Herramientas computacionales para la toma de decisiones discretas al servicio de los estudiantes de Ingeniería Química

Ignacio Aracil, Rubén Ruiz-Femenia y José A. Caballero

Instituto Universitario de Ingeniería de Procesos Químicos. Universidad de Alicante. Carretera de San Vicente s/n. 03690 – San Vicente del Raspeig. Alicante.

Introducción

SIMULACIÓN, OPTIMIZACIÓN Y DISEÑO DE PROCESOS QUÍMICOS

Asignatura obligatoria de 4 º curso del grado en Ingeniería Química de la Universidad de Alicante

Objetivos de aprendizaje	Software
Simulación (parte 1) Conocer los principios teóricos en que se fundamentan los simuladores modulares de procesos para posibilitar el manejo eficaz de los simuladores comerciales.	Aspen HYSYS
Diseño conceptual (parte 2) Desarrollar los principios del diseño conceptual y ser capaces de aplicarlos al diseño de redes de intercambio de calor (integración de energía).	MATLAB
Optimización (parte 3) Comprender las bases de la optimización para aplicarlas al modelado y diseño de procesos químicos que implican la toma de decisiones discretas.	GAMS

¿Qué es la programación generalizada disyuntiva?

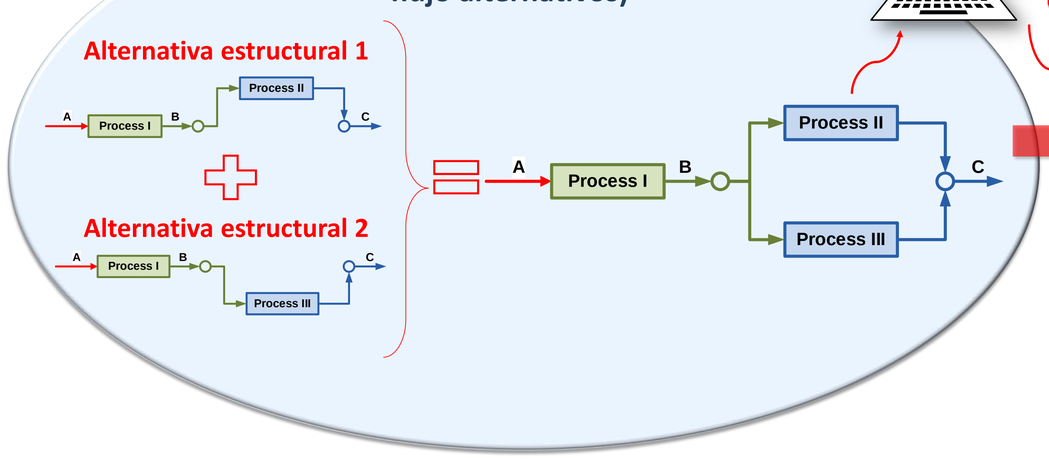
Herramienta matemática que permite el modelado de problemas que requieren de la toma de decisiones discretas [1].

¿Para qué sirve?

La GDP (del inglés, "Generalized Disjunctive Programming") aplicada a la Ingeniería Química posibilita la optimización simultánea de la estructura de un diagrama de flujo y las condiciones de operación del proceso (variables continuas), convirtiéndose en una herramienta muy potente para el diseño sistemático de redes de intercambio de calor, secuencias de columnas de destilación o redes de reactores.

Metodología

Superestructura (contiene todos los diagramas de flujo alternativos)



Se requiere una representación del problema que pueda ser enviada a un solver de optimización

Problema de optimización con disyunciones (incluye variables Booleanas y expresiones lóogicas)

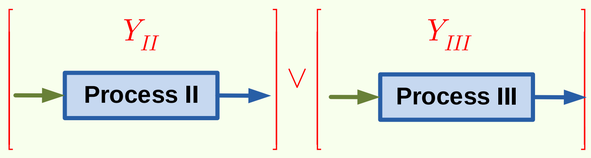
$$\text{minimizar} \quad z = \text{funcion objetivo}(x)$$

