /h)	2,83	2,83
Cro1 (Kgmol/m ³)	0,011	0,042
Tro1 (K)	344,44	344,44
Tjo1 (K)	343,76	342,88
Cp (Kgmol/m ³)	0,40	0,40
Tp (K)	344,44	344,44
Resultados estado dinámico (al final del periodo de de estudio)		
Cro1 (Kgmol/m ³)	0,40	1,48
Tro1 (K)	344,44	344,44
Tjo1 (K)	343,04	341,09
Cp (Kgmol/m ³)	0,40	0,40
Tp (K)	344,44	344,44
Tjo2 (K)	294,44	344,06
Itr1 (K.h)	0,0059	0,037
Itr2 (K.h)	0	0
mu (K ² .h)	0,00014	0,0034

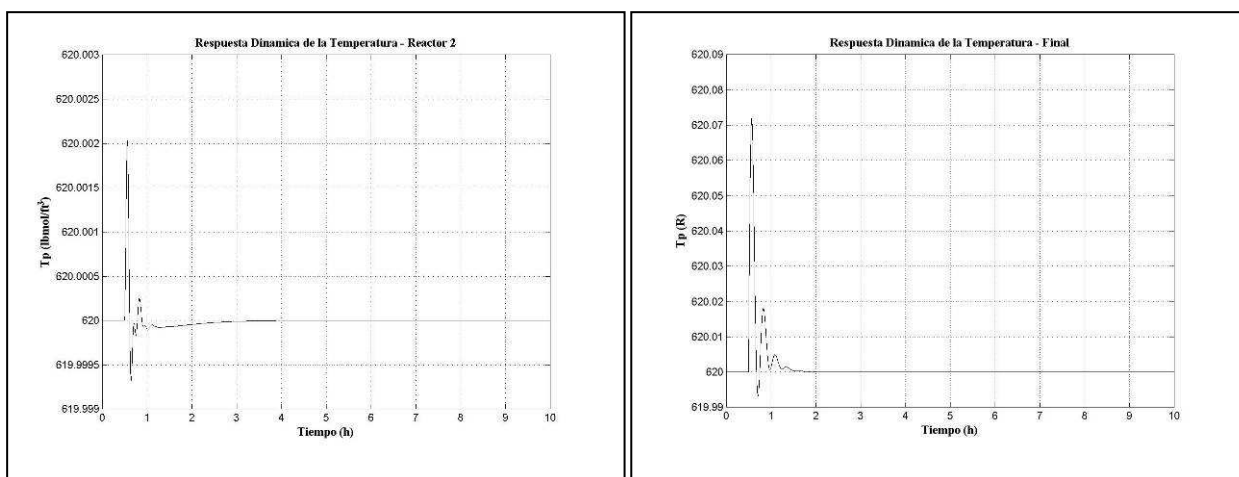


FIGURA N° 5: Comparación de las topologías en paralelo y serie en función de la respuesta dinámica de los sistemas

Como se observa, para el caso de la topología de reactores en paralelo es posible tener un control más riguroso al lograr seleccionar un valor de ε más bajo que en el caso de la disposición de reactores en serie, esto se debe principalmente a que en el resultado del diseño integrado en paralelo la dimensión de uno de los reactores es prácticamente despreciable en comparación con el diseño en serie, siendo la relación entre los volúmenes V_1/V_2 de los dos reactores tan grande para el caso en paralelo que prácticamente el segundo reactor no existe, originando que la disposición en paralelo sea más controlable porque se dispone en sí de un solo reactor en donde casi toda el área de transferencia de calor la soporta el primer reactor, este gran volumen de reacción (caso paralelo) permite tolerar las perturbaciones sin que el sistema sufra mayor desestabilización, al comparar éste fenómeno con la disposición de reactores en serie se observa que tanto los volúmenes como el área de transferencia de calor están distribuidos entre los dos reactores en una relación $V_1=3,62V_2$, a diferencia de la disposición en paralelo en donde $V_1=8849,35V_2$. Desde el punto de vista del proceso químico se tiene que las perturbaciones para el diseño en serie impactarían en mayor magnitud que en paralelo, lo cual es lógico ya que una variación en la temperatura de entrada o en el flujo de entrada de los reactivos modificará más rápidamente y en mayor magnitud bien sea la temperatura del reactor o concentración de algún compuesto en la masa reaccionante menor, todo lo expuesto anteriormente tiene un impacto económico originando que la disposición en paralelo (\$ 299.231,88) presente mayor costos totales que la disposición en serie (\$ 184.704,61). Véanse Tablas N° 3 y N° 4.

