



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD IZTAPALAPA  
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

**Metodología de programación no lineal  
y formulaciones de programación no lineal entera mixta  
para la optimización de redes de intercambio de calor  
con topología pre-establecida**

Tesis que presenta

**M. en C. Rosa Iris Núñez Serna**

para obtener el grado de

Doctora en Ciencias (Ingeniería Química)

Asesor:

**Dr. Juan Manuel Zamora Mata**

Sinodales:

Dr. Felipe López Isunza

Dr. Carlos Martínez Vera

Dr. Arturo Jiménez Gutiérrez

Dr. Héctor Fernando Puebla Núñez

Dr. Vicente Rico Ramírez

México, D.F., 6 de diciembre de 2018

A los amores de mi vida, mis hijos Esteban y Rodrigo

A mi mejor amigo y amor, Arturo

A mi mejor amiga, mi mamá, Rosario y mi hermano, Artemio

A la memoria de mi padre, Artemio Núñez Pérez

## RESUMEN

Esta tesis se ocupa del desarrollo de herramientas para la optimización global de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida. En el Capítulo 1, se presenta brevemente el estado del arte en la síntesis de redes de intercambio de calor, para sentar las bases del surgimiento y la importancia del problema de diseño óptimo, objeto de estudio en esta tesis.

En el Capítulo 2, se plantea el problema de diseño óptimo de una red de intercambio de calor, dada una topología que ha sido pre-establecida por una metodología de síntesis. Se presenta un modelo de programación no lineal ( $P$ ) que minimiza el costo total anual de la red con base en la representación de la estructura de la red mediante un diagrama de malla por etapas que permite incorporar elementos comprendidos en esquemas de superestructura así como otros elementos topológicos. Se propone una metodología estocástica multi-arranque en dos fases para realizar una exploración adecuada de la región factible del modelo en búsqueda de una solución. La aplicación de las estrategias de modelado y el algoritmo de optimización global estocástica se ilustra con la solución detallada de dos problemas con 9 y 10 corrientes de proceso y con 15 y 11 intercambiadores de calor, respectivamente.

En el Capítulo 3, se explora la optimización global determinista de una red de intercambio de calor con topología pre-establecida. Se presentan cuatro formulaciones para el acotamiento inferior riguroso del costo total anual de la red usando estimadores convexos por segmentos para la relajación de los términos no convexos involucrados en la función objetivo de costo y en los balances de energía en sub-corrientes. Se desarrollan con base en una relajación convexa básica que sólo requiere cotas de cargas térmicas, por lo que se establecen mallas uniformes y no uniformes en el dominio de las cargas térmicas de los equipos de intercambio de calor. El desempeño de cada formulación y cada estrategia de mallado se ilustra con un caso de estudio que cuenta con 5 corrientes de proceso y 4 intercambiadores de calor en la red.

En el Capítulo 4, se resumen los principales resultados y contribuciones de la disertación, se comentan algunas conclusiones y se esbozan algunas recomendaciones para el trabajo futuro.

## ABSTRACT

This dissertation is concerned with the development of techniques for stochastic and deterministic global optimization of heat exchanger networks with fixed topology. In Chapter 1, we briefly present the state of the art in the synthesis of heat exchanger networks, to establish the origin and the importance of the optimal design problem with which we work on this thesis.

Chapter 2 of this dissertation poses the problem of optimal design of a heat exchanger network, given a topology that has been pre-established by a synthesis methodology. A nonlinear programming model ( $P$ ) is presented that minimizes the total annual cost of the network and it is constructed based on a stage-wise grid diagram representation. The stage-wise grid diagram allows incorporating structural elements included in the superstructures as well as other topological elements. To improve the possibilities of obtaining global optimal designs, a two-phase stochastic multi-start optimization algorithm is proposed for the solution of the developed model. The methodology is utilized to carry out an adequate exploration of the feasible region of the non-convex model in search of a solution. The effectiveness of the proposed modeling strategies and the stochastic global optimization algorithm is illustrated with the detailed solution of two problems with 9 and 10 process streams and with 15 and 11 heat exchangers, respectively.

Chapter 3 explores the deterministic global optimization of a heat exchanger network with fixed topology. Four convex models are presented for the lower bounding operation of the total annual cost. The underestimating problems are constructed using piecewise underestimating functions for non-convex terms involved in the area cost of heat exchangers and in the energy balances for sub-streams. In order to set up these inequalities only bounds for the heat duties are required, so the relaxations are constructed over a uniform and non-uniform partition of the domain for heat duties. The performance of each convex underestimating problem and each partition strategy is illustrated with the solution of a case study that has 5 process streams and 4 heat exchangers in the network.

Chapter 4 summarizes the main results and contributions of the dissertation, and outlines several recommendations for future work.

## AGRADECIMIENTOS

Quiero expresar mi gratitud al Dr. Juan Manuel Zamora Mata por su dedicación en todo, por compartir conmigo sus conocimientos, su tiempo y su experiencia, por ser un gran maestro para mí y sobre todo, por toda su paciencia en la dirección de la presente tesis de investigación, Gracias Juan.

Al Consejo Nacional de Ciencia Y Tecnología (CONACYT) por la beca de estudios de posgrado otorgada para el desarrollo de este trabajo de investigación.

A la Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa (UAM-I) por brindarme un espacio para desarrollarme en una etapa más de mi formación profesional y la oportunidad de concluirla.

Al laboratorio de Síntesis, Optimización y Simulación de Procesos del Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica, por las facilidades otorgadas.

A los sinodales de la presente tesis doctoral, Dr. Felipe López, Dr. Carlos Martínez, Dr. Arturo Jiménez, Dr. Héctor Puebla y Dr. Vicente Rico, por su tiempo empleado en la revisión de la tesis, su disposición en ayudarme, sus consejos y su valiosa ayuda, que han contribuido considerablemente a consolidar este trabajo.

A mis maestros que compartieron conmigo sus conocimientos y experiencia en los cursos impartidos durante mi formación.

Finalmente y de manera muy especial, a mi familia y amigos, por su apoyo y amistad incondicional en todo momento sin importar las circunstancias y las distancias.

## ÍNDICE

<b>RESUMEN</b> .....	iii
<b>ABSTRACT</b> .....	iv
<b>AGRADECIMIENTOS</b> .....	v
<b>LISTA DE FIGURAS</b> .....	ix
<b>LISTA DE TABLAS</b> .....	x

Capítulo	Página
<b>1. INTRODUCCIÓN</b> .....	1
1.1 La integración térmica de procesos y la síntesis de redes de intercambio de calor ...	1
1.2 Estado del arte.....	2
1.3 Alcances de la investigación.....	4
1.3.1 Optimización global estocástica.....	5
1.3.2 Optimización global determinista.....	5
1.4 Organización de la tesis.....	6
1.4.1 Modelo de programación no lineal y metodología con multi-arranque estocástico en dos fases .....	6
1.4.2 Formulación de programación no lineal entera mixta y metodología determinista.....	6
1.4.3 Conclusiones.....	7
<b>2. MODELO DE PROGRAMACIÓN NO LINEAL Y METODOLOGÍA CON MULTI-ARRANQUE ESTOCÁSTICO EN DOS FASES</b> .....	8
2.1 Introducción .....	8
2.2 Formulación del problema .....	12
2.3 Modelo generalizado .....	13
2.3.1 Representación de topologías pre-establecidas de redes de intercambio de calor.....	13
2.3.2 Modelo matemático ( $P$ ) para la optimización de redes de intercambio de calor .....	16

2.4 Metodología de optimización multi-arranque .....	22
2.4.1 Algoritmo con multi-arranque estocástico en dos fases para la búsqueda aleatoria de soluciones óptimas locales.....	22
2.4.2 Cotas analíticas de las variables de decisión .....	26
2.4.3 Cotas numéricas de las variables de decisión .....	28
2.5 Problemas Ilustrativos .....	29
2.5.1 Problema 2.1.....	29
2.5.2 Problema 2.2.....	34
2.6 Conclusiones .....	39
<b>3. FORMULACIONES DE PROGRAMACIÓN NO LINEAL ENTERA MIXTA Y METODOLOGÍA DETERMINISTA .....</b>	<b>41</b>
3.1 Introducción .....	41
3.2 Formulación del problema .....	45
3.3 Caso de estudio 3.1.....	48
3.3.1 Modelo de programación no lineal no convexo .....	49
3.3.2 Formulación de programación no lineal convexa básica .....	52
3.4 Estimadores convexos por segmentos de los términos fraccionales lineales – Formulación I .....	54
3.5 Estimadores convexos por segmentos de los términos fraccionales lineales – Formulación II.....	58
3.6 Estimadores convexos por segmentos de los términos fraccionales lineales – Formulación III.....	60
3.7 Resultados .....	63
3.8 Metodología de optimización global determinista.....	66
3.8.1 Reformulación del modelo de programación no lineal no convexo.....	66
3.8.2 Estimadores convexos por segmentos de los términos fraccionales lineales – Formulación IV.....	67
3.8.3 Estrategias de mallado .....	70
3.8.4 Resultados .....	71

3.8.5 Prototipo de algoritmo para la optimización global determinista de redes de intercambio de calor .....	72
3.9 Conclusiones .....	74
<b>4. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO .....</b>	<b>76</b>
4.1 Resumen de esta investigación .....	76
4.1.1 Optimización global estocástica de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida .....	76
4.1.2 Optimización global determinista de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida .....	79
4.2 Contribuciones del trabajo de investigación .....	81
4.2.1 Optimización global estocástica de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida .....	81
4.2.2 Optimización global determinista de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida .....	83
4.3 Sugerencias para posibles líneas de investigación en un trabajo futuro .....	84
4.3.1 En la optimización global estocástica de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida .....	84
4.3.2 En la optimización global determinista de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida .....	85
<b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>86</b>



## LISTA DE FIGURAS

	Página
Figura 2.1 Elementos topológicos diversos de redes de intercambio de calor.....	14
Figura 2.2 Representación del diagrama de malla por etapas.....	15
Figura 2.3 Metodología de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases .....	25
Figura 2.4 Diseño base para el Problema Ilustrativo 2.1.....	31
Figura 2.5 Diseño óptimo local para el Problema Ilustrativo 2.1.....	32
Figura 2.6 Diseño base para el Problema Ilustrativo 2.2.....	36
Figura 2.7 Diseño óptimo local P1 para el Problema Ilustrativo 2.2.....	37
Figura 2.8 Diseño óptimo local P2 para el Problema Ilustrativo 2.2.....	38
Figura 3.1 Sub-estimación convexa de un problema no convexo en dos variables.....	46
Figura 3.2 Red de intercambio de calor para el Caso de estudio 3.1.....	49
Figura 3.3 Malla uniforme en el dominio de la variable de carga térmica .....	55
Figura 3.4 Estimación de la cota inferior rigurosa en función del número de intervalos presentes en las mallas de las variables de cargas térmicas.....	65
Figura 3.5 Evolución del acercamiento entre cotas con diferentes estrategias de mallado..	71
Figura 3.6 Estimación de la cota inferior rigurosa en función del número de intervalos presentes en las mallas de las variables de cargas térmicas para la metodología determinista..	74

## LISTA DE TABLAS

	Página
Tabla 2.1 Datos para el Problema Ilustrativo 2.1 .....	30
Tabla 2.2 Tabla comparativa de diseños para el Problema Ilustrativo 2.1 .....	33
Tabla 2.3 Datos para el Problema Ilustrativo 2.2.....	34
Tabla 2.4 Frecuencias en los diseños para el Problema Ilustrativo 2.2.....	36
Tabla 3.1 Datos para el Caso de estudio 3.1.....	48
Tabla 3.2 Desempeños de las formulaciones convexas por segmentos .....	64

# 1. INTRODUCCIÓN

La integración térmica de procesos es un área de investigación cuyo objetivo consiste en lograr un mejor aprovechamiento de la energía en los procesos industriales. Actualmente sigue siendo un área muy activa debido a los retos que enfrenta la industria moderna en materia energética y ambiental. Los costos asociados al uso de energía constituyen una parte importante del costo total de operación en la mayoría de los sistemas de proceso a nivel industrial y debido a los constantes incrementos que presentan, es necesario buscar alternativas para cubrir los requerimientos energéticos de los procesos a un menor costo.

