

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

UNIDAD IZTAPALAPA

**OPTIMIZACION GLOBAL DE REDES DE
INTERCAMBIO DE CALOR CON ESTRUCTURA FIJA**

TESIS QUE PRESENTA:
I.Q. ADRIAN ALBERTO REYES FELIPE

PARA OBTENER EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERIA QUIMICA.
ABRIL DEL 2001

DIVISION DE CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA

TESIS DE MAESTRIA EN INGENIERIA QUIMICA:

**Optimización Global De Redes De
Intercambio De Calor Con Estructura Fija**

PRESENTA:

I. Q. Adrián Alberto Reyes Felipe

ASESOR:

Dr. Juan Manuel Zamora Mata

ABRIL DEL 2001

RESUMEN

El aprovechamiento de los recursos energéticos constituye un problema difícil de resolver, y por ello se desarrollan herramientas tales como la optimización aplicada al diseño de redes de intercambio de calor. En el contexto de síntesis de procesos, la tarea del diseño óptimo de una red de intercambio de calor requiere de modelos de programación no lineal (PNL) y consiste en determinar las temperaturas intermedias, la distribución de cargas térmicas y las áreas para cada intercambiador de tal manera que se minimice el costo total de la red.

En la literatura existen algunos algoritmos que garantizan diseños óptimos globales para redes de intercambio de calor con estructura fija, conocidos con el nombre de algoritmos de optimización global (e. g. Quesada y Grossmann, 1993; Zamora y Grossmann, 1998). Los principales algoritmos de este tipo se basan en el método de ramificación y acotamiento (Horst y Tuy, 1993). En este trabajo se presentan algunos problemas de optimización global de redes de intercambio de calor con estructura fija. También se presenta un estudio del impacto que desempeña la selección del conjunto de variables de partición dentro del algoritmo de ramificación y acotamiento. Por último se presenta un nuevo subestimador convexo para el área de un intercambiador de calor.

Se utiliza GAMS (Sistema General de Modelado Algebraico) como lenguaje de programación en la solución de los modelos planteados para las redes de intercambio de calor. La tesis está organizada de la siguiente forma: en el Capítulo 1 se describe el estado del arte dentro del campo de la optimización y los objetivos planteados en este trabajo. Enseguida se presentan los conceptos básicos utilizados en el campo de la optimización (Capítulo 2). En el Capítulo 3 se presentan las bases para construir el problema convexo relajado y se presenta el algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global continua. El Capítulo 4 presenta ejemplos ilustrativos de diseños óptimos de redes de intercambio de calor. En el Capítulo 5 se presenta un nuevo subestimador convexo para el área de un intercambiador de calor.

DEDICATORIA

A Dios por la oportunidad y la fortaleza que me dado para cumplir uno de mis sueños.

A mi mamá **Irlanda** (una mujer a la que admiro, por su lucha constante), por su valioso apoyo y confianza en todo momento.

A mi padre **Sixto**, por enseñarme a valorar lo que tengo y por sus palabras de aliento.

A mis hermanos **Argelia** y **Sixto** por todos esos sueños e inquietudes que hemos compartido.

A la memoria de mi tío **Atilano**. A mi abuelita y a todos mis familiares que forman parte de mi vida (**Memín, Yadira, Eleine, Alondra, Chilo, Herikín, Heryk**, etc).

A **Carlos E., Gregorio, Benito, César A., Yomalt, Laura I., Elia** amigos de toda una vida.

A ti que con tu silencio, sabes comprender lo que llevo dentro, que con tu mirada sabes lo que siento, que aún en mi silencio entiendes que te quiero (MG).

A **César** (el coordinador TD), **Hugo** (el tamales), **Shaq, Ever** (a ver), **Sara** (la guía de turistas) por compartir tantos momentos, algunos difíciles y otros divertidos.

A **Honorio**, uno de los mejores maestros que he conocido.

A todas esas personas que en mí confían y a las que alguna vez formaron parte de mi vida y que ahora son tan solo recuerdos, por todas las cosas que aprendí de ellas.

A ti niña bonita

AGRADECIMIENTOS.

Para el Dr. Juan Manuel Zamora M. por darme la oportunidad de trabajar en su grupo de trabajo y por la dirección de la presente tesis. Agradezco sinceramente su paciencia que ha tenido para conmigo.

Para los miembros del jurado: Dr. Francisco Javier Sánchez Bernabé, Dr. Vicente Rico Ramírez y al M. en I. Carlos Martínez Vera por sus valiosos comentarios para el mejoramiento de este trabajo.

Para todo el grupo de catedráticos que integran el departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica de la Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa, por darme la oportunidad de realizar la maestría en la mejor universidad que hay en Ingeniería Química.

Al laboratorio de S.O.S (Simulación Optimización y Síntesis) del área de Ingeniería en Recursos Energéticos, por las facilidades para desarrollar el trabajo numérico.

INDICE

RESUMEN	i
DEDICATORIA	ii
AGRADECIMIENTOS	iii
INDICE GENERAL	iv
INDICE DE FIGURAS	vii
INDICE DE TABLAS	viii
NOMENCLATURA	ix

Capítulo	Página
1 INTRODUCCION	1
1.1 ¿ Qué es la optimización?	1
1.2 Modelos de programación matemática utilizados en ingeniería química	2
1.3 Modelos de optimización global con programación no lineal (PNL) no convexa y sus aplicaciones en ingeniería química	3
1.4 El método de ramificación y acotamiento para la optimización global	5
1.4.1 Un problema global suave de programación no lineal	5
1.4.2 Estrategia básica de los algoritmos de ramificación y acotamiento.....	5
1.4.3 Aceleración de los algoritmos de ramificación y acotamiento	7
1.5 Estado del Arte.	8
1.6 Definición del problema.	12
1.7 Objetivo y alcances de la investigación	13
1.8 Resumen general de la Tesis.	14

2	CONCEPTOS BASICOS SOBRE OPTIMIZACION.	15
2.1	Introducción	15
2.2	Estructura de un problema de optimización	15
2.3	Clasificación de los problemas de optimización	16
2.4	Conceptos matemáticos utilizados en optimización	17
2.4.1	Conjuntos convexos	17
2.4.2	Funciones convexas	20
2.4.3	Otros conceptos geométricos.....	20
2.5	Propiedades generales de los problemas de optimización	22
2.6	Complejidad de la optimización local y global	22
2.7	Envoltura convexa	23
3	UN ALGORITMO DE OPTIMIZACION GLOBAL DE PROGRAMACIÓN NO LINEAL	24
3.1	Introducción	24
3.2	Algunos términos no convexos en modelos de optimización en ingeniería química	24
3.3	Un algoritmo general de ramificación y acotamiento	25
3.4	Un problema convexo relajado	26
3.4.1	Relajación de funciones cóncavas univariantes	27
3.4.2	Relajación de términos bilineales	28
3.4.3	Relajación de términos fraccionales lineales	29
3.4.4	Un problema convexo relajado para acotar rigurosamente la solución del problema no convexo.....	31
3.5	Construcción del problema convexo relajado.....	33
3.6	Descripción del algoritmo de ramificación y acotamiento.....	34
3.7	Algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global continua	38

3.8 Ejemplo Ilustrativo del algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global continua.	41
4 OPTIMIZACION GLOBAL DE REDES DE INTERCAMBIO DE CALOR.....	45
4.1 Introducción.....	45
4.2 Síntesis optima global de redes de intercambio de calor.....	46
4.3 Problema del diseño óptimo de redes de intercambio de calor.....	47
4.4 Expresiones básicas de modelado matemático para redes de intercambio de calor	48
4.5 Aproximaciones para la diferencia media logarítmica de temperatura.....	50
4.6 Algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global de redes de intercambio de calor.....	53
4.7 Ejemplo ilustrativo 4.1.....	56
4.8 Ejemplo ilustrativo 4.2.....	70
5 AVANCES EN LA OPTIMIZACION GLOBAL DE REDES DE INTERCAMBIO DE CALOR.....	81
5.1 Introducción.....	81
5.2 Ejemplo Ilustrativo 5.1.....	81
5.3 Nuevo subestimador convexo para el área de un intercambiador de calor.....	98
5.4 Ejemplo Ilustrativo 5.1.....	102
6 CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO.....	109
BIBLIOGRAFIA	112
APENDICES	116

INDICE DE FIGURAS

Figura	Página
2.1 Representación de la región factible en un problema de optimización.....	16
2.2 Representación de un conjunto convexo.....	18
2.3 Representación de un conjunto no convexo.....	18
2.4 Preservación de la propiedad de convexidad.....	19
2.5 Preservación de la propiedad de convexidad.....	19
2.6 Representación de una función convexa.....	20
2.7 Representación de un punto interior y un punto frontera.....	21
3.1 Representación de la subestimación convexa de la función objetivo.....	34
3.2 Representación de la región no convexa para el ejemplo 3.1.....	41
3.3 Representación de la región convexa relajada para el ejemplo 3.1.....	42
4.1 Diferencia entre la diferencia media aritmética de temperatura y la diferencia media logarítmica de temperatura.....	51
4.2 Diferencia entre la aproximación de Chen y la diferencia media logarítmica de temperatura.....	52
4.2 Diferencia entre la aproximación de Patterson y la diferencia Media logarítmica de temperatura.....	52
4.4 Diagrama tradicional para el Ejemplo 4.1.....	56
4.5 Diagrama de malla para el Ejemplo 4.1.....	57
4.6 Diseño óptimo global para el Ejemplo Ilustrativo 4.1.....	62
4.7 Diagrama de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 4.1.....	66
4.8 Diagrama de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 4.1.....	67
4.9 Diagrama de malla para el Ejemplo 4.2.....	71
4.10 Diseño óptimo global del Ejemplo Ilustrativo 4.2 utilizando la aproximación de Chen.....	76

4.11	Diseño óptimo global del Ejemplo Ilustrativo 4.2 utilizando la diferencia media logarítmica de temperatura.....	76
4.12	Arbol de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 4.2.....	79
5.1	Red de intercambio de calor para el Ejemplo 5.1.....	82
5.2	Diseño óptimo global del Ejemplo Ilustrativo 5.1.....	87
5.3	Diseños óptimos locales del Ejemplo 5.1.....	88
5.4	Arbol de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 5.1 utilizando las temperaturas como conjunto de variables de partición.....	92
5.5	Arbol de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 5.1 utilizando los flujos como conjunto de variables de partición.....	94
5.6	Arbol de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 5.1 utilizando las temperaturas y flujos como conjunto de variables de partición.....	96
5.7	Representación de un intercambiador de calor.....	98
5.8	Red de intercambio de calor para el Ejemplo 5.2.....	102
5.9	Diseño óptimo global del Ejemplo Ilustrativo 5.2.....	105
5.9	Diagrama de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 5.2.....	107

INDICE DE TABLAS

Tabla

Página

3.1 Estrategia del algoritmo de ramificación y acotamiento utilizados en el Ejemplo	
Ilustrativo 3.1.....	43
3.2 Resultados del algoritmo de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 3.1.....	43
4.1 Información de las corrientes de proceso y costos para el Ejemplo 4.1.....	57
4.2 Estrategia del algoritmo de ramificación y acotamiento para el Ejemplo	
Ilustrativo 4.1.....	63
4.3 Resultados globales para el Ejemplo 4.1 con el modelo C-4.1A.....	63
4.4 Resultados nodo por nodo para Ejemplo 4.1 con el modelo C-4.1A.....	63
4.5 Resultados globales para el Ejemplo 4.1 con el modelo C-4.1B.....	64
4.6 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 4.1 el modelo C-4.1B.....	65
4.7 Información de las corrientes de proceso y costos para el Ejemplo Ilustrativo 4.2.....	70
4.8 Resultados globales para el Ejemplo 4.2.....	77
4.9 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 4.2.....	78
5.1 Información de las corrientes de proceso y costos para el Ejemplo 5.1.....	82
5.2 Resultados globales para el Ejemplo 5.1 utilizando temperaturas como conjunto	
de variables de partición.....	89
5.3 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 5.1utilizando temperaturas como	
conjunto de variables de partición.....	90
5.4 Resultados globales para el Ejemplo 5.1 utilizando flujos como conjunto	
de variables de partición.....	93
5.5 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 5.1 utilizando flujos como	
conjunto de variables de partición.....	93
5.6 Resultados globales para el Ejemplo 5.1utilizando temperaturas	

y flujos como conjunto de variables de partición.....	95
5.7 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 5.1 utilizando temperaturas	
y flujos como conjunto de variables de partición.....	95
5.8 Información de las corrientes de proceso para el Ejemplo 5.2.....	102
5.9 Resultados globales para el Ejemplo 5.2.....	106
5.10 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 5.2.....	106

NOMENCLATURA

a) Abreviaturas:

CU:	Servicios auxiliares de enfriamiento.
DMAT:	Diferencia Media Aritmética de Temperatura.
DMLT:	Diferencia Media Logarítmica de Temperatura.
HU:	Servicios auxiliares de calentamiento.
Λ :	Lista de nodos abiertos en el árbol de ramificación y acotamiento..
$ \Lambda $:	Número de nodos que faltan por analizar del árbol de ramificación y acotamiento.
Max:	Maximizar.
Min:	Minimizar.
PL:	Programación Lineal.
PNL:	Programación No Lineal.
PNLME:	Programación No Lineal Mixta Entera.
OLB:	Cota global Inferior.
OUB:	Cota global Superior.
$LB(\Omega)$:	Cota inferior del nodo.
$UB(\Omega)$:	Cota superior del nodo.
VP:	Conjunto de variables de partición.
ΔT_{Chen} :	Aproximación de Chen.
ΔT_{Pat} :	Aproximación de Patterson.
$\varepsilon(\Omega)$:	Claro relativo de relajación.
ε_i :	Claro máximo de relajación asignado al algoritmo.
ε :	Claro global de relajación
Ω :	Nodo

b) Parámetros:

$U_{ij}, U_{i,cu}, U_{j,hu}$:	Coeficientes globales de transferencia de calor.
CF_{ij} :	Costo fijo del intercambiador de calor.
$CF_{j,hu}$:	Costo fijo para el calentador.
$CF_{i,cu}$:	Costo fijo para el enfriador.
C_{ij} :	Costo del intercambiador de calor por unidad de área.
$C_{j,hu}$:	Costo del calentador por unidad de área.

$C_{i,cu}$: Costo del enfriador por unidad de área.

c) Sub- índices:

i, H : Corriente caliente.
 j, C : Corriente fría.
 in : Entrada.
 o : Salida.

d) Variables:

A : Área del intercambiador de calor.
 F_b : Mínima fracción de dominio asignado al nodo más pequeño.
 F_i : Flujo de capacidad calorífica para la corriente caliente.
 F_j : Flujo de capacidad calorífica para la corriente fría.
 dt_h : Extremo caliente del intercambiador de calor.
 dt_c : Extremo frío del intercambiador de calor.
 q_{ij} : Carga térmica del intercambiador de calor.
 qhu_j : Carga térmica del calentador.
 qcu_i : Carga térmica del enfriador.
 $t_{i,in}$: Temperatura de entrada para la corriente caliente.
 $t_{j,in}$: Temperatura de entrada para la corriente fría.
 $t_{i,o}$: Temperatura de salida para la corriente caliente.
 $t_{j,o}$: Temperatura de salida para la corriente fría.

Capítulo 1

INTRODUCCION

La armonía oculta es mejor que la obvia (Heráclito)

1.1 ¿Qué es la optimización?

La necesidad de aprovechar en forma eficiente los recursos de que dispone una empresa, ha impulsado al desarrollo de herramientas que permitan alcanzar dicho objetivo. Dentro de ese conjunto de herramientas se encuentra la *optimización matemática*, proceso mediante el cual se busca identificar la mejor solución a un problema determinado.

La optimización auxilia en la toma de decisión dentro de un conjunto de alternativas disponibles para la solución de un problema. Su aplicación dentro del campo de la ciencia y de la ingeniería es muy diversa, y en ella se incluye, entre otros, el modelado económico, el diseño mecánico y nuclear, el diseño de base de datos, el diseño y control en ingeniería química, y problemas de ingeniería ambiental (Horst y Pardalos, 1995).

En el campo de la ingeniería química, la optimización se ha aplicado al diseño de procesos de separación (*e.g.* Kumar y Lucia, 1987), a la solución de problemas de mezclado (*e.g.* Visweswaran y Floudas, 1996), a la determinación de azeotropos (*e.g.* Maranas *et al.*, 1996), a problemas de redes de intercambio de calor (*e.g.* Quesada y Grossmann, 1993) y a redes de uso y tratamiento de aguas residuales (uso eficiente del agua). El presente trabajo se enfoca a la optimización de redes de intercambio de calor con estructura fija.

1.2 Modelos de programación matemática utilizados en ingeniería química.

Entre los recientes avances en la ciencia y en la ingeniería se encuentran varias técnicas numéricas para determinar soluciones globalmente óptimas, las cuales se han utilizado con éxito para la solución de algunos problemas de optimización no convexa (Horst y Pardalos, 1995a).

La programación matemática proporciona una herramienta general de modelado para la optimización de problemas que surgen en el campo de la ingeniería química. Por ejemplo, la programación lineal (PL) se ha aplicado a problemas de planeación y calendarización de la producción por lotes (e.g., Mauderli y Rippin, 1979). La programación lineal mixta entera (PLME) se ha utilizado en la síntesis de sistemas de proceso con modelos simplificados (e. g., Grossmann y Santibanez, 1980). La programación no lineal (PNL) se ha utilizado en el diseño y optimización de procesos de separación (e.g., Kumar y Lucia, 1987). Finalmente, la programación no lineal mixta entera (PNLME) se ha aplicado en la síntesis de procesos (e.g., Grossmann y Kravanja, 1995). Sin embargo, la solución de problemas de optimización global no convexa es muy difícil, debido a la existencia de múltiples soluciones óptimas locales que muchas veces difieren de la solución óptima global. Por ello, estos problemas de optimización global no pueden resolverse por medio de las técnicas clásicas de programación no lineal (Horst y Pardalos, 1995a).

1.3 Optimización global de modelos de programación no lineal (PNL) no convexa y sus aplicaciones en ingeniería química.

Un problema de programación no lineal (PNL) puede representarse de la forma siguiente:

$$\begin{aligned} &\text{Min. } f(x) \\ &\text{sujeto a} \\ &h_i(x) = 0; i = 1, 2, \dots, m \\ &g_j(x) \leq 0; j = 1, 2, \dots, r \\ &x \in S \subseteq R^n \end{aligned}$$

(1.1)

o bien en forma compacta:

$$\text{Min. } f(x)$$

Sujeto a

$$x \in D$$

(1.1a)

donde $D = \{x \in R^n : x \in S, h_i(x) = 0; i = 1, 2, \dots, m; g_j(x) \leq 0; j = 1, 2, \dots, r\}$, $f(x)$ es la función objetivo; $h_i(x) = 0$, con $i = 1, 2, \dots, m$ son las funciones que definen a las restricciones de igualdad y $g_j(x) \leq 0$, con $j = 1, 2, \dots, r$ son las funciones que definen a las restricciones de desigualdad. Condiciones suficientes para garantizar la existencia de un óptimo global en (1.1) son que tanto $f(x)$ como las funciones en $g_j(x)$ sean convexas y además que las funciones en $h_i(x)$ sean lineales (Bazaraa y Shetty, 1979). Sin embargo, los modelos generales de PNL como el que se incluye en (1.1) presentan funciones no convexas que conducen a múltiples soluciones sub-óptimas y a puntos estacionarios no óptimos. Y la solución de estos modelos depende de los puntos iniciales que se les proporcione a los algoritmos estándares de optimización que existen (e.g., el método del gradiente reducido generalizado y la programación cuadrática sucesiva). Además, la linearización de las restricciones no convexas de problemas factibles puede definir regiones infactibles, o producir matrices Hessianas indefinidas que a menudo causan fallas en las técnicas de optimización estándar (Lucia *et al.*, 1996).

Desde luego, ningún algoritmo puede resolver un problema general de optimización global con certidumbre en un número finito de pasos, a menos que se pre-especifique una tolerancia para la precisión del mínimo global. Las técnicas de optimización global se pueden clasificar como *estocásticas* o *deterministas* dependiendo de los elementos incorporados en su planteamiento. Las técnicas estocásticas se aplican a problemas de optimización que no presentan estructuras especiales, y no garantizan la convergencia a un óptimo global en un tiempo finito. Algunos detalles de este tipo de técnicas pueden encontrarse en Boender y Romeijn (1995).

Por otra parte las técnicas de optimización global deterministas están diseñadas para converger a soluciones óptimas globales ó para demostrar que tal solución no existe. La convergencia de las técnicas deterministas a soluciones óptimas se basa en un número de suposiciones específicas que restringen su aplicación a ciertas clases de problemas. Se pueden encontrar excelentes ejemplos sobre técnicas deterministas y más referencias en Horst (1990), Horst y Tuy (1993), y Horst y Pardalos (1995a)

Dentro de la aplicación de los algoritmos deterministas de optimización global en el campo de la ingeniería química, se incluyen problemas de mezclado (Visweswaran y Floudas, 1990, 1996), equilibrios de fase (McDonald y Floudas, 1995), secuencias de separación (Visweswaran y Floudas, 1996), optimización de redes de intercambio de calor (Quesada y Grossmann, 1995), diseño de redes de intercambiadores de calor multiperiodos (Grossmann, 1996), síntesis de redes de intercambio de calor (Zamora y Grossmann, 1997, 1998b), problemas de control adaptivo (Staus *et al.*, 1995), y otros problemas interesantes.

1.4 El método de ramificación y acotamiento para la optimización global.

1.4.1 Un problema suave de programación no lineal global.

Un problema suave de PNL global puede establecerse de la siguiente manera (Véase también Horst y Tuy, 1993):

Sea $f(x): A \rightarrow \mathbb{R}$, una función dos veces continuamente diferenciable, y un conjunto $D = \{x \in S \cap \Omega_0 \subset \mathbb{R}^n : f_k(x) \leq 0, k \in K = \{1, 2, \dots, m\}\}$, en donde A es un conjunto apropiado que contiene a D ; $S \subset \mathbb{R}^n$ es un conjunto no vacío, compacto, convexo; $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^n$ es un hiperrectángulo de n -dimensiones; y $f_k(x), k \in K = \{1, 2, \dots, m\}$ son funciones no convexas dos veces continuamente diferenciables. El problema consiste en determinar al menos un punto $x^* \in D$ que satisfaga $f(x^*) \leq f(x)$ para todo $x \in D$, ó demostrar que tal punto no existe (Zamora, 1997).

1.4.2 Estrategia básica de los algoritmos de ramificación y acotamiento.

La mayoría de los algoritmos deterministas de optimización global para la solución de problemas de PNL no convexos como el presentado en la sección anterior, se basan en el método de ramificación y acotamiento (Horst y Tuy, 1993). Las cotas inferiores del valor mínimo global de la función objetivo $f(x)$ se calculan resolviendo una relajación convexa del problema no convexo original. La relajación se realiza por medio de estimadores convexos y puede tomar la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \underset{x}{\text{Min}} \hat{f}(x) \\ & \text{sujeto a} \\ & \hat{f}_k(x) \leq 0, \quad k \in K \\ & x \in S \cap \Omega_0 \subset \mathbb{R}^n \end{aligned} \tag{1.2}$$

en donde $\hat{f}(x)$ y $\hat{f}_k(x)$ son funciones convexas tales que, $\forall x \in S \cap \Omega_0$, $\hat{f}(x) \leq f(x)$ y $\hat{f}_k(x) \leq f_k$, $\forall k \in K$. La calidad del ajuste de las cotas inferiores depende del problema convexo relajado. Por ello para mejorar esta calidad, los algoritmos de ramificación y acotamiento dividen la región factible del problema relajado en un número finito de subregiones, donde se calculan las cotas inferiores y superiores.

Las cotas superiores que determinan el mínimo global, se obtienen evaluando la función objetivo $f(x)$ en puntos factibles conocidos $x \in D$. Una *cota superior global*, *OUB*, se define como el valor de la función objetivo en el mejor punto factible disponible, x^* , e identifica al mejor candidato disponible a ser el óptimo global. La cota superior global se actualiza ahí donde se encuentra un punto factible con un valor de la función objetivo por debajo de la mejor cota disponible. Las subregiones donde el problema convexo relajado es infactible, se eliminan. También se descartan todas las subregiones activas donde una cota inferior excede el valor de la cota superior global, debido a que no contienen la solución óptima global. Las subregiones que no se eliminan se incluyen en una lista de elementos de partición activos, Λ , a partir de la cual se

calcula la *cota inferior global*, *OLB*, definida ésta como el mínimo valor de las cotas inferiores asociadas con las subregiones activas.

La diferencia relativa entre las cotas globales inferiores y superiores se denomina claro (relativo) de relajación (ϵ), e indica la precisión con la cual se puede garantizar que la mejor solución disponible (cota superior) es un óptimo global. El algoritmo de optimización global se detiene cuando la lista de ramificación y acotamiento está vacía o cuando el claro (relativo) de relajación se encuentra dentro de una tolerancia pre-especificada (ϵ_t). Si esta tolerancia no se satisface, se selecciona una subregión activa para realizar un refinamiento del espacio de búsqueda, y el procedimiento de acotamiento vuelve a iniciar.

El método de ramificación y acotamiento se representa normalmente por medio de un árbol invertido en donde el primer conjunto relajado corresponde al nodo raíz, y los subconjuntos hijos corresponden a los nodos que pertenecen a los diferentes niveles inferiores del árbol.

Los algoritmos de ramificación y acotamiento difieren en la forma de construir el problema de acotamiento inferior, en sus reglas para realizar la selección de las subregiones activas y de las variables de partición (branching); así como el orden en el que se ejecutan los diferentes pasos del algoritmo. La convergencia de una implementación particular de ramificación y acotamiento puede garantizarse cuando se satisfacen algunas condiciones sobre la subregión seleccionada, y la forma en que las operaciones de acotamiento y partición son ejecutadas (*e.g.* Horst, 1990; Horst y Tuy, 1993).

1.4.3 Aceleración de los algoritmos de ramificación y acotamiento.

El tiempo de cómputo requerido para resolver un problema de optimización global por medio de un algoritmo de ramificación y acotamiento depende de la calidad de la relajación convexa utilizada para subestimar el problema no convexo. Tanto menor sea la diferencia entre la función objetivo y su relajación, mejor es la aproximación; la misma relación se aplica entre la región factible y su relajación convexa.

Las cotas de las variables involucradas en los términos no convexos, *variables complicantes o no convexas*, determinan fuertemente la calidad de una relajación convexa. Para hacer más eficiente el desempeño de estos algoritmos se desarrollan técnicas para reducir la región de búsqueda. Estas estrategias de reducción se enfocan principalmente a métodos para estimar y ajustar las cotas de las variables de acuerdo a las redundancias e infactibilidades de las cotas implicadas.

Las estrategias de reducción pueden clasificarse en dos grupos: *técnicas de reducción basadas en factibilidad* y *las técnicas de reducción basadas en optimalidad* (e.g., Ryoo y Sahinidis, 1995). Las primeras utilizan la información implícita contenida en las restricciones del problema para lograr una contracción de cotas. Esto se logra explotando las propiedades de convexidad y concavidad, utilizando principios de monotonicidad, y aritmética de intervalos (e.g., Hansen, 1992).

Algunas de estas técnicas manipulan y reducen las restricciones derivando funciones de acotamiento univariantes que son usadas iterativamente para eliminar porciones del dominio en donde el problema no convexo es infactible. Algunos ejemplos de sus aplicaciones se encuentran en Hansen (1992), Zamora y Grossmann (1997, 1998a) y Smith y Pantelides (1996). Otras técnicas de reducción basadas en factibilidad se desarrollan con base a la solución de problemas de acotamiento para las variables o términos no convexos, sobre el subconjunto original de restricciones convexas o sobre la región factible relajada del problema de subestimadores no convexos (e. g., Quesada y Grossmann, 1995; Visweswaran y Floudas, 1996).

Las técnicas de reducción basadas en optimalidad utilizan la versión convexificada de la función objetivo u otra relajación válida de acotamiento, para descartar las porciones del dominio en el cual la función objetivo toma valores por encima de la mejor cota superior conocida. Algunos ejemplos de aplicación de estas técnicas pueden encontrarse en Ryoo y Sahinidis (1996), y Zamora y Grossmann (1996, 1997). La aplicación repetida de las técnicas a un nodo de ramificación y acotamiento pueden reducir la región de búsqueda.

1.5 Estado del arte.

Aunque la búsqueda de soluciones óptimas globales en problemas de optimización no convexa dentro del campo de la ingeniería química lleva más de dos décadas, existen pocos algoritmos propuestos y probados para resolver problemas donde la región factible es un conjunto compacto no convexo. Las principales investigaciones se han enfocado a la solución de programas cuadráticos cóncavos y programas donde se incluyen términos bilineales, que han tenido muchas aplicaciones. Sin embargo, los problemas que surgen en la ingeniería no siempre se ajustan a los requerimientos de estos algoritmos, debido a que la función objetivo y/o las regiones factibles pueden ser no convexas.

Floudas y Viswesvaran (1990) trataron las no convexidades que aparecen en los modelos matemáticos de PNL por medio de una separación de las variables involucradas en los términos no convexas. El enfoque propone la solución de una secuencia de subproblemas duales relajados para obtener la solución global; sin embargo una dificultad que tiene este algoritmo, es que el número de subproblemas duales relajados requeridos en cada iteración se incrementan exponencialmente de acuerdo a los términos bilineales que contiene el problema a resolver.

Por otra parte, Sherali y Alameddine (1992) desarrollaron la técnica de reformulación – linealización (TRL) para construir un programa lineal ajustado a términos bilineales. Posteriormente Sherali y Tuncbilek (1992) extendieron esta trabajo a la construcción de programas no lineales basados en polinomios. La TRL produce cotas más ajustadas que los cascarones de McCormick (1969) a costa del posible crecimiento exponencial en el número de restricciones requeridas.

Quesada y Grossmann (1995) presentaron un método de acotamiento para PNL con términos bilineales y fraccionales utilizando una combinación de los cascarones de McCormick y estimadores adicionales basados en proyecciones del espacio factible, y desarrollaron métodos para determinar cuáles son las restricciones no redundantes. Estos estimadores adicionales son equivalentes a la TRL para términos bilineales. Ambos estimadores convexas lineales y no lineales se incorporan al problema convexo relajado.

Ryoo y Sahinidis (1995) introdujeron métodos para reducir el dominio de las variables en cada iteración basados en criterios de optimalidad y factibilidad. La estrategia de ajuste de cotas utilizados por un algoritmo de ramificación y acotamiento es crítica para su éxito. Las funciones de acotamiento más justas reducen la necesidad de realizar una partición, disminuyendo el esfuerzo computacional para determinar una solución óptima global.

Epperly y Swaney (1996) presentan un nuevo método para el acotamiento de programas no lineales, el cual forma la base para un algoritmo de ramificación y acotamiento. Este método de acotamiento es la generalización del método propuesto por Swaney (1990), se aplica a problemas de PNL en forma separable, incluye problemas con funciones objetivo cuadráticas.

Adjiman *et al.* (1998) presentan un algoritmo determinista de optimización global basado en la técnica de ramificación y acotamiento. El algoritmo ofrece garantías matemáticas para converger a un punto muy cercano al mínimo global para una amplia clase de problemas de PNL, dos veces continuamente diferenciables.

En lo que se refiere al estudio de la optimización global de redes de intercambio de calor, esta se ha llevado a cabo por medio de métodos estocásticos y deterministas. Los algoritmos deterministas de optimización global para problemas de PNL se han extendido en dos direcciones; el primer enfoque aplica la descomposición generalizada de Benders a problemas de optimización global. Un ejemplo de este enfoque es, el algoritmo GOP de Floudas y Visweswaran (1990, 1996).

El segundo enfoque incluye varios algoritmos de ramificación y acotamiento aplicados en el dominio continuo de las variables. Estos algoritmos se distinguen por su forma de obtener las cotas y de realizar las particiones en el dominio de las variables. Los enfoques de acotamientos se clasifican en dos grupos; el primero de ellos utiliza matemáticas de intervalos (*e.g.*, Hansen, 1992) y constituye una herramienta muy útil para sustituir cotas en la función objetivo y restringir la región factible. El segundo grupo se basa en un problema convexo relajado (*e.g.*, Falk y Soland, 1969; McCormick, 1976; Swaney 1990).

Quesada y Grossmann (1993) propusieron un algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global de redes de intercambio de calor con estructura fija. Suponiendo funciones lineales de costo de área, diferencia media aritmética de temperaturas, DMAT, entre las fuerzas motrices y mezclado isotérmico, y obtienen un modelo de PNL no convexo, puesto que la función objetivo incluye una sumatoria de funciones fraccionales lineales y la región factible esta definida por restricciones lineales. Este algoritmo basa la construcción de un problema convexo relajado para términos fraccionales lineales y bilineales, y proporciona una cota inferior justa al óptimo global. Este problema convexo de PNL se utiliza dentro de un método espacial de ramificación y acotamiento para obtener el diseño óptimo de la red.

Zamora y Grossmann (1997) presentaron un método riguroso de optimización global para la síntesis de redes de intercambio de calor sin división de corrientes. El enfoque propuesto utiliza planos de aproximación que acotan a la diferencia media logarítmica de temperatura por encima, y restringen linealmente al modelo de PNLME. Además predice cotas inferiores para el costo mínimo total anual de la red. Este modelo se implementa en un algoritmo de ramificación y acotamiento que realiza una búsqueda espacial en el dominio de las temperaturas de la red. La solución del modelo de acotamiento inferior PNLME también proporciona un conjunto de configuraciones prometedoras que son optimizadas globalmente para buscar la configuración de red óptima global y las condiciones óptimas de operación.

Zamora y Grossmann (1998a) proponen un algoritmo determinista de ramificación y acotamiento para la optimización de modelos matemáticos que incluyen términos cóncavos univariados, términos bilineales y términos fraccionales lineales. Este algoritmo propuesto depende de la operación de contracción de cotas, la cual consiste en la solución de una secuencia de subproblemas de contracción de cotas para el subconjunto de variables no convexas del problema. Los resultados demuestran que cuando se ejecuta la operación de contracción en algunos de los nodos seleccionados, se pueden eliminar algunas porciones de la región de búsqueda en donde la función objetivo toma un valor por encima de la mejor cota superior conocida, por lo que el número total de nodos en el árbol de soluciones es relativamente pequeño y en algunos problemas no se requiere realizar la partición.

Zamora y Grossmann (1998b) presentan un algoritmo de optimización global que resuelve en forma rigurosa el modelo de Yee y Grossmann (1990) para la síntesis de redes de intercambio de calor, bajo las suposiciones de funciones lineales de costo de área, diferencia media aritmética de temperatura entre las fuerzas motrices y sin división de corrientes. En este enfoque se utilizan dos nuevos conjuntos de subestimadores convexos para el área de transferencia de calor. Para derivar el primer conjunto de subestimadores convexos lineales y no lineales hacen un análisis termodinámico. El segundo conjunto de subestimadores se obtiene por relajación de la ecuación de transferencia de calor, e introduciendo una nueva variable, y una desigualdad que contiene al término no convexo, que se sustituye por su envoltura cóncava. Tomando como base estos subestimadores, el PNLME no convexo original, se sustituye por un problema convexo que predice cotas inferiores ajustadas al mínimo global y que se usa dentro de un método híbrido de ramificación y acotamiento/ búsqueda de aproximación exterior.

Hashemi-Ahmady *et al.* (1999) proponen una herramienta para la síntesis de redes de intercambio de calor, basado en el conocimiento de la termodinámica y de las técnicas heurísticas y de optimización. El enfoque permite una interacción y evaluación durante el transcurso del diseño, e identifica redes óptimas con bajo costo, buenas características de operación y una estructura simple.