$$\text{sujeto a,} \quad s.t. \quad h(x) = 0, \quad g(x) \le 0$$

Beneficio, Costes, Impacto ambiental, Índice de seguridad

Ecuaciones de conservación

Especificaciones de diseño del proceso



Representación disyuntiva del problema

$$\Omega(Y) := Y_{II} \vee Y_{III}$$

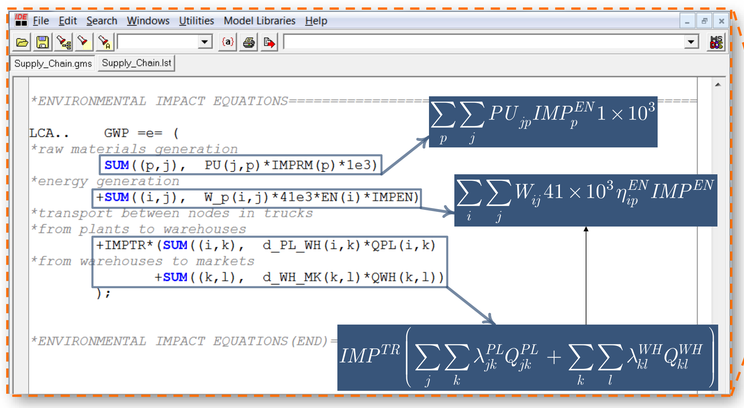
Proposiciones lógicas

$$x^{lo} \le x \le x^{up}, x \in \mathbb{R}^n$$

Variables continuas (temperatura, presión, concentracion, etc...

$$Y_{II}, Y_{III} \in \{Verdadero, Falso\}$$

Variables Booleanas



Problema con ecuaciones algebraicas en términos de variables binarias y continuas

$$\min \quad z = f(x) + d^T y$$

$$s.a \quad \tilde{h}(x) + By = 0$$

$$\tilde{g}(x) + Dy \le 0$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \; y \in \{0,1\}^m$$

Reformulación de la envolvente convexa

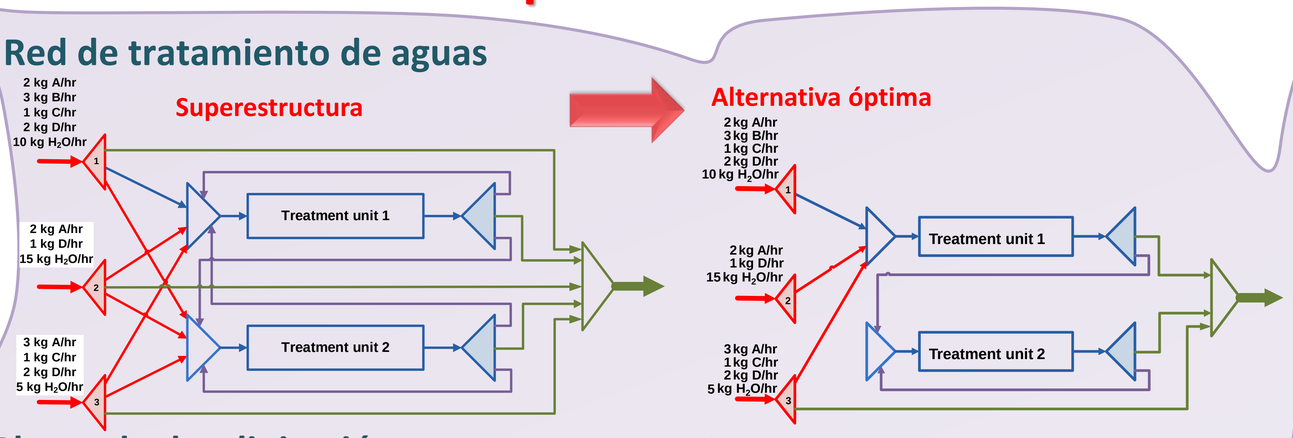
$$\bigvee_{i \in D_k} \begin{bmatrix} Y_{ik} \\ A_{ik} x - b_{ik} \le 0 \\ x_{ik}^L \le x \le x_{ik}^U \end{bmatrix} \xrightarrow{Convex\ Hull} \begin{bmatrix} A_i x_{ik}^{dis} - b_i y_{ik} \le 0 \\ x_i^L y_i \le x_{ik}^{dis} \le x_i^U y_i \end{bmatrix} i \in D_k, \quad x = \sum_{i \in D_k} x_{ik}^{dis}, \quad \sum_{i \in D_k} y_{ik} = 1$$