## 1.1 La integración térmica de procesos y la síntesis de redes de intercambio de calor

La integración térmica de un proceso mediante redes de intercambio de calor presenta una opción para reducir el consumo de energía en servicios auxiliares, lo que puede implicar un ahorro de energía térmica y una disminución de los costos totales del proceso, si los costos de capital asociados a la recuperación de calor son razonablemente bajos. Por esto, la síntesis de redes de intercambio de calor continúa representando un problema importante en la ingeniería de procesos.

El objetivo de la síntesis consiste en diseñar eficientemente una red de intercambio de calor que tenga el costo total mínimo, sin embargo, no es una tarea fácil; más aún si se toma en cuenta la naturaleza de las sustancias de cada corriente, su ubicación dentro de la planta, la seguridad del proceso y su control. El número de posibles estructuras de red es muy grande aún para problemas con pocas corrientes y crece exponencialmente con el número de ellas. Además, los modelos de evaluación de los costos totales anuales generalmente exhiben características no convexas que dan lugar en muchos casos a la existencia de múltiples soluciones óptimas locales por lo que determinar la solución que implique el menor costo se vuelve una tarea complicada.

Atendiendo a estas complicaciones, diversas metodologías han sido desarrolladas y aplicadas en la síntesis de redes de intercambio de calor, para una revisión puede leerse Gundersen y Naess (1988), Jeżowski (1994a y 1994b) y Furman y Sahinidis (2002a,b).

## **1.2 Estado del arte**

Las metodologías aplicadas en la síntesis de redes de intercambio de calor se pueden clasificar en tres grandes grupos: i) punto de pliegue, ii) programación matemática y iii) metodologías estocásticas.

Las metodologías de punto de pliegue (Linnhoff y Flower, 1978; Linnhoff y Hindmarsh, 1983; Hashemi-Ahmady y col., 1999) son métodos secuenciales de diseño que incluyen elementos heurísticos. La base consiste en descomponer el problema de síntesis en sub-problemas que determinan metas de diseño para la recuperación de energía, consumo de servicios auxiliares, área de intercambio de calor, número de intercambiadores de calor y costo total anual de la red. Si bien, establecer estas metas proporciona una base útil que guía el proceso de diseño hacia las características que tendrá la red de intercambio de calor, el resultado no necesariamente produce el diseño que tiene el menor costo total anual.

Las metodologías de programación matemática para la síntesis de redes de intercambio de calor incluyen estrategias secuenciales, sin embargo, la mayoría se han orientado hacia estrategias simultáneas (Yee y Grossmann, 1990; Ciric y Floudas, 1991; Sorsak y Kravanja, 2002; Isafiade y Fraser, 2008; Ponce-Ortega, Serna-González y Jiménez-Gutiérrez, 2010; Huang y Karimi, 2012; Na y col., 2015; Pavão y col., 2018), optimizando el consumo de energía, el área de transferencia de calor, el número de apareamientos entre corrientes y el número de equipos de intercambio de calor, sin descomposición alguna. Para ello, se han desarrollado modelos matemáticos de programación no lineal entera mixta que exhiben características no convexas que originan en la mayoría de los casos la existencia de múltiples soluciones óptimas locales. Para la solución de estas formulaciones de programación no lineal entera mixta, se han utilizado técnicas de optimización local y técnicas de optimización global determinista (Zamora y Grossmann, 1997, 1998; Adjiman y col., 2000; Björk y Westerlund, 2002; Bergamini y col., 2007; Bogataj y Kravanja, 2012; Isafiade y col., 2015; Kim y Bagajewicz, 2017;

Nemet y col., 2018); sin embargo, por un lado las técnicas de optimización local ofrecen diseños subóptimos y por otro, las técnicas de optimización global determinista han estado limitadas a la solución de problemas estructurados que sólo involucran un número pequeño de corrientes de proceso debido al demandante trabajo computacional que requieren.

Las metodologías de optimización estocásticas fundamentan su implementación en la evaluación de funciones empleando meta-heurísticas que guían el proceso de búsqueda de una buena solución. Los diferentes enfoques incluyen: la búsqueda aleatoria pura, que consiste en generar una secuencia de puntos de inicio independientes y distribuidos en la región de búsqueda de manera uniforme, llevando registro del mejor punto considerando el valor de la función objetivo como criterio (Romeijn, 2009); los algoritmos genéticos (Holland, 1975), que se engloban dentro de las técnicas de computación evolutiva planteando resolver problemas basándose en la evolución natural de poblaciones, donde los individuos corresponden a las estructuras de solución del problema abordado y se manipulan con operadores genéticos como la selección, cruce y mutación con el fin de mejorar la aptitud media de la población; el recocido simulado (Kirkpatrick y col., 1983), que se origina como una analogía con el proceso físico del recocido de sólidos donde se busca encontrar estados en equilibrio haciendo transiciones entre estados mediante el criterio probabilístico de Metrópolis; la búsqueda tabú (Glover, 1990; Glover y Laguna, 1998), un método de búsqueda heurística que busca restringir movimientos considerados prohibidos en la manipulación; entre otros.

La implementación de estos enfoques estocásticos en metodologías para la síntesis de redes de intercambio de calor ha encontrado oportunidad debido principalmente a su habilidad para manejar problemas grandes sin necesidad de considerar las no convexidades en los modelos. La implementación explora desde los esquemas básicos como la búsqueda aleatoria pura (Chakraborty y Ghosh, 1999; Pariyani y col., 2006; Gupta y Ghosh, 2010), hasta meta-heurísticas más sofisticadas como: algoritmos genéticos (Lewin y col., 1998; Lewin, 1998; Dipama y col., 2008), el recocido simulado (Dolan y col., 1989, 1990; Peng y Cui, 2015), competencia en-línea (Yan y Ma, 2000), búsqueda tabú (Lin y Miller, 2004), enjambre de partículas (Silva y col., 2010), colonia de hormigas (Myankoooh y Shafiei,

2015), evolución diferencial (Yerramsetty y Murty, 2008) y más recientemente la búsqueda de Cuco (Zhang y Cui, 2018).

En la literatura especializada de síntesis de redes de intercambio de calor también se puede encontrar combinaciones de metodologías como: recocido simulado con procedimientos de programación no lineal (Athier y col., 1996, 1997), algoritmos genéticos con punto de pliegue (Ravagnani y col., 2005) algoritmos genéticos con recocido simulado (Yu y col., 2000), algoritmos genéticos con programación cuadrática secuencial (Gorji-Bandpy y col., 2011), algoritmos genéticos con cálculos térmicos explícitos (Chen y col., 2007), algoritmos genéticos híbridos con recocido simulado (Luo y col., 2009), algoritmos genéticos híbridos con mono genéticos (Fieg y col., 2009), búsqueda armónica con programación cuadrática secuencial (Khorasany y Fesanghary, 2009), búsqueda tabú con programación cuadrática secuencial (Chen y col., 2008), algoritmos genéticos con enjambre de partículas (Zhaoyi y col., 2013) y recocido simulado con enjambre de partículas (Pavão, Costa y Ravagnani, 2017), entre otros.

La principal desventaja de estas técnicas, es que frecuentemente se producen soluciones sub-óptimas. Los componentes básicos de cada una de las técnicas no rigurosas provienen de reglas heurísticas por lo que en la elección de estos componentes radican las principales diferencias entre implementaciones, esto es lo que distingue a un algoritmo de otro aún para la aplicación a un mismo problema.

### **1.3 Alcances de la investigación**

Las características combinatoria y no convexa del problema de síntesis de redes de intercambio de calor, aunado a las particularidades de las diferentes metodologías utilizadas y adecuadas para su solución, conllevan a un cierto grado de incertidumbre sobre los diseños obtenidos; ocasionando, en la mayoría de los casos, comparaciones no confiables entre diseños alternativos debido a la posibilidad de estar llevando a cabo dicha comparación entre diseños sub-óptimos. Esto puede ocasionar una mala toma de decisiones acerca de la mejor estructura de red y los valores para sus variables de operación. Esto abre posibilidades para buscar mejorar, en topología y en condiciones de operación, redes de intercambio de calor diseñadas previamente con alguna metodología de síntesis. Entonces,

con el problema de optimización de una red de intercambio de calor con topología pre-establecida, se pueden explotar estas oportunidades, de tal manera que sea posible determinar un mejor diseño con reducciones en el costo total anual e incrementar la confiabilidad de la toma de decisiones. Para esto, en esta tesis se desarrollan los siguientes dos puntos:

### **1.3.1 Optimización global estocástica**

Si bien los aspectos de las diferentes metodologías estocásticas de síntesis permiten que existan elementos de incertidumbre sobre la calidad de los diseños de redes de intercambio de calor que son obtenidos, emplear estrategias de optimización ya sobre el diseño pre-establecido, con base en reglas heurísticas, es una herramienta exitosa. Uno de los objetivos de este trabajo de investigación es desarrollar y emplear una alternativa de solución estocástica para hacer frente al problema de diseño óptimo de redes de intercambio de calor. Para ello se propone un *modelo de programación no lineal* y una *metodología con multi-arranque estocástico en dos fases para la búsqueda aleatoria de mejores soluciones* óptimas locales y globales en el problema de la optimización de una red de intercambio de calor con topología pre-establecida.

### **1.3.2 Optimización global determinista**

La optimización global determinista de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida utilizando un esquema de ramificación y acotamiento (Horst y Tuy, 2013) requiere, entre otras cosas, la obtención de una cota inferior para el valor de la función objetivo; dicha cota se determina con el desarrollo y la resolución de una relajación convexa del modelo de programación matemática no convexo asociado. Entonces, es de interés desarrollar una expresión matemática que permita una relajación convexa más justa de un modelo para el problema dentro de un esquema determinista. Para ello, en esta tesis, se desarrollan *modelos relajados convexos*, en este caso, *de programación no lineal entera mixta*, que constituyen una nueva estrategia de acotamiento inferior riguroso para el costo total de redes de intercambio de calor explorando el impacto de introducir *estimadores convexos por segmentos* para la relajación de los términos no convexos involucrados en la función objetivo de costo y en los balances de energía en las sub-corrientes; además, se

desarrolla una *metodología global determinista* con base en la partición del dominio de variables de cargas térmicas.