Se han realizado importantes avances dentro del campo de la optimización global de redes de intercambio de calor, sin embargo nadie tiene aún la última palabra en este campo. Existen algunos puntos pendientes tales como el estudio sobre el impacto que tiene selección del conjunto de variables de partición dentro del algoritmo de ramificación y acotamiento propuesto por Zamora (1998a), además del desarrollo de estimadores que faciliten la determinación de diseños óptimos globales de redes de intercambio de calor de mayor tamaño.

1.6 Definición del Problema

La solución de un problema de optimización requiere de la formulación de modelos matemáticos, los cuales generalmente incluyen términos no convexos, que hacen difícil la determinación del diseño óptimo de una red de intercambio de calor. Las no convexidades surgen de la definición de la diferencia media logarítmica de temperatura (DMLT), de la ecuación de transferencia de calor, de los balances de energía y las funciones cóncavas de costo de área.

Existen en la literatura pocos algoritmos desarrollados que garantizan soluciones óptimas globales para el diseño de redes de intercambio de calor con estructura fija, a los que se les conoce como algoritmos de optimización global, mismos que se han descrito en la sección anterior y que se basan principalmente en el método de ramificación y acotamiento (Horst y Tuy, 1993). Este método divide la región factible en pequeñas subregiones facilitando la búsqueda de un diseño óptimo global de la red de intercambio de calor.

Sin embargo, la eficiencia de estos algoritmos depende de la selección del conjunto de variables de partición que se utilice y no existen trabajos detallados sobre ello, por lo que es necesario realizar un estudio para reducir el número de nodos analizados y como consecuencia de ello también disminuir el tiempo de cómputo para llegar a determinar el diseño óptimo global de la red de intercambio de calor. Además, es necesario contar con subestimadores más eficientes que permitan determinar dichos diseños en problemas de redes más grandes analizando un menor número de nodos.

1.7 Objetivos y alcances de la investigación.

Dada una estructura fija de una red de intercambio de calor se pretende:

- a). Determinar el diseño particular de la red y las condiciones de operación que minimizan global y rigurosamente el costo total anual de la propia red de intercambio de calor.
- b). Realizar un estudio sobre el impacto que tiene la selección del conjunto de variables de partición en la eficiencia de los algoritmos de optimización global de redes de intercambio de calor basados en el método de ramificación y acotamiento.
- c). Investigar y desarrollar nuevos estimadores para subestimar de manera rigurosa el área de un intercambiador de calor.

Alcance de la investigación:

Dentro del campo de la ingeniería química, el presente trabajo está enfocado a la optimización global determinista para redes de intercambio de calor con estructura fija.

1.8 Resumen general de la tesis.

En el Capítulo 2 se presentan los conceptos básicos de la optimización útiles para comprender este campo de estudio y también se enumeran algunas de las complejidades que surgen en el campo de la optimización local y global.

En el Capítulo 3 se presenta un algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global de redes de intercambio de calor, y se aborda también la construcción del problema convexo relajado basado en el uso de subestimadores convexos.

En el Capítulo 4 se desarrollan algunos diseños de optimización global de redes de intercambio de calor con topología fija, basado en una adecuación del algoritmo de ramificación y acotamiento propuesto por Zamora (1998a).

En el Capítulo 5 se realiza el estudio del impacto que tiene la selección del conjunto de variables de partición. Además, se presenta un nuevo subestimador convexo para subestimar el área de un intercambiador de calor.

Capítulo 2

CONCEPTOS BASICOS SOBRE OPTIMIZACION

2.1 Introducción.

Los conceptos geométricos juegan un papel importante en el desarrollo y análisis de algoritmos para la solución de problemas de programación matemática (Horst *et al.*, 1995a). Por lo que es importante conocer la naturaleza de las funciones involucradas dentro del problema de optimización a resolver. En el presente capítulo se presentan algunos de los conceptos básicos utilizados en el campo de la optimización.

2.2 Estructura del problema de optimización.

La representación matemática de un problema de optimización de PNL puede darse como:

$$\begin{aligned} &\text{Min. } f(x) \\ &\text{sujeto a} \\ &h_i(x) = 0; i = 1, 2, \dots, m \\ &g_j(x) \leq 0; j = 1, 2, \dots, r \\ &x \in D \subseteq R^n \end{aligned} \tag{2.1}$$

en $f(x)$ es la función objetivo; $h_i(x) = 0$, con $i = 1, 2, \dots, m$ son las funciones que definen a las restricciones de igualdad y $g_j(x) \leq 0$, con $j = 1, 2, \dots, r$ son las funciones que definen a las restricciones de desigualdad. y D representa la región factible.

Solución factible. Se dice que un punto $x \in R^n$ es un punto factible o solución del problema (2.1), si $x \in D$.

Región factible. Es la región constituida por todas las soluciones (o puntos) factibles.

ε -Vecindad: Dado un punto $x \in \mathbb{R}^n$ y un escalar $\varepsilon > 0$, el conjunto $N\varepsilon(x) = \{y \in \mathbb{R}^n : \|y - x\| \leq \varepsilon\}$ es llamado una ε -Vecindad de x .

Solución óptima global. Considere el problema (2.1). Se dice que si un punto $x^* \in S$ satisface $f(x^*) \leq f(x)$, $\forall x \in S$ se denomina solución óptima global.

Solución óptima local. Se dice que x^* es una solución óptima local, si existe una vecindad $N\varepsilon(x^*)$ en donde se satisface $f(x^*) \leq f(x)$, $\forall x \in S \cap N\varepsilon(x)$ de acuerdo al problema (2.1).

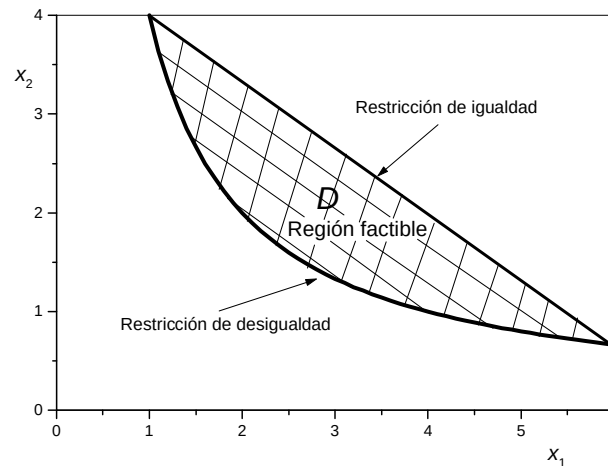


Figura 2.1 Representación de la región factible en el problema de optimización.

2.3 Clasificación de los problemas de optimización.

Los problemas de optimización se pueden clasificar en problemas de optimización discreta y de optimización continua. A su vez, la optimización continua se puede dividir en problemas con y sin restricciones. Por otra parte, de acuerdo con la naturaleza de las funciones que definen a los problemas de optimización, se clasifican como problemas de programación lineal (PL), si la función objetivo y las funciones que definen a las restricciones del problema son lineales; mientras que los problemas de programación no lineal (PNL) son aquellos en donde la función objetivo y/o

las funciones que definen a las restricciones del problema son no lineales. También existen problemas de programación no lineal mixta entera (PNLME) y problemas de programación lineal mixta entera (PLME) donde se incluyen variables binarias.

Otra clasificación de los problemas de optimización se hace de acuerdo a la estructura especial de las restricciones, por ejemplo cuando la función objetivo y la región de búsqueda es convexa, se dice que el problema es de programación convexa; pero si alguno de sus elementos es no convexo, el problema es de programación no convexa.

2.4 Conceptos matemáticos utilizados en optimización.

En el desarrollo de algoritmos de programación matemática, los conceptos geométricos juegan un papel importante con la finalidad de encontrar una solución, ya que dependiendo de la naturaleza de las funciones que componen a un problema pueden facilitar o dificultar su solución. Es por ello que antes de empezar a resolver un problema de optimización conviene conocer el tipo de funciones que están involucrados en el modelo.

2.4.1 Conjuntos convexos.

Dado un conjunto de vectores $x^1, \dots, x^m$ en el espacio Euclidiano R^n y los números reales $\lambda_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, m$ con $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$, la suma vectorial $\lambda_1 x^1 + \dots + \lambda_m x^m$ es llamada una *combinación convexa* de estos puntos .

Se dice que un conjunto C de R^n es convexo si para cada par de puntos $x^1, x^2 \in C$ y para cada número $\lambda \in R, 0 \leq \lambda \leq 1$, se tiene que $\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2 \in C$. Esto es, que para cualesquiera dos puntos de C , el segmento de línea que une a ambos puntos queda dentro de C . La Figura 2.2 ilustra a un conjunto convexo mientras que la Figura 2.3 ilustra a un conjunto no convexo. En otras palabras, un conjunto convexo se caracteriza porque contiene a todas las combinaciones convexas de cada par de sus elementos.

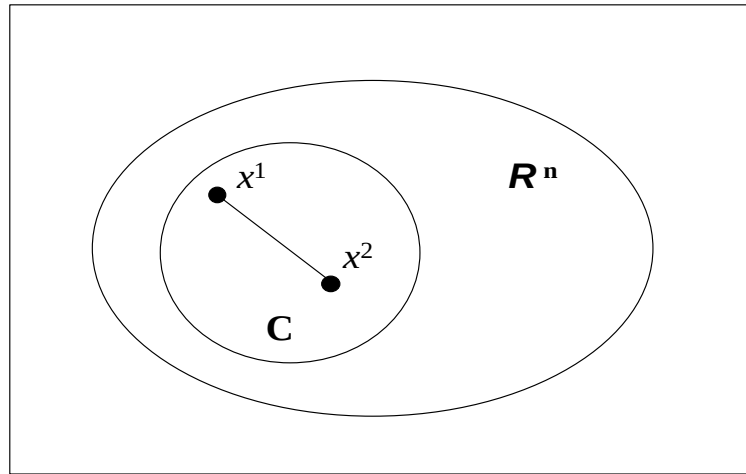


Figura 2.2 Representación de un conjunto convexo.

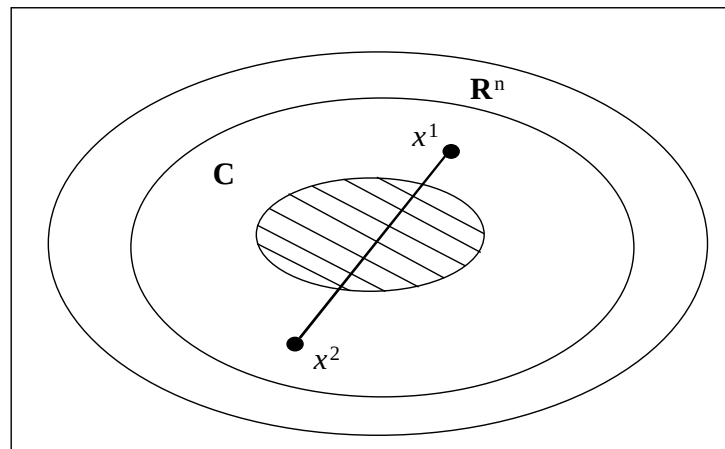


Figura 2.3 Representación de un conjunto no convexo.

Los conjuntos convexos en R^n satisfacen las siguientes propiedades (Chong y Zak, 1996):

a). Si un conjunto C es convexo en R^n y α es un número real. Entonces el conjunto $\alpha C = \{x: x = \alpha y, y \in C\}$ es también convexo (Figura 2.4).

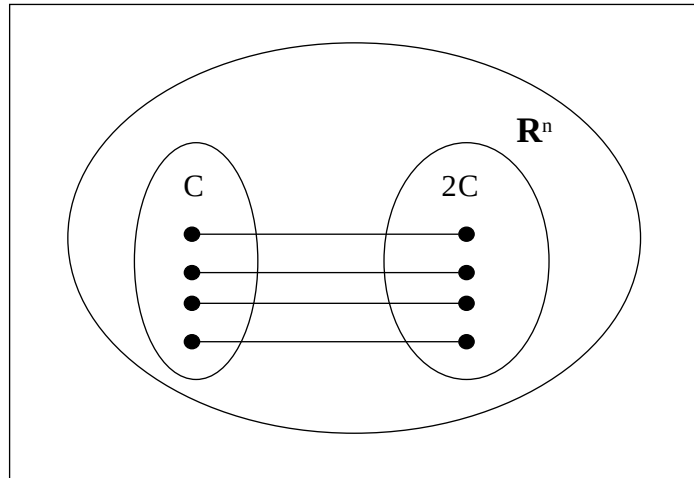


Figura 2.4 Conjunto convexo con un número real ($\alpha = 2$).

b). Si θ_1 y θ_2 son conjuntos convexos, entonces el conjunto

$\theta_1 + \theta_2 = \{x \in \mathbf{R}^n : x = u_1 + u_2, u_1 \in \theta_1, u_2 \in \theta_2\}$ es también convexo.

c). La intersección de cualquier colección de conjuntos convexos es convexa (Figura 2.5).

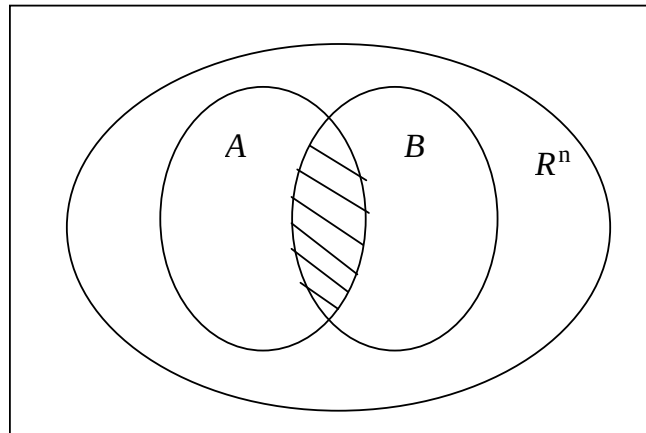


Figura 2.5 Intersección de dos conjuntos convexos

2.4.2 Funciones convexas.

Sea $f(x):S \rightarrow \mathbb{R}$, en donde S es un conjunto convexo en $\mathbb{R}^n$. Se dice que la función $f(x)$ es convexa sobre S , si: $f[\lambda x^1 + (1-\lambda)x^2] \leq \lambda f(x^1) + (1-\lambda)f(x^2)$, $0 \leq \lambda \leq 1$, $\forall x^1, x^2 \in S$.

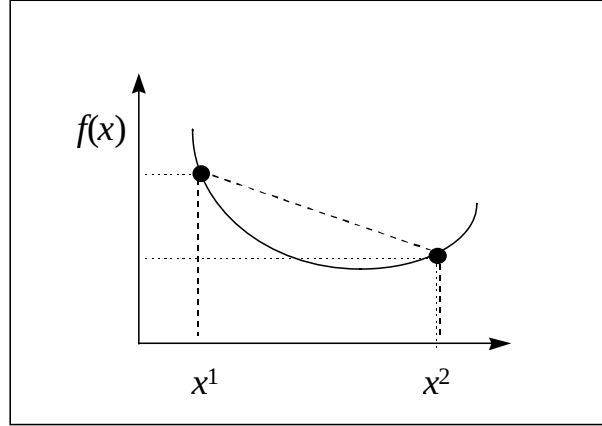


Figura 2.6 Representación de una función convexa.

2.4.3 Otros conceptos geométricos.

Un punto $x \in S$, se dice que es un *punto interior* del conjunto S , si existe al menos una ε -vecindad de x que está totalmente contenida en S (Figura 2.7). El conjunto de todos los puntos interiores de S es llamado interior de S y se le denota como $\text{Int } S$.

Un punto $x \in \mathbb{R}^n$ se le denomina *punto de frontera* del conjunto S , si cualquier vecindad de x contiene al menos un punto dentro y un punto fuera de S . Al conjunto de todos los puntos de frontera se le denomina la frontera de S .

Se dice que el conjunto S es *abierto* si $S = \text{Int } S$, es decir que cada uno de los puntos de S es un punto interior.

Se dice que S es un *conjunto cerrado*, si y solo si, su complemento es abierto.

Al conjunto que puede estar contenido en una hiperesfera de radio finito se le denomina *conjunto acotado*.

Un conjunto es *compacto* si es un conjunto cerrado y acotado.

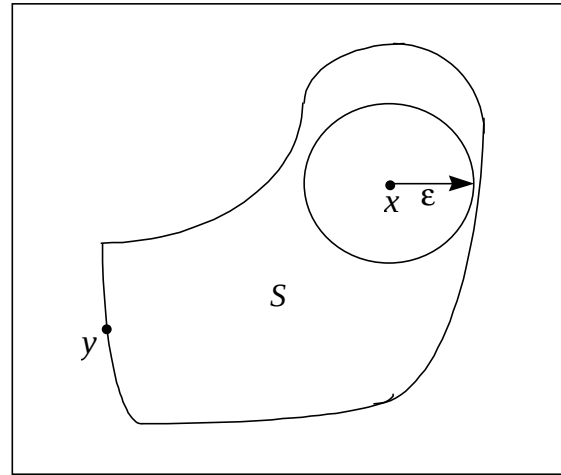


Figura 2.7 Punto interior (x) y Punto de frontera (y).

Teorema de Weierstrass. Si S es un conjunto compacto no vacío en $\mathbb{R}^n$, y $f(x): S \rightarrow \mathbb{R}$ es una función continua sobre S , entonces $f(x)$ tiene al menos un mínimo (ó máximo) global en S .

Otros conceptos utilizados son el de *infimum* y *supremum* de una función $f(x)$ sobre un conjunto $S \subseteq \mathbb{R}^n$. El infimum $\inf \{ f(x): x \in S \}$ de $f(x)$ sobre S es la mayor de las cotas inferiores de $f(x)$ sobre S . Por otra parte, el supremum $\sup \{ f(x): x \in S \}$ de $f(x)$ sobre S es la menor de las cotas superiores de $f(x)$ sobre S . Si $f(x)$ sobre S no está acotada por abajo (arriba), entonces el $\inf \{ f(x): x \in S \} = -\infty$ ($\sup \{ f(x): x \in S \} = \infty$), pero si S es un conjunto vacío, entonces $\inf \{ f(x): x \in S \} = \infty$ ($\sup \{ f(x): x \in S \} = -\infty$).

2.5 Propiedades generales de los problemas de optimización.

El objeto de la programación matemática es el estudio de las propiedades y los algoritmos para la solución de problemas de optimización. El problema de optimización puede definirse como:

$$\text{Min. } f(x)$$

Sujeto a

$$x \in D$$

(2.1a)

donde $D = \{x \in R^n : x \in S, h_i(x) = 0; i = 1, 2, \dots, m; g_j(x) \leq 0; j = 1, 2, \dots, r\}$ es la región factible, $f(x)$ es la función objetivo; $h_i(x) = 0$, con $i = 1, 2, \dots, m$ son las funciones que definen a las restricciones de igualdad y $g_j(x) \leq 0$, con $j = 1, 2, \dots, r$ son las funciones que definen a las restricciones de desigualdad.

En un problema de optimización donde la función objetivo es una función convexa y la región factible (D) es un conjunto convexo se puede garantizar que una solución óptima local es también una solución óptima global. En problemas de programación no lineal no convexa se pueden tener múltiples puntos mínimos locales que a veces tienen valores de la función objetivo diferentes a la de un mínimo global.

2.6 Complejidad de la optimización local y global.

Algunas de las complicaciones que pueden presentarse en problemas de PNL son:

- i) que la función objetivo y/o las funciones que definen a las restricciones del problema, presenten discontinuidades finitas o sean no convexas;
- ii) si se lineariza una restricción o la función objetivo se puede dar lugar a la formación de matrices singulares y como consecuencia ocasiona fallas en el algoritmo (Lucia *et al.*, 1996); y

iii) que la función objetivo exhiba varios puntos óptimos locales donde se desea encontrar una solución óptima global.

2.7 Envoltura Convexa.

En problemas de optimización global es importante contar con una función de aproximación, que permita determinar cotas inferiores para el valor de la función objetivo. En nuestro caso la envoltura convexa se construye relajando los términos no convexos por medio de subestimadores que se encuentran en la literatura.

Definición de envoltura Convexa.

La envoltura convexa se obtiene relajando los términos no convexos de una función no convexa. Esta envoltura es en realidad una función donde se determinan cotas inferiores para un problema no convexo de optimización.

Cascarón convexo: Sea S un subconjunto de $\mathbb{R}^n$. El cascarón convexo de S es un conjunto que resulta de la intersección de todos los conjuntos convexos que contienen a S (i.e. Es el conjunto convexo más pequeño que contiene a S). Las propiedades de un cascarón convexo son:

- a) Debe contener a S .
- b) Debe ser convexo.
- c) No existe un conjunto convexo más pequeño que satisfaga a) y b)

En el siguiente capítulo se aborda el tema del problema convexo relajado para subestimar el valor de la función objetivo.

Capítulo 3

UN ALGORITMO DE OPTIMIZACION GLOBAL PARA PROGRAMACION NO LINEAL

3.1 Introducción.

Los modelos matemáticos utilizados para resolver problemas de optimización en ingeniería incluyen frecuentemente términos no convexos, *funciones cóncavas univariantes*, *términos bilineales* y *términos fraccionales lineales* que pueden conducir a múltiples soluciones sub-óptimas y a puntos estacionarios no óptimos. En este capítulo se presentan los principales estimadores convexos reportados en la literatura para relajar dichos términos y que son útiles para la construcción de un problema convexo relajado, el cual puede utilizarse para calcular cotas inferiores rigurosas para el valor del óptimo global. También se incluye el algoritmo de ramificación y acotamiento propuesto por Zamora (1998a) para la optimización global de problemas de programación no lineal, PNL, el cual sirve de base para el desarrollo de diseños óptimos globales de redes de intercambio de calor.

3.2 Algunos términos no convexos en modelos de optimización en ingeniería química.

Algunos modelos matemáticos incluyen en su formulación funciones no convexas tales como: i) funciones cóncavas univariantes; ii) términos bilineales; y iii) términos fraccionales lineales. Las funciones cóncavas univariantes generalmente se utilizan en modelos matemáticos para representar economías de escala en forma de un exponente fraccional de la función de costo. Los términos bilineales están dados por el producto de dos variables continuas, proviniendo de modelos simplificados para unidades de separación, debido al producto entre el flujo de entrada del componente clave con su respectiva fracción de recuperación. Estos términos también surgen al modelar mezclado no isotérmico de las corrientes de proceso, donde existe un producto entre un flujo y una temperatura, $F t$.

Los términos fraccionales lineales están dados por la razón de dos variables continuas; por ejemplo, la relación entre las cargas térmicas y la diferencia media aritmética de temperatura, DMLT, que son utilizadas en el cálculo áreas de los intercambiadores de calor de la red existente.

3.3 Un algoritmo general de ramificación y acotamiento.

En esta sección se plantea el problema de optimización global para programación no lineal no convexa que incluye, como funciones complicantes, funciones cóncavas univariadas, términos bilineales y términos fraccionales lineales en la función objetivo y en las funciones que definen las restricciones.

La estructura matemática del problema de PNL considerado es la siguiente:

$$\underset{x}{Min} \ f(x) = \sum_{(i,j) \in BL_0} a_{ij} x_i x_j + \sum_{(i,j) \in LF_0} b_{ij} \frac{x_i}{x_j} + \sum_{i \in C_0} g_i(x_i) + h(x)$$

sujeto a

$$f_k(x) = \sum_{(i,j) \in BL_k} a_{ijk} x_i x_j + \sum_{(i,j) \in LF_k} b_{ijk} \frac{x_i}{x_j} + \sum_{i \in C_k} g_{i,k}(x_i) + h_k(x) \leq 0, \ k \in K,$$

$$x \in S \cap \Omega_0 \subset \mathbb{R}^n, \quad (3.1)$$

en donde a_{ij} , a_{ijk} , b_{ij} , b_{ijk} son escalares con $i \in I = \{1, 2, \dots, n\}$, $j \in J = \{1, 2, \dots, n\}$ y $k \in K = \{1, 2, \dots, m\}$. Los conjuntos de pares de índices (i, j) , con $i \neq j$; BL_0 , BL_k , LF_0 , LF_k definen a los términos bilineales y términos fraccionales lineales presentes en el problema. Las funciones $h(x)$, $h_k(x)$ son convexas y dos veces continuamente diferenciables. Los conjuntos de índices, C_0 y C_k definen a las funciones cóncavas univariadas dos veces continuamente diferenciables $g_i(x)$, $g_{i,k}(x)$. El conjunto $S \subset \mathbb{R}^n$ es un conjunto convexo, compacto, no vacío y $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^n$ es un hiper-rectángulo de n dimensiones definido en términos de las cotas iniciales de las variables $x^{L,in}$ y $x^{U,in}$:

$$\Omega_0 = \{x \in \mathbb{R}^n: 0 \leq x^{L,in} \leq x \leq x^{U,in}, x_j^{L,in} > 0, \text{ si } (i, j) \in LF_0 \cup LF_k, i \in I, j \in J, k \in K\}$$

En futuras referencias de esta tesis, la región factible del problema (3.1) se denotará por D . Nótese que una restricción de igualdad no lineal de la forma $f_k(x) = 0$ puede representarse en (3.1) por medio de las desigualdades $f_k(x) \leq 0$ y $-f_k(x) \leq 0$, suponiendo que $h_k(x)$ es función separable.

El algoritmo determinista de optimización global que se presenta en este capítulo pertenece a la clase de algoritmos de ramificación y acotamiento (Horst y Tuy, 1993), los cuales requieren para su funcionamiento de una tolerancia relativa positiva, ε_t , la cual determina la convergencia del algoritmo y está diseñado para determinar un punto $x^* \in D$ tal que:

$$\varepsilon(x) \leq \varepsilon_t, \quad \forall x \in D \quad (3.2)$$

en donde:

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} \frac{f(x^*) - f(x)}{|f(x^*)|} & \text{si } f(x^*) \neq 0; \\ -f(x) & \text{si } f(x^*) = 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

La idea básica del algoritmo propuesto por Zamora (1998a) depende del uso de subestimadores convexos, y explota la estructura del problema para reducir el número de nodos analizados para determinar una solución óptima global. Algunos métodos reportados para resolver el problema (3.1) y ejemplos particulares de este tipo se incluyen en Quesada y Grossmann (1995a), Horst y Pardalos (1995) y Ryoo y Sahinidis (1996).

3.4 Un problema relajado convexo.

Para resolver globalmente el problema (3.1) con el enfoque de ramificación y acotamiento se construye un problema relajado convexo utilizando subestimadores convexos. En esta sección se presentan algunos estimadores reportados en la literatura que se utilizan para relajar términos no convexos como las funciones cóncavas univariadas, los términos bilineales y los términos fraccionales lineales.

3.4.1 Relajación de funciones cóncavas univariables.

La mejor manera de subestimar una función cóncava univariable es por medio de su envoltura convexa (Falk y Soland, 1969). Para la función cóncava $g_i(x_i)$ del problema (3.1) en el dominio $x_i \in [x_i^L, x_i^U]$, su envoltura convexa está dada por la función lineal $\hat{g}_i(x_i)$:

$$\hat{g}_i(x_i) = g_i(x_i^L) + \left(\frac{g_i(x_i^U) - g_i(x_i^L)}{x_i^U - x_i^L} \right) (x_i - x_i^L) \leq g_i(x_i),$$

(3.4)

en donde puede observarse que $\hat{g}_i(x_i) = g_i(x_i)$ cuando $x_i = x_i^L$ y $x_i = x_i^U$. De manera similar, la envoltura convexa para la función cóncava $g_{i,k}(x_i)$ en $x_i \in [x_i^L, x_i^U]$, está dada por,

$$\hat{g}_{i,k}(x_i) = g_{i,k}(x_i^L) + \left(\frac{g_{i,k}(x_i^U) - g_{i,k}(x_i^L)}{x_i^U - x_i^L} \right) (x_i - x_i^L) \leq g_{i,k}(x_i),$$

(3.5)

en donde $\hat{g}_{i,k}(x_i) = g_{i,k}(x_i)$ cuando $x_i = x_i^L$ y $x_i = x_i^U$.

Teorema 3.1

La función $\psi(x) = \sum_{i \in C_0} \hat{g}_i(x_i)$ es la envoltura convexa de $\sum_{i \in C_0} g_i(x_i)$ sobre $\Omega_{C_0} = \{x \in R^{|C_0|} : x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, i \in C_0\}$. Similarmente, $\psi(x) = \sum_{i \in C_0} \hat{g}_{i,k}(x_i)$ es la envoltura convexa de $\sum_{i \in C_0} g_{i,k}(x_i)$ en $\Omega_{C_k} = \{x \in R^{|C_k|} : x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, i \in C_k\}$. La prueba para este teorema puede encontrarse en Falk y Soland (1969).

3.4.2 Relajación de términos bilineales.

Para relajar los términos bilineales del problema (3.1), se introduce un vector de variables no negativas, $y = \{y_{ij}\}$ y cada término bilineal, $x_i x_j$, se sustituye por una variable y_{ij} y se agregan restricciones que acotan el valor de dichas variables. Por lo que, la dimensión n_1 de y es igual al número de términos bilineales diferentes que están presentes en el problema (3.1). El valor de las variables y_{ij} se acotan por medio de las siguientes desigualdades:

$$\left. \begin{aligned} y_{ij} &\geq x_j^L x_i + x_i^L x_j - x_i^L x_j^L & (i, j) \in BL^+ \\ y_{ij} &\geq x_j^U x_i + x_i^U x_j - x_i^U x_j^U & (i, j) \in BL^+ \end{aligned} \right\} \quad (3.6)$$

$$\left. \begin{aligned} y_{ij} &\leq x_j^L x_i + x_i^U x_j - x_i^U x_j^L & (i, j) \in BL^- \\ y_{ij} &\leq x_j^U x_i + x_i^L x_j - x_i^L x_j^U & (i, j) \in BL^- \end{aligned} \right\} \quad (3.7)$$

en donde:

$$BL^+ = \{(i, j): (i, j) \in BL_0 \cup BL_k, a_{ij} > 0, a_{ijk} > 0, k \in K\}$$

$$BL^- = \{(i, j): (i, j) \in BL_0 \cup BL_k, a_{ij} < 0, a_{ijk} < 0, k \in K\}$$

Las desigualdades en (3.6) fueron derivadas por McCormick (1976). En 1983, Al-Khayyal y Falk demostraron que estas desigualdades determinan la envoltura convexa del término bilineal $x_i x_j$. Posteriormente, Al-Khayyal (1990) demostró que las desigualdades en (3.7) determinan la envoltura cóncava del término $x_i x_j$.

Teorema 3.2

La función

$\phi_{ij}^{bl}(x_i, x_j) = \text{Max} [x_j^L x_i + x_i^L x_j - x_i^L x_j^L, x_j^U x_i + x_i^U x_j - x_i^U x_j^U]$ es la envoltura convexa del término bilineal $x_i x_j$ sobre el rectángulo $\Omega_{ij} = \{(x_i, x_j): x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, x_j^L \leq x_j \leq x_j^U\}$. Además $\phi_{ij}^{bl}(x_i, x_j) = x_i x_j$ en la frontera de Ω_{ij} . Una prueba para este teorema puede

encontrarse en Al-Khayyal y Falk (1983) o Horst y Tuy (1993).

Teorema 3.3

La función

$\gamma_{ij}^{bl}(x_i, x_j) = \text{Min} [x_j^L x_i + x_i^U x_j - x_i^U x_j^L, x_j^U x_i + x_i^L x_j - x_i^L x_j^U]$ es la envoltura cóncava del término bilineal $x_i x_j$ sobre el rectángulo $\Omega_{ij} = \{(x_i, x_j): x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, x_j^L \leq x_j \leq x_j^U\}$.

Además $\gamma_{ij}^{bl}(x_i, x_j) = x_i x_j$ en la frontera de Ω_{ij} . La prueba del Teorema se encuentra en Al-Khayyal (1990).

3.4.3 Relajación de términos fraccionales lineales.

Para relajar los términos fraccionales lineales en (3.1), se introduce un vector no negativo de variables $z = \{z_{ij}\}$. Cada término fraccional lineal, x_i/x_j , de la ecuación (3.1) se sustituye por una variable z_{ij} . Además, la dimensión n_2 de z es igual al número de términos fraccionales lineales diferentes que están presentes en el problema (3.1). Los valores de las variables z_{ij} se acotan en el problema convexo relajado por medio de las siguientes desigualdades:

$$\left. \begin{aligned} z_{ij} &\geq \frac{x_i}{x_j^L} + x_i^U \left(\frac{1}{x_j} - \frac{1}{x_j^L} \right) & (i, j) \in LF^+, \\ z_{ij} &\geq \frac{x_i}{x_j^U} + x_i^L \left(\frac{1}{x_j} - \frac{1}{x_j^U} \right) & (i, j) \in LF^- \end{aligned} \right\} \quad (3.8)$$

$$z_{ij} \geq \frac{1}{x_j} \left(\frac{x_i + \sqrt{x_i^L x_j^U}}{\sqrt{x_i^L} + \sqrt{x_i^U}} \right)^2 \quad (i, j) \in LF^+, \quad (3.9)$$

$$\left. \begin{aligned} z_{ij} &\leq \frac{1}{x_j^L x_i^U} (x_j^U x_i - x_i^L x_j + x_i^L x_j^L) & (i, j) \in LF^+, \\ z_{ij} &\leq \frac{1}{x_j^L x_i^U} (x_j^L x_i - x_i^U x_j + x_i^U x_j^U) & (i, j) \in LF^- \end{aligned} \right\} \quad (3.10)$$

en donde:

$$LF^+ = \{(i, j): (i, j) \in LF_0 \cup LF_k, b_{ij} > 0 \text{ ó } b_{ijk} > 0, k \in K\}$$

$$LF^- = \{(i, j): (i, j) \in LF_0 \cup LF_k, b_{ij} < 0 \text{ ó } b_{ijk} < 0, k \in K\}$$

Las desigualdades en (3.8) fueron desarrolladas por Quesada y Grossmann (1993, 1995). Las desigualdades en (3.9) fueron desarrolladas por Zamora y Grossmann (1996). Mientras que las desigualdades en (3.10) se deben a Zamora y Grossmann (1999a), determinan la envoltura cóncava del término fraccional lineal x_i/x_j .

Teorema 3.4

La función $\phi_{ij}^{lf,1}(x_i, x_j) = \text{Max} \left[\frac{x_i}{x_j^L} + x_i^U \left(\frac{1}{x_j} - \frac{1}{x_j^L} \right), \frac{x_i}{x_j^U} + x_i^L \left(\frac{1}{x_j} - \frac{1}{x_j^U} \right) \right]$ es un subestimador convexo del término fraccional lineal x_i/x_j en el rectángulo $\Omega_{ij} = \{(x_i, x_j): 0 \leq x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, 0 < x_j^L \leq x_j \leq x_j^U\}$. Además, $\phi_{ij}^{lf,1}(x_i, x_j) = x_i/x_j$ en la frontera de Ω_{ij} . La prueba de este teorema se desarrolla en Quesada y Grossmann (1993, 1995).

Teorema 3.5

La función $\phi_{ij}^{lf,2}(x_i, x_j) = \frac{1}{x_j} \left(\frac{x_i + \sqrt{x_i^L x_j^U}}{\sqrt{x_i^L} + \sqrt{x_i^U}} \right)^2$ es un subestimador convexo del término fraccional lineal x_i/x_j sobre el rectángulo $\Omega_{ij} = \{(x_i, x_j): 0 \leq x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, 0 < x_j^L \leq x_j \leq x_j^U\}$. Además, $\phi_{ij}^{lf,2}(x_i, x_j) = x_i/x_j$ cuando $x_i = x_i^L$ y $x_i = x_i^U$. La prueba para el Teorema 3.5 se encuentra en Zamora y Grossmann (1999a).