TABLA N° 5. Volumen de los reactores y área de transferencia de calor Diseño Integrado método híbrido (Recocido Simulado + SQP)

Reactor	Volumen del Reactor (ft ³)		Área de intercambio de calor (ft ²)	
	Paralelo	Serie	Paralelo	Serie
	Primer reactor	98,23	24,65	63,78
Segundo Reactor	0,011	6,81	0,15	9,19

4. CONCLUSIONES

- La mejor solución al problema del Diseño Integrado de una red de dos reactores mezcla completa se obtiene mediante la combinación de métodos globales y los métodos locales de optimización, por ser un problema MINLP-DAE. Ésta combinación está representada en los métodos híbridos de optimización.
- El método híbrido de optimización ensayado fue la asociación del método de recocido simulado (método heurístico) y una función de solución probada en éste sistema, basada en el uso del gradiente, como es *fmincon* de Matlab (método local).
- El Diseño Integrado del sistema estudiado de dos reactores mezcla completa empleando recocido simulado como método de optimización global crea sus puntos de partida de una población inicial aleatoria, lo que salva la dificultad de los métodos de optimización local de contar con puntos de partida cercanos al óptimo global. Para el sistema estudiado el recocido simulado exhibió su mejor propiedad al aproximarse lo más cercanamente posible a la solución óptima hallando las condiciones iniciales del problema NLP-DAE y la dirección de movimiento proporcionada por el método del gradiente garantizó la mejora en el objetivo acelerando la convergencia del algoritmo hacia el óptimo global.
- Para el sistema estudiado la disposición de los reactores en serie es la óptima, por presentar un diseño más económico (\$ 184.704,61), que la disposición de los reactores en Paralelo (\$ 299.231,88). El resultado del arreglo en paralelo no es viable técnicamente porque se está llevando a cabo toda la reacción en un solo reactor. Se genera una inversión adicional por ese equipo que eleva los costos totales. Para la topología de reactores en serie tanto los volúmenes como el área de transferencia de

calor quedaron distribuidos entre los dos reactores en una relación $V1=3,62V2$. No solamente en el análisis de la respuesta total del sistema (Error Cuadrático Integral ISE) la topología en paralelo presenta mejor desempeño en la respuesta dinámica, sino también en el análisis en puntos sobre la respuesta dinámica del sistema (tiempo de asentamiento y sobre impulso) la disposición en paralelo tiene un mejor efecto en la amortiguación del efecto de la perturbación en el producto presentando un menor sobre impulso ($0,07\text{ }^{\circ}\text{C}<0,3\text{ }^{\circ}\text{C}$) y tiempo de asentamiento ($1,5\text{ h}<3\text{ h}$).

- El comportamiento dinámico del Error Cuadrático Integral (ISE) presentó una variación de la controlabilidad a lo largo del periodo de estudio en el rango que va de $[0,0001-0,00056]$ para la distribución de reactores en paralelo y para topología de reactores en serie se obtuvo el rango $[0,01-0,095]$.
- Los valores óptimos de controlabilidad ε (ypsilon), que proporcionaron un equilibrio tanto en los objetivos económicos como en los objetivos de control, resultaron en $\varepsilon=0,00045$ para la topología de reactores en paralelo y $\varepsilon=0.011$ para la topología en serie.

5. REFERENCIAS

- [1] Brengel DD, Sieder WD (1992) Coordinated design and control optimization of nonlinear processes. *Comp. Chem. Eng.* 16: 861-886.
- [2] Elhossini, A. y otros. (2010). Strength Pareto Particle Swarm Optimization and Hybrid EA-PSO for Multi-Objective Optimization. School of Engineering, University of Guelph, Guelph, ON, N1G 2W1. Canada. Massachusetts Institute of Technology.
- [3] Elliot TR, Luyben WL (1995) Capacity-based approach for the quantitative assessment of process controllability during the conceptual design stage. *Ind. Eng. Chem. Res.* 34: 3907-3915.
- [4] Figueroa JL, Bahri PA, Bandoni JA, Romagnoli JA (1996) economic impact of disturbances and uncertain parameters in chemical processes-a dynamic back-off analysis. *Comp. Chem. Eng.* 20: 453-461.