## **1.4 Organización de la tesis**

### **1.4.1 Modelo de programación no lineal y metodología con multi-arranque estocástico en dos fases**

En el Capítulo 2, se presentan una formulación de programación no lineal para la optimización de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida y una metodología con multi-arranque estocástico en dos fases para la búsqueda aleatoria de su solución, que permite determinar diseños óptimos locales y globales a través de la minimización del costo total anual de la red. Se muestra también la representación de las estructuras de redes de intercambio de calor mediante un diagrama de malla por etapas que permite capturar diversos elementos topológicos que no es posible incluir en superestructuras, como son, enfriadores o calentadores o apareamientos en serie en las sub-corrientes.

Las metodologías de síntesis con frecuencia identifican soluciones locales para los problemas con más de nueve corrientes de proceso, en el Capítulo 2 se exploran diseños alternativos partiendo de estas topologías como base. La representación permite que en el modelo de programación no lineal no sea necesario incluir el balance de energía en los mezcladores, lo que reduce el número de no convexidades requeridos por el modelo. Se presentan dos casos de estudio para ilustrar las capacidades de los elementos propuestos. Los resultados muestran que es posible realizar reducciones en el costo total anual de los diseños o sugerir modificaciones en las topologías base, que lleven a diseños alternativos.

### **1.4.2 Formulaciones de programación no lineal entera mixta y metodología determinista**

En el Capítulo 3, se presentan estimadores convexos por segmentos para la relajación de los términos fraccionales lineales involucrados en los términos de costo de los equipos de recuperación de calor dentro de una formulación convexa básica. La idea



principal en estos estimadores convexos por segmentos consiste en particionar el dominio de cada variable de carga térmica, se asigna una variable binaria a cada partición, y se establece un esquema de contribuciones por segmento para el costo total de la red. Se desarrollan tres diferentes esquemas de contribuciones por segmento y tres estrategias de mallado para particionar el dominio.

En el Capítulo 3, se ilustra el desempeño de cada estrategia con la optimización de una red de intercambio de calor que involucra la integración térmica de dos corrientes calientes y tres corrientes frías, con la interconexión de cuatro equipos y mezclado no isotérmico. Los resultados muestran que al introducir los estimadores por segmentos, la cota inferior obtenida es considerablemente más justa que la obtenida con una relajación convexa construida sobre una sola partición. Además, se desarrolla una metodología determinista para la optimización de redes de intercambio de calor utilizando los estimadores por segmentos desarrollados y con una partición del dominio de cargas térmicas adecuada.

### **1.4.3 Conclusiones**

En el capítulo 4 se resumen los principales resultados y las contribuciones de esta investigación, se presentan algunas conclusiones y se anotan algunas recomendaciones para trabajo futuro.

## **2. MODELO DE PROGRAMACIÓN NO LINEAL Y METODOLOGÍA CON MULTI-ARRANQUE ESTOCÁSTICO EN DOS FASES.**

### **2.1 Introducción**

El problema del diseño óptimo de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida se ha estudiado en la literatura con enfoques de programación matemática desde el trabajo pionero de Westerberg y Shah (1978). Estos autores presentan un modelo de programación no lineal que contempla funciones de costo no convexas y mezclado no isotérmico, además de un algoritmo de solución con una descomposición con base en los multiplicadores de Lagrange, que reinicia desde diferentes puntos del espacio de búsqueda, con una estrategia que divide la topología de red en subsistemas. Castellanos (1981) presenta la optimización de una red de intercambio de calor con un algoritmo para la optimización de funciones no lineales con base en la evolución de un simplex, abarcando inicialmente la mayor parte de la región factible limitada por las restricciones de diseño y reduciéndose gradualmente hasta converger en un punto óptimo local. Yee y Grossmann (1990) proponen obtener mejores diseños de redes considerando mezclado no isotérmico a través de la solución de problemas de programación no lineal para la optimización de las redes inicialmente generadas considerando mezclado isotérmico con el modelo Synheat en el problema de síntesis.

Por otro lado, también se han empleado metodologías meta-heurísticas, combinaciones de ellas o combinaciones con programación matemática, para estudiar el problema del diseño óptimo de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida.

Athier y col. (1996, 1997) presentan la aplicación de un método de recocido simulado, donde la configuración atómica del recocido simulado equivale a una configuración de la red de intercambio de calor. Estos autores desarrollaron un modelo de programación no lineal que incluye división de corrientes con mezclado isotérmico, múltiples apareamientos entre dos mismas corrientes y la diferencia media logarítmica de

temperatura, su metodología de solución se basa en una inicialización sencilla multi-arranque.

Lewin (1998) emplea un algoritmo genético con las estructuras de red como individuos y la función de evaluación operando sobre variables continuas calculando el costo total anual lineal en función de las áreas de transferencia de calor. La selección es proporcional a la aptitud y aunque la cruce es aleatoria, la mejor estructura se conserva siempre y un porcentaje dado de los padres exitosos se copian directamente en la siguiente generación.

Yu y col. (2000) presentan una técnica que combina un algoritmo genético con el recocido simulado y se le conoce como algoritmo GA/SA. Para inicializar se toma una solución viable, a partir de esta topología pre-establecida se hace una transferencia a una mejor zona de búsqueda para obtener una solución nueva. Estos autores consideran el diseño de redes sin división de corrientes en las que un mismo par de corrientes pueden presentar múltiples apareamientos y utilizan la diferencia media logarítmica de temperaturas.

Yan y Ma (2001) utilizan un algoritmo de competencia en línea donde los diseños de redes son las familias, las cuales son independientes y paralelas durante la evolución. Estos autores consideran la posibilidad de división de corrientes y utiliza la aproximación de Paterson (1984) para la diferencia de temperaturas. La topología pre-establecida se modela con base en la superestructura de Floudas y Ciric (1989).

Myankoooh y Shafiei (2015) abordan el problema de diseño óptimo de redes de intercambio de calor con topologías pre-establecidas con un algoritmo de optimización de colonias de hormigas trabajando en el espacio reducido de búsqueda de soluciones definido por las temperaturas de salida de las corrientes calientes en los intercambiadores de calor presentes en la red. Los resultados que presentan corresponden a problemas de diseño óptimos de tamaño pequeño a mediano; sin embargo, la aplicación del algoritmo se limita básicamente a la optimización de redes de intercambio de calor sin divisiones de corrientes. Las redes con divisiones de corrientes se optimizan eliminando las divisiones y aplicando el algoritmo para la generación de redes sin divisiones que sean competitivas con los diseños

originales. Un inconveniente adicional de la implementación del algoritmo de colonia de hormigas es el hecho de que se requiere el ajuste de seis parámetros operativos.

Short y col. (2016) presentan una metodología que utiliza la formulación Synheat y la superestructura de Yee y Grossmann (1990) para la generación de una red inicial, después, en la etapa de optimización de topología pre-establecida, modifican su función objetivo para incluir factores de corrección que incluyen el diseño detallado de intercambiadores individuales utilizando métodos tales como Bell-Delaware y heurísticos. La función objetivo modificada incluye parámetros que modifican las áreas obtenidas por el modelo Synheat para representar más de cerca las áreas obtenidas por los modelos detallados. Los factores de corrección tienen en cuenta las caídas de presión, consideraciones ambientales y los cambios en el coeficiente de transferencia de calor general de cada apareamiento, entre otros. Aplican una metodología iterativa para evaluar redes potenciales y se elige la mejor red, basada en los diseños detallados de los intercambiadores.

Pavão y col. (2017) utilizan un enfoque de recocido simulado para el nivel combinatorio y pre-establecer la topología que debe optimizarse. Ya en el espacio de variables continuas desarrollan y utilizan el algoritmo de optimización de fuegos artificiales que consiste en dos pasos. De acuerdo a los autores, en primer lugar se aplica una modificación del recocido simulado original para manejar espacios continuos con el fin de encontrar una solución prometedora, que se incorpora a un conjunto de soluciones aleatorias. Posteriormente, estos diseños se convierten en partículas en la optimización de enjambre de partículas, incorporando la identificación de coincidencias interdependientes y esquemas de manejo de restricciones. Estos pasos emulan el lanzamiento y la explosión de los fuegos artificiales, de ahí el nombre de la técnica.

Bao y col. (2018) presentan el algoritmo de caminata aleatoria con evolución compulsiva aplicado a la síntesis de redes de intercambio de calor, que consiste en establecer una población básica de redes para generar numerosas soluciones candidatas y a partir de ellas ir mejorando la solución con el principio de evolución del algoritmo original. Las soluciones que incluyen óptimos actuales se introducen a una población protectora. Para lograr una mayor precisión de convergencia, se diseña una técnica de caminata

aleatoria de reducción de dimensiones para que en la población protectora se realice una optimización local completa de las soluciones protegidas. Además, se presenta una técnica de optimización líder-seguidor al considerar las divisiones de flujo. Dado que el comportamiento de mutación permite aceptar soluciones incorrectas que podrían sustituir las soluciones excelentes por las malas no se pueden garantizar las estructuras de costo óptimo sin la población protectora.

Estas metodologías han sido aplicadas para estructuras de redes particulares y los modelos matemáticos desarrollados se han obtenido para cada topología estudiada, lo que no permite su uso inmediato y extensivo en sistemas de recuperación de calor que incluyen elementos estructurales diferentes. También, para llevar a cabo la optimización de una red es necesario que su topología pre-establecida se pueda representar como una configuración particular, o bien, dentro de un esquema de superestructura disponible en la literatura, por ejemplo, la superestructura Synheat (Yee y Grossmann, 1990). Por lo tanto, el poder contar con un modelo de programación no lineal para la optimización de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida reusable y suficientemente general es muy conveniente. En este trabajo se presenta un modelo matemático no lineal y una metodología estocástica multi-arranque de búsqueda de soluciones óptimas que determinan diseños óptimos locales y globales a través de la minimización del costo total de la red de intercambio de calor, sujeto a los balances de materia y energía, asumiendo que la topología de una red viable ha sido previamente establecida.

En la siguiente sección se describe formalmente el problema de diseño óptimo abordado. En la Sección 2.3 se presenta el modelo de programación no lineal para minimizar el costo total anual de redes de intercambio de calor. El modelo matemático se desarrolla a partir de teoría de conjuntos con la representación de la red mediante un diagrama de malla por etapas, con la posibilidad de representar topologías que no se consideran en las superestructuras de Yee y Grossmann (1990) y Floudas y Ciric (1989). Para la solución del modelo, en la Sección 2.4 se presenta una metodología no rigurosa, un algoritmo de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases, una global y una local. El algoritmo explora la región factible buscando incrementar la probabilidad de obtener diseños de red óptimos globales. A pesar de su simplicidad, es importante

mencionar que algoritmos estocásticos multi-arranque en dos fases no se han utilizado en la literatura para la optimización de redes de intercambio de calor. En la Sección 2.5 se presentan dos problemas ilustrativos con la finalidad de mostrar la capacidad de la representación y el modelado, además del desempeño del algoritmo multi-arranque para determinar los mejores valores posibles de las cargas térmicas, temperaturas intermedias de la red, distribuciones de flujos y áreas de intercambio de calor. Finalmente, en la Sección 2.6 de este capítulo se presentan algunas conclusiones.