Teorema 3.6

La función $\gamma_{ij}^{lf}(x_i, x_j) = \text{Min} \left[\frac{1}{x_j^L x_j^U} (x_j^U x_i - x_i^L x_j + x_i^L x_j^L), \frac{1}{x_j^L x_j^U} (x_j^L x_i - x_i^U x_j + x_i^U x_j^U) \right]$ es

la envoltura cóncava del término fraccional lineal x_i/x_j sobre el rectángulo $\Omega_{ij} = \{(x_i, x_j): 0 \leq x_i^L \leq x_i \leq x_i^U, 0 < x_j^L \leq x_j \leq x_j^U\}$. Además, $\gamma_{ij}^{lf}(x_i, x_j) = x_i/x_j$ cuando $x_j = x_j^L$ y $x_j = x_j^U$. La prueba de este teorema se encuentra en Zamora y Grossmann (1999a).

3.4.4 Un problema convexo relajado para acotar rigurosamente la solución del problema no convexo.

Para obtener una cota inferior rigurosa, $LB(\Omega)$, para el mínimo global del problema (3.1) sobre $D \cap \Omega$, donde $\Omega = \{x \in R^n: x^L \leq x \leq x^U\} \subseteq \Omega_0$. Se utiliza el siguiente problema convexo relajado propuesto por Zamora y Grossmann (1998a):

$$\underset{(x,y,z)}{\text{Min}} \hat{f}(x,y,z) = \sum_{(i,j) \in BL_0} a_{ij} y_{ij} + \sum_{(i,j) \in LF_0} b_{ij} z_{ij} + \sum_{i \in C_0} \hat{g}_i(x_i) + h(x) \quad (3.11)$$

sujeto a

$$\begin{aligned} \hat{f}_k(x,y,z) &= \sum_{(i,j) \in BL_k} a_{ijk} y_{ij} + \sum_{(i,j) \in LF_k} b_{ijk} z_{ij} + \sum_{i \in C_k} \hat{g}_{i,k}(x_i) + h_k(x) \leq 0, \quad k \in K, \\ (x,y,z) &\in T(\Omega) \subset R^n \times R^{n1} \times R^{n2}, \\ x &\in S \cap \Omega \subset R^n, \quad y \in R_+^{n1}, \quad z \in R_+^{n2}, \end{aligned}$$

en donde $\hat{g}_i(x_i)$ y $\hat{g}_{i,k}(x_i)$, dados por (3.4) y (3.5), son las envolturas convexas de las funciones cóncavas univariadas $g_i(x_i)$ y $g_{i,k}(x_i)$, respectivamente; y_{ij} y z_{ij} son las variables adicionales para las desigualdades convexas de acotamiento en (3.6)-(3.10) y,

$$T(\Omega) = \{(x,y,z) \in R^n \times R^{n1} \times R^{n2}: (3.6)-(3.10) \text{ con } x^L, x^U \text{ dadas como en } \Omega\}.$$

La región factible del problema (3.11) se denota por $M(\Omega)$, y una solución del problema convexo relajado se representa por $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})_\Omega$. Además, el claro (relativo) de relajación $\varepsilon(\Omega)$ en

un nodo de ramificación y acotamiento se define como:

$$\varepsilon(\Omega) = \begin{cases} \infty & \text{si } OUB = \infty, \\ -LB(\Omega) & \text{si } OUB = 0, \\ \frac{(OUB - LB(\Omega))}{|OUB|} & \text{en otro caso} \end{cases}$$

donde la cota superior global, OUB , es el valor de $f(x)$ en el mejor punto factible disponible $x \in D$; si ningún punto factible está disponible, entonces se asigna a $OUB = \infty$.

Teorema 3.7

El programa en (3.11) es un problema convexo relajado que subestima la solución del problema (3.1) sobre $D \cap \Omega$.

Comentarios:

- 1.- El problema convexo relajado en (3.11) es un programa lineal si $LF^+ = \emptyset$.
- 2.- Durante la ejecución del algoritmo de ramificación y acotamiento, el problema (3.11) se resuelve inicialmente sobre $M(\Omega_0)$ (nodo raíz del árbol de ramificación y acotamiento). Si se requiere una mejor aproximación, se refina $M(\Omega_0)$ por partición de Ω_0 en dos hiperrectángulos más pequeños, Ω_{01} y Ω_{02} , y se crean dos nodos hijos con regiones factibles relajadas dadas por $M(\Omega_{01})$ y $M(\Omega_{02})$.
- 3.- El problema dado en (3.11) puede considerarse como un problema convexo relajado para el problema general en (3.1). En algunos casos pueden desarrollarse estimadores convexos adicionales, como los que se encuentran en Sherali y Alameddine (1992), Quesada y Grossmann (1995) y Sherali y Tuncbilek (1995).

3.5 Construcción del problema convexo relajado.

Un punto clave para resolver un problema de optimización global no convexo con el enfoque de ramificación y acotamiento es la construcción del problema convexo relajado. En las secciones anteriores se presentaron algunos de los estimadores que aparecen en la literatura para relajar términos no convexos y que permiten la construcción del problema convexo relajado.

Inicialmente se plantea un modelo matemático no convexo (NC) generado para el problema de interés a resolver. Al sustituir los términos no convexos del modelo (NC) por nuevas variables y agregar restricciones que acotan los valores para dichas variables, se construye el problema relajado convexo. La solución del modelo (NC) permite la obtención de una cota superior en el nodo analizado; mientras que al resolver el modelo convexo relajado se obtiene una cota inferior que subestima el valor de la función objetivo del problema (NC).

Otra representación matemática para el problema (NC) y el problema convexo relajado es la siguiente:

Problema no convexo

$$\text{Min } f(x)$$

sujeto a

$$x \in D \cap \Omega$$

Problema convexo relajado

$$\text{Min } \hat{f}(x)$$

sujeto a

$$x \in \hat{D} \cap \Omega$$

donde $\hat{D} \cap \Omega = M(\Omega)$

En la Figura 3.1 se ilustra que el valor de la función objetivo $\hat{f}(x)$ del problema convexo relajado subestima al valor de la función objetivo $f(x)$ del problema no convexo.

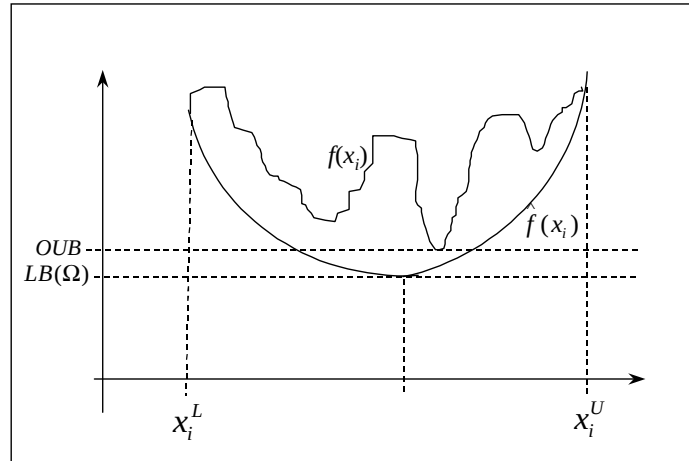


Figura 3.1 Subestimación de la función objetivo del problema no convexo.

3.6 Descripción del algoritmo de ramificación y acotamiento

La búsqueda de un mínimo global con el algoritmo propuesto por Zamora y Grossmann (1998a) inicia asignando una cota superior global, OUB , igual a infinito y asignando también un punto focal, el cual se utiliza para establecer la partición de la región de búsqueda en los casos donde ésta se realice. En la Fase 1, se intenta encontrar un buen candidato a óptimo global para el problema (3.1) por medio de un algoritmo estándar de optimización y diferentes puntos de inicialización.

En la Fase 2 se realiza la búsqueda rigurosa para determinar una solución óptima global. Se especifica el conjunto de variables de partición y un parámetro, l_n , que es el que determina el número de términos con los peores errores que debe analizar el algoritmo. Además se especifica la mínima fracción del dominio que deben contener los nodos hijos en la operación de partición, F_b , y así como el claro máximo de relajación o tolerancia, ϵ_t , asignado al algoritmo. Y también se asigna una cota global inferior, OLB , igual a $-\infty$.

Se abre una lista de nodos activos que contiene inicialmente un solo nodo y se asigna la cota global inferior, OLB . Se calcula el claro global de relajación, ϵ , y se compara contra la

tolerancia asignada al algoritmo, ε_t , para determinar si el algoritmo se detiene o continua con la siguiente etapa. Al determinar el claro global del primer nodo es obvio que el algoritmo no se detiene y procede a determinar la cota inferior de este nodo.

Se asigna como cota inicial inferior la cota global inferior asignada anteriormente en la región de búsqueda correspondiente. Y calcula la cota inferior del nodo de acuerdo al problema (3.11) sobre la región $M(\Omega_s)$. Si la solución es factible, se determina el claro relativo de relajación, $\varepsilon(\Omega)$, y si es menor a la tolerancia del algoritmo, ε_t , se verifica si la lista de nodos está vacía y si OUB tiene un valor diferente a infinito, entonces la solución obtenida es un mínimo global. En otro caso, se determina el conjunto de variables de partición y se asigna como *punto focal* la solución del problema (3.11).

Se asigna una cota superior al nodo igual a OUB , y tomando la solución de (3.11), se intenta resolver el problema (3.1) sobre $D \cap \Omega_s$. Si se localiza un punto factible se actualiza el punto focal. También se actualiza OUB siempre y cuando la solución obtenida al analizar el nodo sea menor al valor de la cota global superior disponible y se eliminan los nodos activos que tengan asociada una cota inferior con un valor igual o mayor al nuevo valor de OUB . En otro caso se elige una variable del mayor error de aproximación determinado por el parámetro, l_n , para realizar la partición del nodo de acuerdo a las reglas establecidas en el algoritmo. Si la mínima fracción se satisface para cada nodo hijo se procede a realizar una partición en el nodo. Pero si uno de los nodos hijos no conserva la mínima fracción especificada al algoritmo entonces se realiza una bisección en el nodo padre. La descripción formal de este algoritmo se presenta en la Sección 3.7.

Definición 1. El *punto focal* en un nodo de ramificación y acotamiento, es el punto $x^b \in \mathbb{R}^n$ que proporciona la mejor cota superior (UB) conocida para el problema (3.1) sobre el subconjunto correspondiente, $D \cap \Omega$, de la región factible. Si tal punto no está disponible, entonces el punto focal está dado por la componente x de la solución $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})_\Omega$ del problema

convexo relajado (3.11) sobre $M(\Omega)$.

Definición 2. El *claro (relativo) de relajación*, $\varepsilon(\Omega)$, es la diferencia relativa entre la cota global superior disponible y la cota inferior del nodo analizado (Sección 3.4.4).

Definición 3. Un *conjunto de variables de partición* $VP(\Omega)$, se define como el subconjunto de las variables complicantes o no convexas incluidas en los términos no convexos del problema, y se determina considerando la solución óptima $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})_\Omega$ del problema convexo relajado (3.11), identificando los términos no convexos en los que se tiene la peor aproximación:

$$VP(\Omega) = \{i, j: \left| \hat{y}_{ij} - \hat{x}_i \hat{x}_j \right| = \xi_l \text{ o } \left| \hat{z}_{ij} - \hat{x}_i / \hat{x}_j \right| = \xi_l \text{ o } g_i(\hat{x}_i) - \hat{g}_i(\hat{x}_i) = \xi_l \text{ o } \\ g_{i,k}(\hat{x}_i) - \hat{g}_{i,k}(\hat{x}_i) = \xi_l, \text{ para } i \in I, j \in J, k \in K, l \in L\}$$

en donde, l_n , es el parámetro que indica cuantas variables del subconjunto de variables de partición con $L = \{1, 2, \dots, l_n\}$ se deben considerar, y ξ_1 es la peor aproximación del problema (3.11) a un término no convexo evaluado en $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})_\Omega$:

$$\xi_1 = \underset{i \in I, j \in J, k \in K}{\text{Max}} \left[\left| \hat{y}_{ij} - \hat{x}_i \hat{x}_j \right|, \left| \hat{z}_{ij} - \hat{x}_i / \hat{x}_j \right|, g_i(\hat{x}_i) - \hat{g}_i(\hat{x}_i), g_{i,k}(\hat{x}_i) - \hat{g}_{i,k}(\hat{x}_i) \right]$$

En algunos casos puede ser conviene introducir pesos en la determinación de las $VP(\Omega)$ con el objeto de escalar las diferencias entre los errores de aproximación (Zamora y Grossmann, 1999a).

Definición 4. Las *estrategias de reducción por factibilidad* de un problema de optimización se entienden por un conjunto de técnicas que aceleran la convergencia en los algoritmos de ramificación y acotamiento, y se utilizan para eliminar subregiones por medio de la propagación de cotas dentro del mismo problema de optimización. Esta reducción de la región factible en el problema (3.11), hace que la búsqueda del mínimo global sea más eficiente, ya que

puede reducir el número de nodos analizados en el árbol de ramificación y acotamiento.

Definición 5. La partición de la región factible del problema (3.11) se lleva a cabo tomando en cuenta la mínima fracción del dominio, F_b , especificada al algoritmo y se realiza de la siguiente manera:

i) Si los nodos hijos derivados de un nodo satisfacen la mínima fracción del dominio se realiza una *partición en el nodo* de acuerdo al punto focal disponible.

ii) Si uno de los nodos hijos tiene un dominio menor al especificado por el algoritmo entonces la partición del nodo se realiza por medio de una *bisección*.

Nomenclatura utilizada en el algoritmo de ramificación y acotamiento:

F_b : Mínima fracción para el nodo más pequeño.

$LB(\Omega_s)$: Cota inferior.

$M(\Omega_s)$: Región convexa relajada.

$UB(\Omega_s)$: Cota superior.

OLB : Cota global inferior.

OUB : Cota global superior.

ε : Claro global de relajación.

ε_t : Claro máximo de relajación permitido para la convergencia del algoritmo.

$\varepsilon(\Omega)$: Claro relativo de relajación.

Λ : Lista de nodos activos.

l_n : Parámetro que determina el número de variables con los peores errores de aproximación que debe considerar el algoritmo.

3.7 Algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global continua.

El algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global continua se compone de dos fases. En la Fase 1 se intenta encontrar un buen candidato a óptimo del problema no convexo (3.1) La búsqueda rigurosa para una solución óptima global se realiza en la Fase 2 del algoritmo.

Inicio

Asignar $OUB := \infty$, $x^b := (x^{L, in} + x^{U, in})/2$.

Fase 1 (Búsqueda Heurística PNL)

En esta etapa se intenta resolver el problema no convexo de programación no lineal, PNL, utilizando un algoritmo estándar de optimización para determinar por lo menos un punto factible. Si se localiza un punto factible, se utiliza como candidato a óptimo global. Se actualiza OUB y ahora el punto focal es $x^b := x^*$, siendo x^* la mejor solución disponible.

Fase 2 (Búsqueda Global PNL)

PASO 1. Especificar el parámetro l_n que determina el número de variables con los peores errores de aproximación a considerar en el algoritmo de ramificación y acotamiento.

Especificar la mínima fracción del dominio, F_b , que se asignará al nodo más pequeño.

Especificar el claro máximo de relajación, ε_t , para la convergencia del algoritmo.

Asignar $LB(\Omega_0) := -\infty$.

PASO 3. Iniciar la lista de nodos abiertos $\Lambda = \{(0, LB(\Omega_0))\}$.

PASO 4. Si $\Lambda = \emptyset$, entonces termina la ejecución del algoritmo. Si $OUB = \infty$, entonces el problema de PNL es infactible, en otro caso x^* es un mínimo global.

PASO 5. Determinar la cota global inferior, OLB , de acuerdo a la lista de nodos abiertos:

$$OLB = \min_r [LB(\Omega_r)], \forall (r, LB(\Omega_r)) \in \Lambda.$$

Calcular el claro global de relajación:

$$\varepsilon = \begin{cases} \infty & \text{si } OUB = \infty, \\ -OLB & \text{si } OUB = 0, \\ \frac{(OUB - OLB)}{|OUB|} & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Si $\varepsilon \leq \varepsilon_t$ entonces termina la ejecución del algoritmo y x^* es un mínimo global.

PASO 6. Seleccionar un nodo s con $LB(\Omega_s) = OLB$, y $\Omega_s = \{x \in R^n : x^L \leq x \leq x^U\}$.

$$\Lambda := \Lambda \setminus \{s, LB(\Omega_s)\}$$

PASO 7. Aplicar la técnica de reducción basada en la factibilidad al nodo seleccionado. Si las cotas del nodo seleccionado se cruzan en algún punto, entonces ir al Paso 4.

PASO 8. Calcular $LB(\Omega_s)$ resolviendo el problema (3.11) sobre $M(\Omega_s)$. Si el problema es infactible ir al Paso 4. En otro caso, determinar el claro (relativo) de relajación en el nodo $\varepsilon(\Omega_s)$. Si $\varepsilon(\Omega_s) \leq \varepsilon_t$ ir al Paso 4. En otro caso, determinar el conjunto de variables de partición (VP), y asignar como punto focal $x^b := \hat{x}$.

PASO 9. Asignar como $UB(\Omega_s) := \infty$ a la cota superior del nodo seleccionado, e intentar resolver el problema (3.1) sobre $D \cap \Omega_s$, para determinar una cota superior del nodo. Si no se encuentra ningún punto factible ir al Paso 11. En otro caso, se determina una solución factible x^s con una cota superior $UB(\Omega_s)$, y se asigna como punto focal $x^b := x^s$.

PASO 10. Si $UB(\Omega_s) < OUB$, entonces:

- i) Asignar $x^* = x^s$
- ii) Actualizar $OUB := UB(\Omega_s)$.
- iii) Eliminar todos los nodos r de Λ tales que $LB(\Omega_s) \geq OUB$.
- iv) Calcular el claro (relativo) de relajación en el nodo ε (Ω_s).
- v) Si $\varepsilon(\Omega_s) \leq \varepsilon_t$, entonces ir al Paso 4.

PASO 11. Seleccionar una variable x_b , con $b \in VP$, tal que

$$\frac{x_b^U - x_b^L}{x_b^{U,in} - x_b^{L,in}} \geq \frac{x_i^U - x_i^L}{x_i^{U,in} - x_i^{L,in}}, \quad \forall i \in VP$$

Crear dos nodos nuevos, $s1$ y $s2$. Asignando las cotas inferiores de los nodos de la siguiente manera: $LB(\Omega_{s1}) := LB(\Omega_s)$, $LB(\Omega_{s2}) := LB(\Omega_s)$ y la lista de particiones activas se actualiza como: $\Lambda := \Lambda \cup \{[s1, LB(\Omega_{s1})], [s2, LB(\Omega_{s2})]\}$. Ω_{s1} y Ω_{s2} y se definen como sigue:

$$\text{Si } \min \left[\frac{x_b^b - x_b^L}{x_b^U - x_b^L}, \frac{x_b^U - x_b^b}{x_b^U - x_b^L} \right] \geq F_b,$$

entonces se realiza una partición en el punto focal con $\Omega_{s1} := \Omega_s \cap \{x \in \mathbb{R}^n : x^b \leq x_b^b\}$ y $\Omega_{s2} := \Omega_s \cap \{x \in \mathbb{R}^n : x^b \geq x_b^b\}$. En otro caso se realiza una partición con bisección, $\Omega_{s1} = \Omega_s \cap \{x \in \mathbb{R}^n : x_b \leq (x_b^L + x_b^U) / 2\}$ y $\Omega_{s2} = \Omega_s \cap \{x \in \mathbb{R}^n : x_b \geq (x_b^L + x_b^U) / 2\}$.

Ir al Paso 5.

3.8 Ejemplo ilustrativo del algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global continua.

Resolver el siguiente problema de optimización:

$$\begin{aligned} \text{Min. } f(x) &= x_1^2 + x_2^2 - 4x_1 - 5x_2 \\ \text{sujeto a} \\ x_1x_2 &= 4 & (\text{NC}) \\ x \in \Omega_0 &= \{x: 0 \leq x_1 \leq 6, 0 \leq x_2 \leq 4\} \end{aligned}$$

El problema descrito arriba es no convexo porque la restricción de igualdad es no lineal y no convexa, aunque la función objetivo es convexa. Al resolver el problema no convexo (NC) se obtiene una solución en la que la función objetivo toma un valor de:

$$x^* = (1.738, 2.302), f(x^*) = -10.14195, \text{ por lo que } OUB = -10.14195$$

Los puntos factibles para este problema (NC) se ubican sobre la curva mostrada en la Figura 3.2. Debido a la naturaleza del problema es necesario construir un problema convexo relajado que permita determinar la solución óptima global, aplicando el algoritmo de ramificación y acotamiento.

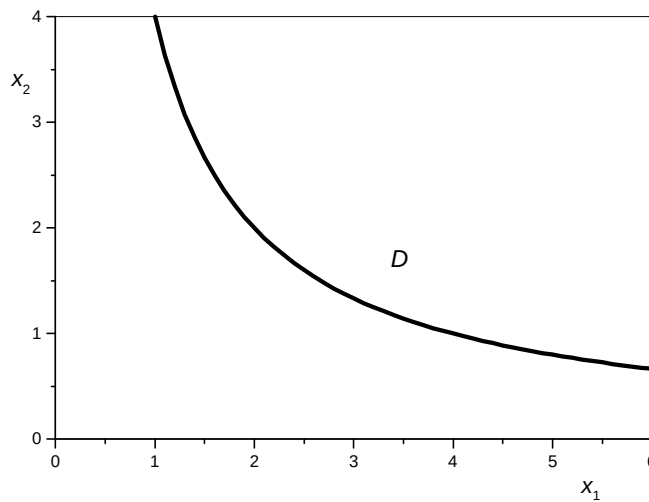


Figura 3.2 Región no convexa para el problema NC.

Construcción del problema convexo relajado.

Para garantizar la optimalidad de la solución óptima global del problema (NC) se construye un problema convexo relajado donde se sustituye el término bilineal de acuerdo a lo presentado en la Sección 3.4.2. En este modelo se sustituye el término no lineal que aparece en la función que define a la restricción de igualdad, $x_1 x_2$, por una nueva variable y_{12} , de tal manera que el problema convexo relajado es:

$$\begin{aligned}
 &\text{Min. } \hat{f}(x) = f(x) \\
 &\text{sujeto a} \\
 &y_{12} = 4 \\
 &y_{12} \geq x_2^L x_1 + x_1^L x_2 - x_1^L x_2^L \\
 &y_{12} \geq x_2^U x_1 + x_1^U x_2 - x_1^U x_2^U \\
 &y_{12} \leq x_2^L x_1 + x_1^U x_2 - x_1^U x_2^L \\
 &y_{12} \leq x_2^U x_1 + x_1^L x_2 - x_1^L x_2^U \\
 &x \in \Omega_0
 \end{aligned} \tag{C}$$

La Figura 3.3 muestra la región convexa para el modelo convexo relajado (C).

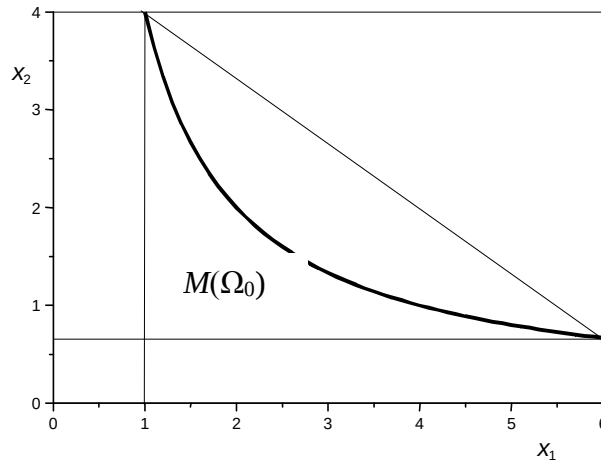


Figura 3.3 Región convexa relajada $M(\Omega_0)$ para el problema C.

La Tabla 3.1 muestra los principales pasos que se ejecutan del algoritmo de ramificación y acotamiento para resolver este ejemplo ilustrativo. No se ejecutan los Pasos 2 y 7.

Tabla 3.1 de estrategias aplicada al ejemplo ilustrativo

Estrategia	Fase 1	Paso 2	Paso 7
S1	*		

Resultados para el ejemplo ilustrativo 3.1.

Tabla 3.2 Resultados aplicando el algoritmo de ramificación y acotamiento

Iter	Nodo	LBpadre	Lbnodo	OUB	$\varepsilon(\%)$	V	x_1'	x_2'
1	1	$-\infty$	-10.25000	∞		x_1	2.00	2.50
2	2	-10.25000	-10.20000	-10.14195	1.0653	x_2	1.80	2.40
3	3	-10.25000	-10.00000	-10.14195	1.0653	-	2.0	2.0
4	4	-10.20000	-10.14754	-10.14195	0.5728	x_2	1.75	2.30
5	5	-10.20000	-10.13889	-10.14195	0.5728	-	1.67	2.50
6	6	-10.14754	infactible	-10.14195	.05510	-	-	-
7	7	-10.14754	-10.14754	-10.14195	.05510	x_1	1.75	2.30
8	8	-10.14754	infactible	-10.14195	.05510	-	-	-
9	9	-10.14754	-10.14754	-10.14195	.05510	x_2	1.75	2.30
10	10	-10.14754	infactible	-10.14195	.05510	-	-	-
11	11	-10.14754	10.14754	-10.14195	.05510	x_1	1.75	2.30
12	12	-10.14754	-10.14233	-10.14195	.05510	x_2	1.74	2.31
13	13	-10.14754	-10.14150	-10.14195	.05510	-	1.76	2.27
14	14	-10.14233	infactible	-10.14195	.00377	-	-	-
15	15	-10.14233	-10.14233	-10.14195	.00377	x_1	1.74	2.31
16	16	-10.14233	infactible	-10.14195	.00377	-	-	-
17	17	-10.14233	-10.14233	-10.14195	.00377	x_2	1.74	2.31
18	18	-10.14233	-10.14197	-10.14195	.00377	x_1	1.74	2.30
19	19	-10.14233	-10.14228	-10.14195	.00325	x_1	1.73	2.31
20	20	-10.14197	infactible	-10.14195	.00325	-	-	-
21	21	-10.14197	-10.14197	-10.14195	.00020	x_2	1.74	2.30
22	22	-10.14228	infactible	-10.14195	.00092	-	-	-
23	23	-10.14228	-10.14205	-10.14195	0.0012	x_1	1.73	2.31
24	24	-10.14205	infactible	-10.14195	0.0012	-	-	-
25	25	-10.14205	-10.14193	-10.14195	0.0012	-	-	-
26	26	-10.14197	infactible	-10.14195	0.0012	-	-	-
27	27	-10.14197	-10.14197	-10.14195	0.0012	x_1	1.74	2.30
28	28	-10.14197	infactible	-10.14195	0.0012	-	-	-
29	29	-10.14197	-10.14197	-10.14195	0.0012	x_2	1.74	2.30
30	30	-10.14197	infactible	-10.14195	0.0012	-	-	-
31	31	-10.14197	-10.14197	-10.14195	0.0012	x_1	1.74	2.30
32	32	-10.14197	infactible	-10.14195	0.0012	-	-	-
33	33	-10.14197	-10.14197	-10.14195	0.0012	x_2	1.74	2.30
34	34	-10.14197	-10.1413	-10.14195	0.0012	-	1.75	1.28
35	35	-10.14197	-10.14197	-10.14195	0.0012			
36	36	-10.14197	-10.14197	-10.14195				

37	37	-10.14197	-10.14197	-10.14195		-	1.738	2.302
----	----	-----------	-----------	-----------	--	---	-------	-------

La Tabla 3.2 muestra los resultados obtenidos al aplicar el algoritmo de ramificación y acotamiento. En ella se puede apreciar que la determinación del óptimo global requirió del análisis de 37 nodos. La segunda columna de la Tabla 3.2 indica el nodo analizado, la cuarta columna indica la cota obtenida para cada nodo al ejecutarse el algoritmo. La quinta columna nos indica la cota superior global. La siguiente columna indica el claro de relajación global. Las últimas dos columnas indican la solución del problema convexo relajado. En esta tabla la letra V indica la variable sobre la que se realizó la partición.

Discusión de resultados.

La solución óptima global del Ejemplo Ilustrativo fue determinada desde la primer iteración en el problema (NC), sin embargo fue necesario el análisis de 37 nodos para garantizar la optimalidad global. El claro de relajación global inicial con 1% y termina con 0%. Como es de esperarse, se observa un comportamiento monotonicamente decreciente en este parámetro. La partición se realiza sobre ambas variables que forman parte del término bilineal.

Capítulo 4

OPTIMIZACION GLOBAL DE REDES DE INTERCAMBIO DE CALOR

4.1 Introducción.

El enfoque de programación matemática aplicada a la síntesis de redes de intercambio de calor es una herramienta versátil y poderosa para la optimización simultánea del consumo de energía, área y apareamiento de corrientes. Sin embargo, algunos de los modelos utilizados para resolver estos problemas de síntesis incluyen términos no convexos que pueden conducir a soluciones sub-óptimas. También, la optimización global de redes de intercambio de calor con estructura fija permite determinar un diseño óptimo y las mejores condiciones de operación de una red de intercambio de calor.

En este capítulo se realiza una adecuación al algoritmo presentado en el Capítulo 3, con la finalidad de implementarlo de manera especializada en la optimización global de redes de intercambio de calor con estructura fija. La Sección 4.2 muestra en que consiste el problema de síntesis de redes de intercambio de calor. En la Sección 4.3 se plantea el problema de diseño óptimo global de redes de intercambio de calor. En la Sección 4.4 se proporcionan ciertas guías para el modelado de intercambiadores, calentadores, enfriadores, mezcladores y divisores. La Sección 4.5 presenta algunas expresiones que se han desarrollado para aproximar a la diferencia media logarítmica de temperatura, DMLT. La Sección 4.6 presenta el algoritmo de optimización global para redes de intercambio de calor. Las Secciones 4.7 y 4.8 presentan ejemplos ilustrativos de diseños óptimos globales de redes de intercambio de calor.

4.2 Síntesis óptima global de redes de intercambio de calor.

Los enfoques de programación matemática más comunes para la síntesis simultánea de redes de intercambio de calor proporcionan una poderosa y versátil herramienta para la generación de diseños de redes que optimizan simultáneamente el nivel de consumo de servicios auxiliares, capital de inversión, y los apareamientos de las corrientes. Algunos de estos enfoques permiten obtener configuraciones de redes con condiciones óptimas de operación con un costo mínimo (e. g. Zamora y Grossmann, 1998b). Un trabajo reciente fue desarrollado por Hashemi *et al.* (1999), donde se propone un enfoque secuencial para la síntesis óptima de redes de intercambio de calor que incorpora también elementos de optimización global.

El problema de síntesis óptima de redes de intercambio de calor se puede definir de la siguiente forma:

Dados:

- 1) Un conjunto de corrientes calientes de proceso $(F_i, Cp_i, T_{i,in}, T_{i,o}, h_i)$ a ser enfriadas.
- 2) Un conjunto de corrientes frías de proceso $(F_j, Cp_j, T_{j,in}, T_{j,o}, h_j)$ a ser calentadas.
- 3) Un conjunto de servicios auxiliares de calentamiento, $hu, (T_{hu,in}, T_{hu,o})$ y de enfriamiento, $cu, (T_{cu,in}, T_{cu,o})$.
- 4) Información de costos de inversión (CI) y de operación.

Se tiene como objetivo desarrollar la estructura de una red de intercambio de calor y las características de diseño y operación de tal forma que se minimice el costo total de la red.

Existen métodos heurísticos y enfoques matemáticos para tratar este problema de síntesis. Los primeros se basan en reglas empíricas o heurísticas que pueden conducir a la selección de una buena alternativa de síntesis, con la inconveniencia de que el diseño final depende fuertemente de la experiencia que tenga el diseñador.

Por otro lado los enfoques matemáticos simultáneos permiten explorar en forma sistemática todas las alternativas de diseño para la síntesis de la red de intercambio que pueden ser representadas por medio de una superestructura (*e.g.* Yee y Grossmann, 1990). Sin embargo, la complejidad de este enfoque se debe al número de variables binarias que aparecen en los modelos matemáticos utilizados para resolver el problema de síntesis, así como su naturaleza no convexa.

4.3 Problema del diseño óptimo de redes de intercambio de calor en el contexto de la síntesis de procesos.

El problema del diseño óptimo de redes de intercambio de calor se define como:

Dados:

- 1) La topología de una red de intercambio de calor con,
 - Intercambiadores de calor a contracorriente.
 - Fuerza motriz: DMLT, DMAT.
 - Flujos de capacidades caloríficas constantes.
 - Coeficientes de transferencia de calor constantes.
- 2) Funciones de costo de los intercambiadores,

$$CF + C \left(\frac{q}{U\Delta t} \right)^\beta$$

- 3) Información de costo de los servicios auxiliares.

Determinar:

La distribución de áreas y cargas térmicas de los intercambiadores y las condiciones de operación, flujos y temperaturas intermedias, que minimizan el costo total anual de la red de intercambio de calor.

4.4 Expresiones básicas de modelado matemático para redes de intercambio de calor.

a) Intercambiador de calor.

Suponga que se desea intercambiar una carga térmica, q_{ij} , entre una corriente caliente, i , con una temperatura de entrada, $t_{i,in}$ y una temperatura de salida, $t_{i,o}$, y una corriente fría, j , con una temperatura de entrada, $t_{j,in}$, y una temperatura de salida, $t_{j,o}$. Entonces las ecuaciones de balance de energía que utilizará el modelo matemático estarán dadas de la forma siguiente:

$$q_{ij} = F_i (t_{i,in} - t_{i,o})$$

(4.1)

$$q_{ij} = F_j (t_{j,o} - t_{j,in})$$

(4.2)

Para las corrientes caliente y fría, respectivamente.

El área de un intercambiador de calor se determina utilizando la ecuación de transferencia de calor definida como:

$$q_{ij} = U_{ij} A_{ij} \Delta t_{ij}$$

(4.2a)

en donde U_{ij} es el coeficiente global de transferencia de calor; A_{ij} es el área del intercambiador de calor y Δt_{ij} es la fuerza motriz en el intercambiador de calor.

b) Enfriador.

Un enfriador es un intercambiador de calor donde se conocen las temperaturas de entrada y salida para la corriente fría, j . Además se conoce la temperatura de salida, $T_{i,o}$, de la corriente caliente, i , por lo que la ecuación a considerar en el modelo matemático está dada por:

$$qcu_i = F_i (t_{i,in} - T_{i,o})$$

(4.3)

La ecuación de transferencia de calor para un enfriador está dada por:

$$qcu_i = U_{i,cu} A_{i,cu} \Delta t_{i,cu}$$

(4.3a)

en donde $U_{i,cu}$ es el coeficiente global de transferencia de calor, $A_{i,cu}$ es el área del enfriador y $\Delta t_{i,cu}$ es la fuerza motriz en el enfriador.

c) Calentador.

Un calentador es un intercambiador donde las temperaturas de entrada y salida de la corriente caliente son conocidas, y se desea calentar una corriente fría de proceso, j , desde una temperatura de entrada, $t_{j,in}$, hasta una temperatura, $T_{j,o}$, entonces la expresión a considerar en el modelo matemático está dada por:

$$qhu_j = F_j (T_{j,o} - t_{j,in})$$

(4.4)

La ecuación de transferencia de calor para un calentador está dada por:

$$qhu_j = U_{j,hu} A_{j,hu} \Delta t_{j,hu}$$

(4.4a)

en donde $U_{j,hu}$ es el coeficiente global de transferencia de calor, $A_{j,hu}$ es el área del calentador y $\Delta t_{j,hu}$ es la fuerza motriz en el calentador.

d) Mezcladores.