Reformulación de la M grande

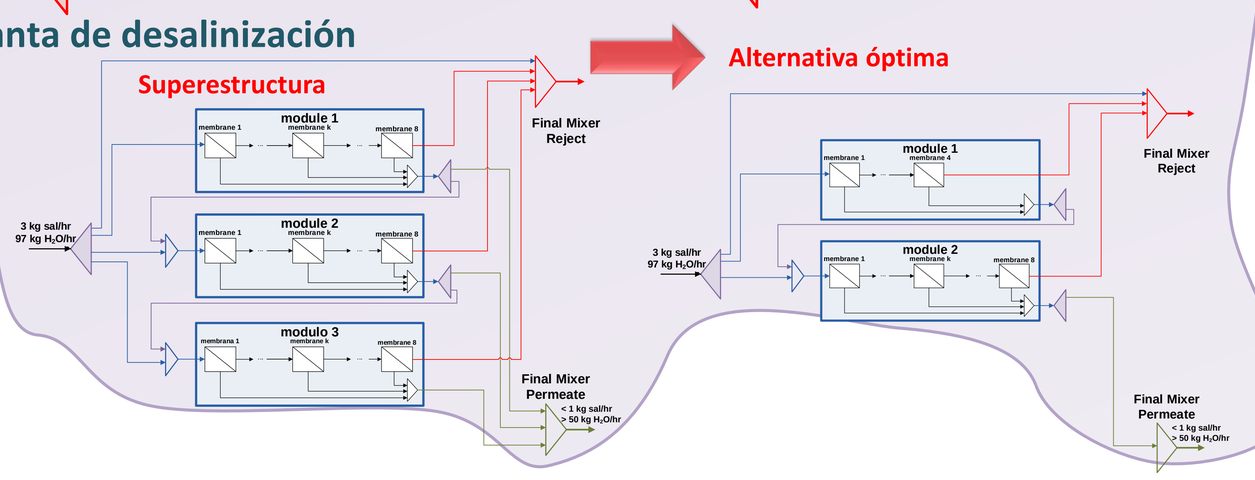
$$\bigvee_{i \in D_k} \begin{bmatrix} Y_{ik} \\ r_{ik}(x) \le 0 \\ s_{ik}(x) = 0 \end{bmatrix} \xrightarrow{big-M} \begin{bmatrix} r_{ik}(x) \le M(1 - y_i) \\ s_{ik}(x) \le M(1 - y_i) \\ s_{ik}(x) \ge -M(1 - y_i) \end{bmatrix} i \in D_k, \quad \sum_{i \in D_k} y_{ik} = 1$$

Problemas resueltos por los alumnos

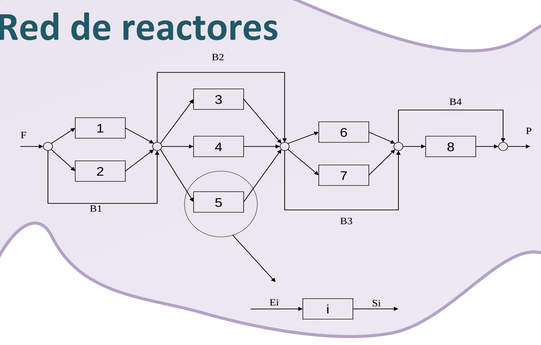
Red de tratamiento de aguas



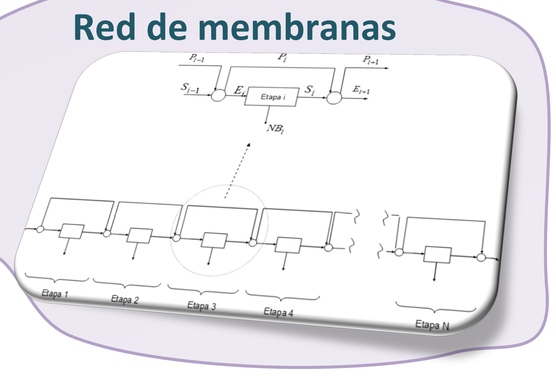
Planta de desalinización



Red de reactores



Red de membranas



Referencias

[1] Kocis, G. R. y I. E. Grossmann (1989). "A modelling and decomposition strategy for the MINLP optimization of process flowsheets." Computers & Chemical Engineering 13(7), 797-819.

[2] García, N., R. Ruiz-Femenia and J. A. Caballero (2012). "Teaching mathematical modeling software for multiobjective optimization in chemical engineering courses." Education for Chemical Engineers 7(4), e169-e180.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Ciencia e Innovación del gobierno de España (CTQ2012-37039-C02-02).

Gobierno de España – Ministerio de Economía y Competitividad

Unión Europea – Fondo Europeo de Desarrollo Regional

"Una manera de hacer Europa"