## **2.2 Formulación del problema**

El problema de determinar un diseño óptimo para redes de intercambio de calor se puede establecer como sigue: se conocen un conjunto de corrientes de proceso calientes, que necesitan ser enfriadas, y un conjunto de corrientes de proceso frías, que necesitan ser calentadas. Asociados a cada corriente de proceso, se conocen su flujo de capacidad calorífica, su temperatura de suministro y su temperatura objetivo. Se tienen disponibles un conjunto de servicios auxiliares de calentamiento y servicios auxiliares de enfriamiento con sus temperaturas de suministro y objetivo. Se cuenta, además, con la topología de una red de intercambio de calor con la cual se pueden realizar los intercambios de calor necesarios para que todas las corrientes de proceso alcancen sus temperaturas objetivo. El propósito del problema abordado consiste en determinar los valores de las distribuciones de flujos, cargas térmicas, áreas de intercambio de calor y temperaturas intermedias de la red que determinan diseños que siguen un criterio de minimización del costo total anual de la red de intercambio de calor, sujeto a los balances de materia y energía.

Se consideran las siguientes suposiciones: *i)* que los flujos de capacidad calorífica toman valores constantes, calculados a la temperatura promedio; *ii)* que no existe cambio de fase en las corrientes de proceso en la red de intercambio de calor; *iii)* que los equipos de intercambio de calor se modelan del tipo tubo y coraza de un solo paso operando a contracorriente; *iv)* que se conocen los coeficientes de película de todas las corrientes, o el coeficiente global para la transferencia de calor, en todos los intercambiadores; *v)* que una diferencia mínima de temperaturas para el intercambio de calor está especificada; *vi)* que se conocen los costos de operación unitarios CU por el uso de los servicios auxiliares de

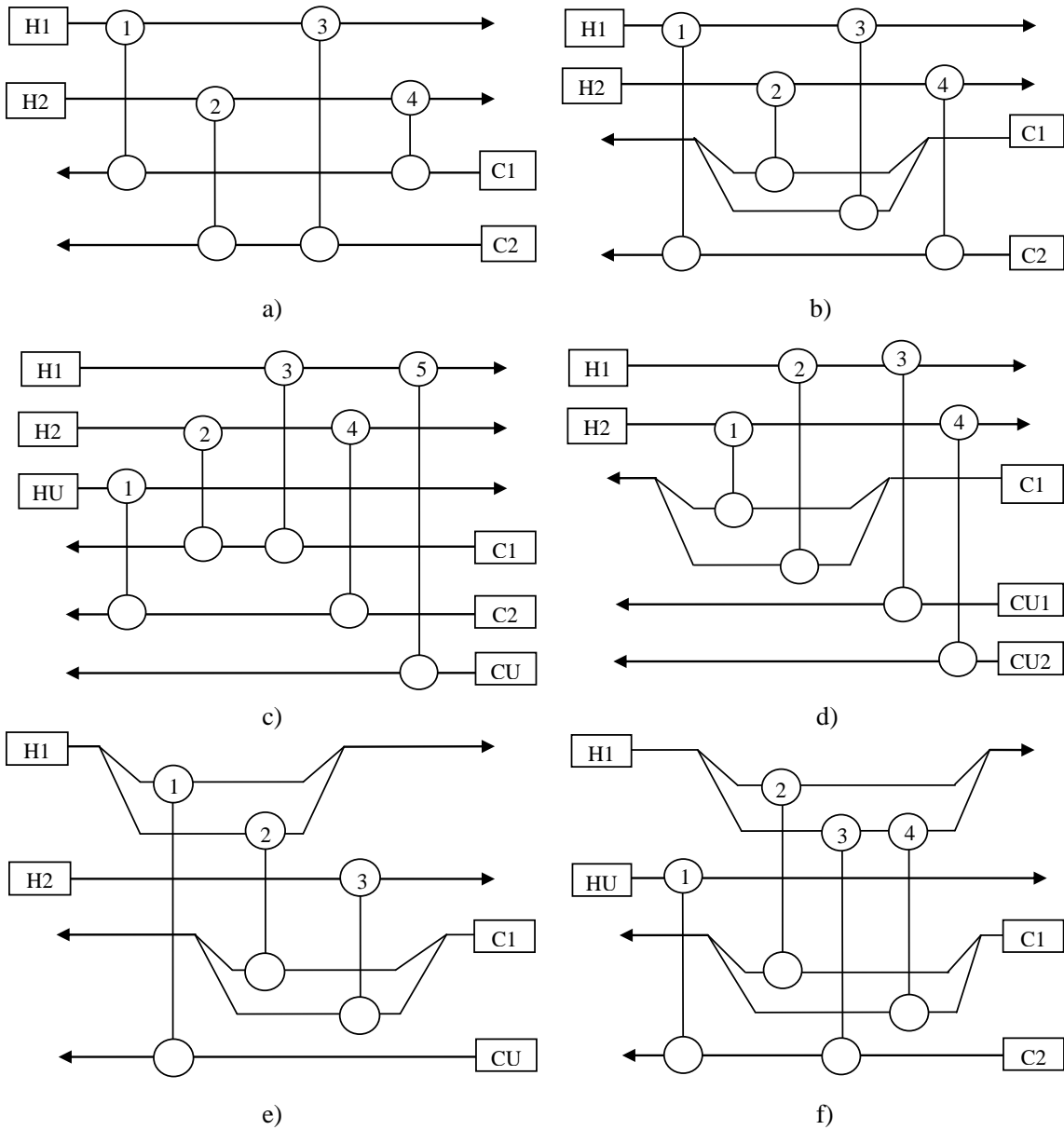
calentamiento y enfriamiento; y *vii*) que los costos de capital  $C_k$  (\$) se calculan con una ley exponencial de costo en función del área de la superficie para la transferencia de calor,  $A_k$ , (Hall y *col.*, 1990; Ahmad y *col.*, 1990),  $C_k = CF_k + CC_k A_k^{\beta_k}$ , donde  $CF_k$ ,  $CC_k$  y  $\beta_k$ , son parámetros que dependen del intercambiador. Los costos de capital se anualizan multiplicando  $C_k$  por un factor  $r$ .

## 2.3 Modelo generalizado

### 2.3.1 Representación de topologías pre-establecidas de redes de intercambio de calor

La representación de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida constituye un reto debido a las múltiples configuraciones que deben considerarse a la hora de plantear una representación versátil. Entre los diversos elementos topológicos que es deseable representar, tenemos por ejemplo, redes sin división de corrientes (Fig. 2.1a), con división de corrientes de proceso en dos o más sub-corrientes (Fig. 2.1b), redes con una corriente de servicio auxiliar de calentamiento y una corriente de servicio auxiliar de enfriamiento (Fig. 2.1c), redes con dos o más enfriadores o calentadores, esto es, múltiples corrientes de servicios auxiliares (Fig. 2.1d), apareamientos entre una corriente y una sub-corriente, o entre sub-corrientes, o entre alguna sub-corriente y un servicio auxiliar en calentadores o enfriadores intermedios (Fig. 2.1e), o bien, equipos de intercambio de calor en serie para una misma sub-corriente (Fig. 2.1f), entre otros. Nótese que en la superestructura Synheat de Yee y Grossmann (1990) y en la superestructura de Floudas y Ciric (1989) no es posible representar los elementos topológicos incluidos en las Figuras 2.1 e), f).

La propuesta en este trabajo comienza con la representación de la red de intercambio de calor que se desee optimizar, a la que llamaremos diseño base, obtenida con alguna metodología de síntesis, como un diagrama de malla por “etapas”, con base en el diagrama de malla presentado originalmente por Linnhoff y Flower (1978).

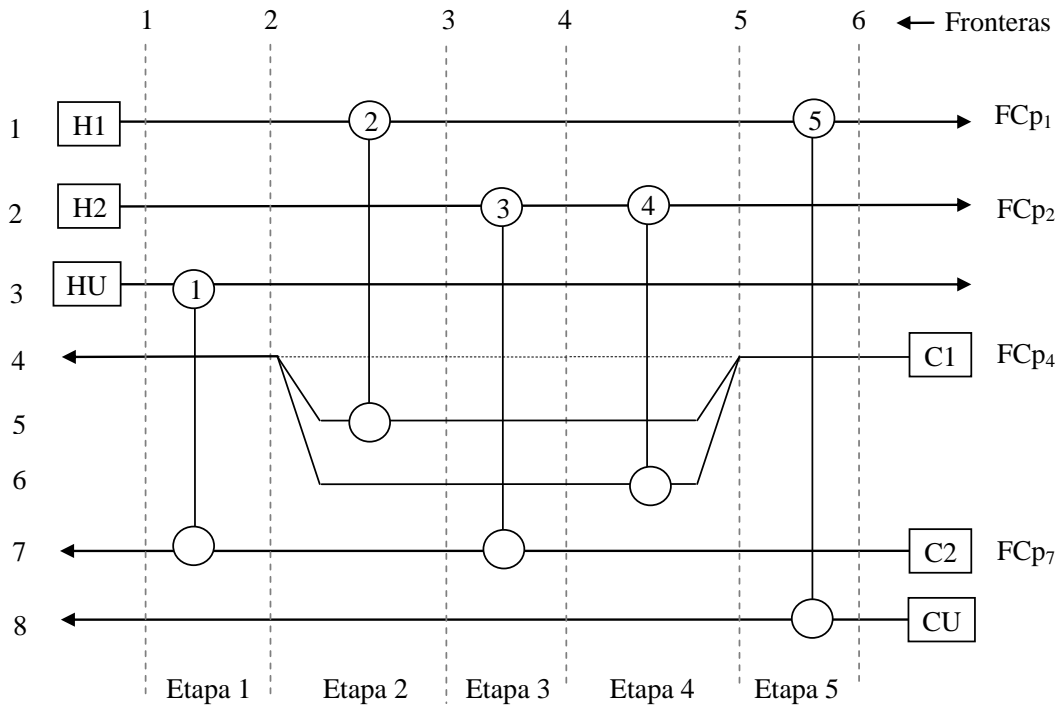


**Figura 2.1 Elementos topológicos diversos de redes de intercambio de calor**

En este diagrama de malla por etapas, una etapa  $k$  está definida como una sección del diagrama de malla en la que existe un apareamiento entre corrientes, esto es, una etapa contiene solo un equipo de intercambio de calor. Así, el número de etapas se define en función del número de intercambiadores presentes en la red, se identifican  $NOK$  etapas, tomando en consideración equipos de recuperación de calor, calentadores y enfriadores. Por consiguiente, el diagrama de malla por etapas tendrá  $NOK+1$  fronteras entre etapas, que



representan el extremo caliente y frío de cada intercambiador de calor, identificados por los elementos de un conjunto  $K$ .



**Figura 2.2 Representación del diagrama de malla por etapas para un diseño base ilustrativo**

En la Figura 2.2 se muestra un diagrama de malla por etapas para representar una topología de red como diseño base ilustrativo, que cuenta con cinco equipos de intercambio de calor: tres recuperadores (2, 3 y 4), un calentador (1) y un enfriador (5). El diagrama está dividido en cinco etapas con seis fronteras. Un total de ocho corrientes se requieren para representar las cuatro corrientes de proceso (corrientes 1, 2, 4 y 7), dos corrientes de servicios auxiliares (corrientes 3 y 8), y las dos sub-corrientes de la corriente fría C1 (corrientes 5 y 6). Las dos sub-corrientes se manejan en el problema de optimización como corrientes con flujos de capacidad calorífica no especificados. Además, se define formalmente que una sub-corriente está presente únicamente en las etapas comprendidas entre el divisor y el mezclador conectados por dicha sub-corriente, y no está presente en las otras etapas del diagrama de malla. Por ejemplo, en la Figura 2.2 se puede observar que las sub-corrientes 5 y 6 no están presentes en las etapas 1 y 5.