Suponga que se desea mezclar dos corrientes de proceso, una corriente con temperatura, t_1 , y flujo de capacidad calorífica, F_1 , y una corriente de proceso con temperatura, t_2 , y flujo de capacidad calorífica, F_2 , por lo que se desconoce la temperatura a la salida del mezclador, t . Su modelado requiere de un balance de materia (Ec. 4.5a) y de un balance de energía (4.5b) dada por las siguientes relaciones:

$$F_1 + F_2 = F$$

(4.5a)

$$F_1 t_1 + F_2 t_2 = F t$$

(4.5b)

donde F_1 y F_2 son los flujos de capacidad calorífica para las corrientes de proceso que entran al mezclador y F es el flujo de capacidad calorífica a la salida del mezclador.

e) Divisores.

La expresión para representar un divisor en un modelo matemático para la optimización de redes de intercambio de calor está dada por el balance de masa.

$$F = F_1 + F_2$$

(4.6)

donde F es el flujo de capacidad calorífica de una corriente de proceso que entra al divisor; F_1 y F_2 son los flujos de capacidad calorífica para las corrientes de proceso que salen del divisor.

f) Fuerzas motrices de temperatura.

La diferencia en los extremos caliente y frío de un intercambiador pueden representarse respectivamente por medio de las siguientes expresiones:

$$dt_h = (t_{i,in} - t_{j,o})$$

(4.7a)

$$dt_c = (t_{i,o} - t_{j,in})$$

(4.7b)

En términos de cotas variables se tiene:

1) Para la diferencia media aritmética de temperatura:

$$DMAT = (dt_h + dt_c) / 2$$

(4.7c)

2) Para la diferencia media logarítmica de temperatura:

$$DMLT = (dt_h - dt_c) / \ln(dt_h / dt_c)$$

(4.7d)

4.5 Aproximaciones para la diferencia media logarítmica de temperatura.

La definición de la diferencia media logarítmica de temperatura a menudo ocasiona problemas cuando la diferencia de temperatura en los lados caliente y frío son iguales, generando como resultado una división entre cero; por ello se desarrollaron otras aproximaciones para definir las fuerzas motrices de temperaturas. La primer aproximación fue desarrollada por Patterson (1984) y la segunda aproximación fue desarrollada Chen (1987).

1) *Aproximación de Patterson:*
$$DMLT = \frac{1}{3} \left[\frac{1}{2} (dt_h + dt_c) \right] + \frac{2}{3} \sqrt{dt_h dt_c}$$

2) *Aproximación de Chen:*
$$DMLT = \left[(dt_h)(dt_c)(dt_h + dt_c) / 2 \right]^{1/3}.$$

Es bien sabido que la diferencia media aritmética de temperatura, $DMAT$, sobreestima a la diferencia media logarítmica de temperatura, $DMLT$, tal como se observa en la Figura 4.1. Por otra parte la aproximación de Chen subestima a la $DMLT$ tal y como lo muestra la Figura 4.2, sin embargo esta aproximación evita indeterminaciones cuando los lados caliente y frío de intercambiador de calor son iguales. La Figura 4.3 muestra que la aproximación de Patterson subestima a la $DMLT$. Esta aproximación tiene un comportamiento similar a la de Chen.

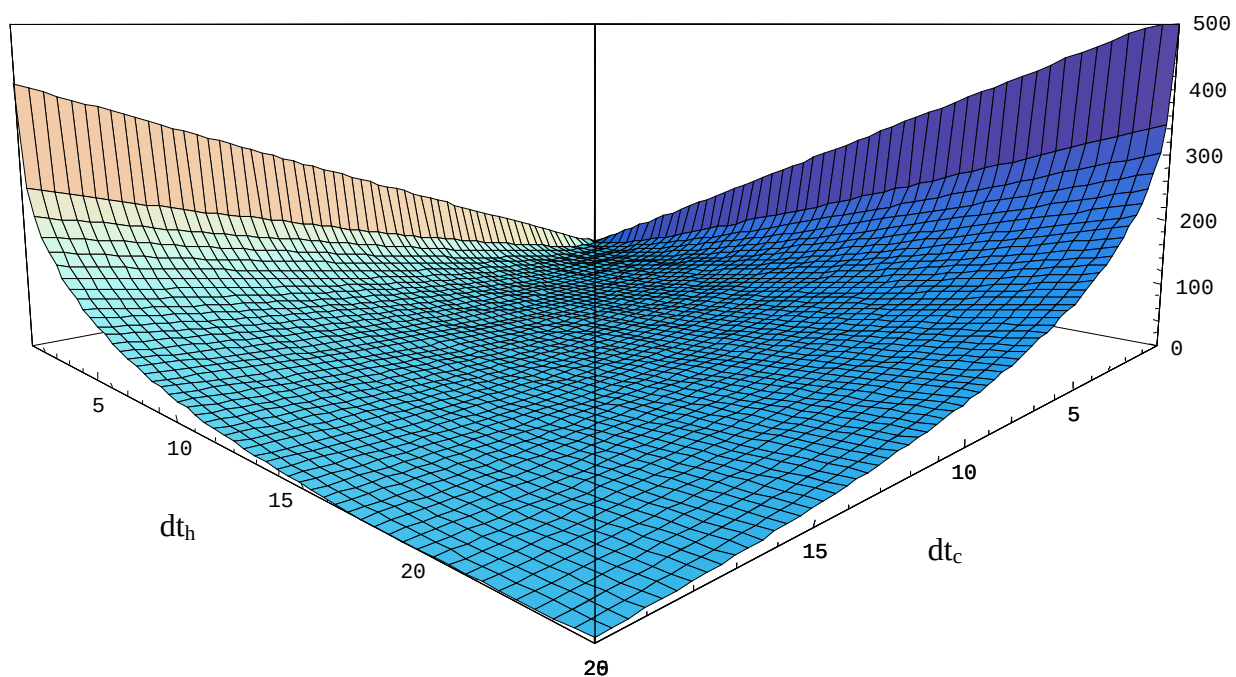


Figura 4.1 Diferencia entre la Diferencia Media Aritmética de Temperatura y la Diferencia Media Logarítmica de Temperatura $[50 \cdot (f_{DMAT} - f_{DMLT})]$.

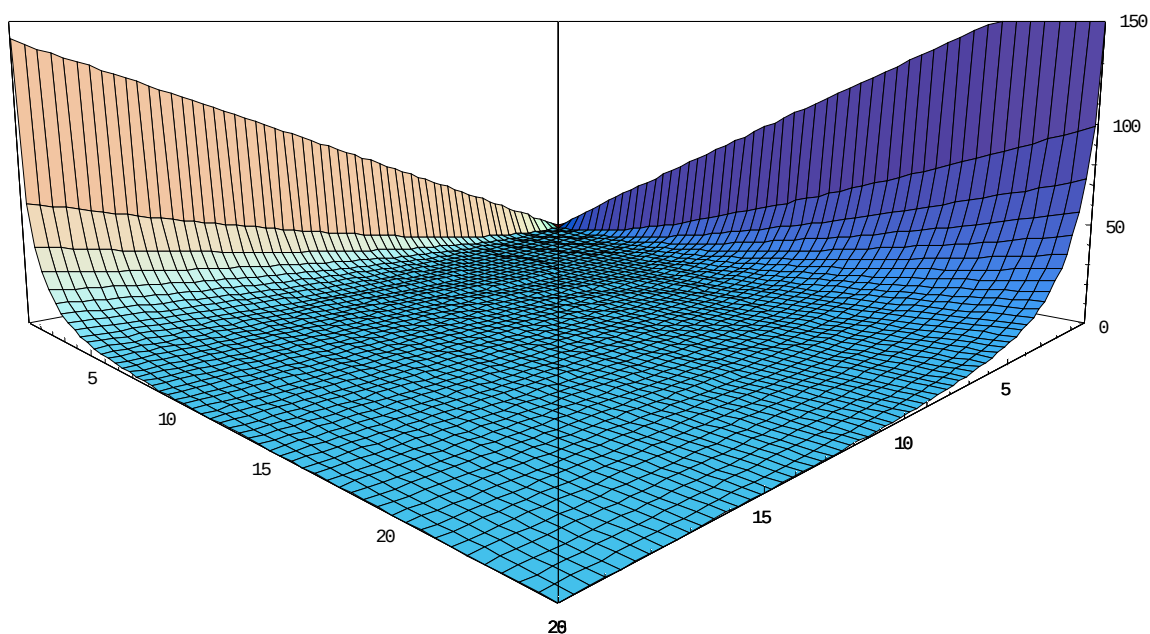


Figura 4-2 Diferencia entre la Diferencia Media Logarítmica de Temperatura y la Aproximación de Chen $[100 \cdot (50 \cdot (f_{DLMT} - f_{CHEN}))]$.

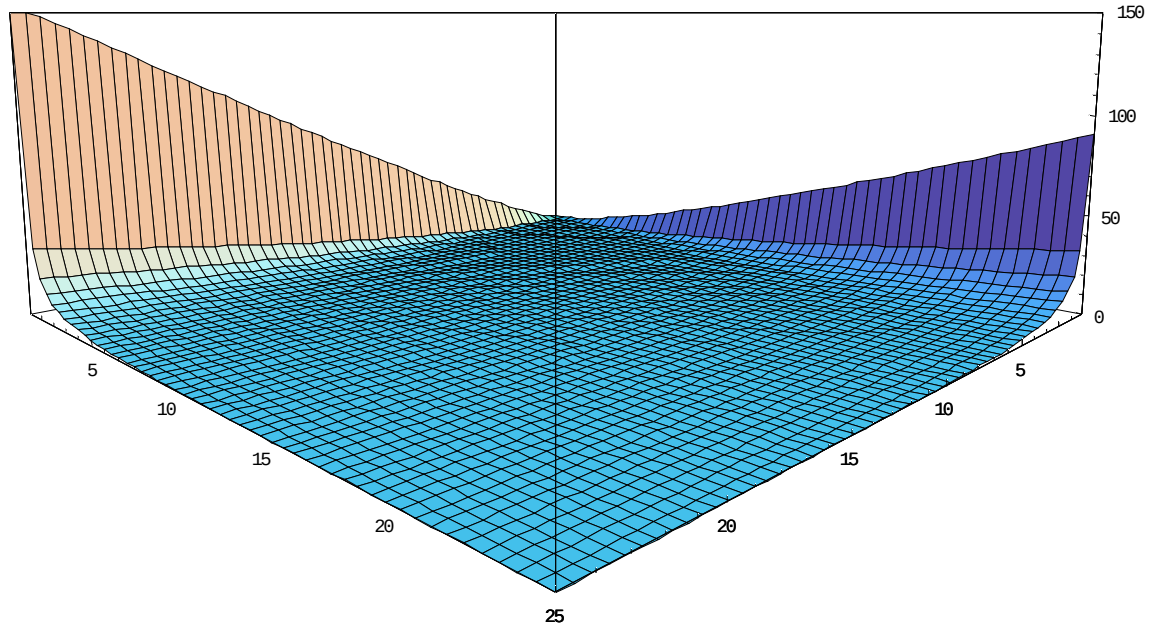


Figura 4.3 Diferencia entre la Aproximación de Patterson y Diferencia Media Logarítmica de Temperatura $[100*(f_{PAT} - f_{DMLT})]$.

4.6 Algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global de redes de intercambio de calor.

En la Sección 3.6 del capítulo anterior se presentó el algoritmo de ramificación y acotamiento para la optimización global continua y se presentaron las reglas de selección de variables de partición. Dentro de las variables de partición más comunes en problemas de redes de intercambio de calor se incluyen las cargas térmicas y las temperaturas, las cuales aparecen en términos no convexos, tales como las relaciones, Ft y $\frac{q_i}{U_i \Delta t_i}$. En esta sección se presenta una adecuación al algoritmo mencionado para aplicarlo a la optimización global de redes de intercambio de calor.

Inicio

Se asigna una cota superior global $OUB := \infty$, y $q^b := (q^{L,in} + q^{U,in})/2$.

Fase 1. Búsqueda Heurística PNL.

En esta fase se intenta determinar un diseño factible al problema de optimización de redes de intercambio de calor utilizando alguna técnica estándar de optimización. Si se localiza un diseño factible, se utiliza como candidato a óptimo global. Se actualiza OUB y se asigna como punto focal $q^b := q^*$, donde q^* es la carga térmica obtenida del diseño factible para la red de intercambio de calor.

Fase 2. Búsqueda Rigurosa del Optimo Global PNL.

PASO 1. Especificar el parámetro l_n que determina el número de variables con los peores errores de aproximación que se deben considerar en el algoritmo.

Especificar la mínima fracción (F_b) del dominio que se asignará a un nodo hijo.

Especificar el claro máximo de relajación permitido (ϵ) por el algoritmo.

Asignar una cota inferior al nodo padre $LB(\Omega_0) := -\infty$.

PASO 3. Inicializar la lista de nodos abiertos $\Lambda = \{(0, LB(\Omega_0))\}$.

PASO 4. Si $\Lambda = \emptyset$, entonces termina la ejecución del algoritmo. Si $OUB = \infty$, entonces el problema de PNL es infactible, en otro caso q^* es un mínimo global.

PASO 5. Determinar la cota global inferior, OLB , de acuerdo a la lista de nodos abiertos:

$$OLB = \min_r [LB(\Omega_r)], \forall (r, LB(\Omega_r)) \in \Lambda.$$

Calcular el claro global de relajación:

$$\varepsilon = \begin{cases} \infty & \text{si } OUB = \infty, \\ -OLB & \text{si } OUB = 0, \\ \frac{(OUB - OLB)}{|OUB|} & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Si $\varepsilon \leq \varepsilon_t$ entonces termina la ejecución del algoritmo y q^* es un mínimo global.

PASO 6. Seleccionar un nodo s con $LB(\Omega_s) = OLB$, y $\Omega_s = \{q \in \mathbb{R}^n : q^L \leq q \leq q^U\}$.

$$\Lambda := \Lambda \setminus \{s, LB(\Omega_s)\}$$

PASO 7. Aplicar la técnica de reducción basada en factibilidad al nodo seleccionado. (Opcional).

PASO 8. Se calcula $LB(\Omega_s)$ resolviendo el problema convexo relajado (3.11) sobre $M(\Omega_s)$. Si el problema es infactible ir al Paso 4. En otro caso, determinar el claro (relativo) de relajación en el nodo $\varepsilon(\Omega_s)$. Si $\varepsilon(\Omega_s) \leq \varepsilon_t$ ir al Paso 4. En otro caso, determinar el conjunto de variables de partición (VP), y asignar como punto focal $q^b := \hat{q}$. Siendo $\hat{q}$ la solución del problema convexo relajado.

PASO 9. Asignar como $UB(\Omega_s) := \infty$ a la cota superior del nodo seleccionado, e intentar resolver el problema no convexo (3.1) sobre $D \cap \Omega_s$, para determinar la cota superior del nodo. Si no se encuentra ningún punto factible ir al Paso 11. En otro caso, se determina una solución factible q^s con una cota superior $UB(\Omega_s)$, y se asigna como punto focal $q^b := q^s$.

PASO 10. Sí $UB(\Omega_s) < OUB$, entonces:

- i) Asignar $q^* := q^s$,
- ii) Actualizar $OUB := UB(\Omega_s)$.
- iii) Eliminar todos los nodos r de Λ tales que $LB(\Omega_s) \geq OUB$.
- iv) Calcular el claro (relativo) de relajación en el nodo $\varepsilon(\Omega_s)$.

v) Si $\varepsilon(\Omega_s) \leq \varepsilon_t$, entonces ir al Paso 4.

PASO 11. Seleccionar una variable q_b , con $b \in VP$, tal que

$$\frac{q_b^U - q_b^L}{q_b^{U,in} - q_b^{L,in}} \geq \frac{q_i^U - q_i^L}{q_i^{U,in} - q_i^{L,in}}, \quad \forall i \in VP$$

Crear dos nodos nuevos, $s1$ y $s2$. Asignando las cotas inferiores de los nodos de la siguiente manera: $LB(\Omega_{s1}) := LB(\Omega_s)$, $LB(\Omega_{s2}) := LB(\Omega_s)$ y la lista de partición activa se asigna como: $\Lambda := \Lambda \cup \{[s1, LB(\Omega_{s1})], [s2, LB(\Omega_{s2})]\}$. Ω_{s1} y Ω_{s2} se definen de la siguiente manera:

$$\text{Sí } \min \left[\frac{q_b^b - q_b^L}{q_b^U - q_b^L}, \frac{q_b^U - q_b^b}{q_b^U - q_b^L} \right] \geq F_b,$$

entonces se realiza una partición en el punto focal con $\Omega_{s1} := \Omega_s \cap \{q \in \mathbb{R}^n : q^b \leq q_b^b\}$ y $\Omega_{s2} := \Omega_s \cap \{q \in \mathbb{R}^n : q^b \geq q_b^b\}$. En caso contrario se realiza una partición con bisección $\Omega_{s1} = \Omega_s \cap \{q \in \mathbb{R}^n : q_b \leq (q_b^L + q_b^U)/2\}$ y $\Omega_{s2} = \Omega_s \cap \{q \in \mathbb{R}^n : q_b \geq (q_b^L + q_b^U)/2\}$.

Ir al Paso 5.

4.7 Ejemplo Ilustrativo 4.1. Red de intercambio de calor con mezclado isotérmico (Quesada y Grossmann, 1993)

Consideremos el problema de determinar un diseño óptimo global para la red de intercambio de calor que se muestra en la Figura 4.4, bajo las suposiciones de mezclado isotérmico y diferencia media aritmética de temperatura. La información de las corrientes de proceso, coeficientes globales de transferencia de calor, y de costos para este ejemplo se dan en la Tabla 4.1. La tarea de diseño consiste en determinar la red con un costo mínimo total, así como las áreas y cargas térmicas de los intercambiadores, así como las temperaturas intermedias.

Para resolver el Ejemplo 4.1 se presentan dos enfoques de solución: el primero de ellos es un modelo convexo relajado que utiliza los subestimadores para términos fraccionales lineales

desarrollados por Zamora (1997). El segundo modelo convexo utiliza los subestimadores desarrollados por Quesada y Grossmann (1995). Ambos enfoques se comparan de acuerdo al desempeño que tienen en la búsqueda del diseño óptimo de la red de intercambio de calor utilizando para ello el algoritmo de ramificación y acotamiento de la Sección 4.5.

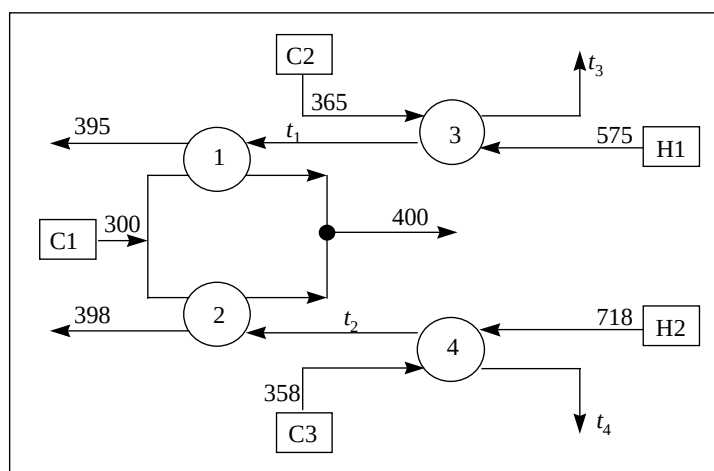


Figura 4.4 Red de intercambio de calor para el Ejemplo 4.1 (Quesada y Grossmann, 1993)

Tabla 4.1. Información de las corrientes de proceso y costos para el Ejemplo 4.1

Corriente	T_{in} (K)	T_o (K)	F (kW / K)
H1	575	395	5.555
H2	718	398	3.125
C1	300	400	10
C2	365	-	4.545
C3	358	-	3.571
Costo del intercambiador 1 (\$/año) = 270 [$A_1(m^2)$]			
Costo del intercambiador 2 (\$/año) = 720 [$A_2(m^2)$]			
Costo del intercambiador 3 (\$/año) = 240 [$A_3(m^2)$]			
Costo del intercambiador 4 (\$/año) = 900 [$A_4(m^2)$]			
$U_1=U_2=0.1$ kW/(m^2 K); $U_3=U_4=1$ kW/(m^2 K)			

Otro diagrama que puede utilizarse en diseño de una red de intercambio es el diagrama de malla mostrado en la Figura 4.5.

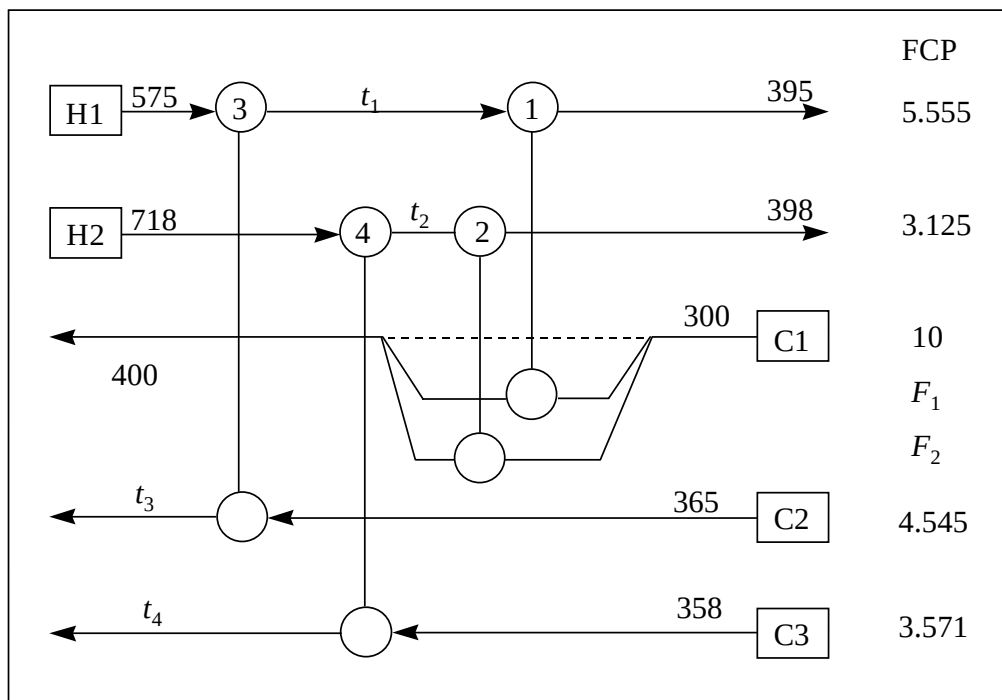


Figura 4.5 Diagrama de malla para el Ejemplo 4.1

Enfoques de solución.

La solución de un problema de optimización de red de intercambio de calor requiere de un modelo matemático, donde se establezca el objetivo del diseño así como las restricciones que debe satisfacer dicho diseño. Es por ello, que para resolver el Ejemplo 4.1, se parte del modelo no convexo (NC-4.1) propuesto por Quesada y Grossmann(1993). El modelo NC-4.1 es no lineal y no convexo, debido a presenta cuatro términos fraccionales lineales en la función objetivo, aunque las restricciones que componen al modelo son lineales.

Tomando como base el modelo NC-4.1 se construye un modelo convexo relajado donde se sustituye cada término fraccional lineal por una nueva variable y se agregan restricciones que

acotan el valor de las nuevas variables. En este caso se construirán dos modelos convexos relajados, basados en el problema de subestimadores convexos presentado en la Sección 3.4.

Formulación del modelo no convexo.

El modelo no convexo para determinar un diseño óptimo de la red de intercambio del Ejemplo 4.1 tiene como función objetivo minimizar el costo total de la red.

MODELO NO CONVEXO (NC-4.1)

$$\text{Min} \quad 270 \frac{q_1}{U_1 \Delta t_1} + 720 \frac{q_2}{U_2 \Delta t_2} + 240 \frac{q_3}{U_3 \Delta t_3} + 900 \frac{q_4}{U_4 \Delta t_4} \quad (4.8)$$

sujeto a:

BALANCES DE ENERGÍA POR INTERCAMBIADOR

$$\left. \begin{aligned} q_1 &= 5.555(t_1 - 395); \\ q_2 &= 3.125(t_2 - 398); \\ q_3 &= 5.555(575 - t_1); \\ q_3 &= 4.545(t_3 - 365); \\ q_4 &= 3.125(718 - t_2); \\ q_4 &= 3.571(t_4 - 358) \end{aligned} \right\} \quad (4.9)$$

BALANCES GLOBALES DE ENERGÍA PARA CADA CORRIENTE

$$\left. \begin{aligned} q_1 + q_2 &= 1000; \\ q_1 + q_3 &= 999.9; \\ q_2 + q_4 &= 1000 \end{aligned} \right\} \quad (4.10)$$

BALANCE DE MATERIA PARA EL MEZCLADOR

$$F_1 + F_2 = 10 \quad (4.11)$$

DIFERENCIA ARITMETICA DE TEMPERATURA

$$(4.12) \quad \left. \begin{aligned} \Delta t_1 &= (t_1 - 305) / 2 \\ \Delta t_2 &= (t_2 - 302) / 2 \\ \Delta t_3 &= (t_1 - t_3 + 210) / 2 \\ \Delta t_4 &= (t_2 - t_4 + 360) / 2 \end{aligned} \right\}$$

Cotas iniciales:

$$\begin{aligned} &405 \leq t_1 \leq 575; \quad 405 \leq t_2 \leq 718; \quad 365 \leq t_3 \leq 575; \quad 358 \leq t_4 \leq 718; \quad 0 \leq F_1 \leq 10; \quad 0 \leq F_2 \leq 10; \\ &0 \leq q_1 \leq 999.9; \quad 0 \leq q_2 \leq 1000; \quad 0 \leq q_3 \leq 954.45; \quad 0 \leq q_4 \leq 1000; \quad 5 \leq \Delta t_1 \leq 135; \quad 5 \leq \Delta t_2 \leq 208; \\ &5 \leq \Delta t_3 \leq 210; \quad 5 \leq \Delta t_4 \leq 360 \end{aligned}$$

Comentarios:

1) Observe que la función objetivo incluye cuatro términos fraccionales lineales derivados de la relación entre las cargas de los intercambiadores y la diferencia media aritmética de temperatura en cada intercambiador.

2) La región de búsqueda del modelo NC-4.1 es convexa, puesto que las restricciones son lineales.

Formulación del modelo convexo relajado.

Para garantizar el diseño óptimo global de una red de intercambio de calor, el algoritmo de ramificación y acotamiento como el presentado en la Sección 4.5, requiere de modelos convexos relajados, los cuales están basados en problemas de subestimadores convexos. El modelo convexo relajado se construye sustituyendo término fraccional lineal del modelo NC-4.1 por una nueva variable (z_{ij}) y se agregan desigualdades para acotar el valor de la nueva variable. A continuación se presentan dos modelos convexos relajados para determinar el diseño óptimo de la red de

intercambio de calor para el Ejemplo 4.1. La formulación C-4.1A utiliza los subestimadores desarrollados por Zamora (1997), mientras que la formulación C-4.1B utiliza los subestimadores desarrollados por Quesada y Grossmann (1993).

MODELO CONVEXO RELAJADO (C-4.1A)

$$\text{Min} \quad 270 \frac{z_{11}}{U_1} + 720 \frac{z_{22}}{U_2} + 240 \frac{z_{33}}{U_3} + 900 \frac{z_{44}}{U_4} \quad (4.13)$$

Sujeto a:

ECUACIONES (4.9) - (4-12)

ACOTAMIENTO DE LAS VARIABLES DE RELAJACION (Zamora, 1997):

$$\left. \begin{aligned} z_{11} &\geq \frac{1}{\Delta t_1} \left(\frac{q_1 + \sqrt{q_1^L q_1^U}}{\sqrt{q_1^L} + \sqrt{q_1^U}} \right)^2; & z_{22} &\geq \frac{1}{\Delta t_2} \left(\frac{q_2 + \sqrt{q_2^L q_2^U}}{\sqrt{q_2^L} + \sqrt{q_2^U}} \right)^2; \\ z_{33} &\geq \frac{1}{\Delta t_3} \left(\frac{q_3 + \sqrt{q_3^L q_3^U}}{\sqrt{q_3^L} + \sqrt{q_3^U}} \right)^2; & z_{44} &\geq \frac{1}{\Delta t_4} \left(\frac{q_4 + \sqrt{q_4^L q_4^U}}{\sqrt{q_4^L} + \sqrt{q_4^U}} \right)^2 \end{aligned} \right\} \quad (4.14)$$

Cotas iniciales:

$405 \leq t_1 \leq 575$; $405 \leq t_2 \leq 718$; $365 \leq t_3 \leq 575$; $358 \leq t_4 \leq 718$; $0 \leq F_1 \leq 10$; $0 \leq F_2 \leq 10$;
 $0 \leq q_1 \leq 999.9$; $0 \leq q_2 \leq 1000$; $0 \leq q_3 \leq 954.45$; $0 \leq q_4 \leq 1000$; $5 \leq \Delta t_1 \leq 135$; $5 \leq \Delta t_2 \leq 208$;
 $5 \leq \Delta t_3 \leq 210$; $5 \leq \Delta t_4 \leq 360$

MODELO CONVEXO RELAJADO (C-4.1B)

$$\text{Min} \quad 270 \frac{z_{11}}{U_1} + 720 \frac{z_{22}}{U_2} + 240 \frac{z_{33}}{U_3} + 900 \frac{z_{44}}{U_4} \quad (4.13)$$

Sujeto a:

ECUACIONES (4.9) - (4-12)

ACOTAMIENTO DE VARIABLES DE RELAJACION (Quesada y Grossmann, 1993):

$$\left. \begin{aligned} z_{11} &\geq \frac{q_1}{\Delta t_1^L} + q_1^U \left(\frac{1}{\Delta t_1} - \frac{1}{\Delta t_1^L} \right); & z_{11} &\geq \frac{q_1}{\Delta t_1^U} + q_1^L \left(\frac{1}{\Delta t_1} - \frac{1}{\Delta t_1^U} \right); \\ z_{22} &\geq \frac{q_2}{\Delta t_2^L} + q_2^U \left(\frac{1}{\Delta t_2} - \frac{1}{\Delta t_2^L} \right); & z_{22} &\geq \frac{q_2}{\Delta t_2^U} + q_2^L \left(\frac{1}{\Delta t_2} - \frac{1}{\Delta t_2^U} \right); \\ z_{33} &\geq \frac{q_3}{\Delta t_3^L} + q_3^U \left(\frac{1}{\Delta t_3} - \frac{1}{\Delta t_3^L} \right); & z_{33} &\geq \frac{q_3}{\Delta t_3^U} + q_3^L \left(\frac{1}{\Delta t_3} - \frac{1}{\Delta t_3^U} \right); \\ z_{44} &\geq \frac{q_4}{\Delta t_4^L} + q_4^U \left(\frac{1}{\Delta t_4} - \frac{1}{\Delta t_4^L} \right); & z_{44} &\geq \frac{q_4}{\Delta t_4^U} + q_4^L \left(\frac{1}{\Delta t_4} - \frac{1}{\Delta t_4^U} \right) \end{aligned} \right\} \quad (4.15)$$

Cotas iniciales:

$$\begin{aligned} 405 \leq t_1 \leq 575; & \quad 405 \leq t_2 \leq 718; \quad 365 \leq t_3 \leq 575; \quad 358 \leq t_4 \leq 718; \quad 0 \leq F_1 \leq 10; \quad 0 \leq F_2 \leq 10; \\ 0 \leq q_1 \leq 999.9; & \quad 0 \leq q_2 \leq 1000; \quad 0 \leq q_3 \leq 954.45; \quad 0 \leq q_4 \leq 1000; \quad 5 \leq \Delta t_1 \leq 135; \quad 5 \leq \Delta t_2 \leq 208; \\ 5 \leq \Delta t_3 \leq 210; & \quad 5 \leq \Delta t_4 \leq 360 \end{aligned}$$

Resultados.

La solución del modelo NC-4.1 proporcionó una cota superior inicial de \$36 163/año. Por otra parte, al resolver el modelo C-4.1A se obtuvo una cota inferior inicial de \$22018.22/año, mientras que al resolver el modelo C-4.1B se obtuvo una cota inferior inicial de \$23199.78/año. El diseño óptimo global para el Ejemplo 4.1 puede observarse en la Figura 4.6, cuyas características de la red son las siguientes:

$$\begin{aligned} t_1=571.0801 \text{ K}, \quad t_2=405 \text{ K}, \quad t_3=369.7909 \text{ K}, \quad t_4=631.9079 \text{ K}, \quad q_1=978.125 \text{ kW}, \quad q_2=21.875 \text{ kW}, \\ q_3=21.775 \text{ kW}, \quad q_4=78.125 \text{ kW}, \quad A_1= 73.521 \text{ m}^2, \quad A_2= 4.248 \text{ m}^2, \quad A_3= 0.106 \text{ m}^2, \quad A_4= 14.698 \text{ m}^2, \\ \Delta t_1=133.04 \text{ K}, \quad \Delta t_2=51.5 \text{ K}, \quad \Delta t_3=205.21 \text{ K}, \quad \Delta t_4=66.55 \text{ K}. \end{aligned}$$

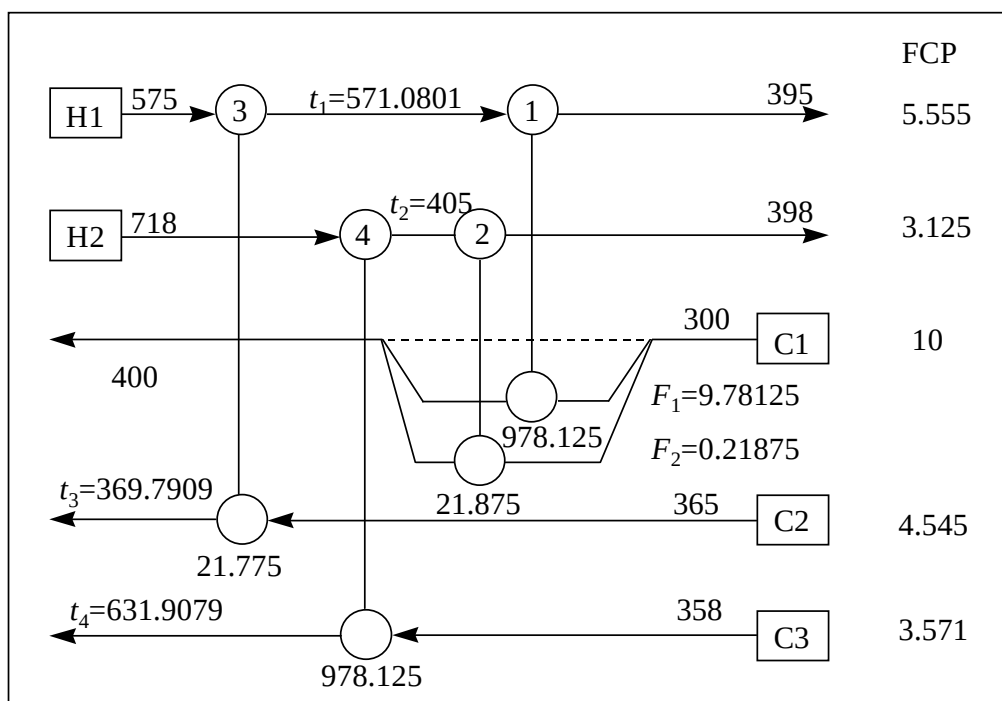


Figura 4.6 Diseño óptimo global para Ejemplo Ilustrativo 4.1

La Tabla 4.2 muestra los principales pasos del algoritmo de ramificación y acotamiento presentado en la Sección 4.5 que se ejecutan para determinar el diseño óptimo de la red de intercambio de calor para el Ejemplo 4.1. Las Tablas 4.3 y 4.4 muestran los resultados globales y los resultados nodo por nodo respectivamente, obtenidos al ejecutar el algoritmo de ramificación y acotamiento utilizando el modelo C-4.1A.