- [5] Gutiérrez G, De Prada C (2003). Diseño Integrado y Síntesis de Procesos Químicos. Universidad de Valladolid. España. 1-6.
- [6] Hongfeng X, y otros. (2009). Large Scale Function Optimization or High-Dimension Function Optimization in Large Using Simplex-based Genetic Algorithm. School of Information Science and Engineering, Central South University, Shanghai China.
- [7] Kirkpatrick, S. y otros (1983). Optimization by simulated annealing, Revista "Science", Vol. 220, No. 4598, pp. 671-680.
- [8] Liu C, y otros. (2009). Image based Reconstruction using Hybrid Optimization of Simulated Annealing and Genetic Algorithm. Shanghai University.
- [9] Luyben ML, Floudas CA (1994) Analyzing the interaction of design and control. Comp. Chem. Eng. 18, Nro. 10, 933-969.
- [10] Martinez T, Behar A (2011) Estrategia Híbrida AG-SIMPLEX para la identificación experimental de sistemas. Departamento de Control Automático, Instituto de Cibernética, Matemática y Física (ICIMAF) CIE. México.
- [11] Mohideen MJ, Perkins JD, Pistikopoulos EN (1996) Optimal design of dynamic systems under uncertainty. *AIChE J.* 42: 2251- 2272.
- [12] Morari M (1983) Design of resilient processing plants III, A general framework for the assessment of dynamic resilience. *Ind. Chem. Eng. Sci.* 38: 1881-1891.
- [13] Morari M. (1992). Effect of design on the controllability of chemical plants. In J. D. Perkins (Ed.). Preprints IFAC Workshop Interactions Between Process Design and Process Control. 3-16. Oxford: Pergamon Press.
- [14] Morari M, Zafiriou E (1989) Robust Process Control, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ. 488.

- [15] Naraway LT, Perkins JD, Barton GW (1991) Interaction between process design and process control: economic analysis of process dynamics. *J. Proc. Cont. 1*: 243-250.
- [16] Naraway LT, Perkins JD (1993) Selection of control structure based on economics. *Comp. Chem. Eng.*, Vol. 18, 511-515.
- [17] Nishida N, Ichikawa A, Tazoki E (1974) Synthesis of Optimal Process Systems with Uncertainty. *Ind. Eng. Chem. Process. 13*: 209-2014.
- [18] Nishida N, Ichikawa A (1975) Synthesis of Optimal Dynamic Process Systems by a Gradient Method. *Ind. Eng. Chem. Process. 13*: 236-242.
- [19] Nishida N, Liu Y, Ichikawa A (1976) Studies in Chemical Process Design and Síntesis II. Optimal Synthesis of Dynamic Process Systems with Uncertainty. *AIChE J. 22*: 539-549.
- [20] Petcu A, Faltings B (2007). A Hybrid of Inference and Local Search for Distributed Combinatorial Optimization. EPFL, Switzerland.
- [21] Pirona K (2009) Diseño integrado de una red de reactores mezcla completa mediante algoritmos genéticos. Universidad Nacional Experimental Politécnica “Antonio J. de Sucre”. Barquisimeto. Venezuela.
- [22] Quintana F (2003) Síntesis de Procesos, (Optimización del diseño de Plantas Químicas). Universidad Politécnica de Madrid. España. 184.
- [23] Scenna NJ (1999) *Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos*. Buenos Aires, Argentina. 840 pp.
- [24] Segura C (2007) Diseño Integrado de Reactores Mezcla Completa. Universidad Nacional Experimental Politécnica “Antonio J. de Sucre”. Barquisimeto. Venezuela.
- [25] Sheffield R (1992) Integrate process and control system design. *Ind. Chem. Eng. Prog.* 88: 30-35.

- [26] Schweiger C, Floudas C (1997), Interaction of Design and Control. Optimization with Dynamic Models. En Hager WW, Pardalos PM (Eds) Optimal Control Theory, Algorithms and Applications. Kluwer Princeton, EEUU. 1-2
- [27] Skogestad S (1991) Consistency of steady-state models using insight about extensive variables. *Ind. Eng. Chem. Res.* 30: 654-661.
- [28] Skogestad S, Morari M (1987a) Control Configurations for Distillation Columns. *AIChEJ.* 33: 1620-1635.
- [29] Skogestad S, Morari M (1987b) Design of resilient Processing Plants-IX. Effect of Model Uncertainty on Dynamic Resilience *Chem. Eng. Sci.* 42: 1765-1780.
- [30] Skogestad S, Wolff E (1992), Controllability Measures for Disturbance Rejection. Preprints IFAC-workshop on interactions between design and control. London. 127-132. Edited by Perkins S, Pergamon Press.
- [31] Walsh S, Perkins JD (1996) Operability and control and process synthesis and design. *Adv. Chem. Eng.* 23: 301-402.
- [32] Zhou, Q. y otros. (2009). A Hybrid Optimization Algorithm for the Job-shop Scheduling Problem. Department of Computer Science and Technology Chuzhou University. Chuzhou, China.