En la representación del diagrama de malla por etapas se definen diferentes conjuntos; para el diseño base ilustrativo presentado en la Figura 2.2, los diferentes conjuntos se especifican como sigue: el conjunto de etapas en el diagrama de malla  $ST = \{1,2,3,4,5\}$ , el conjunto de fronteras  $K = \{1,2,3,4,5,6\}$ , el conjunto de corrientes  $S = \{1,2,3,4,5,6,7,8\}$ , el conjunto de corrientes de proceso  $SP = \{1,2,4,7\}$ , el conjunto de corrientes de proceso que no se dividen  $SPO = \{1,2,7\}$ , el conjunto de corrientes de proceso que se dividen  $SPI = \{4\}$ , el conjunto de sub-corrientes  $SS = \{5,6\}$ , el conjunto de corrientes de servicios auxiliares  $SU = \{3,8\}$ , los conjuntos que definen los apareamientos en cada intercambiador de calor  $S_1 = \{3,7\}$ ,  $S_2 = \{1,5\}$ ,  $S_3 = \{2,7\}$ ,  $S_4 = \{2,6\}$ ,  $S_5 = \{1,8\}$ , el conjunto que establece la relación entre una corriente de proceso y sus sub-corrientes  $D_4 = \{5,6\}$ , los conjuntos que identifican corrientes de proceso que intercambian calor a través de sus sub-corrientes en una etapa dada  $SI_2 = \{4\}$ ,  $SI_4 = \{4\}$ , y los conjuntos que especifican las sub-corrientes que no están presentes en una etapa dada  $S2_1 = \{5,6\}$ ,  $S2_5 = \{5,6\}$ .

Cabe destacar que esta representación con un diagrama de malla por etapas permite capturar todos los elementos mostrados en la Figura 2.1. Sin embargo, la propuesta de representación también tiene limitaciones; en particular, no es posible representar múltiples divisores en una misma corriente de proceso ni una división de sub-corrientes.

### **2.3.2 Modelo matemático ( $P$ ) para la optimización de redes de intercambio de calor**

El modelo matemático ( $P$ ) es una propuesta formal de programación no lineal que permite la optimización de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida enfocado en minimizar el costo total anual de la red; el modelo se formula utilizando conceptos básicos de teoría de conjuntos para traducir a un lenguaje matemático el diseño base. El modelo ( $P$ ) tiene características no convexas por la presencia de potencias de términos fraccionales lineales para el cálculo de los costos de área en la función objetivo, términos bilineales en los balances de energía de sub-corrientes y la diferencia media logarítmica de temperaturas en las restricciones. Sin embargo, la propuesta permite modelar

mezclado no isotérmico sin la necesidad de plantear el balance de energía en mezcladores, lo cual excluye esta ecuación no lineal y no convexa del modelo.

### **Modelo (P)**

#### *Índices*

$L$  = índice para la cota inferior de una variable de decisión

$k, k1$  = índice para etapas y fronteras de etapas

$s, s1$  = índice para corrientes

$U$  = índice para la cota superior de una variable de decisión

#### *Conjuntos*

$S$  = {  $s$  :  $s$  es una corriente de proceso, una sub-corriente o un servicio auxiliar }

$SP$  = {  $s$  :  $s$  es una corriente de proceso }

$SP1$  = {  $s$  :  $s$  es una corriente de proceso que se divide en sub-corrientes }

$SP0$  = {  $s$  :  $s$  es una corriente de proceso que no se divide }

$SS$  = {  $s$  :  $s$  es una sub-corriente de proceso }

$SU$  = {  $s$  :  $s$  es una corriente de servicio auxiliar }

$D_s$  = {  $s1 \in SS$  :  $s1$  es una sub-corriente de la corriente de proceso  $s \in SP1$  }

$K$  = {  $k$  :  $k$  es una frontera de etapa en el diagrama de malla }

$ST$  = {  $k$  :  $k$  es una etapa en el diagrama de malla }

$S_k$  = {  $s \in S$  :  $s$  es una corriente que intercambia calor en la etapa  $k$  }

$S1_k$  = {  $s \in SP1$  : si una sub-corriente de  $s$ , intercambia calor en la etapa  $k$  }

$S2_k$  = {  $s \in SS$  :  $s$  es una sub-corriente que no está presente en la etapa  $k$  }

#### *Parámetros*

$NOK$  = número total de intercambiadores de calor o etapas en la red

$CC_k$  = coeficiente de costo de capital ( $\$ m^{-2\beta_k}$ )

$\beta_k$  = exponente de costo de capital

$CF_k$  = cargo fijo del costo de capital ( $\$$ )

$U_k$  = coeficiente global de transferencia de calor ( $kW m^{-2} K^{-1}$ )

- $CU_k$  = costo unitario de servicios auxiliares ( $\$ kW^{-1} \text{ año}^{-1}$ )  
 $r$  = factor de anualización del costo de capital ( $\text{año}^{-1}$ )  
 $F_s$  = flujo de capacidad calorífica ( $kW K^{-1}$ )  
 $h_s$  = coeficiente de película para la transferencia de calor ( $kW m^{-2} K^{-1}$ )  
 $C_s$  = 1, si la corriente es caliente; = -1, si la corriente es fría  
 $TO_s$  = temperatura objetivo (K)  
 $TS_s$  = temperatura de suministro (K)  
 $TOC_s$  = 1, si se conoce la temperatura objetivo; = 0, si se desconoce

*Variables continuas positivas*

- $q_k$  = carga térmica del intercambiador de calor en la etapa  $k$  (kW)  
 $\Delta T_k$  = diferencia media logarítmica de temperaturas (K)  
 $dTc_k$  = diferencia de temperaturas en el extremo frío del intercambiador de calor (K)  
 $dTh_k$  = diferencia de temperaturas en el extremo caliente del intercambiador de calor (K)  
 $t_{s,k}$  = temperatura de la corriente  $s$  en la frontera caliente de la etapa  $k$  (K)  
 $t_{s,k+1}$  = temperatura de la corriente  $s$  en la frontera fría de la etapa  $k$  (K)  
 $\alpha_{s1}$  = fracción de flujo de la sub-corriente  $s1$   
 $z$  = función objetivo de costo total anual del modelo (P)

*Función objetivo*

$$\text{Minimizar } z = \sum_{k \in ST} \left[ CF_k \cdot r + CC_k \cdot r \cdot \left( \frac{q_k}{U_k \Delta T_k} \right)^{\beta_k} + CU_k \cdot q_k \right] \quad (2.1)$$

$$\text{donde: } 0 < \beta_k \leq 1 \quad \text{y} \quad U_k = \left[ \sum_{s \in S_k} \left( \frac{1}{h_s} \right) \right]^{-1}, \quad k \in ST;$$

### Restricciones

*Balance global de energía para corrientes de proceso*

$$\sum_{\substack{k \in ST \\ s \in S_k \cup S1k}} q_k = F_s \cdot C_s \cdot (TS_s - TO_s) \quad s \in SP \text{ con } TOC_s = 1 \quad (2.2)$$

*Balance de energía en los intercambiadores de calor*

$$q_k = F_s (t_{s,k} - t_{s,k+1}) \quad s \in SP \cap S_k, \quad k \in ST \quad (2.3)$$

$$q_k = F_s \cdot \alpha_{s1} (t_{s1,k} - t_{s1,k+1}) \quad s : s1 \in D_s, \quad s1 \in SS \cap S_k, \quad k \in ST \quad (2.4)$$

*Balance de masa en los divisores*

$$\sum_{s1 \in D_s} \alpha_{s1} = 1 \quad s \in SP1 \quad (2.5)$$

*Diferencias de temperatura en cada lado de los intercambiadores*

$$dth_k = \sum_{s \in S_k} C_s \cdot t_{s,k} \quad k \in ST \quad (2.6)$$

$$dtc_k = \sum_{s \in S_k} C_s \cdot t_{s,k+1} \quad k \in ST \quad (2.7)$$

*Diferencia media logarítmica de temperaturas*

$$\Delta T_k = \frac{(dth_k - dtc_k)}{\ln(dth_k / dtc_k)} \quad k \in ST \quad (2.8)$$

*Propagación horizontal de temperaturas en el diagrama de malla*

$$t_{s,k} = t_{s,k+1} \quad s \in SPO \setminus S_k, \quad k \in ST \quad (2.9)$$

$$t_{s,k} = t_{s,k+1} \quad s \in SP1 \setminus (S_k \cup S1_k), \quad k \in ST \quad (2.10)$$

$$t_{s,k} = t_{s,k+1} \quad s \in SS \setminus (S_k \cup S2_k), \quad k \in ST \quad (2.11)$$

$$t_{s,k} = t_{s,k+1} \quad s \in SU \setminus S_k, \quad k \in ST \quad (2.12)$$

*Propagación horizontal de temperaturas cuando una sub-corriente intercambia calor*

$$q_k = F_s (t_{s,k} - t_{s,k+1}) \quad s \in S1_k, \quad k \in ST \quad (2.13)$$

*Propagación vertical de temperaturas en el diagrama de malla*

$$t_{s1,1} = t_{s,1} \quad s1 \in D_s, \quad s \in SP1 \text{ con } C_s = 1 \quad (2.14)$$

$$t_{s1,k+1} = t_{s,k+1} \quad s1 \in D_s \cap S2_k, \quad s \in SP1 \text{ con } C_s = 1, \quad k \in ST \quad (2.15)$$

$$t_{s1,NOK+1} = t_{s,NOK+1} \quad s1 \in D_s, \quad s \in SP1 \text{ con } C_s = -1 \quad (2.16)$$

$$t_{s1,k} = t_{s,k} \quad s1 \in D_s \cap S2_k, \quad s \in SP1 \text{ con } C_s = -1, \quad k \in ST \quad (2.17)$$

*Asignación de temperaturas de suministro y objetivo*

$$t_{s,1} = TS_s \quad s \in SP \cup SU \text{ con } C_s = 1 \quad (2.18)$$

$$t_{s,NOK+1} = TO_s \quad s \in SP \cup SU \text{ con } C_s = 1 \text{ y } TOC_s = 1 \quad (2.19)$$

$$t_{s,NOK+1} = TS_s \quad s \in SP \cup SU \text{ con } C_s = -1 \quad (2.20)$$

$$t_{s,1} = TO_s \quad s \in SP \cup SU \text{ con } C_s = -1 \text{ y } TOC_s = 1 \quad (2.21)$$

*Cotas de las variables*

$$q_k^L \leq q_k \leq q_k^U \quad k \in ST$$

$$t_{s,k}^L \leq t_{s,k} \leq t_{s,k}^U \quad s \in S, \quad k \in ST$$

$$dth_k^L \leq dth_k \leq dth_k^U \quad k \in ST$$

$$dte_k^L \leq dte_k \leq dte_k^U \quad k \in ST$$

$$\Delta T_k^L \leq \Delta T_k \leq \Delta T_k^U \quad k \in ST$$

$$0 \leq \alpha_{s1} \leq 1 \quad s1 \in SS$$

## Comentarios

1. La función objetivo en la expresión (2.1) para minimizar el costo total anual de la red de intercambio de calor incluye no convexidades debido a las potencias fraccionarias de los términos fraccionales lineales en la función de área de los intercambiadores de calor.