Por otra parte, las Tablas 4.5 y 4.6 presentan los resultados globales y los resultados nodo por nodo respectivamente, obtenidos al ejecutar el algoritmo de ramificación y acotamiento utilizando en este caso el modelo C-4.1B. Los diagramas de árbol obtenidos al ejecutar el algoritmo de ramificación y acotamiento con cada modelo se presentan en las Figuras 4.7 y 4.8.

Tabla 4.2 Estrategia aplicada al ejemplo 4.1

Estrategia	Fase 1	Paso 2	Paso 7	Paso 11
------------	--------	--------	--------	---------

S8	*		*	
----	---	--	---	--

Tabla 4.3. Resultados globales para el Ejemplo 4.1 con el modelo C-4.1A.

Iteración	Nodo	status	OLB	OUB	$\epsilon(\%)$	$ \Lambda $	Λ	Nodo prox.
1	0	bisección	22018	36163	39.11	2	1,2	1
2	1	bisección	30295	36163	16.23	3	2,3,4	2
3	2	-	39310	36163	-	2	3,4	3
4	3	bisección	32364	36163	10.51	3	4,5,6	4
5	4	-	43829	36163	-	2	5,6	5
6	5	bisección	33573	36163	7.16	3	6,7,8	6
7	6	-	40568	36163	-	2	7,8	7
8	7	partición	34308	36163	5.13	3	8,9,10	8
9	8	-	38119	36613	-	2	9,10	9
10	9	-	36163	36163	0.00	1	10	10
11	10	-	36163	36163	0.00	0	-	-

Tabla 4.4 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 4.1 con el modelo C-4.1A.

Nodo	padre	$LB(\Omega_p)$	$LB(\Omega)$	$UB(\Omega)$	V
0	-	-	22018	36163	q_2
1	0	22018	30295	36163	q_2
2	0	22018	39310	45086	-
3	1	30295	32364	36163	q_2
4	1	30295	43829	43829	-
5	3	32364	33573	36163	q_2
6	3	32364	40567	40567	-
7	5	33573	34308	36163	q_2
8	5	33573	38119	38119	-
9	7	34308	36163	36163	-
10	7	34308	36163	36163	-

Tabla 4.5 Resultados globales del Ejemplo 4.1 obtenidos con el modelo C-4.1B.

Iteración	Nodo	status	OLB	OUB	$\epsilon(\%)$	$ \Lambda $	Λ	Nodo prox.
1	0	bisección	23200	36163	35.85	2	1,2	1
2	1	-	-	36163	-	1	2	2
3	2	bisección	27690	36163	23.43	2	3,4	3
4	3	-	28374	36163	21.54	1	4	4
5	4	bisección	28900	36163	20.08	2	5,6	5
6	5	bisección	33029	36163	8.67	3	6,7,8	6
7	6	-	infactible	36163	-	2	7,8	7
8	7	bisección	34993	36163	3.24	3	8,9,10	8
9	8	-	43825	36163	-	2	9,10	9
10	9	bisección	36118	36163	1.24	3	10,11,12	10
11	10	-	40568	36163	-	2	11,12	11
12	11	-	37079	36163	-	1	12	12
13	12	partición	36118	36163	1.24	2	13,14	13
14	13	bisección	36132	36163	0.0857	3	14,15,16	14
15	14	bisección	36132	36163	0.0857	4	15,16,17,18	15
16	15	-	38119	36163	-	3	16,17,18	16
17	16	partición	36150	36163	0.0347	4	17,18,19,20	17
18	17	-	infactible	36613	-	3	18,19,20	18
19	18	partición	36150	36163	0.0347	4	19,20,21,22	19
20	19	-	36163	36163	0.00	3	20,21,22	20
21	20	-	36163	36163	0.00	2	21,22	21
22	21	-	36163	36163	0.00	1	22	22
23	22	-	36163	36163	0.00	0	-	-

Tabla 4.6 Resultados nodo por nodo del Ejemplo 4.1 con el modelo C-4.1B

nodo	padre	$LB(\Omega_p)$	$LB(\Omega)$	$UB(\Omega)$	V
0	-	-	23200	36163	q_4
1	0	23200	29948	46357	-
2	0	23200	27690	36163	q_4
3	1	27690	28374	43839	-
4	1	27690	28900	36163	q_2
5	3	28900	33029	36163	q_2
6	3	28900	infactible	-	-
7	5	33029	34993	36163	q_2
8	5	33029	43825	43830	-
9	7	34993	36118	36163	q_4
10	7	34993	40568	40568	-
11	9	36118	37079	38119	-
12	9	36118	36118	36163	q_4
13	12	36118	36132	36163	q_1
14	12	36118	36132	36163	q_1
15	13	36132	38119	38119	-
16	13	36132	36150	36163	q_1
17	14	36132	infactible	-	-
18	14	36132	36150	36163	q_1
19	16	36150	36163	36163	-
20	16	36150	36163	36163	-
21	18	36150	36163	36163	-
22	18	36150	36163	36163	-

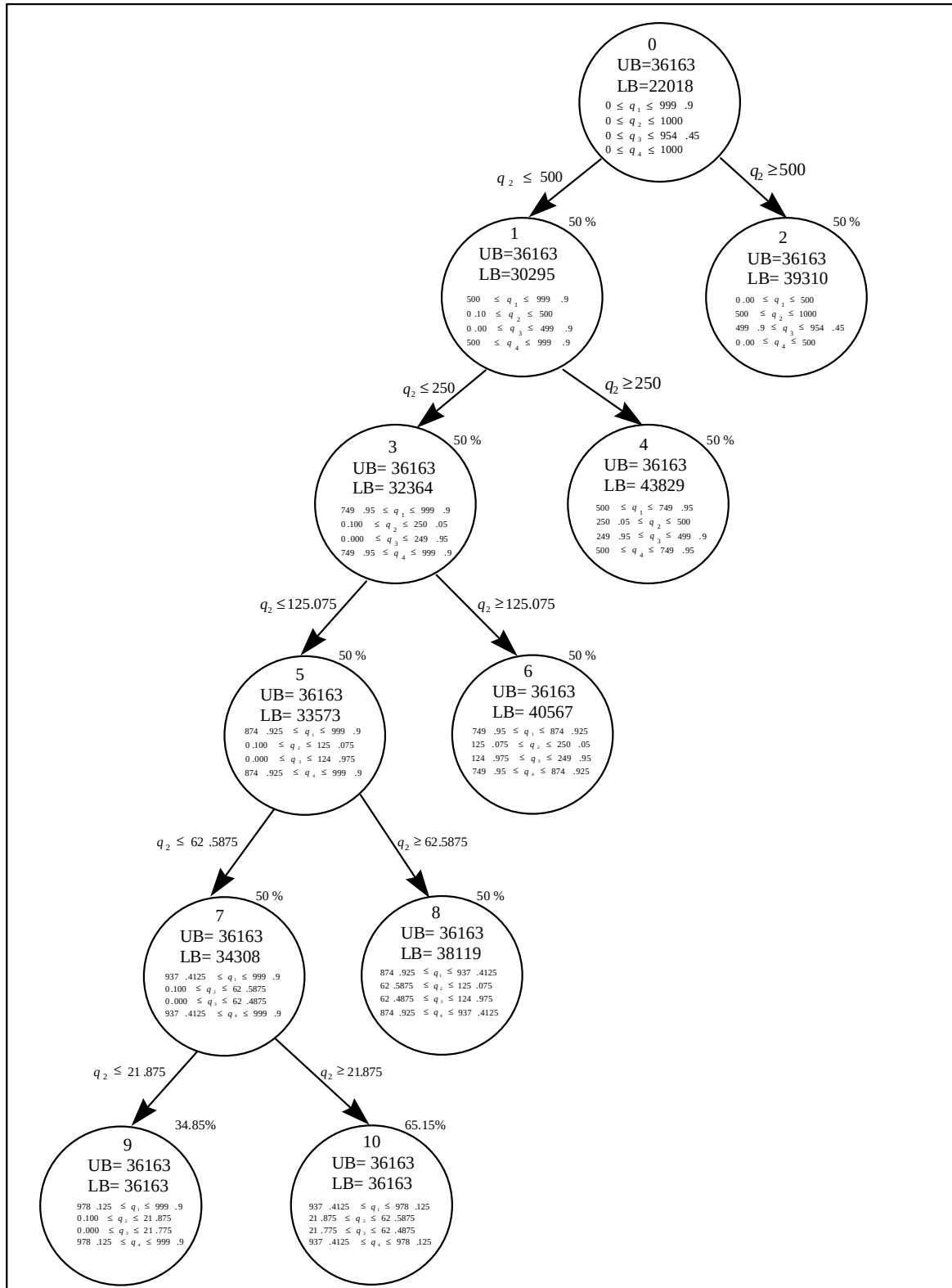


Figura 4.7 Diagrama de ramificación y acotamiento para la solución del Ejemplo 4.1 con el modelo C-4.1A.

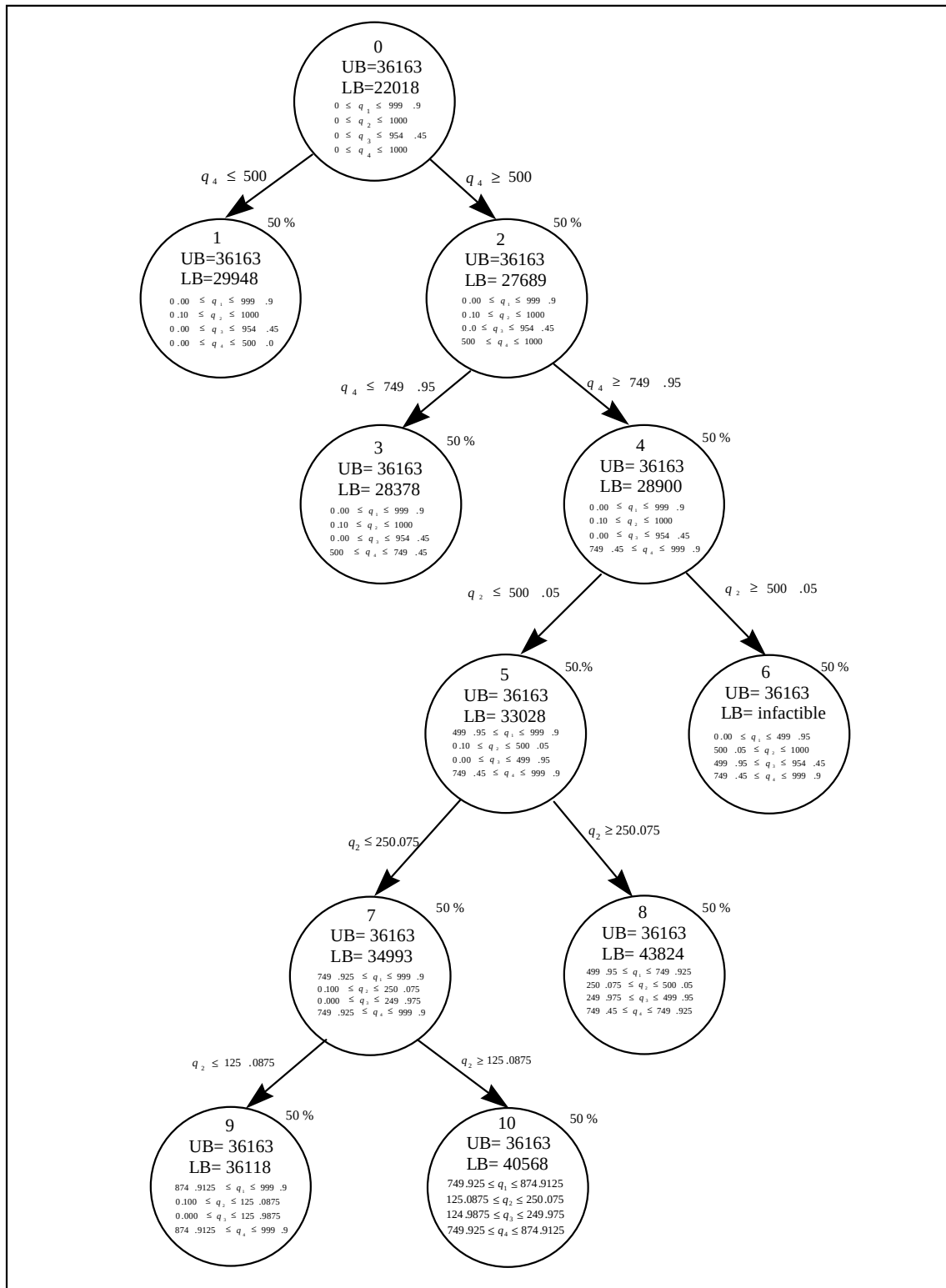


Figura 4.8 Diagrama de ramificación y acotamiento para la solución del Ejemplo 4.1 con el modelo C-4.1B.

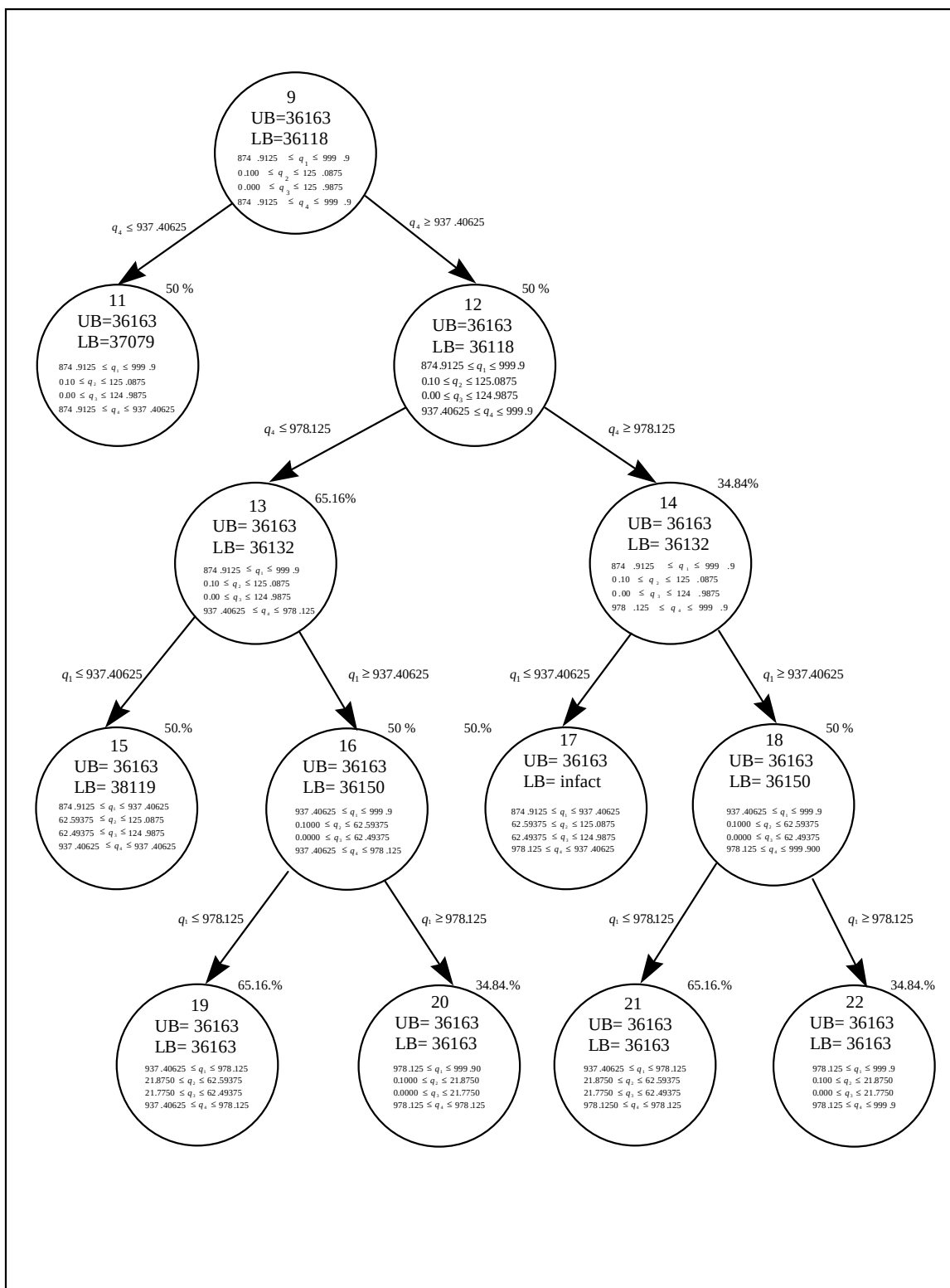


Figura 4.8 Continua

Discusión de resultados.

La ejecución del algoritmo de ramificación y acotamiento con ambos modelos convexos relajados dió como resultado el mismo diseño óptimo global para la red de intercambio de calor del Ejemplo 4.1. Se puede observar que el diseño óptimo se obtiene desde el primer nodo, sin embargo el algoritmo se detiene hasta demostrar que existe optimalidad global.

De acuerdo a los resultados presentados en la Tabla 4.4 se puede observar que al utilizar el modelo C-4.1A se realizó la partición únicamente sobre la carga térmica q_2 y se requirió el análisis de 10 nodos con un tiempo aproximado de 10 segundos para determinar el diseño óptimo global de la red de intercambio para el Ejemplo 4.1.

Por otra parte al ejecutar el algoritmo de ramificación y acotamiento con el modelo C-4.1B, la partición se realiza sobre las cargas térmicas q_1 , q_2 y q_4 . El número de nodos analizados en este caso fué de 22 nodos, aumentando por lo tanto el tiempo para determinar el diseño óptimo global de la red de intercambio.

En 1993 Quesada y Grossmann resolvieron este problema de diseño requiriendo un análisis de 5 nodos. Sin embargo resolvieron en forma adicional subproblemas de programación lineal, ya que realizaban un problema de minimización y otro de maximización por cada nodo incrementando de esta forma el tiempo de cómputo para determinar el diseño óptimo global de la red de intercambio de calor.

4.8 Ejemplo Ilustrativo 4.2. Red de intercambio de calor sin división de corrientes (Zamora y Grossmann, 1997)

Se considera el problema de diseño de la red de intercambio de calor sin división de corrientes que se muestra en la Figura 4.9. La información de las corrientes de proceso del Ejemplo 4.1 se dan en la Tabla 4.7. La solución del Ejemplo 4.1 se realiza utilizando un problema convexo relajado y el método de *ramificación y acotamiento* para redes de intercambio de calor presentado en la Sección 4.5.

Tabla 4.7 Información de las corrientes de proceso y costos para el ejemplo ilustrativo 4.2

Corriente	T_{in} (°C)	T_o (°C)	F (kW / °C)	h [kW/(m ² °C)]
H1	180	75	30	0.15
H2	240	60	40	0.10
C1	40	230	35	0.20
C2	120	300	20	0.10
CU	25	40	-	0.50
HU	325	325	-	2.00
Costo de intercambiadores (\$/año) = $15000 + 30 [A(m^2)]^{0.8}$				
Costo de enfriadores (\$/año) = $15000 + 30 [A(m^2)]^{0.8}$				
Costo de calentadores (\$/año) = $15000 + 60 [A(m^2)]^{0.8}$				
Costo de Serv. Aux. de enfriamiento (\$/año) = 10.00 [\$(kW-a)]				
Costo de Serv. Aux. de calentamiento (\$/año) = 110.0 [\$(kW-a)]				



La determinación del diseño óptimo global para la red de intercambio de calor del Ejemplo 4.2 requiere de un modelo matemático que tiene como suposiciones que los flujos de capacidades caloríficas y los coeficientes de transferencia de calor son constantes. Se utiliza la aproximación de Chen (1987) para determinar las fuerzas motrices de temperatura.

Modelo no Convexo (NC-4.2)

$$\begin{aligned}
 \text{Min} \quad & 30 \left(\frac{q_1}{U_1 \Delta t_1} \right)^{0.8} + 30 \left(\frac{q_2}{U_2 \Delta t_2} \right)^{0.8} + 30 \left(\frac{q_3}{U_3 \Delta t_3} \right)^{0.8} + 30 \left(\frac{q_4}{U_4 \Delta t_4} \right)^{0.8} \\
 & + 30 \left(\frac{q_5}{U_5 \Delta t_5} \right)^{0.8} + 60 \left(\frac{q_6}{U_6 \Delta t_6} \right)^{0.8} + 10q_{cu} + 110q_{hu} + 90000
 \end{aligned}
 \tag{4.16}$$

Sujeto a:

BALANCE S DE ENERGÍA EN LOS INTERCAMBIADORES:

$$\left. \begin{aligned}
 q_1 &= 40 (240 - t_1); \\
 q_1 &= 35 (230 - t_4); \\
 q_2 &= 40 (t_1 - t_2); \\
 q_2 &= 20 (t_6 - t_5); \\
 q_3 &= 30 (180 - t_3); \\
 q_3 &= 20 (t_5 - 120); \\
 q_4 &= 40 (t_2 - 60); \\
 q_4 &= 35 (t_4 - 40); \\
 q_5 &= 30 (t_3 - 75); \\
 q_6 &= 20 (300 - t_6)
 \end{aligned} \right\}
 \tag{4.17}$$

BALANCES GLOBALES DE ENERGÍA PARA CORRIENTE

$$\left. \begin{aligned}
 q_1 + q_2 + q_4 &= 7200; \\
 q_3 + q_5 &= 3150; \\
 q_1 + q_4 &= 6650; \\
 q_2 + q_3 + q_6 &= 3600
 \end{aligned} \right\}
 \tag{4.18}$$

DIFERENCIAS DE TEMPERATURAS EN EL LADO CALIENTE DE LOS INTERCAMBIADORES

$$\left. \begin{aligned} dt_{h1} &= 10; \\ dt_{h2} &= t_1 - t_6; \\ dt_{h3} &= 180 - t_3; \\ dt_{h4} &= t_2 - t_4; \\ dt_{h5} &= t_3 - 40; \\ dt_{h6} &= 25 \end{aligned} \right\}$$

(4.19)

DIFERENCIAS DE TEMPERATURAS EN EL LADO FRÍO DE LOS INERCAMBIADORES:

$$\left. \begin{aligned} dt_{c1} &= t_1 - t_4; \\ dt_{c2} &= t_2 - t_5; \\ dt_{c3} &= t_3 - 120; \\ dt_{c4} &= 20; \\ dt_{c5} &= 50; \\ dt_{c6} &= 325 - t_6 \end{aligned} \right\}$$

(4.20)

APROXIMACION DE CHEN PARA LA DMLT:

$$\left. \begin{aligned} \Delta t_1 &= [(dt_{h1})(dt_{c1})(dt_{h1} + dt_{c1})/2]^{1/3}; & \Delta t_2 &= [(dt_{h2})(dt_{c2})(dt_{h2} + dt_{c2})/2]^{1/3}; \\ \Delta t_3 &= [(dt_{h3})(dt_{c3})(dt_{h3} + dt_{c3})/2]^{1/3}; & \Delta t_4 &= [(dt_{h4})(dt_{c4})(dt_{h4} + dt_{c4})/2]^{1/3}; \\ \Delta t_5 &= [(dt_{h5})(dt_{c5})(dt_{h5} + dt_{c5})/2]^{1/3}; & \Delta t_6 &= [(dt_{h6})(dt_{c6})(dt_{h6} + dt_{c6})/2]^{1/3} \end{aligned} \right\}$$

(4.21)

Cotas iniciales:

$$\begin{aligned} 120 \leq t_1 \leq 240; & 120 \leq t_2 \leq 240; 120 \leq t_3 \leq 180; 40 \leq t_4 \leq 230; 120 \leq t_5 \leq 180; 120 \leq t_6 \leq 240; \\ 0 \leq q_1 \leq 6650; & 0 \leq q_2 \leq 2380; 0 \leq q_3 \leq 1180; 0 \leq t_4 \leq 6650; 0 \leq q_5 \leq 3150; 0 \leq q_6 \leq 3600; \\ 1 \leq \Delta t_1 \leq 59.50; & 1 \leq \Delta t_2 \leq 120; 1 \leq \Delta t_3 \leq 60; 1 \leq \Delta t_4 \leq 76; 1 \leq \Delta t_5 \leq 87; 1 \leq \Delta t_6 \leq 84 \end{aligned}$$

Enfoques de Solución.

El modelo NC-4.2 es no convexo porque incluye en la función objetivo seis términos fraccionales lineales elevados a un exponente fraccional. Para construir el modelo convexo relajado se utiliza el subestimador propuesto por Zamora (1997), el cual relaja a la función de costo de área con el exponente fraccional. También se relaja la aproximación de Chen.

Modelo convexo relajado (C-4.2)

$$\begin{aligned}
 \text{Min} \quad & 30 \left(\frac{\theta_1^{9/4}}{U_1 \Delta t_1} \right)^{4/3} + 30 \left(\frac{\theta_2^{9/4}}{U_2 \Delta t_2} \right)^{4/3} + 30 \left(\frac{\theta_3^{9/4}}{U_3 \Delta t_3} \right)^{4/3} + 30 \left(\frac{\theta_4^{9/4}}{U_4 \Delta t_4} \right)^{4/3} \\
 & + 30 \left(\frac{\theta_5^{9/4}}{U_5 \Delta t_5} \right)^{4/3} + 60 \left(\frac{\theta_6^{9/4}}{U_6 \Delta t_6} \right)^{4/3} + 10 \, qcu + 110 \, qhu + 90000
 \end{aligned}
 \tag{4.22}$$

Sujeto a:

ECUACIONES (4.17) - (4.18)

RELAJACIÓN PARA LA APROXIMACION DE CHEN:

$$\left. \begin{aligned}
 \Delta t_1 &\leq \left[(dt_{h1})(dt_{c1})(dt_{h1} + dt_{c1}) / 2 \right]^{1/3}; & \Delta t_2 &\leq \left[(dt_{h2})(dt_{c2})(dt_{h2} + dt_{c2}) / 2 \right]^{1/3}; \\
 \Delta t_3 &\leq \left[(dt_{h3})(dt_{c3})(dt_{h3} + dt_{c3}) / 2 \right]^{1/3}; & \Delta t_4 &\leq \left[(dt_{h4})(dt_{c4})(dt_{h4} + dt_{c4}) / 2 \right]^{1/3}; \\
 \Delta t_5 &\leq \left[(dt_{h5})(dt_{c5})(dt_{h5} + dt_{c5}) / 2 \right]^{1/3}; & \Delta t_6 &\leq \left[(dt_{h6})(dt_{c6})(dt_{h6} + dt_{c6}) / 2 \right]^{1/3}
 \end{aligned} \right\}
 \tag{4.22}$$

ACOTAMIENTO DE VARIABLES DE RELAJACION:

$$\left. \begin{aligned}
 \theta_1 &\geq (q_1^L)^{4/3} + \frac{(q_1^U)^{4/3} - (q_1^L)^{4/3}}{(q_1^U - q_1^L)} (q_1 - q_1^L); \theta_2 \geq (q_2^L)^{4/3} + \frac{(q_2^U)^{4/3} - (q_2^L)^{4/3}}{(q_2^U - q_2^L)} (q_2 - q_2^L); \\
 \theta_3 &\geq (q_3^L)^{4/3} + \frac{(q_3^U)^{4/3} - (q_3^L)^{4/3}}{(q_3^U - q_3^L)} (q_3 - q_3^L); \theta_4 \geq (q_4^L)^{4/3} + \frac{(q_4^U)^{4/3} - (q_4^L)^{4/3}}{(q_4^U - q_4^L)} (q_4 - q_4^L); \\
 \theta_5 &\geq (q_5^L)^{4/3} + \frac{(q_5^U)^{4/3} - (q_5^L)^{4/3}}{(q_5^U - q_5^L)} (q_5 - q_5^L); \theta_6 \geq (q_6^L)^{4/3} + \frac{(q_6^U)^{4/3} - (q_6^L)^{4/3}}{(q_6^U - q_6^L)} (q_6 - q_6^L)
 \end{aligned} \right\}$$

(4.23)

Cotas iniciales:

$$\begin{aligned}
 120 \leq t_1 \leq 240; \quad 120 \leq t_2 \leq 240; \quad 120 \leq t_3 \leq 180; \quad 40 \leq t_4 \leq 230; \quad 120 \leq t_5 \leq 180; \quad 120 \leq t_6 \leq 240; \\
 0 \leq q_1 \leq 6650; \quad 0 \leq q_2 \leq 2380; \quad 0 \leq q_3 \leq 1180; \quad 0 \leq t_4 \leq 6650; \quad 0 \leq q_5 \leq 3150; \quad 0 \leq q_6 \leq 3600; \\
 1 \leq \Delta t_1 \leq 59.50; \quad 1 \leq \Delta t_2 \leq 120; \quad 1 \leq \Delta t_3 \leq 60; \quad 1 \leq \Delta t_4 \leq 76; \quad 1 \leq \Delta t_5 \leq 87; \quad 1 \leq \Delta t_6 \leq 84
 \end{aligned}$$

Comentarios:

- 1.- Los términos no convexos del modelo NC-4.2 son los términos fraccionales lineales.
- 2.- Para resolver este problema se toma a las cargas térmicas como conjunto de variables de partición.

Estrategia de reducción por factibilidad para el ejemplo 4.2.

Para realizar una búsqueda más eficiente del diseño óptimo global para el Ejemplo 4.2 se utiliza la técnica de reducción por factibilidad expresiones se encuentran en el Apéndice 4. Esta técnica explota la estructura de la red del modelo NC-4.2 para establecer relaciones (pueden ser relaciones entre cargas y/o entre temperaturas) que permiten reducir la región de búsqueda disminuyendo de esta forma el número de nodos analizados y el tiempo de cómputo.

Resultados para el Ejemplo 4.2.

Al resolver el modelo NC-4.2 se obtuvo una cota superior inicial de \$422 160.71/año y una cota inferior de \$413 380.77/año obtenida con el modelo C-4.2. El diseño óptimo global para el Ejemplo 4.2 se muestra en la Figura 4.10 y las características de la red son las siguientes:

Costo de red = \$ 422 160.71/año; $A_1=1749.668 \text{ m}^2$; $A_2=1539.838 \text{ m}^2$; $A_3=1378.932 \text{ m}^2$; $A_4=11612.391 \text{ m}^2$; $A_5=243.545 \text{ m}^2$; $A_6=38.147 \text{ m}^2$; $q_1=1446.902 \text{ kW}$; $q_2=550.00 \text{ kW}$; $q_3=1078.071 \text{ kW}$; $q_4=5203.098 \text{ kW}$; $q_5=2071.929 \text{ kW}$; $q_6=1971.929 \text{ kW}$; $\Delta t_1=12.404 \text{ }^\circ\text{C}$; $\Delta t_2=7.144 \text{ }^\circ\text{C}$; $\Delta t_3=13.030 \text{ }^\circ\text{C}$; $\Delta t_4=6.721 \text{ }^\circ\text{C}$; $\Delta t_5=73.731 \text{ }^\circ\text{C}$; $\Delta t_6 = 61.231 \text{ }^\circ\text{C}$;

La Figura 4.11 muestra el diseño óptimo global para el Ejemplo 4.2 obtenida por Zamora (1997) utilizando como fuerza motriz a la diferencia media logarítmica de temperatura.

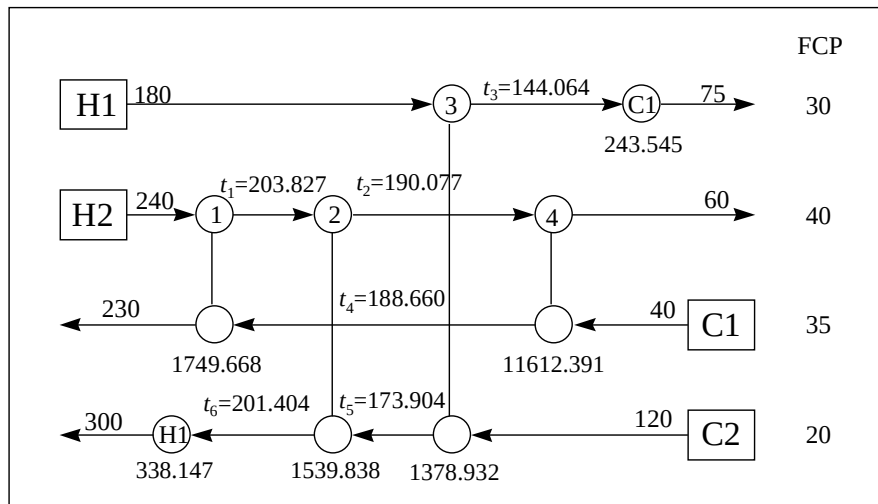


Figura 4.10 Diseño óptimo global para el Ejemplo 4.2 (\$422160.71/ año).

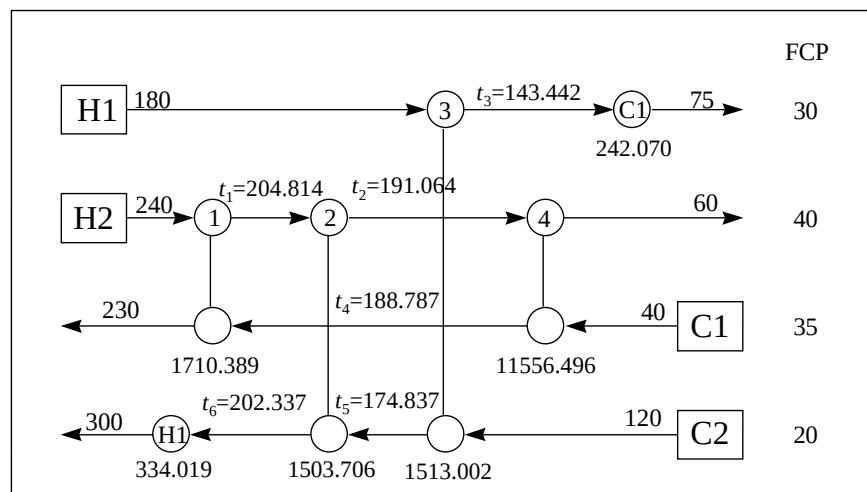


Figura 4.11 Diseño óptimo global utilizando DMLT (\$419 978.82/ año; Zamora, 1997).

Las Tablas 4.8 y 4.9 muestran los resultados globales y resultados nodo por nodo obtenidos al ejecutar el algoritmo de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 4.2. El diagrama de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 4.2 se muestra en la Figura 4.12.

Tabla 4.8 Resultados globales para el Ejemplo 4.2.

i	Nodo	status	OLB	OUB	$\epsilon(\%)$	$ \Lambda $	Λ	Nodo prox.
1	0	P	$-\infty$	422160.71	-	2	1,2	1
2	1	B	413380.77	422160.71	2.08	3	2,3,4	2
3	2	B	413380.77	422160.71	2.08	4	3,4,5,6	5
4	5	-	420675.11	422160.71	0.352	3	3,4,6	6
5	6	B	420675.11	422160.71	0.352	4	3,4,7,8	3
6	3	-	420887.61	422160.71	0.302	3	4,7,8	4
7	4	B	420887.61	422160.71	0.302	4	7,8,9,10	7
8	7	-	421884.88	422160.71	0.0654	3	8,9,10	8
9	8	B	421884.88	422160.71	0.0654	4	9,10,11,12	9
10	9	-	421889.75	422160.71	0.0642	3	10,11,12	10
11	10	P	421889.75	422160.71	0.0642	4	11,12,13,14	11
12	11	-	422063.34	422160.71	0.0231	3	12,13,14	12

13	12	P	422063.34	422160.71	0.0231	4	13,14,15,16	13
14	13	P	422073.01	422160.71	0.0208	5	14,15,16,17,18	14
15	14	B	422073.01	422160.71	0.0208	6	15,16,17,18,19,20	15
16	15	B	422087.11	422160.71	0.0174	7	16,17,18,19,20,21,22	16
17	16	-	422087.11	422160.71	0.0174	6	17,18,19,20,21,22	21
18	21	P	422134.31	422160.71	0.00625	7	17,18,19,20,22,23,24	22
19	22	-	422134.31	422160.71	0.00625	6	17,18,19,20,23,24	17
20	17	-	422134.63	422160.71	0.00618	5	18,19,20,23,24	18
21	18	-	422134.63	422160.71	0.00618	4	19,20,23,24	23
22	23	-	422141.46	422160.71	0.00456	3	19,20,24	24
23	24	-	422141.46	422160.71	0.00456	2	19,20	19
24	19	-	422159.23	422160.71	0.000606	1	20	20
25	20	-	422159.23	422160.71	0.000606	0	-	-

Comentarios:

La letra B presentada en la Tabla 4.8 indica que se realiza una bisección sobre el dominio de la variable de partición seleccionada, mientras que la letra P indica que se realiza una partición en el punto focal determinado por la solución del modelo no convexo.

Tabla 4.9 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 4.2

nodo	padre	LB(Ω_p)	LB(Ω)	UB(Ω)	V
0	-	$-\infty$	413380.77	422160.71	q_1
1	0	413380.77	420887.61	422160.71	q_3
2	0	413380.77	420675.11	422160.71	q_3
3	1	420887.61	466922.40	-	-
4	1	420887.61	421889.75	422160.71	q_3
5	2	420675.11	452831.66	-	-
6	2	420675.11	421884.88	422160.71	q_3
7	6	421884.88	429309.10	infactible	-
8	6	421884.88	422063.34	422160.71	q_4

Fija

9	4	421889.75	435725.47	infactible	-
10	4	421889.75	422073.01	422160.71	q_3
11	8	422063.34	-	-	-
12	8	422063.34	422087.11	422160.71	q_3
13	10	422073.01	422134.63	422160.71	q_6
14	10	422073.01	422159.23	422160.71	q_1
15	12	422087.11	422134.31	422160.71	q_1
16	12	422087.11	422157.80	422160.71	-
17	13	422134.63	-	-	-
18	13	422134.63	422160.52	422160.71	-
19	14	422159.23	-	-	-
20	14	422159.23	422160.29	422160.71	-
21	15	422134.31	422141.46	422160.71	-
22	15	422134.31	-	-	-
23	21	422141.46	infactible	infactible	-
24	21	422141.46	422156.88	infactible	-

Comentarios:

La letra V indica la variable sobre la que se realizó la partición.

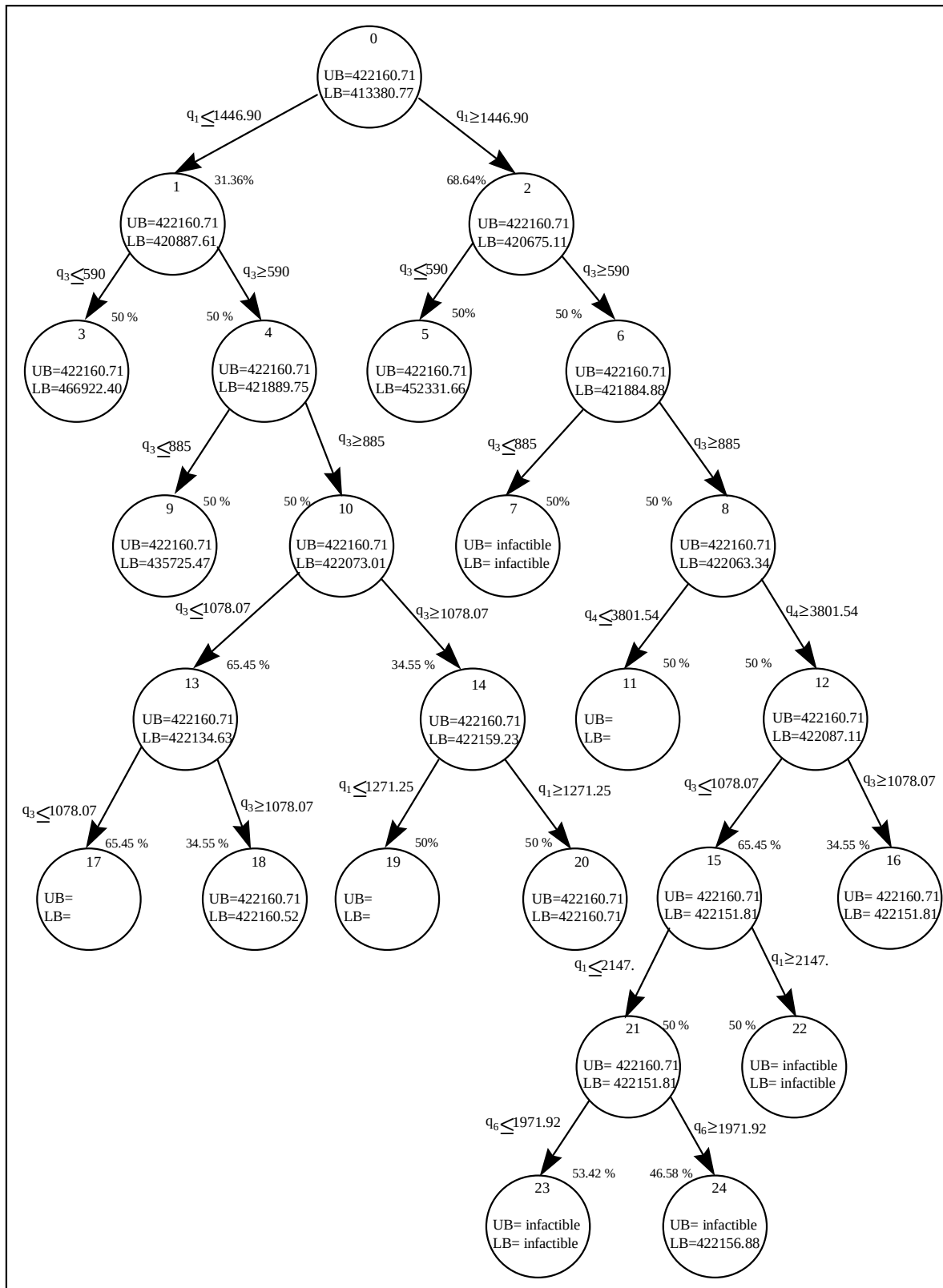


Figura 4.12 Diagrama de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 4.2

Discusión de resultados.

Debido a que la aproximación de Chen (1987) subestima a la DMLT el diseño obtenido al resolver el Ejemplo 4.2 presenta un costo mayor que el obtenido por Zamora (1997), sin embargo la bondad de esta aproximación radica en que cuando las diferencias entre el lado caliente y el lado frío de los intercambiadores son iguales proporciona el valor exacto de la fuerza motriz evitando la indeterminación (división entre cero) que se tiene al utilizar la DMLT.

En el árbol de ramificación y acotamiento puede apreciarse que en los nodos 11, 17 y 19 no se determinan cotas debido a que al realizar la reducción por factibilidad en dichos nodos ocurre un cruzamiento de cotas para algunas variables incluidas en el modelo utilizado para resolver el Ejemplo 4.2.

Se debe apreciar que el diseño óptimo global para la red de intercambio de calor del Ejemplo 4.2 se determinó desde el nodo inicial, sin embargo el algoritmo se ejecuta hasta garantizar la optimalidad global en el diseño encontrado.

La aplicación de la técnica de reducción basada en factibilidad reduce el número de nodos analizados en el árbol de ramificación y acotamiento. Para el Ejemplo 4.2 se requirió un análisis de 34 nodos con un tiempo de cómputo de 30 segundos aproximadamente. En caso de no utilizar la técnica de reducción basada en factibilidad, el número de nodos analizados se incrementa a 86 nodos.

Capítulo 5

AVANCES EN LA OPTIMIZACION GLOBAL DE REDES DE INTERCAMBIO DE CALOR.

5.1 Introducción.

Aún existen interrogantes en el campo de la optimización global de redes de intercambio de calor, por ejemplo es necesario desarrollar nuevos estimadores y reglas de partición que mejoren el desempeño del algoritmo de ramificación y acotamiento presentado en el Capítulo 3. Ya que los estimadores presentados en la literatura generalmente funcionan bien, pero en ciertos casos las cotas que proporcionan para la subestimación de la función de costo no son muy justas, por lo que el número de nodos requeridos para determinar el diseño óptimo global de la red de intercambio puede ser muy grande. En este capítulo se presentan algunas aportaciones a la optimización global de redes de intercambio de calor.

La Sección 5.2 muestra el impacto que tiene la selección del conjunto de variables de partición en la optimización global de redes de intercambio de calor. La Sección 5.3 presenta un nuevo subestimador convexo para el área de un intercambiador de calor y se ilustra el desempeño que tiene el nuevo subestimador con un ejemplo de diseño para una red de intercambio de calor.

5.2 Ejemplo Ilustrativo 5.1 Red de intercambio de calor (Floudas *et al.*, 1986)

Considere el problema del diseño óptimo global para la red de intercambio calor que se muestra en la Figura 5.1. La red de intercambio consiste de una corriente caliente y dos corrientes frías y la información del costo de los intercambiadores de calor y las propiedades de las corrientes de proceso se dan en la Tabla 5.1. Observe que las cargas térmicas de los equipos están dadas, sin embargo para obtener el diseño óptimo de red es necesario determinar la distribución de áreas de los equipos, así como las temperaturas intermedias y los flujos. Se consideran tres conjuntos de variables de partición para determinar el diseño óptimo global de la red de intercambio de calor: i) temperaturas; ii) flujos; y iii) temperaturas- flujos. En este Ejemplo Ilustrativo se estudia el desempeño que juega la selección del conjunto de variables de partición.

Tabla 5.1 Información de las corrientes de proceso y costos para el Ejemplo 5.1

Corriente	$T_{in} (K)$	$T_{out} (K)$	$FC_p \left(\frac{kW}{K} \right)$	$h \left(\frac{kW}{m^2 K} \right)$
H1	440	350	22	2
C1	349	430	20	2
C2	320	368	7.5	0.667
S	500	500		
CW	300	320		

Costo de intercambiadores de calor = $C = 1300 A^{0.6} (\$/año); A(m^2)$

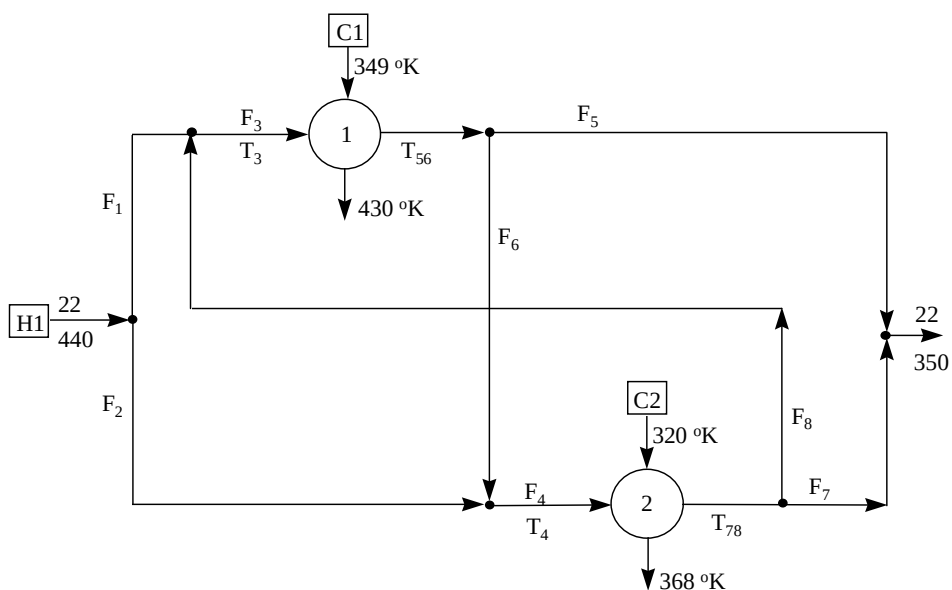


Figura 5.1 Estructura de la red para el Ejemplo 5.1

Formulación del modelo matemático no convexo.

El modelo matemático tiene como objetivo minimizar el costo total de la red y debe satisfacer como restricciones: i) los balances de energía para las corrientes fría y caliente en cada intercambiador; ii) los balances de energía para cada mezclador; iii) los balances de materia para divisores y mezcladores. Se utiliza la diferencia media logarítmica de temperatura (DMLT) para determinar la fuerza motriz. También se incluye la ecuación de transferencia de calor en cada intercambiador.

MODELO NC-5.1

$$\text{Min. } 1300 \left(\frac{1620}{U_1 \Delta t_1} \right)^{0.6} + 1300 \left(\frac{360}{U_2 \Delta t_2} \right)^{0.6} \quad (5.1)$$

Sujeto a:

BALANCES DE ENERGÍA EN INTERCAMBIADORES

$$\left. \begin{array}{l} F_3 (t_3 - t_{56}) = 1620; \\ F_4 (t_4 - t_{78}) = 360 \end{array} \right\} \quad (5.2)$$

BALANCES DE ENERGÍA EN MEZCLADORES

$$\left. \begin{array}{l} 440F_1 + t_{78}F_8 - t_3F_3 = 0; \\ 440F_2 + t_{56}F_6 - t_4F_4 = 0; \\ t_{56}F_5 + t_{78}F_7 - 7700 = 0 \end{array} \right\} \quad (5.3)$$

BALANCES DE MASA EN MEZCLADORES

$$\left. \begin{array}{l} F_1 + F_8 - F_3 = 0; \\ F_2 + F_6 - F_4 = 0; \\ F_5 + F_7 - 22 = 0 \end{array} \right\} \quad (5.4)$$

BALANCES DE MASA EN DIVISORES

$$\left. \begin{array}{l} F_1 + F_2 = 22; \\ F_3 - F_5 - F_6 = 0; \\ F_4 - F_7 - F_8 = 0 \end{array} \right\} \quad (5.5)$$

DIFERENCIAS DE TEMPERATURA

LADO CALIENTE

$$\left. \begin{array}{l} dt_{h1} = t_3 - 430; \\ dt_{h2} = t_4 - 368 \end{array} \right\} \quad (5.6)$$

LADO FRIO

$$\left. \begin{array}{l} dt_{c1} = t_{56} - 349; \\ dt_{c2} = t_{78} - 320 \end{array} \right\} \quad (5.7)$$

DIFERENCIA MEDIA LOGARITMICA DE TEMPERATURA

$$\Delta t_1 = \frac{dt_{h1} - dt_{c1}}{\ln \left(\frac{dt_{h1}}{dt_{c1}} \right)}; \quad \Delta t_2 = \frac{dt_{h2} - dt_{c2}}{\ln \left(\frac{dt_{h2}}{dt_{c2}} \right)} \quad (5.8)$$

Cotas iniciales:

$$430 \leq t_3 \leq 440; 378 \leq t_4 \leq 440; 330 \leq t_{56} \leq 440; 330 \leq t_{78} \leq 440; 10 \leq \Delta t_1 \leq 36.68; \\ 10 \leq \Delta t_2 \leq 93.97; 0 \leq F_1, F_2, \dots, F_8 \leq 22$$

Comentarios:

1. La función objetivo (Ec. 5.1) del modelo NC-5.1 es convexa, tal como lo demostraron Floudas y Ciric (1989). Otra demostración alternativa de que la función objetivo en (5.1) es convexa, se presenta en el Apéndice 5.
2. El modelo NC-5.1 es no convexo porque contiene términos bilineales en los balances de energía en intercambiadores (Ec. 5.2) y en mezcladores (Ec. 5.3). Además, las ecuaciones que definen a la diferencia media logarítmica de temperatura (Ec. 5.8) son también no convexas.

Enfoque de solución.

El modelo convexo relajado se obtiene relajando los términos bilineales (producto entre flujos y temperaturas, Ft) del modelo NC-5.1 que aparecen en las Ecs. (5.2) y (5.3). Para relajar estos términos no convexas se utilizan los estimadores de McCormick (1976) y de Al-Khayyal y Falk (1983). En este modelo se incluye una relajación de la diferencia media aritmética de temperatura (Ec. 5.12) que permite regular en forma eficiente los valores que toma la fuerza motriz cuando los lados caliente y frío del intercambiador de calor son iguales.

MODELO C-5.1

$$\text{Min. } 1300 \left(\frac{1620}{U_1 \Delta t_1} \right)^{0.6} + 1300 \left(\frac{360}{U_2 \Delta t_2} \right)^{0.6} \quad (5.1)$$

Sujeto a:

ECUACIONES (5.4 - 5.7)

RELAJACIÓN DE LOS TERMINOS BILINEALES:

$$\left. \begin{array}{l} y_{33} - y_{356} = 1620; \\ y_{44} - y_{478} = 360 \end{array} \right\} \quad (5.9)$$

$$\begin{array}{l} 440F_1 + y_{878} - y_{33} = 0 \\ 440F_2 + y_{656} - y_{44} = 0 \\ y_{556} + y_{778} - 7700 = 0 \end{array}$$

(5.10)

DIFERENCIA MEDIA LOGARITMICA DE TEMPERATURA

$$\Delta t_1 \leq \frac{dt_{h1} - dt_{c1}}{\ln\left(\frac{dt_{h1}}{dt_{c1}}\right)}; \quad \Delta t_2 \leq \frac{dt_{h2} - dt_{c2}}{\ln\left(\frac{dt_{h2}}{dt_{c2}}\right)} \quad (5.11)$$

DIFERENCIA MEDIA ARITMETICA DE TEMPERATURA

$$\Delta t_1 \leq \frac{dt_{h1} + dt_{c1}}{2}; \quad \Delta t_2 \leq \frac{dt_{h2} + dt_{c2}}{2} \quad (5.12)$$

ACOTAMIENTO DE VARIABLES DE RELAJACIÓN:

$$\left. \begin{aligned} y_{33} &\geq t_3^L F_3 + F_3^L t_3 - F_3^L t_3^L; \\ y_{33} &\geq t_3^U F_3 + F_3^U t_3 - F_3^U t_3^U; \\ y_{33} &\leq t_3^L F_3 + F_3^U t_3 - F_3^U t_3^L; \\ y_{33} &\leq t_3^U F_3 + F_3^L t_3 - F_3^L t_3^U; \end{aligned} \right\} \quad (5.13) \quad \left. \begin{aligned} y_{44} &\geq t_4^L F_4 + F_4^L t_4 - F_4^L t_4^L; \\ y_{44} &\geq t_4^U F_4 + F_4^U t_4 - F_4^U t_4^U; \\ y_{44} &\leq t_4^L F_4 + F_4^U t_4 - F_4^U t_4^L; \\ y_{44} &\leq t_4^U F_4 + F_4^L t_4 - F_4^L t_4^U; \end{aligned} \right\}$$

(5.14)

$$\left. \begin{aligned} y_{356} &\geq t_{56}^L F_3 + F_3^L t_{56} - F_3^L t_{56}^L; \\ y_{356} &\geq t_{56}^U F_3 + F_3^U t_{56} - F_3^U t_{56}^U; \\ y_{356} &\leq t_{56}^L F_3 + F_3^U t_{56} - F_3^U t_{56}^L; \\ y_{356} &\leq t_{56}^U F_3 + F_3^L t_{56} - F_3^L t_{56}^U; \end{aligned} \right\} \quad (5.15) \quad \left. \begin{aligned} y_{478} &\geq t_{78}^L F_4 + F_4^L t_{78} - F_4^L t_{78}^L; \\ y_{478} &\geq t_{78}^U F_4 + F_4^U t_{78} - F_4^U t_{78}^U; \\ y_{478} &\leq t_{78}^L F_4 + F_4^U t_{78} - F_4^U t_{78}^L; \\ y_{478} &\leq t_{78}^U F_4 + F_4^L t_{78} - F_4^L t_{78}^U; \end{aligned} \right\}$$

(5.16)

$$\left. \begin{aligned} y_{656} &\geq t_{56}^L F_6 + F_6^L t_{56} - F_6^L t_{56}^L; \\ y_{656} &\geq t_{56}^U F_6 + F_6^U t_{56} - F_6^U t_{56}^U; \\ y_{656} &\leq t_{56}^L F_6 + F_6^U t_{56} - F_6^U t_{56}^L; \\ y_{656} &\leq t_{56}^U F_6 + F_6^L t_{56} - F_6^L t_{56}^U; \end{aligned} \right\} \quad (5.17) \quad \left. \begin{aligned} y_{878} &\geq t_{78}^L F_8 + F_8^L t_{78} - F_8^L t_{78}^L; \\ y_{878} &\geq t_{78}^U F_8 + F_8^U t_{78} - F_8^U t_{78}^U; \\ y_{878} &\leq t_{78}^L F_8 + F_8^U t_{78} - F_8^U t_{78}^L; \\ y_{878} &\leq t_{78}^U F_8 + F_8^L t_{78} - F_8^L t_{78}^U; \end{aligned} \right\}$$

(5.18)

$$\left. \begin{aligned} y_{556} &\geq t_{56}^L F_5 + F_5^L t_{56} - F_5^L t_{56}^L; \\ y_{556} &\geq t_{56}^U F_5 + F_5^U t_{56} - F_5^U t_{56}^U; \\ y_{556} &\leq t_{56}^L F_5 + F_5^U t_{56} - F_5^U t_{56}^L; \\ y_{556} &\leq t_{56}^U F_5 + F_5^L t_{56} - F_5^L t_{56}^U; \end{aligned} \right\} \quad (5.19) \quad \left. \begin{aligned} y_{778} &\geq t_{78}^L F_7 + F_7^L t_{78} - F_7^L t_{78}^L; \\ y_{778} &\geq t_{78}^U F_7 + F_7^U t_{78} - F_7^U t_{78}^U; \\ y_{778} &\leq t_{78}^L F_7 + F_7^U t_{78} - F_7^U t_{78}^L; \\ y_{778} &\leq t_{78}^U F_7 + F_7^L t_{78} - F_7^L t_{78}^U; \end{aligned} \right\}$$

(5.20)

Cotas iniciales:

$$430 \leq t_3 \leq 440; 378 \leq t_4 \leq 440; 330 \leq t_{56} \leq 440; 330 \leq t_{78} \leq 440; 10 \leq \Delta t_1 \leq 36.68; \\ 10 \leq \Delta t_2 \leq 93.97; 0 \leq F_1, F_2, \dots, F_8 \leq 22$$

Comentarios:

1.- Zamora (1997) probó que la diferencia media logarítmica de temperatura, DMLT, se puede relajar por medio de las desigualdades convexas dadas por la Ec. 5.11 del modelo C-5.1.

2.- El modelo C-5-1 incluye en su formulación desigualdades en términos de la diferencia media aritmética (Ec. 5.12) puesto que se ha comprobado que no afecta al desempeño del algoritmo y proporciona valores exactos cuando el lado caliente y el lado frío de un intercambiador son iguales.

3.- El número de ecuaciones del modelo C-5.1 es mayor al del modelo NC-5.1, puesto que cada término no convexo se sustituye por una nueva variable e implica agregar nuevas restricciones para acotar el valor de dichas variables y de esta forma se incrementa el número de ecuaciones.

Resultados.

Para determinar el diseño óptimo global de la red de intercambio de calor del Ejemplo 5.1 se utilizaron tres conjuntos de variables de partición: i) temperaturas; ii) Flujos; y iii) Temperaturas – Flujos. Para realizar una búsqueda más eficiente del diseño óptimo global de la red de intercambio se implementó la técnica de reducción por factibilidad cuyas relaciones se presentan en el Apéndice 5.

El diseño óptimo global para la red de intercambio de calor del Ejemplo 5.1 se muestra en la Figura 5.2. Las características para el diseño óptimo global del Ejemplo 5.1 son las siguientes:

Costo = \$42 181/año

$t_3=440$ K; $t_4= 378.8809$ K; $t_{56}= 359$ K; $t_{78}= 334.7010$ K; $A_1= 162$ m²; $A_2= 56.7136$ m²;

$F_1 = 20 \text{ kW/K}$; $F_2 = 2 \text{ kW/K}$; $F_3 = 20 \text{ kW/K}$; $F_4 = 8.1485 \text{ kW/K}$; $F_5 = 13.8515 \text{ kW/K}$;
 $F_6 = 6.1485 \text{ kW/K}$; $F_7 = 8.1485 \text{ kW/K}$; $F_8 = 0.0 \text{ kW/K}$

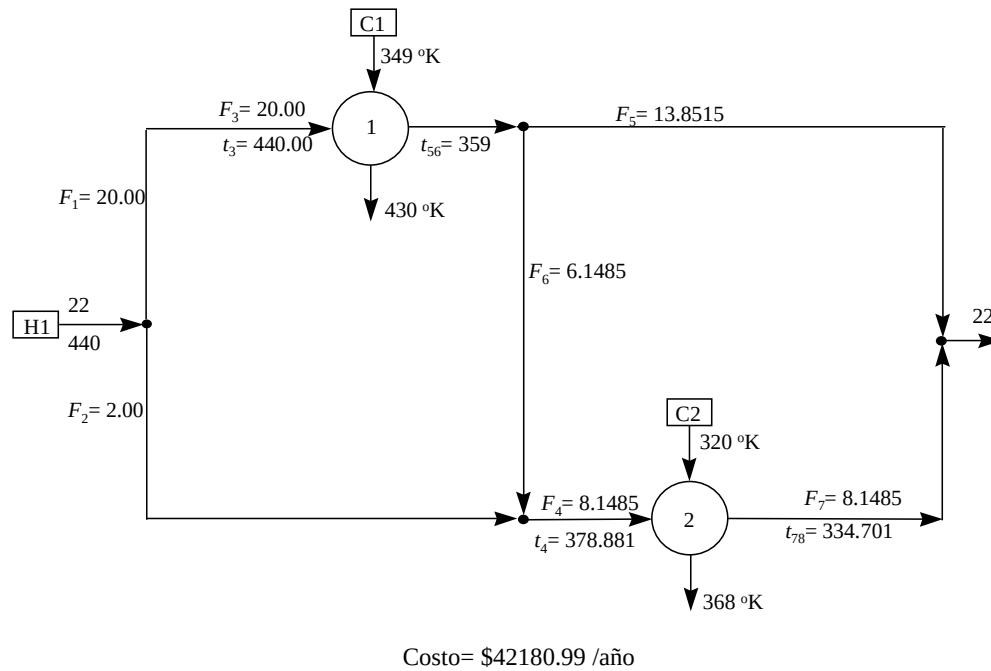
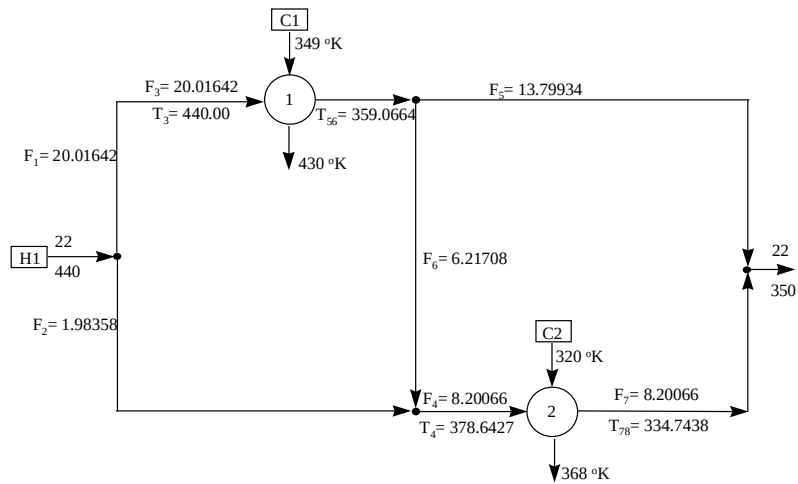
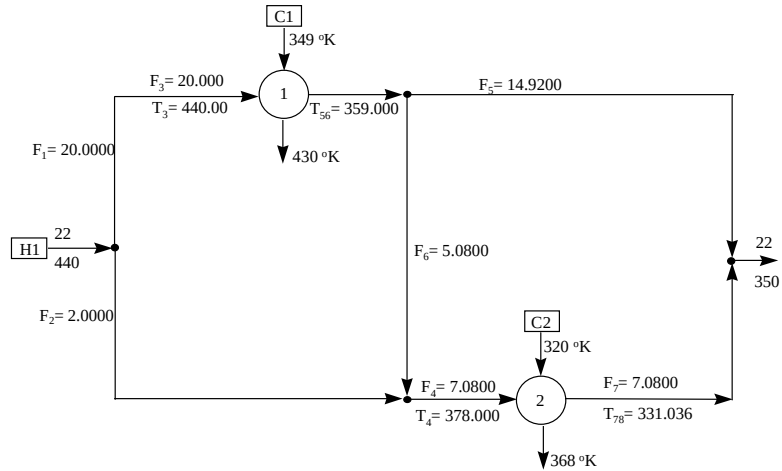


Figura 5.2 Diseño óptimo global para la red de intercambio de calor del ejemplo 5.1

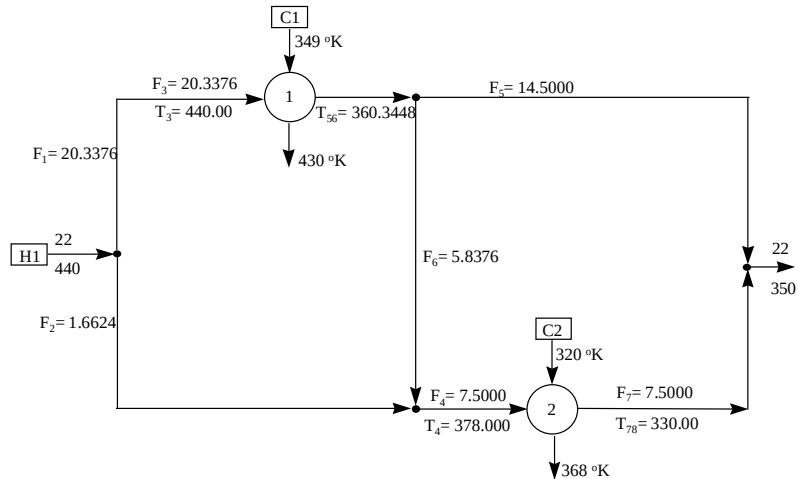
Siguiendo la ejecución del algoritmo de ramificación y acotamiento se obtuvieron tres diseños óptimos locales mismos que se muestran en la Figura 5.3. El primer diseño local (a) presenta un costo de \$42 230/año; el diseño (b) tiene un costo de \$42387/año; y el diseño (c) tiene un costo de \$43 406/año.



(a) 42230.31 \$/año



(b) 42387.03 \$/año



(c) 43406.35 \$/año

Figura 5.3 Diseños óptimos locales para el Ejemplo 5.1.

Para determinar un diseño óptimo global con el algoritmo de ramificación y acotamiento se asignó un claro global de relajación, ϵ_t , de 1×10^{-8} . Las Tablas 5.2 y 5.3 muestran los resultados globales y nodo por nodo obtenidos al utilizar como conjunto de variables de partición a las temperaturas, respectivamente. La primera parte del árbol de ramificación y acotamiento para determinar el diseño óptimo del Ejemplo 5.1 utilizando como conjunto de variables de partición a las temperaturas se presenta en la Figura 5.4.

Tabla 5.2 Resultados globales para el Ejemplo 5.1 utilizando las temperaturas como conjunto de variables de partición.

I	Nodo	status	OLB	OUB	$\epsilon(\%)$	$ \Lambda $	Λ	Nodo prox.
1	0	B	$-\infty$	∞	-	2	1,2	1
2	1	B	38732.994	42180.988	8.17	3	2,3,4	2
3	2	-	38732.994	42180.988	8.17	2	3,4	3
4	3	P	38732.994	42180.988	8.17	3	4,5,6	4
5	4	-	38732.994	42180.988	8.17	2	5,6	5
6	5	B	38732.994	42180.988	8.17	3	6,7,8	6
7	6	-	38732.994	42180.988	8.17	2	7,8	7
8	7	B	40975.993	42180.988	2.85	3	8,9,10	8
9	8	-	40975.993	42180.988	2.85	2	9,10	9
10	9	-	41752.266	42180.988	1.02	1	10	10
11	10	B	41752.266	42180.988	1.02	2	11,12	11
12	11	B	41956.146	42180.988	0.533	3	12,13,14	12
13	12	-	41956.146	42180.988	0.533	2	13,14	13
14	13	-	42023.528	42180.988	0.373	1	14	14
15	14	B	42023.528	42180.988	0.373	2	15,16	15
16	15	B	42045.582	42180.988	0.321	3	16,17,18	16
17	16	-	42045.582	42180.988	0.321	2	17,18	17
18	17	B	42080.937	42180.988	0.237	3	18,19,20	18
19	18	-	42080.937	42180.988	0.237	2	19,20	19
20	19	-	42104.098	42180.988	0.182	1	20	20
21	20	P	42104.098	42180.988	0.182	2	21,22	21
22	21	B	42118.177	42180.988	0.149	3	22,23,24	22
23	22	B	42118.177	42180.988	0.149	4	23,24,25,26	25
24	25	B	42142.009	42180.988	0.092	5	23,24,26,27,28	26
25	26	-	42142.009	42180.988	0.092	4	23,24,27,28	23
26	23	B	42146.228	42180.988	0.082	5	24,27,28,29,30	24

•
•
•

Tabla 5.2 continua

I	Nodo	status	OLB	OUB	$\varepsilon(\%)$	$ \Lambda $	Λ	Nodo prox.
27	24	-	42146.228	42180.988	0.082	4	27,28,29,30	27
28	27	-	42155.420	42180.988	0.061	3	28,29,30	28
29	28	-	42155.420	42180.988	0.061	2	29,30	29
30	29	B	42163.749	42180.988	0.041	3	30,31,32	30
31	30	-	42163.749	42180.988	0.041	2	31,32	31
32	31	B	42170.752	42180.988	0.024	3	32,33,34	32
33	32	-	42170.752	42180.988	0.024	2	33,34	33
34	33	-	42174.192	42180.988	0.016	1	34	34
35	34	B	42174.192	42180.988	0.016	2	35,36	35
36	35	-	42175.413	42180.988	0.013	1	36	36
37	36	B	42175.413	42180.988	0.013	2	37,38	37
38	37	B	42176.819	42180.988	0.0098	3	38,39,40	38
39	38	-	42176.819	42180.988	0.0098	2	39,40	39
40	39	B	42178.862	42180.988	0.0050	3	40,41,42	40
41	40	-	42178.862	42180.988	0.0050	2	41,42	41
42	41	-	42179.480	42180.988	0.0036	1	42	42
43	42	B	42179.480	42180.988	0.0036	2	43,44	43
44	43	-	42179.766	42180.988	0.0029	1	44	44
45	44	B	42179.766	42180.988	0.0029	2	45,46	45
46	45	B	42180.279	42180.988	0.0017	3	46,47,48	46
47	46	-	42180.279	42180.988	0.0017	2	47,48	47
48	47	-	42180.555	42180.988	0.0010	1	48	48
49	48	B	42180.555	42180.988	0.0010	2	49,50	49
50	49	B	42180.625	42180.988	0.0009	3	50,51,52	50
51	50	-	42180.625	42180.988	0.0009	2	51,52	51
52	51	-	42180.706	42180.988	0.0007	1	52	52
53	52	B	42180.706	42180.988	0.0007	2	53,54	53

Tabla 5.3 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 5.1 utilizando como conjunto de variables de partición a las temperaturas.

nodo	padre	$LB(\Omega_p)$	$LB(\Omega)$	$UB(\Omega)$	V
0	-	$-\infty$	38732.994	42180.988	t_2
1	0	38732.994	38732.994	42180.988	t_2
2	0	38732.994	infactible	infactible	-
3	1	38732.994	infactible	infactible	t_2
4	1	38732.994	infactible	infactible	-
5	3	38732.994	40975.993	42180.988	t_4
6	3	38732.994	infactible	infactible	-
7	5	40975.993	41752.266	42180.988	t_2
8	5	40975.993	infactible	infactible	-
9	7	41752.266	42312.429	42473.575	-

10	7	41752.266	41956.146	infactible	t_4
----	---	-----------	-----------	------------	-------

Tabla 5.3 Continua.