2. Los balances de energía para las sub-corrientes que participan en equipos de intercambio de calor se plantean en la Ec. (2.4) e incluyen términos bilineales que también introducen no convexidades en el modelo.

3. La diferencia media logarítmica de temperaturas en los intercambiadores de calor, Ec. (2.8), puede sustituirse por la aproximación propuesta por Chen (1987) o la aproximación propuesta por Paterson (1984), cualquiera de estas tres ecuaciones son no lineales e introducen no convexidades en el modelo, o bien, en una situación simplificada, puede sustituirse por el promedio aritmético.

4. En el modelo propuesto, la propagación de temperaturas entre etapas consecutivas del diagrama de malla por etapas donde no ocurren intercambios de calor se plantean en las ecs. (2.9) – (2.12).

5. La Ec. (2.13) plantea los balances de energía para las corrientes de proceso que se dividen, en los equipos de intercambio de calor cuando es alguna de sus sub-corrientes la que intercambia calor; en el caso de redes con mezclado no isotérmico, esta ecuación permite excluir el uso de ecuaciones no convexas en los balances de energía en los mezcladores.

6. Las Ecs. (2.14) - (2.17) indican las asignaciones de temperatura de las corrientes de proceso que se dividen a las sub-corrientes que dan origen, en aquellas etapas donde las sub-corrientes no están presentes.

7. Adicionalmente, si se desea modelar el mezclado isotérmico de las sub-corrientes de una corriente de proceso caliente  $s$ , colocando el mezclador en la frontera fría de la etapa  $k1$ , se deberá agregar la restricción de la Ec. (2.22):

$$t_{s1,k1+1} = t_{s,k1+1} \quad s1 \in D_s \quad (2.22)$$

8. De igual manera, si se desea modelar el mezclado isotérmico de las sub-corrientes de una corriente de proceso fría  $s$ , colocando el mezclador en la frontera caliente de la etapa  $k1$ , se deberá agregar la restricción de la Ec. (2.23):

$$t_{s1,k1} = t_{s,k1} \quad s1 \in D_s \quad (2.23)$$

## 2.4 Metodología de optimización

Debido a la naturaleza del problema abordado, el modelo ( $P$ ) incluye características no convexas que pueden dar lugar a la existencia de múltiples soluciones óptimas locales. Puesto que el desempeño de los algoritmos estándar empleados para la solución de problemas de programación no lineal tiene una fuerte dependencia en el punto desde el cual el proceso de solución se inicia, la solución del modelo ( $P$ ) con uno de estos resolvedores muy probablemente conduce a una solución óptima local, que en algunas ocasiones podría ser, incluso, una solución no tan buena.

La estrategia más comúnmente utilizada para determinar una solución óptima global es quizás, emplear un algoritmo que identifique soluciones óptimas locales iniciando desde diversos puntos de arranque (puede leerse Andersen y Bloomfield, 1975; Edgar y col., 2001 y Ravindran y col., 2006). Esta estrategia básica de búsqueda se explora en este trabajo para mejorar las posibilidades de obtener buenas soluciones óptimas locales y globales para el problema de diseño óptimo abordado.

### 2.4.1 Algoritmo con multi-arranque estocástico en dos fases para la búsqueda aleatoria de soluciones óptimas locales

En términos formales, un algoritmo de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases (Boender y Romeijn, 1995) es utilizado para la solución del modelo ( $P$ ). La primera fase del algoritmo multi-arranque, la fase global, lleva a cabo una búsqueda global dentro del dominio  $\Omega$  establecido por las cotas de las variables de decisión del modelo ( $P$ ). En cada iteración  $i$  del algoritmo, la fase global utiliza una distribución uniforme de probabilidad para generar un punto  $x \in \Omega$  muestreado aleatoriamente de manera independiente. En la segunda fase del algoritmo, la fase local, se ejecuta un procedimiento



de búsqueda local de programación no lineal desde el punto de inicio aleatorio seleccionado para buscar convergencia a una solución óptima local  $x^i$  del modelo ( $P$ ). Las iteraciones del algoritmo multi-arranque continúan, conservando la mejor solución  $x^*$  encontrada. Dado que los puntos de arranque aleatorios son distribuidos de manera uniforme en el dominio, una exploración adecuada de la región factible está asegurada conforme el número de iteraciones se acerca al infinito.

Para la optimización de un diseño de red de intercambio de calor, al inicio de cada iteración del algoritmo de multi-arranque estocástico en dos fases, se determina de manera aleatoria dentro de sus cotas el valor inicial de las variables de decisión del problema: cargas térmicas, temperaturas, fracciones de flujo y diferencias de temperatura. El punto así generado se utiliza como punto de arranque para un resolvidor local de programación no lineal en un intento para determinar un mínimo local del modelo ( $P$ ). Por lo tanto, la aplicación de elementos estocásticos dentro de la metodología propuesta se limita a la fase global con la generación de puntos de arranque para las variables de decisión al inicio de cada iteración.

Es importante hacer notar que la metodología de optimización propuesta, consiste de una combinación de un método estocástico simple de búsqueda global con un método de programación no lineal para la búsqueda local; por esto, la metodología de optimización usada en este trabajo para la solución del modelo ( $P$ ) desarrollado, no está asociada con el recocido simulado que se mueve progresivamente de la búsqueda global a la local, o con otras meta-heurísticas más sofisticadas como algoritmos genéticos, colonia de hormigas o enjambre de partículas. También, se debe destacar que el algoritmo con multi-arranque estocástico en dos fases no se ha utilizado previamente en la literatura para la optimización de redes de intercambio de calor.

Las estrategias para generar los diferentes puntos de arranque aleatorios varían desde técnicas de muestreo sencillas hasta procedimientos más elaborados. En este trabajo, en el inicio de cada iteración  $i$  del algoritmo multi-arranque, se asigna un valor aleatorio a cada variable de decisión  $v$  en función sus cotas inferior y superior,  $v^L$  y  $v^U$  respectivamente, y un número aleatorio  $R_x^i$ , utilizando la siguiente relación:

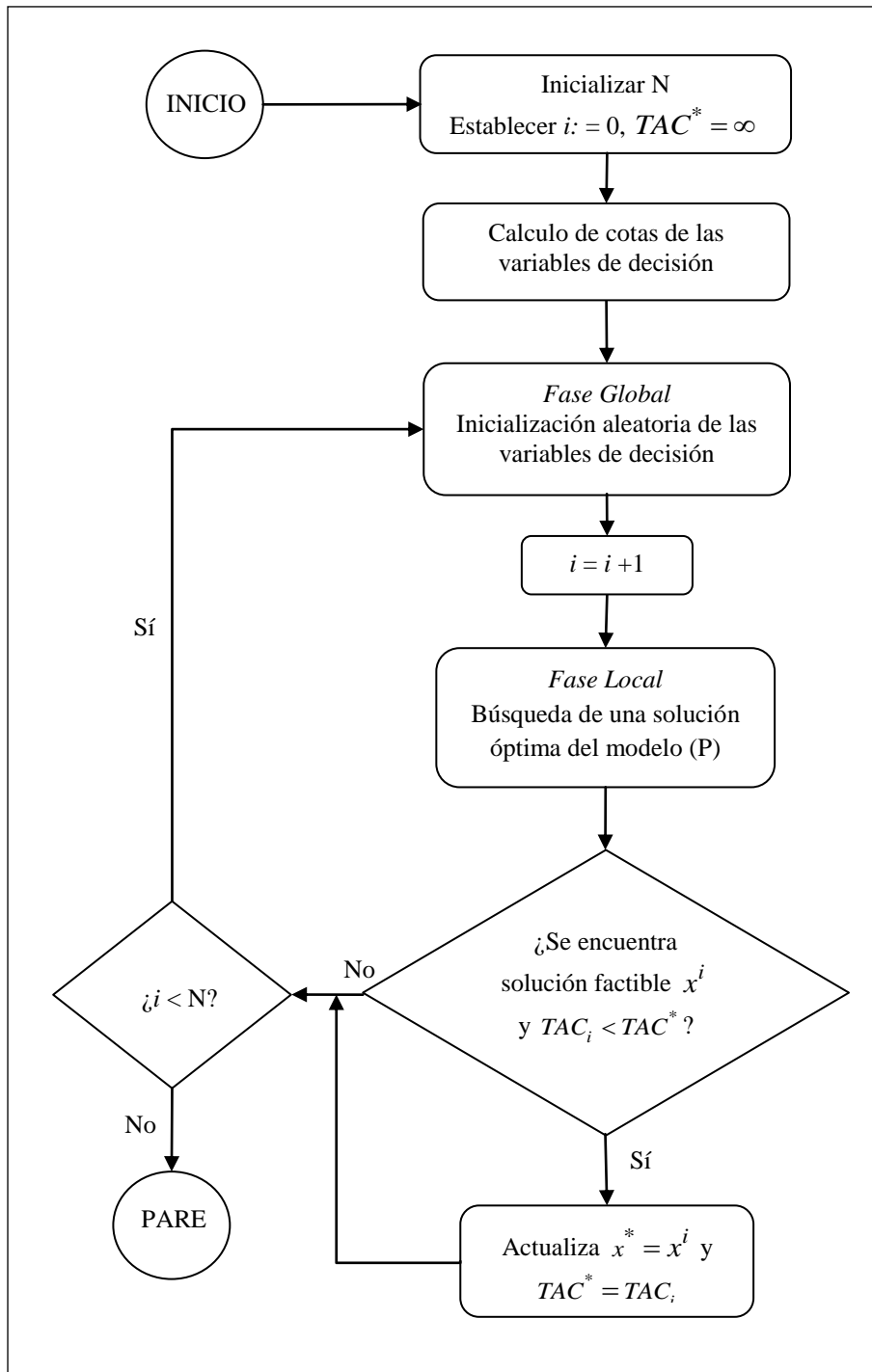
$$v = v^L + R_x^i (v^U - v^L)$$

El número aleatorio  $R_x^i$  es generado con una distribución probabilística uniforme en el intervalo  $[0,1]$  que puede ser muestreado de forma independiente para cada variable de decisión en cada iteración.

La metodología estocástica multi-arranque en dos fases para la optimización de redes de intercambio de calor se presenta de manera esquemática en la Figura 2.3. El algoritmo inicia estableciendo el número de iteraciones  $N$  que se llevarán a cabo, esto se utiliza como criterio de paro para el proceso de búsqueda. El contador del número de iteraciones se establece en cero y el costo total anual de la mejor solución disponible se inicializa como  $TAC^* = \infty$ . Como un siguiente paso, se calculan las cotas de las variables de decisión del problema con el procedimiento descrito en la siguiente Sección 2.4.2 o bien, se pueden calcular mejores cotas con el procedimiento presentado en la Sección 2.4.3.

Con esto inicia la parte central del algoritmo: se determina en la fase global el punto de arranque de manera aleatoria, se incrementa en 1 el número de iteraciones y se ejecuta la fase local intentando resolver el modelo no convexo ( $P$ ) asociado al problema particular de diseño óptimo. En principio, cualquier resolvidor estándar para problemas de programación no lineal con restricciones se puede utilizar para realizar la búsqueda de una solución óptima local; sin embargo, en este trabajo, la fase local del algoritmo se ejecuta con CONOPT 3 (Drud, 1996), el cual está basado en una implementación del algoritmo de gradiente reducido generalizado (GRG), presentado por Abadie y Carpentier (1969). La implementación actual del algoritmo GRG en CONOPT 3 incluye varias modificaciones, tales como pasos de pre-procesamiento y procedimientos de escalamiento con la finalidad de hacerlo más eficiente para modelos de gran escala (Drud, 1985, 1992).