Nodo	padre	LB(Ω_p)	LB(Ω)	UB(Ω)	V
11	10	41956.146	42023.528	42180.988	t_2
12	10	41956.146	infactible	infactible	-
13	11	42023.528	42271.823	42327.852	-
14	11	42023.528	42045.582	infactible	t_4
15	14	42045.582	42080.937	infactible	t_1
16	14	42045.582	infactible	infactible	-
17	15	42080.937	42104.098	42180.988	t_2
18	15	42080.937	infactible	infactible	-
19	17	42104.098	42281.263	42327.340	-
20	17	42104.098	42118.177	42180.988	t_4
21	20	42118.177	42146.228	42180.988	t_1
22	20	42118.177	42142.009	42180.988	t_1
23	21	42146.228	42163.749	42180.988	t_1
24	21	42146.228	-	-	-
25	22	42142.009	42155.420	42180.988	t_2
26	22	42142.009	infactible	infactible	-
27	25	42155.420	-	-	-
28	25	42155.420	-	-	-
29	23	42163.749	42170.752	42180.988	t_1
30	23	42163.749	infactible	infactible	-
31	29	42170.752	42174.192	infactible	t_4
32	29	42170.752	infactible	infactible	-
33	31	42174.192	42229.006	42235.159	-
34	31	42174.192	42175.413	infactible	t_2
35	34	42175.413	42208.571	infactible	-
36	34	42175.413	42176.819	42180.988	t_1
37	36	42176.819	42178.862	42180.988	t_1
38	36	42176.819	infactible	infactible	-
39	37	42178.862	42179.480	infactible	t_4
40	37	42178.862	42221.082	42223.720	-
41	39	42179.480	42206.495	infactible	-
42	39	42179.480	42179.766	42180.988	t_2
43	42	42179.766	42195.084	infactible	-
44	42	42179.766	42180.279	42180.988	t_1
45	44	42180.279	42180.555	infactible	t_4
46	44	42180.279	42201.341	infactible	-
47	45	42180.555	42193.745	infactible	-
48	45	42180.555	42180.625	42180.988	t_1
49	48	42180.625	42180.707	42180.988	t_2
50	48	42180.625	42191.054	42191.449	-

51	49	42180.707	42188.006	infactible	-
52	49	42180.707	42180.988	42180.988	-

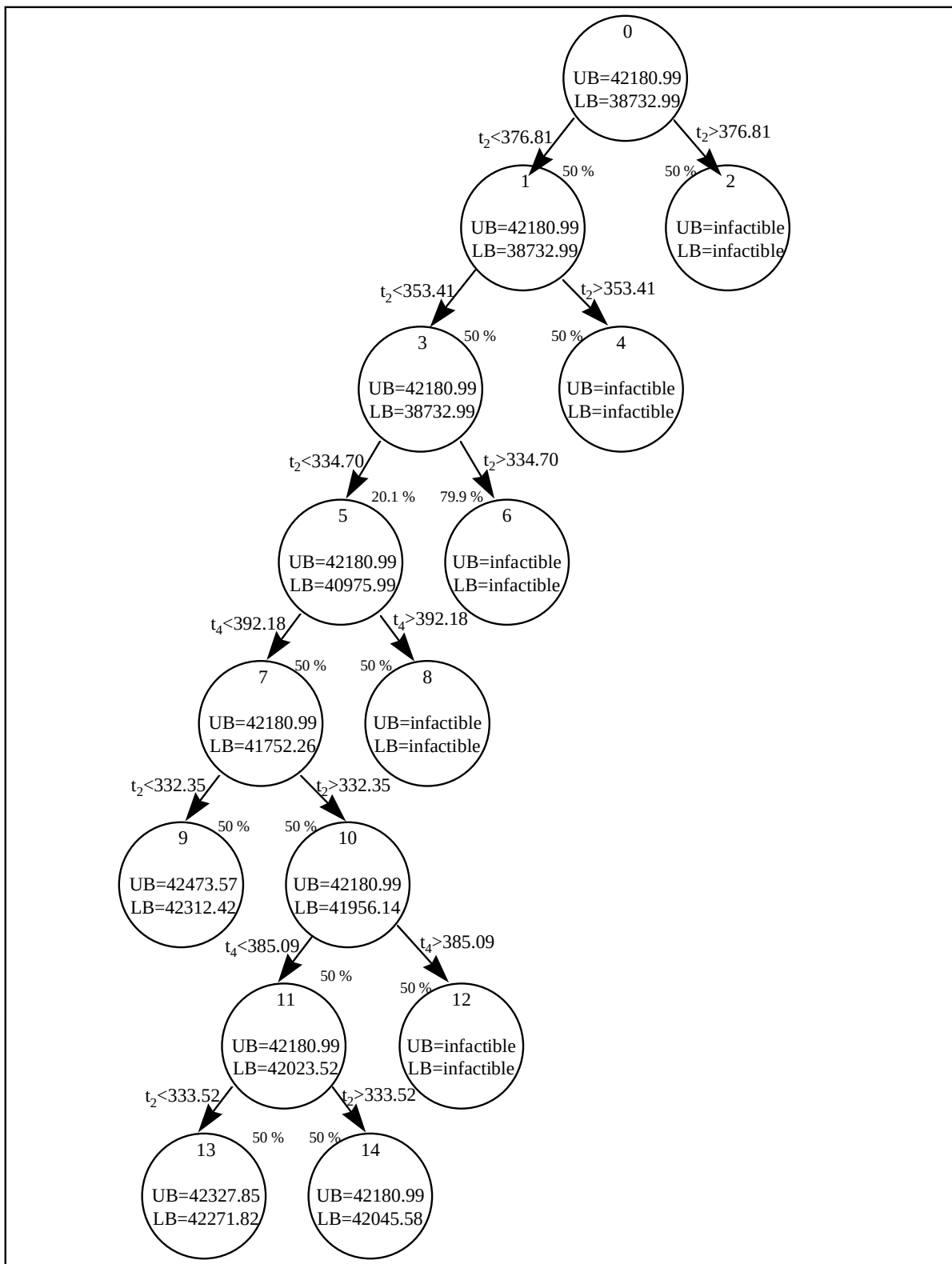


Figura 5.4 Arbol de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 5.1 utilizando temperaturas como conjunto de variables de partición.

Las Tablas 5.4 y 5.5 presentan resultados globales y nodo por nodo obtenidos para el Ejemplo 5.1 utilizando flujos como conjunto de variables de partición. La Figura 5.5 muestra el árbol de ramificación y acotamiento generado al ejecutar el algoritmo y utilizando flujos como conjunto de variables de partición.

Tabla 5.4 Resultados globales para el Ejemplo 5.1 utilizando los flujos como conjunto de variables de partición.

I	Nodo	status	OLB	OUB	$\epsilon(\%)$	$ \Lambda $	Λ	Nodo prox.
1	0	P	$-\infty$	∞	-	2	1,2	1
2	1	P	38732.994	42180.99	8.17	3	2,3,4	2
3	2	-	38732.994	42180.99	8.17	2	3,4	3
4	3	B	40161.343	42180.99	4.79	3	4,5,6	4
5	4	-	40161.343	42180.99	4.79	2	5,6	5
6	5	-	40218.098	42180.99	4.65	1	6	6
7	6	B	40218.098	42180.99	4.65	2	7,8	7
8	7	-	41515.945	42180.99	1.58	1	8	8
9	8	B	41515.945	42180.99	1.58	2	9,10	9
10	9	-	41894.299	42180.99	0.68	1	10	10
11	10	B	41894.299	42180.99	0.68	2	11,12	11
12	11	-	42046.849	42180.99	0.318	1	12	12
13	12	-	42046.849	42180.99	0.318	0	-	-

Tabla 5.5 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 5.1 utilizando los flujos como conjunto de variables de partición.

nodo	padre	$LB(\Omega_p)$	$LB(\Omega)$	$UB(\Omega)$	V
0	-	$-\infty$	38732.994	42180.988	F_7
1	0	38732.994	40161.343	42180.988	F_4
2	0	38732.994	Infactible	infactible	-
3	1	40161.343	40218.098	42180.988	F_7
4	1	40161.343	Infactible	infactible	-
5	3	40218.098	Infactible	infactible	-
6	3	40218.098	41515.945	42180.988	F_7
7	6	41515.945	Infactible	infactible	-
8	6	41515.945	41894.299	42180.988	F_7
9	8	41894.299	42657.389	42696.247	-
10	8	41894.299	42046.849	42180.988	F_7

11	10	42046.849	Infactible	infactible	-
12	10	42046.849	42180.988	42180.988	-

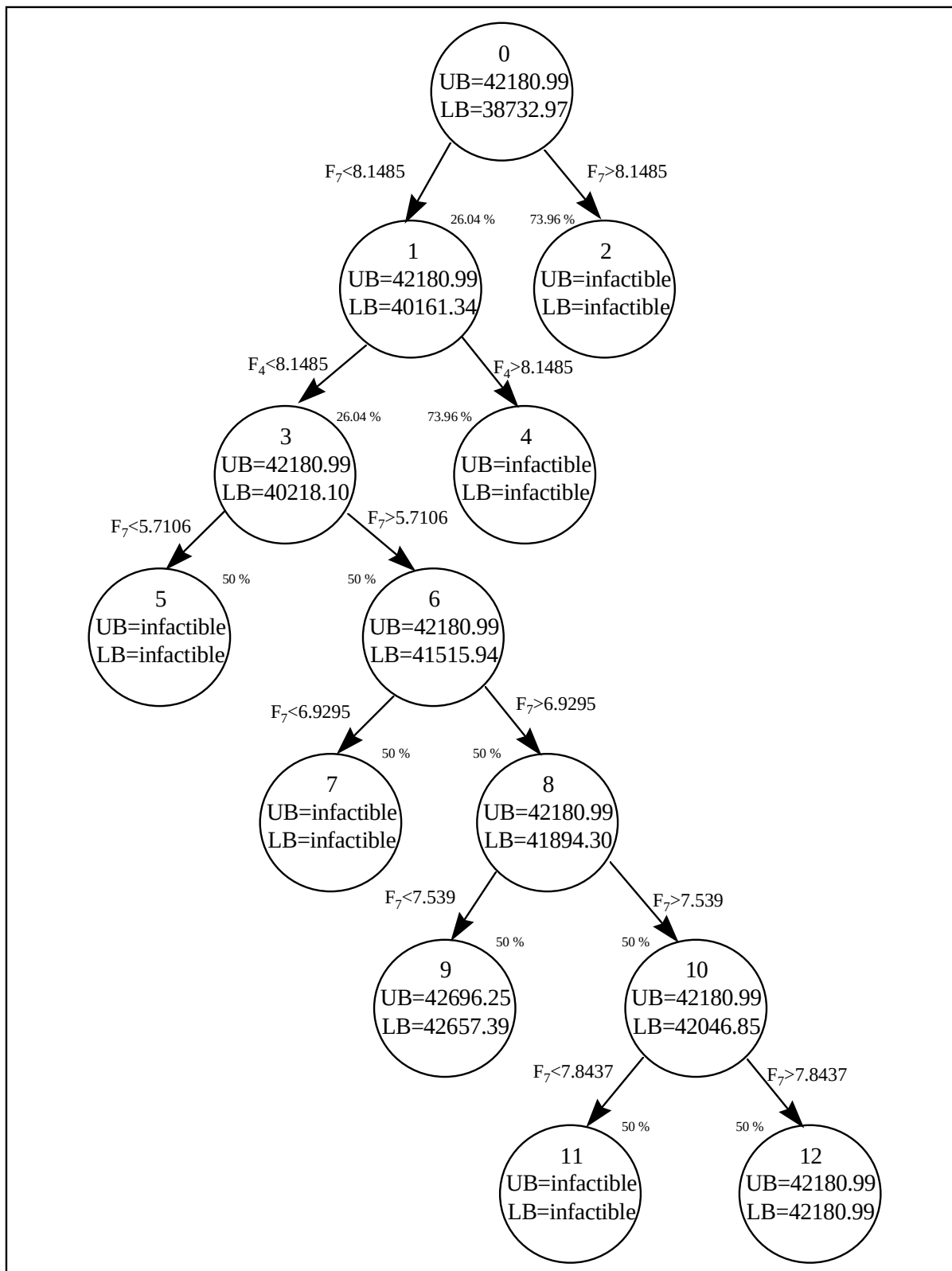


Figura 5.5 Diagrama de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 5.1 utilizando los flujos como conjunto de variables de partición.

Las Tablas 5.6 y 5.7 muestran los resultados globales y nodo por nodo obtenidos al ejecutar el algoritmo de ramificación y acotamiento, tomando como conjunto de variables de partición las temperaturas y flujos. En la Figura 5.6 se presenta el árbol de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 5.1 utilizando flujos- temperaturas como conjunto de variables de partición.

Tabla 5.6 Resultados globales del Ejemplo 5.1 utilizando temperaturas y flujos como conjunto de variables de partición.

I	Nodo	status	OLB	OUB	$\epsilon(\%)$	$ \Lambda $	Λ	Nodo prox.
1	0	B	$-\infty$	∞	-	2	1,2	1
2	1	B	38732.994	42180.99	8.17	3	2,3,4	2
3	2	-	38732.9940	42180.99	8.17	2	3,4	3
4	3	B	41001.917	42180.99	2.79	3	4,5,6	4
5	4	-	41001.917	42180.99	2.79	2	5,6	5
6	5	P	41409.750	42180.99	1.83	3	6,7,8	6
7	6	-	41409.750	42180.99	1.83	2	7,8	7
8	7	P	41409.750	42180.99	1.83	3	8,9,10	8
9	8	-	41409.750	42180.99	1.83	2	9,10	9
10	9	B	41612.138	42180.99	1.34	3	10,11,12	10
11	10	-	41612.138	42180.99	1.34	2	11,12	11
12	11	-	41685.885	42180.99	1.17	1	12	12
13	12	-	41685.885	42180.99	1.17	0	-	-

Tabla 5.7 Resultados nodo por nodo para el Ejemplo 5.1

nodo	padre	$LB(\Omega_p)$	$LB(\Omega)$	$UB(\Omega)$	V
0	-	$-\infty$	38732.994	42180.988	t_2
1	0	38732.994	41001.917	42180.988	F_7
2	0	38732.994	infactible	infactible	-
3	1	41001.917	41409.750	42180.988	t_2
4	1	41001.917	infactible	infactible	-
5	3	41409.750	41409.750	42180.988	F_7
6	3	41409.750	infactible	infactible	-
7	5	41409.750	41612.138	42180.988	F_4
8	5	41409.750	infactible	infactible	-
9	7	41612.138	41685.885	42180.988	F_7

10	7	41612.138	infactible	infactible	-
11	9	41685.885	infactible	infactible	-
12	9	41685.885	42180.988	42180.988	-

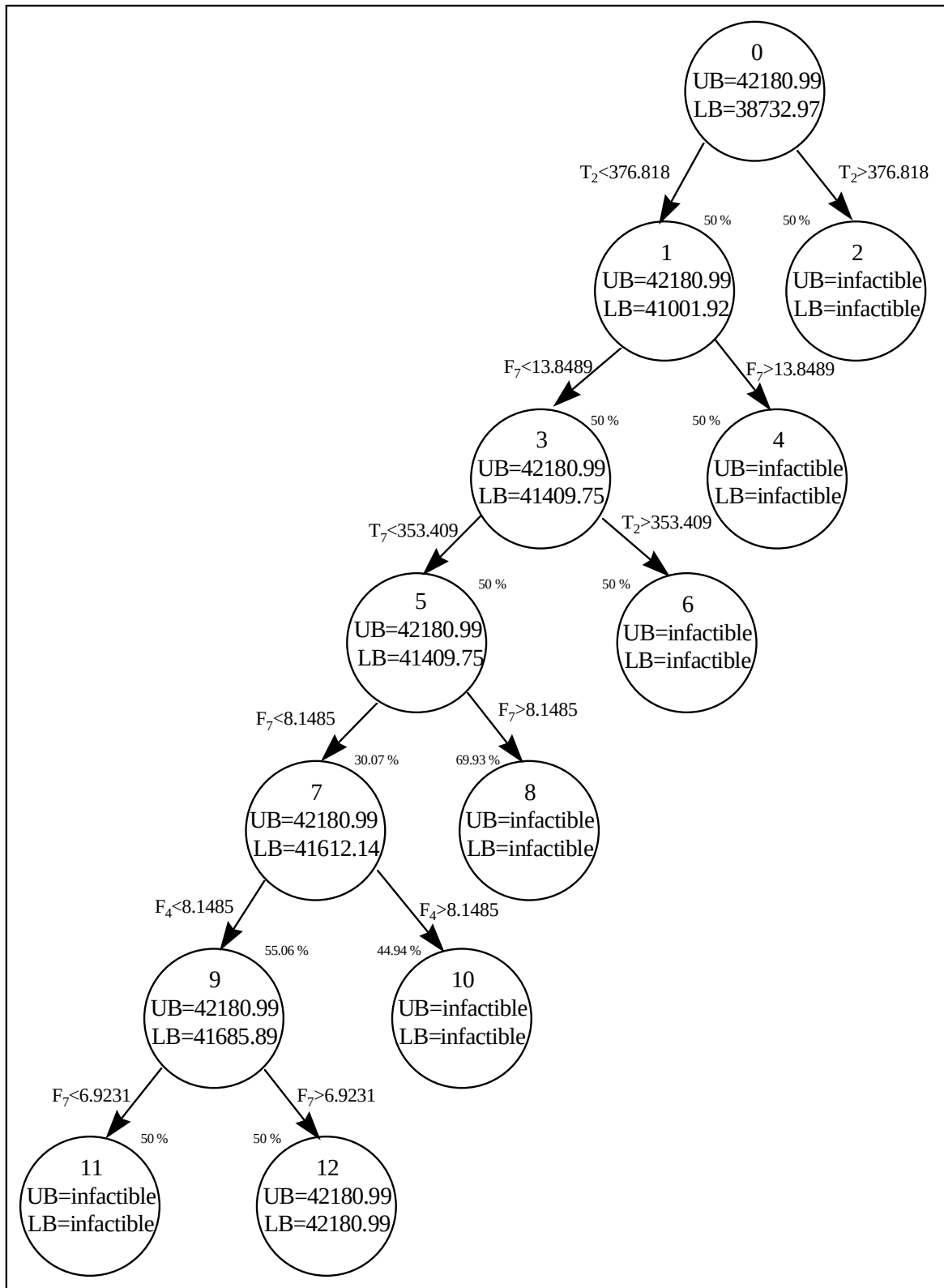


Figura 5.6 Arbol de ramificación y acotamiento del Ejemplo 5.1 utilizando flujos y temperaturas como conjunto de variables de partición.

Discusión de resultados.

Para resolver el Ejemplo 5.1 se realizó una serie de pruebas variando el claro global de relajación o tolerancia, ϵ_t , del algoritmo de ramificación y acotamiento presentado en la Sección 4.6 y se comprobó que la variación de dicha tolerancia no afecta a la solución obtenida para dicho ejemplo. Es interesante notar que, a pesar de que el Ejemplo 5.1 considera una red de intercambio de calor pequeña con cargas térmicas fijas, se han determinado tres diseños óptimos locales. También se determinó un diseño óptimo global para la red de intercambio de calor del Ejemplo 5.1.

La solución del Ejemplo 5.1 se llevó a cabo mediante tres conjuntos de variables de partición: i) temperaturas; ii) flujos; y iii) temperaturas - flujos. De acuerdo a los resultados presentados, se observa que al utilizar los flujos o bien flujos- temperaturas como conjuntos de variables de partición la búsqueda del diseño óptimo global para la red del Ejemplo 5.1 son más eficientes, que utilizando las temperaturas como conjunto de variables de partición. Puesto que los primeros requieren de un análisis de 12 nodos para determinar el diseño óptimo global de la red; mientras que al utilizar las temperaturas como conjunto de variables de partición se analizaron 52 nodos para determinar el diseño óptimo global.

5.3 Nuevo sub-estimador convexo para el área de un intercambiador de calor.

Considere el intercambiador de calor mostrado en la Figura 5.7 con una temperatura de entrada conocida, $t_{i,in}$, para la corriente caliente i ; y una temperatura de entrada conocida, $t_{j,in}$, para la corriente fría j . Además, considere que la carga térmica del intercambiador de calor es igual a q . A partir del balance de energía para el lado caliente, se tiene que la corriente caliente i irá desde una temperatura de entrada $t_{i,in}$ hasta una temperatura de salida $t_{i,in} - q/F_i$; de forma similar la corriente fría irá desde una temperatura de entrada $t_{j,in}$ hasta una temperatura de salida $t_{j,in} + q/F_j$. De esta manera la diferencia de temperaturas en el lado caliente del intercambiador de calor será $dt_h = t_{i,in} - t_{j,in} - q/F_j$, mientras que la diferencia de temperaturas en el lado frío estará dada por $dt_c = t_{i,in} - t_{j,in} - q/F_i$. Por supuesto, para garantizar la transferencia de calor desde la corriente caliente hacia corriente fría es necesario que dt_h y dt_c sean mayores que cero.

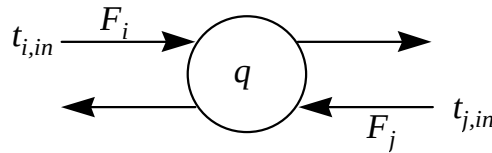


Figura 5.7 Representación de un intercambiador de calor.

Partiendo de la definición para la diferencia media logarítmica de temperatura (DMLT), se puede obtener la siguiente expresión para la fuerza motriz:

$$DMLT_{i,j} = \frac{q_{ij}(F_j - F_i)}{F_i F_j \ln \left(\frac{t_{i,in} - t_{j,in} - q_{ij}/F_j}{t_{i,in} - t_{j,in} - q_{ij}/F_i} \right)} \quad (5.21)$$

Para el caso donde no se conozcan las temperaturas de entrada al intercambiador, pero se cuenta con cotas superiores e inferiores para las mismas, esto es, $t_{i,in}^L \leq t_{i,in} \leq t_{i,in}^U$ y $t_{j,in}^L \leq t_{j,in} \leq t_{j,in}^U$, la Ec. (5.21) se puede relajar para obtener la siguiente cota superior para la fuerza motriz:

$$DMLT_{i,j} \leq DMLT_{i,j}^U = \frac{q_{ij}(F_j - F_i)}{F_i F_j \ln \left(\frac{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij}/F_j}{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij}/F_i} \right)} \quad (5.22)$$

Esta cota superior para la fuerza motriz puede utilizarse, en combinación con la ecuación de transferencia de calor, para generar una cota inferior del área requerida para realizar la operación de transferencia de calor:

$$A_{i,j} \geq A_{i,j}^L = \frac{(F_i F_j)}{U_{i,j}(F_j - F_i)} \ln \left(\frac{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij}/F_j}{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij}/F_i} \right) \quad (5.23)$$

La desigualdad en (5.23) no ha sido reportada previamente en la literatura, por lo que constituye un nuevo subestimador que proporciona una aproximación exacta cuando se conocen las temperaturas de entrada, los flujos de capacidad calorífica y el coeficiente global de transferencia de calor. El desarrollo de este nuevo subestimador convexo, sigue un procedimiento similar al utilizado por Zamora (1997) para el caso en el que la fuerza motriz se calcula con la diferencia media aritmética de temperatura, la cual se aplica casos donde $F_i = F_j$, puesto que la desigualdad (5.23) da lugar a indeterminaciones.

Teorema 5.1

Dados los flujos de capacidad calorífica y el coeficiente global de transferencia de calor, entonces la desigualdad en (5.23) es convexa, subestima el área de un intercambiador de calor, y proporciona una representación exacta cuando las temperaturas de entrada para las corrientes caliente y fría son $t_{i,in} = t_{i,in}^U$ y $t_{j,in} = t_{j,in}^L$, respectivamente.

Demostración.

La expresión en el lado derecho de (5.23), es función únicamente de q , su segunda derivada está dada por:

$$\frac{F_i F_j (t_{i,in}^U - t_{i,in}^L) \left[(t_{i,in}^U - t_{j,in}^L) F_i - q_{ij} + (t_{i,in}^U - t_{j,in}^L) F_j - q_{ij} \right]}{U_{i,j} \left[(t_{i,in}^U - t_{j,in}^L) F_i - q_{ij} \right]^2 \left[(t_{i,in}^U - t_{j,in}^L) F_j - q_{ij} \right]^2} = \frac{F_i F_j (t_{i,in}^U - t_{j,in}^L) [dt_h^* + dt_c^*]}{U_{i,j} (dt_h^*)^2 (dt_c^*)^2} \quad (5.24)$$

donde $dt_h^* = t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q / F_j$, $dt_c^* = t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q / F_i$.

Para cualquier apareamiento permitido por la segunda ley de la termodinámica la expresión en (5.24) es mayor o igual a cero. Por lo tanto, el lado derecho de (5.23) es convexo. La convexidad de la desigualdad en (5.23) se debe a que la suma de funciones convexas es convexa. Para probar que (5.23) es un subestimador riguroso para el área de un intercambiador de calor, basta con mostrar que el error de aproximación (Δ_{ij}^I) es mayor o igual que cero, dado por,

$$\begin{aligned} \Delta_{ij}^I &= A_{i,j} - A_{i,j}^L = \frac{q_{ij}}{U_{i,j} DMLT_{i,j}} - \frac{F_i F_j}{U_{i,j} (F_j - F_i)} \ln \left(\frac{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij} / F_j}{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij} / F_i} \right) \\ &= \frac{q_{ij}}{U_{i,j} DMLT_{i,j}} \left[\frac{\ln \left(\frac{t_{i,in} - t_{j,in} - q_{ij} / F_j}{t_{i,in} - t_{j,in} - q_{ij} / F_i} \right) - \ln \left(\frac{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij} / F_j}{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij} / F_i} \right)}{\ln \left(\frac{t_{i,in} - t_{j,in} - q_{ij} / F_j}{t_{i,in} - t_{j,in} - q_{ij} / F_i} \right)} \right] \\ &= \frac{F_i F_j}{U_{i,j} (F_j - F_i)} \left[\ln \left(\frac{t_{i,in} - t_{j,in} - q_{ij} / F_j}{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij} / F_j} \right) - \ln \left(\frac{t_{i,in} - t_{j,in} - q_{ij} / F_i}{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij} / F_i} \right) \right] \\ &= \frac{F_i F_j}{U_{i,j} (F_j - F_i)} \left[\ln f(F_j) - \ln f(F_i) \right] \end{aligned} \quad (5.25)$$

en donde se define la función $f(F) = \frac{t_{i,in} - t_{j,in} - q_{ij} / F}{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij} / F}$, la cual tiene un comportamiento monotónicamente creciente con respecto a F , es decir que si $F_i < F_j$, entonces $f(F_i) < f(F_j)$. En el Apéndice 6 se prueba rigurosamente esta propiedad.

Con base en lo anterior y para demostrar que el error de aproximación es no negativo, se consideran dos casos:

Caso 1. Si $F_i > F_j$, se tiene que $f(F_i) < f(F_j)$, y la diferencia entre los logaritmos de ambos argumentos es negativa, pero además la diferencia entre F_i y F_j es negativa, por lo que el error de aproximación es positivo.

Caso 2. Si $F_i < F_j$, se tiene que $f(F_i) > f(F_j)$, y la diferencia entre los logaritmos de ambos argumentos es positiva, pero se observa también que la diferencia entre F_i y F_j es positiva, por lo que el error de aproximación es positivo.

De acuerdo a los dos casos posibles, el error de aproximación es no negativo, por lo tanto el lado derecho de (5.23) subestima rigurosamente el área de un intercambiador de calor. También, observe de (5.25) que Δ_{ij}^l es igual a cero cuando $t_{i,in} = t_{i,in}^U$ y $t_{j,in} = t_{j,in}^L$.

5.4 Ejemplo Ilustrativo 5.2

Para comprobar la eficacia del subestimador convexo desarrollado en la Sección 5.3 se retoma el problema de diseño de la red de intercambio de calor de la Sección 4.6 (Figura 5.8). Suponiendo mezclado isotérmico y usando la diferencia media logarítmica de temperatura. La información de las corrientes de proceso se presenta en la Tabla 5.8.

Tabla 5.8 Información de las corrientes de proceso y costos para Ejemplo 5.2.

Corriente	T_{in} (K)	T_o (K)	F (kW / K)
H1	575	395	5.555
H2	718	398	3.125
C1	300	400	10
C2	365	-	4.545
C3	358	-	3.571

Costo del intercambiador 1 (\$/año) = 270 [A_1 (m ²)]			
Costo del intercambiador 2 (\$/año) = 720 [A_2 (m ²)]			
Costo del intercambiador 3 (\$/año) = 240 [A_3 (m ²)]			
Costo del intercambiador 4 (\$/año) = 900 [A_4 (m ²)]			
$U_1=U_2=0.1$ kW/(m ² K); $U_3=U_4=1$ kW/(m ² K)			

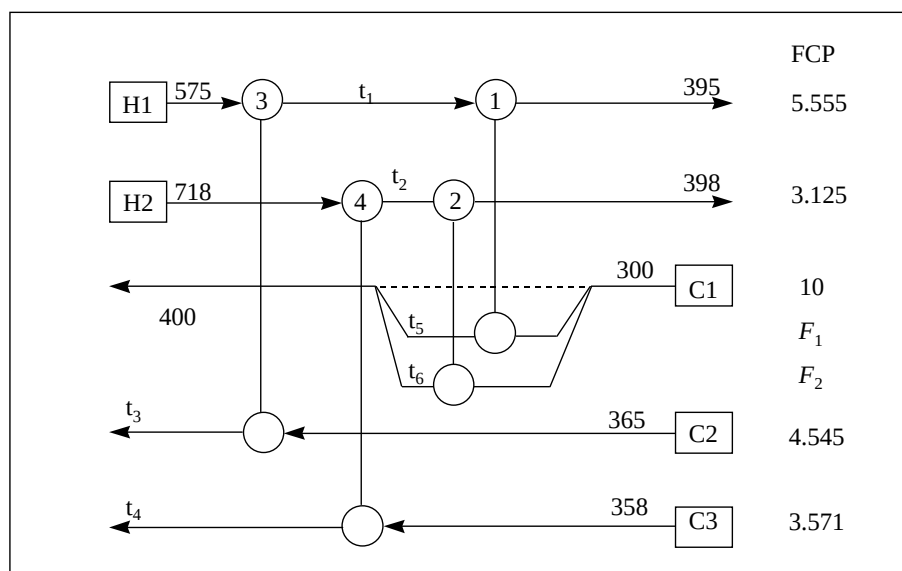


Figura 5.8 Red de intercambio de calor para el Ejemplo 5.2

Enfoque de solución.

Se plantea un modelo no convexo (NC-5.2) con la suposición de flujos de capacidades caloríficas y coeficientes globales de transferencia de calor constantes, DMLT e intercambiadores a contracorriente. Para construir el modelo convexo relajado (C-5.2) se utiliza el nuevo subestimador convexo para el área de un intercambiador de calor desarrollado en la Sección 5.3.

MODELO NC-5.2

$$\text{Min} \quad 270 \frac{q_1}{U_1 \Delta t_1} + 720 \frac{q_2}{U_2 \Delta t_2} + 240 \frac{q_3}{U_3 \Delta t_3} + 900 \frac{q_4}{U_4 \Delta t_4} \quad (5.26)$$

sujeto a:

BALANCES DE ENERGÍA POR INTERCAMBIADOR

$$\left. \begin{aligned} q_1 &= 5.555(t_1 - 395); \\ q_2 &= 3.125(t_2 - 398); \\ q_3 &= 5.555(575 - t_1); \\ q_3 &= 4.545(t_3 - 365); \\ q_4 &= 3.125(718 - t_2); \\ q_4 &= 3.571(t_4 - 358) \end{aligned} \right\}$$

(5.27)

BALANCES GLOBALES DE ENERGÍA PARA CADA CORRIENTE

$$\left. \begin{aligned} q_1 + q_2 &= 1000; \\ q_1 + q_3 &= 999.9; \\ q_2 + q_4 &= 1000 \end{aligned} \right\}$$

(5.28)

BALANCE DE MATERIA PARA EL MEZCLADOR

$$F_1 + F_2 = 10$$

(5.29)

DIFERENCIA MEDIA LOGARITMICA DE TEMPERATURA:

$$\left. \begin{aligned} \Delta t_1 &= \frac{(t_1 - 495)}{\ln[(t_1 - 400)/95]}; \quad \Delta t_2 = \frac{(t_2 - 498)}{\ln[(t_2 - 400)/98]}; \\ \Delta t_3 &= \frac{(940 - t_1 - t_3)}{\ln[(575 - t_3)/(t_1 - 365)]}; \quad \Delta t_4 = \frac{(1076 - t_2 - t_4)}{\ln[(718 - t_4)/(t_2 - 358)]} \end{aligned} \right\} \quad (5.30)$$

Cotas iniciales:

$$\begin{aligned} &405 \leq t_1 \leq 575; \quad 405 \leq t_2 \leq 718; \quad 365 \leq t_3 \leq 575; \quad 358 \leq t_4 \leq 718; \quad 0 \leq F_1 \leq 10; \quad 0 \leq F_2 \leq 10; \\ &0 \leq q_1 \leq 999.9; \quad 0 \leq q_2 \leq 1000; \quad 0 \leq q_3 \leq 954.45; \quad 0 \leq q_4 \leq 1000; \quad 5 \leq \Delta t_1 \leq 135; \quad 5 \leq \Delta t_2 \leq 208; \\ &5 \leq \Delta t_3 \leq 210; \quad 5 \leq \Delta t_4 \leq 360 \end{aligned}$$

Formulación del modelo convexo relajado.

En este modelo se relajan los términos no convexos del modelo no convexo y se introduce el nuevo subestimador convexo presentado en la Sección 5.3

MODELO CONVEXO RELAJADO C-5.2

$$\text{Min} \quad 270 \frac{z_{11}}{U_1} + 720 \frac{z_{22}}{U_2} + 240 A_3' + 900 A_4'$$

(5.31)

Sujeto a:

ECUACIONES (5.27) - (5.29)

ACOTAMIENTO DE LAS VARIABLES DE RELAJACIÓN:

$$\left. \begin{aligned} z_{11} &\geq \frac{1}{\Delta t_1} \left(\frac{q_1 + \sqrt{q_1^L q_1^U}}{\sqrt{q_1^L} + \sqrt{q_1^U}} \right)^2; \quad z_{22} \geq \frac{1}{\Delta t_2} \left(\frac{q_2 + \sqrt{q_2^L q_2^U}}{\sqrt{q_2^L} + \sqrt{q_2^U}} \right)^2 \end{aligned} \right\}$$

(5.32)

$$\Delta t_1 \leq \frac{(t_1 - 495)}{\ln[(t_1 - 400)/95]}; \quad \Delta t_2 \leq \frac{(t_2 - 498)}{\ln[(t_2 - 400)/98]} \quad \left. \vphantom{\Delta t_1} \right\}$$

(5.33)

ACOTAMIENTO PARA LAS AREAS DE LOS INTERCAMBIADORES:

$$A_3' \geq \frac{25.247475 \ln\left(\frac{210 - q_3/4.545}{210 - q_3/5.555}\right)}{U_3 (4.545 - 5.555)}; \quad A_4' \geq \frac{11.159375 \ln\left(\frac{360 - q_4/3.571}{360 - q_4/3.125}\right)}{U_4 (3.571 - 3.125)} \quad \left. \vphantom{A_3'} \right\}$$

(5.33)

Cotas iniciales:

$$\begin{aligned} &405 \leq t_1 \leq 575; \quad 405 \leq t_2 \leq 718; \quad 365 \leq t_3 \leq 575; \quad 358 \leq t_4 \leq 718; \quad 0 \leq F_1 \leq 10; \quad 0 \leq F_2 \leq 10; \\ &0 \leq q_1 \leq 999.9; \quad 0 \leq q_2 \leq 1000; \quad 0 \leq q_3 \leq 954.45; \quad 0 \leq q_4 \leq 1000; \quad 5 \leq \Delta t_1 \leq 135; \quad 5 \leq \Delta t_2 \leq 208; \\ &5 \leq \Delta t_3 \leq 210; \quad 5 \leq \Delta t_4 \leq 360 \end{aligned}$$

Resultados.