Si se determina una solución factible  $x^i$  del modelo ( $P$ ) en la fase local, su costo total anual  $TAC_i$  se compara con el costo de la mejor solución disponible  $TAC^*$ , y si hubo reducciones en el costo, se actualizan la mejor solución conocida y su costo total anual,  $x^* = x^i$ ,  $TAC^* = TAC_i$ .



**Figura 2.3 Metodología de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases**

Finalmente se verifica el criterio de paro, si aun no se han realizado N iteraciones se continúa con el proceso de búsqueda en la siguiente iteración. Durante todo el proceso

iterativo se guarda registro de las diferentes soluciones obtenidas y cada solución es revisada para corroborar su factibilidad y su costo total anual.

## 2.4.2 Cotas analíticas de las variables de decisión

### i) Cotas de temperatura

Para las variables de temperatura de las corrientes calientes en cada frontera del diagrama de malla por etapas, se asigna el valor de la temperatura de suministro como cota superior y la temperatura objetivo como cota inferior.

Para las variables de temperatura de las corrientes frías en cada frontera del diagrama de malla por etapas, se asigna el valor de la temperatura objetivo como cota superior y la temperatura de suministro como cota inferior.

A las cotas superiores de variables de temperatura de una sub-corriente caliente  $sI$  en cada frontera del diagrama de malla por etapas, se les asigna el valor de la temperatura de suministro  $TS_s$  de la corriente que le da origen. Las correspondientes cotas inferiores se establecen considerando la temperatura objetivo  $TO_s$  de la corriente que le da origen, y la temperatura más baja  $TS_c^{\min}$  de las corrientes frías con las que interactúa la sub-corriente caliente, tomando en consideración la diferencia mínima de temperaturas aceptable en ambos extremos de cada intercambiador, EMAT, siguiendo la siguiente expresión:

$$t_{sI,k}^L = \text{Min} \left[ TO_s, TS_c^{\min} + \text{EMAT} \right]$$

A las cotas inferiores de variables de temperatura de una sub-corriente fría  $sI$  en cada frontera del diagrama de malla por etapas, se les asigna el valor de la temperatura de suministro  $TS_s$  de la corriente que le da origen. Las correspondientes cotas superiores se establecen considerando la temperatura objetivo  $TO_s$  de la corriente que le da origen, y la temperatura más alta  $TS_h^{\max}$  de las corrientes calientes con las que interactúa la sub-corriente fría, tomando en consideración la diferencia mínima de temperaturas aceptable en ambos extremos de cada intercambiador, EMAT, siguiendo la siguiente expresión:

$$t_{s1,k}^U = \text{Max} \left[ \text{TO}_s, \text{TS}_h^{\text{max}} - \text{EMAT} \right]$$

ii) Cotas de cargas térmicas

Las cotas de las cargas térmicas se determinan siguiendo el trabajo de Zamora y Grossmann (1997). Las cotas inferiores se establecen en cero. Las cotas superiores de las variables de cargas térmicas en cada etapa  $k$  se establecen considerando tres cantidades importantes.

La primera cantidad es el calor disponible de la corriente caliente  $h$  que participa en el intercambio:  $Q_h = F_h (\text{TS}_h - \text{TO}_h)$ ; para fines del cálculo de cotas, se considerará que el calor disponible de una sub-corriente caliente es el mismo que el calor disponible de la corriente que le da origen, y al calor disponible de una corriente auxiliar de calentamiento se le asigna un valor grande.

La segunda cantidad es el calor requerido por la corriente fría  $c$  que participa en el intercambio:  $Q_c = F_c (\text{TO}_c - \text{TS}_c)$ ; para fines del cálculo de cotas, se considerará que el calor requerido por una sub-corriente fría es el mismo que el calor requerido por la corriente que le da origen, y al calor requerido de una corriente auxiliar de enfriamiento se le asigna un valor grande.

La tercera, es la cantidad máxima de calor que termodinámicamente es posible intercambiar entre las dos corrientes, caliente y fría participantes, para capacidades caloríficas y temperaturas de suministro dadas considerando la diferencia mínima de temperaturas aceptable en ambos extremos del intercambiador (EMAT):  $Q_{\text{max}} = \text{Min} [F_h, F_c] (\text{TS}_h - \text{TS}_c - \text{EMAT})$ ; para fines del cálculo de cotas, cuando sea una sub-corriente la que participa en el intercambio, se considerará la capacidad calorífica y la temperatura de suministro de la corriente que le da origen, mientras que a la capacidad calorífica de una corriente auxiliar se le asigna un valor ficticio grande. Las cotas superiores entonces se calculan con la siguiente expresión:

$$q_k^U = \text{Max} \left[ 0, \text{Min} (Q_h, Q_c, Q_{\text{max}}) \right]$$

*iii)* Cotas para la diferencia de temperaturas

Las cotas inferiores se establecen en la diferencia mínima EMAT. Las correspondientes cotas superiores se establecen en el valor de la diferencia de la temperatura de suministro de la corriente caliente y la temperatura de suministro de la corriente fría que participan en el intercambio de calor. Las cotas para la diferencia media logarítmica de temperaturas en cada equipo de intercambio de calor se establecen de manera similar.

*iv)* Cotas para las fracciones de flujo

Las variables de fracciones de flujo asociadas a las sub-corrientes tienen cotas inferiores igual a cero y cotas superiores igual a uno.

### **2.4.3 Cotas numéricas de las variables de decisión**

Mejores cotas para las variables de decisión se pueden determinar mediante la solución de una serie de problemas de optimización de programación lineal formulados con las restricciones lineales del modelo ( $P$ ), que incluyen los balances globales de energía, Ec. (2.2), los balances de energía para las corrientes de proceso en los equipos de intercambio, Ec. (2.3), las diferencias de temperatura en los extremos de los intercambiadores, ecs. (2.6) y (2.7), la propagación de temperaturas en el diagrama de malla por etapas, ecs. (2.9) – (2.17) y la asignación de temperaturas de suministro y objetivo, ecs. (2.18) – (2.21). Una cota inferior numérica se obtiene minimizando el valor de una de las variables de decisión en la región factible definida por el conjunto de restricciones lineales. De igual manera, una cota superior numérica se obtiene maximizando el valor de una de las variables de decisión en la región factible definida por el conjunto de restricciones lineales. El procedimiento se repite con cada una de las variables.

## 2.5 Problemas ilustrativos

El modelo de programación no lineal ( $P$ ) propuesto y la metodología de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases fueron implementados en el ambiente GAMS (Brooke y *col.*, 2015) con GAMS 21.4 / CONOPT 3 (Drud, 1996) como resolvidor en la fase local del algoritmo, en una computadora personal con procesador Intel Core 2 Quad de 2.4 GHz y 4 GB de memoria RAM. El número de iteraciones del algoritmo multi-arranque,  $N$ , se fijó en 1000. La optimización de dos diseños de red propuestos en la literatura para el problema 9SP (Linnhoff y Ahmad, 1990) y el problema 10SP1 (Pho y Lapidus, 1973) ilustran las capacidades de la metodología de optimización propuesta. En ambos problemas ilustrativos, se determinaron cotas básicas de cada variable de decisión con el procedimiento analítico descrito en la sección 2.4.2. Adicionalmente, se determinaron cotas numéricas para las variables de cargas térmicas, resolviendo una serie de problemas de programación lineal de acuerdo al procedimiento descrito en la sección 2.4.3. Estos problemas de acotamiento fueron resueltos usando GAMS 21.4 / CPLEX 9.0.

### 2.5.1 Problema 2.1

Este problema de diseño, presentado por Linnhoff y Ahmad (1990), se conoce como problema 9SP y se refiere a la integración térmica en un proceso que cuenta con cuatro corrientes calientes y cinco corrientes frías, con aceite caliente como servicio auxiliar de calentamiento y agua para enfriamiento. Los datos para las corrientes y la información de costos están dados en la Tabla 2.1.

La optimización se realiza sobre un diseño base que corresponde al mejor diseño sin división de corrientes para el problema 9SP. Esta solución fue presentada por Bergamini y *col.* (2007) utilizando el modelo Synheat (Yee y Grossmann, 1990) con cinco etapas en la superestructura, modelando la diferencia media logarítmica de temperaturas con la aproximación de Paterson (1984), estableciendo el valor de EMAT igual a 10 °C y la restricción de no división de corrientes. Estos autores emplean un algoritmo de optimización global determinista con base en aproximaciones exteriores que permite seleccionar una estructura potencialmente óptima en la fase exterior y determinar los

valores óptimos de las variables continuas para dicha estructura en la fase interior, con un procedimiento de contracción de cotas desarrollado por Zamora y Grossmann (1997, 1999).

**Tabla 2.1 Datos para el Problema Ilustrativo 2.1 (Linnhoff y Ahmad, 1990; Bergamini y col. 2007)**

Corriente	TS (°C)	TO (°C)	F (kW °C <sup>-1</sup> )	h (kW °C <sup>-1</sup> m <sup>-2</sup> )
H1	327	40	100	0.50
H2	220	160	160	0.40
H3	220	60	60	0.14
H4	160	45	400	0.30
C1	100	300	100	0.35
C2	35	164	70	0.70
C3	85	138	350	0.50
C4	60	170	60	0.14
C5	140	300	200	0.60
HU	330	250	---	0.50
CU	15	30	---	0.50

Costo por intercambiador (\$) = 10,000 + 350 área (m<sup>2</sup>).

Tiempo de vida de la planta = 5 años; Tasa de interés = 0 %.

Costo de aceite caliente = 60 \$ kW<sup>-1</sup> año<sup>-1</sup>.

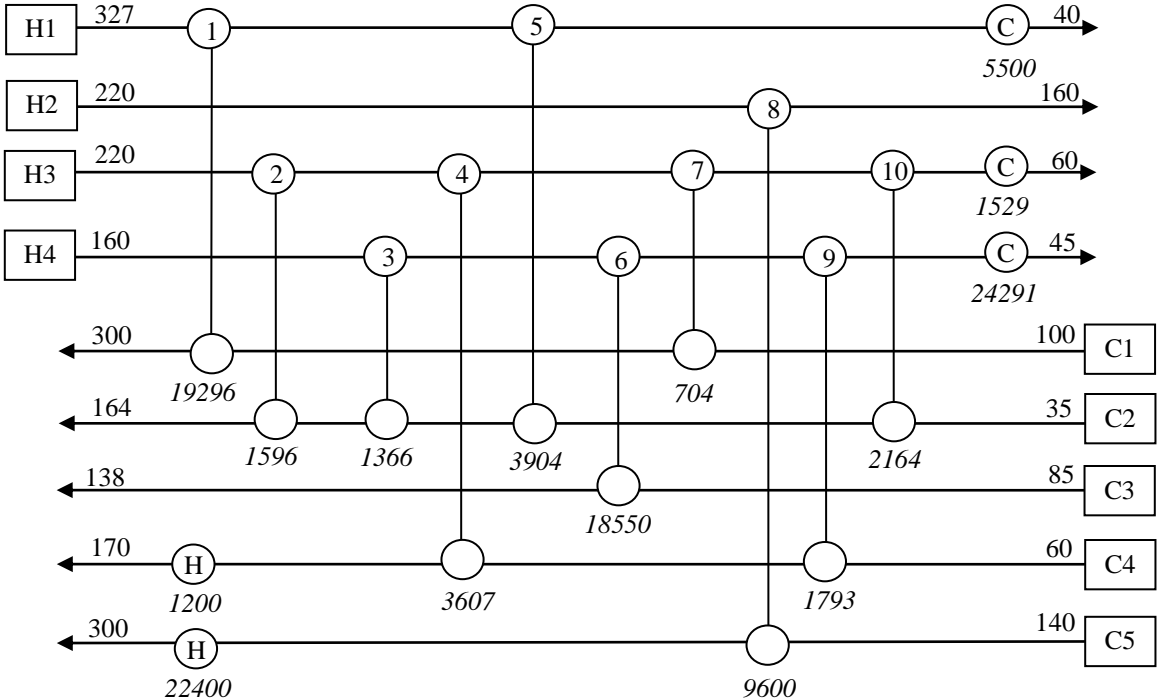
Costo de agua de enfriamiento = 6 \$ kW<sup>-1</sup> año<sup>-1</sup>.