La cota inicial obtenida al resolver el modelo convexo relajado del Ejemplo 5.2 es de \$31302.27/año. El diseño óptimo global obtenido para el Ejemplo 5.2 tiene un costo de \$39114.51/año y las características de la red óptima se observan en la Figura 5.9.

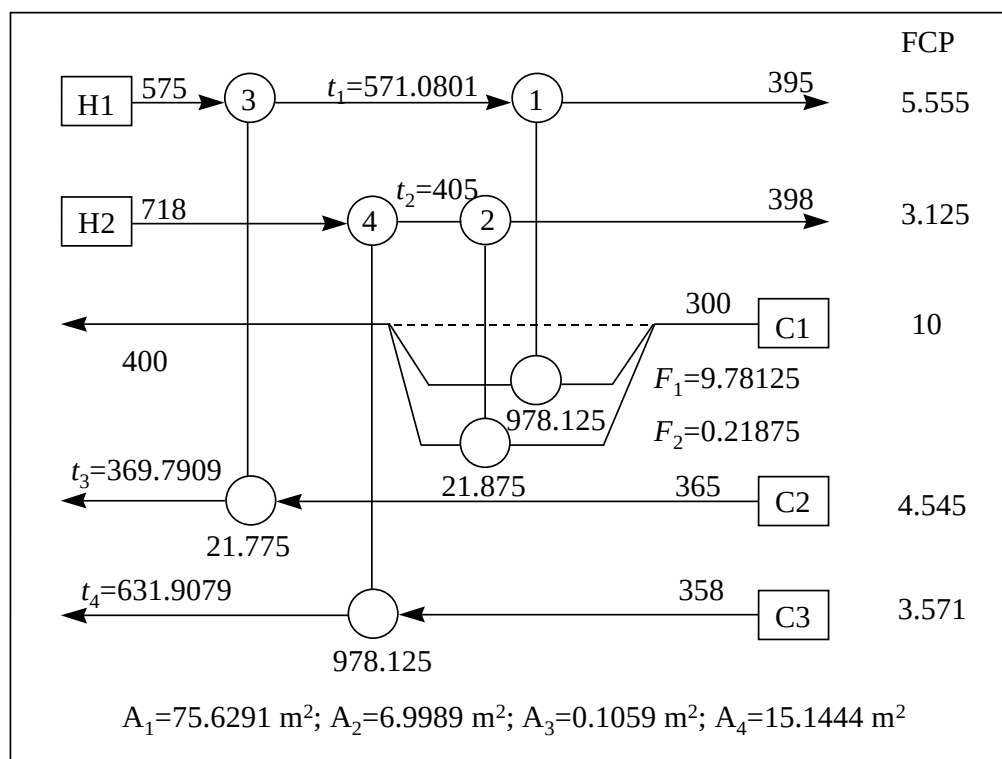


Figura 5.9 Diseño óptimo de red para el Ejemplo Ilustrativo 5.2

Las Tablas 5.9 y 5.10 muestran los resultados globales y nodo por nodo respectivamente obtenidos para el Ejemplo 5.2. El árbol de ramificación y acotamiento del ejemplo ilustrativo 5.2 se muestra en la Figura 5.10.

Tabla 5.9 Resultados globales para el Ejemplo 5.2.

Iteración	Nodo	status	OLB	OUB	$\epsilon(\%)$	$ \Lambda $	Λ	Nodo prox.
1	0	bisección	31302	39114	19.97	2	1,2	1
2	1	bisección	35836	39114	8.38	3	2,3,4	2
3	2	-	45293	39114	-	2	3,4	3
4	3	bisección	37714	39114	3.58	3	4,5,6	4
5	4	-	43649	39114	-	2	5,6	5
6	5	bisección	38677	39114	1.12	3	6,7,8	6
7	6	-	42104	39114	-	2	7,8	7
8	7	bisección	39051	39114	0.16	3	8,9,10	8
9	8	-	40973	39114	-	2	9,10	9
10	9	-	40226	39114	0.00	1	10	10

11	10	-	39114	39114	0.00	0	-	-
----	----	---	-------	-------	------	---	---	---

Tabla 5.10 Resultados nodo por nodo del ejemplo ilustrativo 5.2.

Nodo	padre	$LB(\Omega_p)$	$LB(\Omega)$	$UB(\Omega)$	V
0	-	-	31302	39114	q_2
1	0	31302	35836	39114	q_2
2	0	31302	45293	46710	-
3	1	35836	37714	39114	q_2
4	1	35836	43649	44076	-
5	3	37714	38677	39114	q_2
6	3	37714	42104	42188	-
7	5	38677	39051	39114	q_1
8	5	38677	40973	40992	-
9	7	39051	40226	40226	-
10	7	39051	39114	39114	-

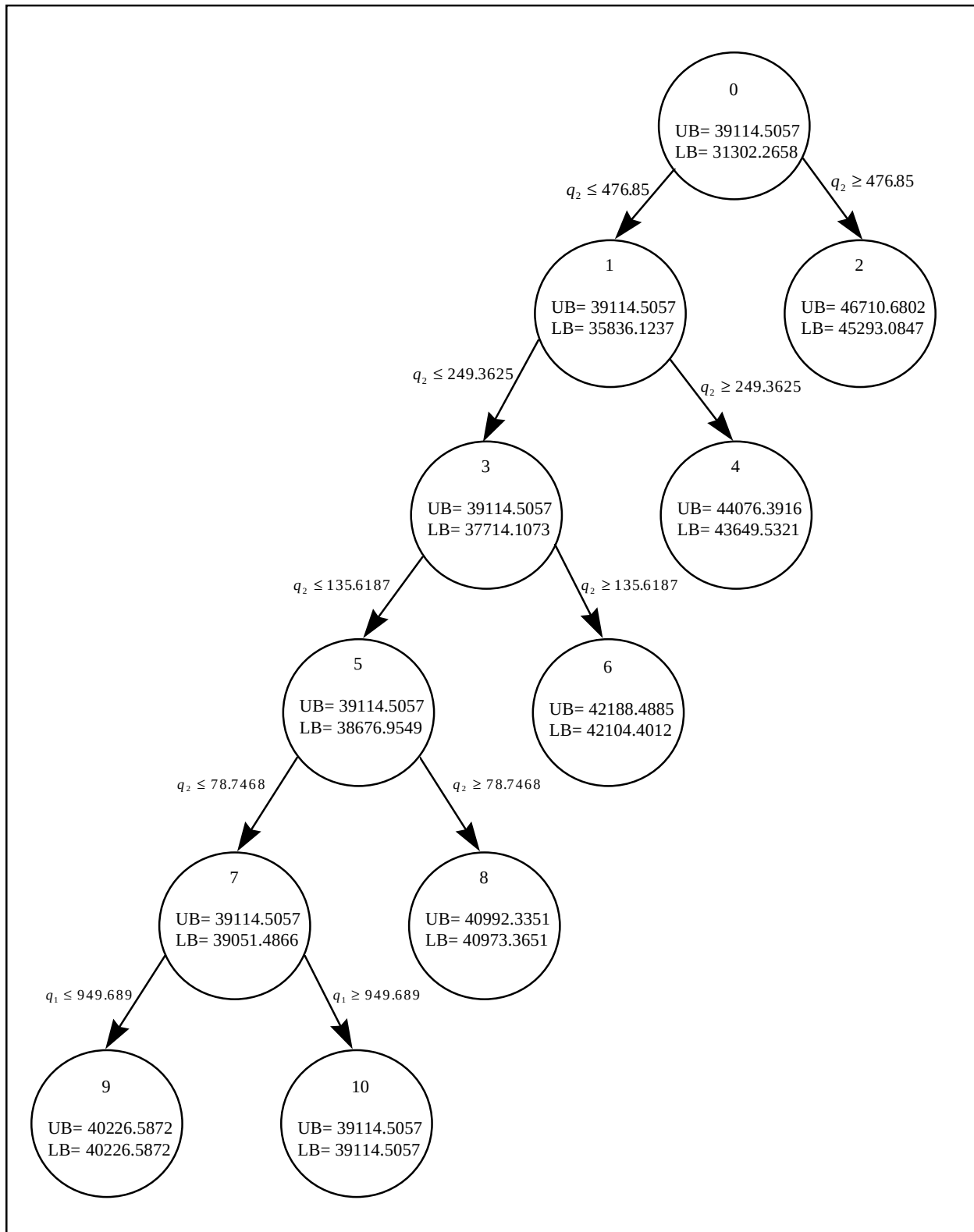


Figura 5.10 Diagrama de ramificación y acotamiento para el Ejemplo 5.2.

Discusión de resultados.

Se determinó el diseño óptimo global para el Ejemplo Ilustrativo 5.2 utilizando como base el nuevo subestimador para el área de un intercambiador desarrollado en la Sección 5.3. Para este ejemplo se utilizó como conjunto de variables de partición las cargas térmicas. La carga térmica, q_2 , es la variable de partición con mayor participación dentro del árbol de ramificación y acotamiento. El algoritmo de ramificación y acotamiento requirió de un análisis de 10 nodos para determinar el diseño óptimo global de la red de intercambio de calor del Ejemplo 5.2. El diseño óptimo global para la red de este ejemplo ilustrativo fue localizado desde el primer nodo al resolver el modelo no convexo, sin embargo para comprobar la optimalidad global es necesario la ejecución completa del algoritmo de ramificación y acotamiento.

Capítulo 6

CONCLUSIONES

El problema de optimización global de redes de intercambio de calor es muy complicado para resolverlo de manera rigurosa, puesto que algunos de los modelos matemáticos utilizados para su solución incluyen términos no convexos: i) funciones cóncavas univariables; ii) términos bilineales; y iii) términos fraccionales lineales. Las funciones cóncavas univariables se utilizan generalmente en modelos matemáticos para representar economías de escala en forma de un exponente fraccional de la función de costo. Los términos bilineales están dados por el producto de dos variables continuas, y surgen al modelar mezclado no isotérmico de las corrientes de proceso, como un producto entre una temperatura y un flujo. Los términos fraccionales lineales están dados por la razón de dos variables continuas, por ejemplo, la relación entre las cargas térmicas y la diferencia media logarítmica de temperatura. El trabajo desarrollado en esta tesis se ha enfocado a la optimización global de diseños de redes de intercambio de calor con estructura fija.

En el Capítulo 1 se presentó el estado del arte de la optimización global y una visión general de la tesis. El Capítulo 2 contiene conceptos básicos utilizados en el campo de la optimización. En el Capítulo 3 se presentó un algoritmo global de ramificación y acotamiento. También se desarrolló un Ejemplo Ilustrativo para demostrar su funcionamiento. Las innovaciones de esta tesis se presentan en los Capítulos 4 y 5.

En el Capítulo 4 se realizó una adecuación del algoritmo de ramificación y acotamiento propuesto por Zamora (1998a) con la finalidad de implementarlo en forma especializada en la optimización global de redes de intercambio de calor. Se presentaron dos Ejemplos Ilustrativos de diseño óptimo global donde se utiliza la técnica de reducción por factibilidad. Esta técnica de reducción se basa principalmente en métodos para estimar y ajustar las cotas de las variables por la implicación de redundancias e infactibilidades inmersas en las restricciones del problema y pueden reducir el número de nodos analizados en el árbol de ramificación y acotamiento para determinar el diseño óptimo global de la red de intercambio de calor.

La determinación del diseño óptimo global para la red de intercambio de calor del Ejemplo Ilustrativo 4.1 se realizó utilizando dos modelos convexos relajados. El primer modelo utiliza los subestimadores desarrollados por Zamora (1997), el segundo modelo utiliza los subestimadores desarrollados por Quesada (1993). Como es de esperarse, ambos modelos conducen al mismo diseño óptimo global para la red de intercambio de calor del Ejemplo 4.1, sin embargo se observa que el primer modelo es más eficiente debido a que proporciona cotas más justas y por ello requiere de un análisis de 10 nodos en el árbol de ramificación y acotamiento. Mientras que el segundo modelo requiere de 22 nodos para determinar el diseño óptimo global.

Para obtener el diseño óptimo de la red de intercambio de calor del Ejemplo Ilustrativo 4.2 se utilizó como fuerza motriz a la aproximación de Chen (1987) con la finalidad de evitar indeterminaciones cuando los lados caliente y frío del intercambiador son iguales. Sin embargo, el costo del diseño óptimo de la red de intercambio de calor para el Ejemplo 4.2 con esta aproximación es mayor que el costo obtenido por Zamora (1997) para la misma red utilizando como fuerza motriz la diferencia media logarítmica de temperatura, DMLT. Para determinar el diseño óptimo global de esta red de intercambio de calor se requirió de un análisis de 34 nodos.

En el Capítulo 5 se realizó un estudio sobre el impacto que tiene la selección del conjunto de variables de partición en el funcionamiento del algoritmo de ramificación y acotamiento. El Ejemplo Ilustrativo 5.1 muestra que aún cuando una red de intercambio de calor tenga una estructura muy pequeña, puede tener varios diseños óptimos locales que difieren del diseño óptimo global.

El tiempo de cómputo requerido para determinar un diseño óptimo global de una red de intercambio de calor por medio de un algoritmo de ramificación y acotamiento depende de la calidad de la relajación convexa utilizada para subestimar al problema no convexo. Tanto menor sea la diferencia entre la función objetivo y su relajación, mejor es la aproximación. En este contexto, se desarrolló un nuevo subestimador convexo para subestimar el área de un intercambiador de calor utilizando como fuerza motriz la diferencia media logarítmica de temperatura.

El nuevo subestimador convexo proporciona una representación exacta cuando las temperaturas de entrada para las corrientes caliente y fría son conocidas con precisión.

El nuevo subestimador convexo fue incorporado dentro del esquema de ramificación y acotamiento presentado en el Capítulo 4 dando como resultado la obtención de cotas muy justas al valor de la función objetivo por lo que se requirió de un análisis de 10 nodos para determinar el diseño óptimo global del Ejemplo Ilustrativo 5.2

Trabajo futuro:

Es necesario desarrollar nuevos estimadores que puedan incorporarse al algoritmo de ramificación y acotamiento para realizar una búsqueda más eficiente del diseño óptimo global para redes de intercambio de calor.

BIBLIOGRAFIA

C. S. Adjiman, C. A. Floudas (1998), A global optimization method, α BB, for general twice-differentiable constrained NLPs - I. Theoretical advances, *Computers chem. Eng.***22**, 1137-1158.

C. S. Adjiman, C. A. Floudas y col. (1998), A global optimization method, α BB, for general twice-differentiable constrained NLPs - II. Implementation and computational results, *Computers chem. Eng.***22**, 1159-1179.

Bazaraa, M.S. and Shetty, C.M. (1979), *Nonlinear Programming*, John Wiley, New York.

Boender, C.G.E. and Romeijn, H.E. (1995), Stochastic Methods, in *Handbook of Global Optimization*, Horst, R. and Pardalos, P.M., Kluwer Academic Publishers, 829-869.

Brooke, A., Kendrick, D. and Meeraus, A. (1992), *GAMS. A User's Guide*, Release 2.25, Scientific Press.

Edgar T.F. and Himmelblau D. M. (1989), *Optimization of Chemical Processes*, McGraw-Hill International Editions.

Edwin K. P. Chong y Stanislaw H. Zak (1996), *An Introduction to Optimization*, John Wiley and Sons, Inc,

C. A. Floudas y P. M. Pardalos (1990) A Collection of Test Problems for Constrained Global Optimization Algorithms, Vol. 455 of Lecture Notes in Computer Science. Springer-Verlag

C. A. Floudas y P. M. Pardalos, editors (1992). *Recent Advances in Global Optimization*. Princeton Series in Computer Science. Princeton University Press.

C. A. Floudas y V. Visweswaran. A global optimization algorithm (GOP) for certain classes of nonconvex NLPs - I. Theory. *Computer and Chemical Engineering*, 14(12):1397-1417, 1990.

Grossmann, I.E. and Santibanez, J. (1980), Applications of Mixed Integer Linear Programming in Process Synthesis, *Computers chem. Engng.*, **4**, 205

Grossmann, I.E., (1990), Mixed-Integer Nonlinear Programming Techniques for the Synthesis of Engineering Systems, *Res. Eng. Des.* **1**, 205.

Grossmann, I.E. and Kravanja, Z. (1995), Mixed- Integer Nonlinear Programming Techniques for Process Systems Engineering, *Computers chem. Engng.*, **19**, Suppl. pp S189-S204.

Grossmann, I.E., Ed. (1996), *Global Optimization in Engineering Design*, Kluwer Academic Publishers.

E. R. Hansen (1992). *Global Optimization using Interval Analysis*. Marcel Dekker.

Horst, R. and Tuy, H. (1993), *Global Optimization: Deterministic Approaches*, Second Edition, Springer-Verlag, Berlin.

Horst, R. and Pardalos, P.M., Eds. (1995a), *Handbook of Global Optimization*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands.

Horst, R. and Pardalos, P.M., Eds. (1995b), *Introduction to Global Optimization*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands.

Kumar, A. and Lucia, A. (1987), Separation Process Optimization Calculations, *IMACS J. Appl. Num. Math.* **3**, 409-425.

Lucia *et al.* (1996), Nonconvex Process optimization, *Computers and chem. Eng.* **20**, 1375-1398.

McDonald, C.M. and Floudas, C.A. (1995), Global Optimization for the Phase Stability Problem, *AIChE Journal* **41**, 1798.

Maranas, C.D. et al. (1996), Locating All Azeotropes in Homogeneous Azeotropic Systems, *Computers chem. Eng.* **20**, Suppl.S413-S418..

Mauderli, A.M. and Rippin, D.W.T. (1979), Production Planning and Scheduling for y contracción Multipurpose Batch Chemical Plants, *Computers and chem. Eng.* **3**, 199-206.

Moore, R.E. (1966), *Interval Analysis*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.

Ryoo, H.S. and Sahinidis, N.V. (1996), A Branch-and-Reduce Approach to Global Optimization, *Journal of Global Optimization* **8**, 107-138.

Quesada, I. and Grossmann, I.E. (1992), An LP/NLP Based Branch and Bound Algorithm for Convex MINLP Optimization Problems, *Computers chem. Eng.* **16**, 937-947.

Quesada, I. and Grossmann, I.E. (1993), Global Optimization Algorithm for Heat Exchanger Networks, *Ind. Eng. Chem. Res.* **32**, 487-499.

Quesada, I. and Grossmann, I.E. (1995a), A Global Optimization Algorithm for Linear Fractional and Bilinear Programs, *Journal of Global Optimization* **6**, 39-76.

Staus, G.H., Biegler, L.T. and Ydstie, B.E. (1995), Adaptive Control via Non-Convex Optimization, in *State of the Art in Global Optimization: Computational Methods and Applications*, Floudas, C.A. and Pardalos, P.M., Ed., Kluwer Academic Publishers.

Swaney, R. (1990), Global Solution of Algebraic Nonlinear Programs, Paper 22F, AIChE National Meeting, Chicago IL.

Thakur, L.S. (1991), Domain Contraction in Nonlinear Programming: Minimizing a Quadratic Concave Objective over a Polyhedron, *Mathematics of Operations Research* **16**, 390-407.

Visweswaran, V. and Floudas C.A. (1990) A Global Optimization (GOP) for Certain Classes of Nonconvex NLPs-II Application of Theory and Test Problems, *Computers and chem. Eng.* 14, 1419-1434.

Visweswaran, V. and Floudas C.A. (1996) New Formulations and Branching Strategies for the GOP Algorithm, in *Global Optimization in Engineering Design*, Grossmann I.E., Ed., Kluwer Academic Publishers.

Zamora, J.M. and Grossmann, I.E. (1996), Global Optimization Approach of MINLP problems, Paper ME29-3, INFORMS Spring Meeting, Washington, D.C.

Zamora, J.M. and Grossmann, I.E. (1997), A Comprehensive Global Optimization Approach for the Synthesis of Heat Exchanger Networks with no Stream Splits, *Computers and chem. Eng.* **21**, Suppl. S65-S70.

Zamora, J.M. and Grossmann, I.E. (1998a), Continuous Global Optimization of Structured Process Systems Models, *Computers chem. Eng.* **22(12)**, 1749-1770.

Zamora, J.M. and Grossmann, I.E. (1998b), A Global MINLP Optimization Algorithm for the Synthesis of Heat Exchanger Networks with no Stream Splits, *Computers and chem. Eng.* **22** (3), Suppl. 367-384

Zamora, J.M. and Grossmann, I.E. (1999a), A Branch and Contract Algorithm for Problems with Concave Univariate, Bilinear and Linear Fractional Terms, *Journal of Optimization*.

Zamora, J.M., Grossmann, I.E., and Hashemi -Ahmady, A. (1999b), Global Optimization of Heat Exchanger Networks, in preparation.

APENDICE 1

ESTRUCTURA GENERAL PARA RESOLVER UN PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN GLOBAL DE REDES DE INTERCAMBIO DE CALOR POR MEDIO DE GAMS

1 Se asignan datos de entrada:

- a) Se declaran las variables y ecuaciones a utilizar.
- b) Se define el conjunto de variables de partición, coeficientes globales de transferencia de calor, flujos de capacidad calorífica y las ecuaciones.
- c) Se definen las cotas iniciales, los puntos iniciales.

2. Se declara el ciclo iterativo para la reducción por factibilidad.

3. Se declara el Modelo Convexo Relajado.

- a) Función objetivo (minimizar el costo de la red de intercambio de calor.
- b) Restricciones del modelo.
- c) Estimadores utilizados para relajar los términos no convexos.

4. Se declara el Modelo No Convexo.

- a) Función objetivo.
- b) Restricciones del modelo.

5. Se llama al resolutor utilizado en los modelos.

6. Impresión de resultados.

APENDICE 2

EXPRESIONES PARA LA REDUCCION POR FACTIBILIDAD DEL EJEMPLO 4.1

***** INICIA LA REDUCCION POR FACTIBILIDAD *****

$$q_1^L = \text{Max} \left[q_1^L, 999.9 - q_3^U, 1000 - q_2^U, 5.555(t_1^L - 395) \right]$$

$$q_1^U = \text{Min} \left[q_1^U, 999.9 - q_3^L, 1000 - q_2^L, 5.555(t_1^U - 395) \right]$$

$$q_2^L = \text{Max} \left[q_2^L, 1000 - q_1^U, 1000 - q_4^U, 3.125(t_2^L - 398) \right]$$

$$q_2^U = \text{Min} \left[q_2^U, 1000 - q_1^L, 1000 - q_4^L, 3.125(t_2^U - 398) \right]$$

$$q_3^L = \text{Max} \left[q_3^L, 999.9 - q_1^U, 5.555(575 - t_1^U), 4.545(t_3^L - 365) \right]$$

$$q_3^U = \text{Min} \left[q_3^U, 999.9 - q_1^L, 5.555(575 - t_1^L), 4.545(t_3^U - 365) \right]$$

$$q_4^L = \text{Max} \left[q_4^L, 1000 - q_2^U, 3.125(718 - t_2^U), 3.571(t_4^L - 358) \right]$$

$$q_4^U = \text{Min} \left[q_4^U, 1000 - q_2^L, 3.125(718 - t_2^L), 3.571(t_4^U - 358) \right]$$

***** TERMINA LA REDUCCION POR FACTIBILIDAD *****

APENDICE 3

EXPRESIONES PARA LA REDUCCION POR FACTIBILIDAD DEL EJEMPLO 4.2

***** INICIA LA REDUCCION POR FACTIBILIDAD *****

$$q_1^L = \text{Max} \left[q_1^L, 6650 - q_4^U, 7200 - q_2^U - q_4^U, 40(240 - t_1^U), 35(230 - t_4^U) \right]$$

$$q_1^U = \text{Min} \left[q_1^U, 6650 - q_4^L, 7200 - q_2^L - q_4^L, 40(240 - t_1^L), 35(230 - t_4^L), 35(240 - t_4^L - \Delta T_{\min}) \right]$$

$$q_2^L = \text{Max} \left[q_2^L, 3600 - q_3^U - q_6^U, 7200 - q_1^U - q_4^U, 40(t_1^L - t_2^L), 20(t_6^L - t_5^L) \right]$$

$$q_2^U = \text{Min} \left[q_2^U, 3600 - q_3^L - q_6^L, 7200 - q_1^L - q_4^L, 40(t_1^U - t_2^L), 20(t_6^U - t_5^L), 20(t_1^U - t_5^L - \Delta T_{\min}) \right]$$

$$q_3^L = \text{Max} \left[q_3^L, 3150 - q_5^U, 3600 - q_2^U - q_6^U, 30(180 - t_3^U), 20(t_5^L - 120) \right]$$

$$q_3^U = \text{Min} \left[q_3^U, 3150 - q_5^L, 3600 - q_2^L - q_6^L, 30(180 - t_3^L), 20(t_5^U - 120), 20(60 - \Delta T_{\min}) \right]$$

$$q_4^L = \text{Max} \left[q_4^L, 6650 - q_1^U, 7200 - q_1^U - q_2^U, 40(t_2^L - 60), 35(t_4^L - 40) \right]$$

$$q_4^U = \text{Min} \left[q_4^U, 6650 - q_1^L, 7200 - q_1^L - q_2^L, 40(t_2^U - 60), 35(t_4^U - 40), 35(t_2^U - 40 - \Delta T_{\min}) \right]$$

$$q_5^L = \text{Max} \left[q_5^L, 3150 - q_3^U \right]$$

$$q_5^U = \text{Min} \left[q_5^U, 3150 - q_3^L \right]$$

$$q_6^L = \text{Max} \left[q_6^L, 3600 - q_2^U - q_3^U \right]$$

$$q_6^U = \text{Min} \left[q_6^U, 3600 - q_2^L - q_3^L \right]$$

$$t_1^L = \text{Max} \left(t_1^L, 240 - q_1^U / 40, t_2^L + q_2^L / 40 \right)$$

$$t_1^U = \text{Min} \left(t_1^U, 240 - q_1^L / 40, t_2^U + q_2^U / 40 \right)$$

$$t_2^L = \text{Max} \left(t_2^L, 60 + q_4^L / 40, t_1^L - q_2^U / 40 \right)$$

$$t_2^U = \text{Min} \left(t_2^U, 60 + q_4^U / 40, t_1^U - q_2^L / 40 \right)$$

$$t_3^L = \text{Max} \left(t_3^L, 180 - q_3^U / 30, 75 + q_5^L / 30 \right)$$

$$t_3^U = \text{Min} \left(t_3^U, 180 - q_3^L / 30, 75 + q_5^U / 30 \right)$$

$$t_4^L = \text{Max} \left(t_4^L, 230 - q_1^U / 35, 40 + q_4^L / 35 \right)$$

$$t_4^U = \text{Min} \left(t_4^U, 230 - q_1^L / 35, 40 + q_4^U / 35 \right)$$

$$t_5^L = \text{Max} \left(t_5^L, 120 + q_3^L / 20, t_6^L - q_2^U / 20 \right)$$

$$t_5^U = \text{Min} \left(t_5^U, 120 + q_3^U / 20, t_6^U - q_2^L / 20 \right)$$

$$t_6^L = \text{Max} \left(t_6^L, 300 - q_6^U / 20, t_5^L + q_2^L / 20 \right)$$

$$t_6^U = \text{Min} \left(t_6^U, 300 - q_6^L / 20, t_5^U + q_2^U / 20 \right)$$

***** TERMINA LA REDUCCION POR FACTIBILIDAD *****

APENDICE 4

Propiedad 4.2 Sea ΔT una variable positiva continua y α una constante con $\Delta T > 0$, $\alpha > 0$. Entonces la función,

$$f(\Delta T) = \left(\frac{1}{\Delta T} \right)^\alpha \quad (\text{A4-1})$$

es convexa.

Demostración.

La función en (A4-1) es función de una sola variable, su segunda derivada está dada por:

$$\frac{d^2 f}{d\Delta T^2} = \frac{\alpha(1+\alpha) \left(\frac{1}{\Delta T} \right)^\alpha}{\Delta T^2}$$

Debido a que α y $\alpha(1+\alpha)$ son positivas, la segunda derivada toma siempre valores positivos. Esto implica que la función en (A4-1) es convexa.

APENDICE 5

EXPRESIONES PARA LA REDUCCION POR FACTIBILIDAD DEL EJEMPLO 5.1

**** INICIA LA REDUCCIÓN POR FACTIBILIDAD ****

$$F_1^L = \text{Max} \left[F_1^L, 22 - F_2^U, F_3^L - F_8^L, \frac{t_3^L F_3^L}{440} - \frac{t_{78}^L F_8^L}{440} \right]$$

$$F_1^U = \text{Min} \left[F_1^U, 22 - F_2^L, F_3^U - F_8^L, \frac{t_3^U F_3^U}{440} - \frac{t_{78}^L F_8^L}{440} \right]$$

$$F_2^L = \text{Max} \left[F_2^L, 22 - F_1^U, F_4^L - F_6^L, \frac{t_4^L F_4^L}{440} - \frac{t_{56}^L F_6^L}{440} \right]$$

$$F_2^U = \text{Min} \left[F_2^U, 22 - F_1^L, F_4^U - F_6^L, \frac{t_4^U F_4^U}{440} - \frac{t_{56}^L F_6^L}{440} \right]$$

$$F_3^L = \text{Max} \left[F_3^L, F_5^L + F_6^L, F_1^L + F_8^L, \frac{440 F_1^L}{t_3^U} + \frac{t_{78}^L F_8^L}{t_3^U}, \frac{1620}{t_3^U - t_{56}^U} \right]$$

$$F_3^U = \text{Min} \left[F_3^U, F_5^U + F_6^U, F_1^U + F_8^U, \frac{440 F_1^U}{t_3^L} + \frac{t_{78}^U F_8^U}{t_3^L}, \frac{1620}{t_3^L - t_{56}^L} \right]$$

$$F_4^L = \text{Max} \left[F_4^L, F_2^L + F_6^L, F_7^L + F_8^L, \frac{440 F_2^L}{t_4^U} + \frac{t_{56}^L F_6^L}{t_4^U}, \frac{360}{t_4^U - t_{78}^U} \right]$$

$$F_4^U = \text{Min} \left[F_4^U, F_2^U + F_6^U, F_7^U + F_8^U, \frac{440 F_2^U}{t_4^L} + \frac{t_{56}^U F_6^U}{t_4^L}, \frac{360}{t_4^L - t_{78}^L} \right]$$

$$F_5^L = \text{Max} \left[F_5^L, 22 - F_7^U, F_3^L - F_6^L \right]$$

$$F_5^U = \text{Min} \left[F_5^U, 22 - F_7^L, F_3^U - F_6^L \right]$$

$$F_6^L = \text{Max} \left[F_6^L, F_4^L - F_2^L, F_3^L - F_5^L, \frac{t_4^L F_4^L}{t_{56}^U} - \frac{440 F_2^U}{t_{56}^L} \right]$$

$$F_6^U = \text{Min} \left[F_6^U, F_4^U - F_2^L, F_3^U - F_5^L, \frac{t_4^U F_4^U}{t_{56}^L} - \frac{440 F_2^L}{t_{56}^U} \right]$$

$$F_7^L = \text{Max} \left[F_7^L, 22 - F_5^U, F_4^L - F_8^L \right]$$

$$F_7^U = \text{Min} \left[F_7^U, 22 - F_5^L, F_4^U - F_8^L \right]$$

$$\begin{aligned}
F_8^L &= \text{Max} \left[F_8^L, F_3^L - F_1^L, F_4^L - F_7^L, \frac{t_3^L F_3^L}{t_{78}^U} - \frac{440 F_1^U}{t_{78}^L} \right] \\
F_8^U &= \text{Min} \left[F_8^U, F_3^U - F_1^L, F_4^U - F_7^L, \frac{t_3^U F_3^U}{t_{78}^L} - \frac{440 F_1^L}{t_{78}^U} \right] \\
t_3^L &= \text{Max} \left[t_3^L, \frac{1620}{F_3^U} + t_{56}^L, \frac{440 F_1^L}{F_3^U} + \frac{t_{78}^L F_8^L}{F_3^U} \right] \\
t_3^U &= \text{Min} \left[t_3^U, \frac{1620}{F_3^L} + t_{56}^U, \frac{440 F_1^U}{F_3^L} + \frac{t_{78}^U F_8^U}{F_3^L} \right] \\
t_4^L &= \text{Max} \left[t_4^L, \frac{360}{F_4^U} + t_{78}^L, \frac{440 F_2^L}{F_4^U} + \frac{t_{56}^L F_6^L}{F_4^U} \right] \\
t_4^U &= \text{Min} \left[t_4^U, \frac{360}{F_4^L} + t_{78}^U, \frac{440 F_2^U}{F_4^L} + \frac{t_{56}^U F_6^U}{F_4^L} \right] \\
t_{56}^L &= \text{Max} \left[t_{56}^L, t_3^L - \frac{1620}{F_3^U}, \frac{t_4^L F_4^L}{F_6^U} - \frac{440 F_2^L}{F_6^U} \right] \\
t_{56}^U &= \text{Min} \left[t_{56}^U, t_3^U - \frac{1620}{F_3^L}, \frac{t_4^U F_4^U}{F_6^L} - \frac{440 F_2^U}{F_6^L} \right] \\
t_{78}^L &= \text{Max} \left[t_{78}^L, t_4^L - \frac{360}{F_4^U}, \frac{t_3^L F_3^L}{F_8^U} - \frac{440 F_1^L}{F_8^U} \right] \\
t_{78}^U &= \text{Min} \left[t_{78}^U, t_4^U - \frac{360}{F_4^L}, \frac{t_3^U F_3^U}{F_8^L} - \frac{440 F_1^U}{F_8^L} \right]
\end{aligned}$$

***** TERMINA LA REDUCION POR FACTIBILIDAD *****

APENDICE 6

Demostración: Dada una función $f(F) = \frac{t_{i,in} - t_{j,in} - q_{ij} / F}{t_{i,in}^U - t_{j,in}^L - q_{ij} / F}$, la cual tiene un comportamiento

monotónicamente creciente con respecto a F , es decir que si $F_i < F_j$, entonces $f(F_i) > f(F_j)$.

Su primera derivada está dada por:

$$f'(F) = \frac{q(t_{i,in}^U - t_{i,in} + t_{j,in} - t_{j,in}^L)}{\left[(t_{i,in}^U - t_{j,in}^L)F - q \right]^2} \quad (A6.1)$$

De (A6.1) se observa claramente que $f'(F) \geq 0$, esto implica que cuando $t_{i,in} = t_{i,in}^U$ y $t_{j,in} = t_{j,in}^L$ toma el valor de cero; y para cualquier otro caso tiene un valor positivo. Por lo tanto $f'(F) \geq 0$.