La optimización global se lleva a cabo con la solución de problemas sub-estimadores convexos que generan cotas inferiores rigurosas del costo total anual de la red. Los problemas de acotamiento inferior están contruidos con aproximaciones lineales por segmentos en particiones del dominio de área y relajaciones convexas de términos bilineales (McCormick, 1976; Al-Khayyal y Falk, 1983 y Al-Khayyal, 1990) que involucran a las variables de diferencia media logarítmica de temperaturas y a las variables de área. El criterio de paro usado en el algoritmo de Bergamini y col., considera una tolerancia para la optimalidad global de 1%.

El diseño base para este problema ilustrativo se muestra en la Figura 2.4, y corresponde a la solución óptima global sin división de corrientes presentada por Bergamini y col. (2007) para el problema 9SP, con un costo total anual reportado de k\$2935.02. El



diseño base incluye un total de 15 equipos de intercambio de calor, de los cuales 10 son recuperadores de calor, 3 son enfriadores y 2 son calentadores, los servicios auxiliares están localizados en los extremos de las corrientes de proceso. La Figura 2.4, además, muestra detalles de la distribución de cargas térmicas en la red. Mediante la representación con el diagrama de malla por etapas que se presenta en este trabajo es posible capturar todos los elementos topológicos del diseño base, formular y resolver el modelo matemático asociado.

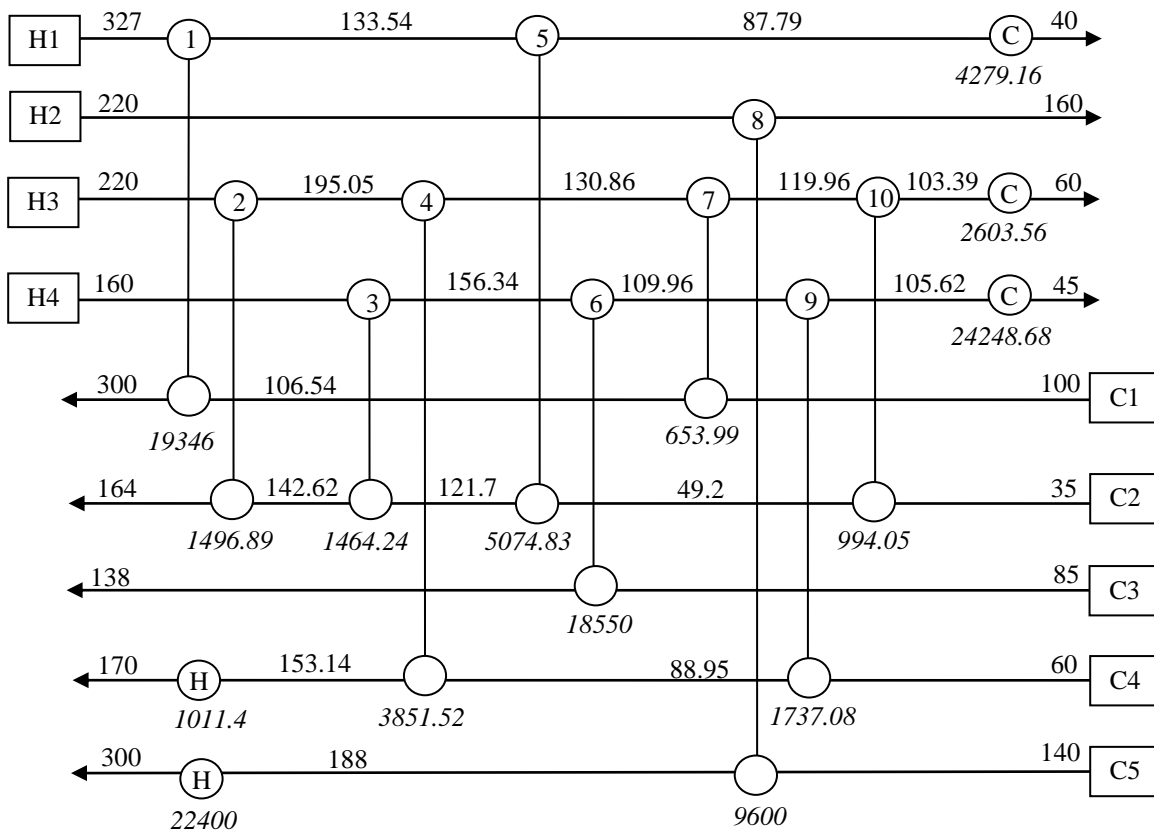


**Figura 2.4** Diseño base para el Problema Ilustrativo 2.1 (Bergamini y col. 2007) con un costo total anual reportado de \$ 2,935,020 (temperaturas (°C) en letra normal, cargas térmicas (kW) en letra cursiva).

La metodología de optimización multi-arranque se usa con la aproximación de Paterson (1984) para efectos de comparación directa de los resultados; se consumió un tiempo computacional total de 82.367 s, 545 de las 1000 iteraciones realizadas terminaron en una condición de infactibilidad y 455 convergieron a una única solución óptima local con un costo total anual de \$ 2,932,817, que representa un ahorro de 0.08% en el costo total anual de la red respecto al costo del diseño base. El diseño óptimo mejorado se

muestra en la Figura 2.5 y en la Tabla 2.2 se presenta una comparación entre el diseño base y la solución óptima determinada en este trabajo.

Aunque los resultados muestran una diferencia de sólo \$ 2203 en el costo total anual, la distribución de cargas térmicas en ambos diseños es significativamente diferente, solamente coinciden las cargas térmicas de tres equipos de intercambio de los 15 que son, corresponden a los apareamientos entre las corrientes H4 y C3, H2 y C5, así como el calentador de la corriente de proceso C5. Además, el diseño óptimo presenta una mejor integración térmica con un ahorro de 188.6 kW en el consumo de servicios auxiliares.



**Figura 2.5** Diseño óptimo local para el Problema Ilustrativo 2.1, con un costo total anual de \$ 2,932,817 (temperaturas (°C) en letra normal, cargas térmicas (kW) en letra cursiva).

También se debe hacer notar que, a pesar del hecho de que el diseño base en este problema ilustrativo corresponde a una solución óptima obtenida por Bergamini y col.

(2007) con una técnica de optimización global determinista para el problema 9SP sin división de corrientes, la aplicación de la metodología de optimización desarrollada en este trabajo ha permitido la obtención de un diseño de red con la misma topología del diseño base pero con una distribución diferente de temperaturas, cargas térmicas y áreas de intercambio de calor. El diseño mejorado presentado en la Figura 2.5 de este trabajo es entonces la mejor solución conocida sin división de corrientes para el problema 9SP.

**Tabla 2.2 Tabla comparativa de diseños para el Problema Ilustrativo 2.1.**

Equipo	Apareamiento entre corrientes	Cargas térmicas (kW)	
		Diseño base (Bergamini y col., 2007)	Diseño óptimo (este trabajo)
	HU – C4	1,200	<b>1,011.4</b>
	HU – C5	22,400	22,400
1	H1 – C1	19,296	<b>19,346.01</b>
2	H3 – C2	1,596	<b>1,496.89</b>
3	H4 – C2	1,366	<b>1,464.24</b>
4	H3 – C4	3,607	<b>3,851.52</b>
5	H1 – C2	3,904	<b>5,074.83</b>
6	H4 – C3	18,550	18,550
7	H3 – C1	704	<b>653.99</b>
8	H2 – C5	9,600	9,600
9	H4 – C4	1,793	<b>1,737.08</b>
10	H3 – C2	2,164	<b>994.05</b>
	H1 – CU	5,500	<b>4,279.16</b>
	H3 – CU	1,529	<b>2,603.56</b>
	H4 – CU	24,291	<b>24,248.68</b>
	Recuperación de calor (kW)	62,580	<b>62,768.6</b>
	Servicios auxiliares de calentamiento (kW)	23,600	<b>23,411.4</b>
	Servicios auxiliares de enfriamiento (kW)	31,320	<b>31,131.4</b>
	Costo Total Anual (\$ año <sup>-1</sup> )	2,935,020	<b>2,932,817</b>
	No. Equipos	15 (10, 3, 2)	15 (10, 3, 2)

Las diferencias respecto al diseño base están resaltadas en negritas.

## 2.5.2 Problema 2.2

Este problema de diseño se conoce en la literatura como problema 10SP1, propuesto inicialmente en unidades del sistema inglés por Pho y Lapidus (1973), pero en este trabajo se resuelve considerando el Sistema Internacional de unidades. El problema 10SP se refiere a la integración térmica en un proceso que cuenta con cinco corrientes calientes y cinco corrientes frías, con vapor como servicio auxiliar de calentamiento y agua para enfriamiento. Los datos para las corrientes y la información de costos están dados en la Tabla 2.3.

**Tabla 2.3 Datos para el Problema Ilustrativo 2.2 (Pho y Lapidus, 1973; Pariyani y col. 2006)**

Corriente	TS (K)	TO (K)	F (kW K <sup>-1</sup> )
H1	433	366	8.79
H2	522	411	10.55
H3	544	422	12.56
H4	500	339	14.77
H5	472	339	17.73
C1	355	450	17.28
C2	366	478	13.90
C3	311	494	8.44
C4	333	433	7.62
C5	389	495	6.08
HU	509	509	---
CU	311	355	---

$U = 0.852 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$  para recuperadores de calor y enfriadores.

$U = 1.136 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$  para los calentadores.

Costo por intercambiador ( $\$ \text{ año}^{-1}$ ) =  $145.63 \text{ área}^{0.6} \text{ (m}^2\text{)}$ .

Costo de vapor =  $37.64 \text{ \$ kW}^{-1} \text{ año}^{-1}$ .

Costo de agua de enfriamiento =  $18.12 \text{ \$ kW}^{-1} \text{ año}^{-1}$ .

En este Problema Ilustrativo 2.2 se considera como diseño base la solución presentada por Pariyani y col. (2006) para el problema 10SP1. Este diseño incorpora elementos topológicos inusuales que las superestructuras de Floudas y Ciric (1989) y Yee y Grossmann (1990) no son capaces de representar.

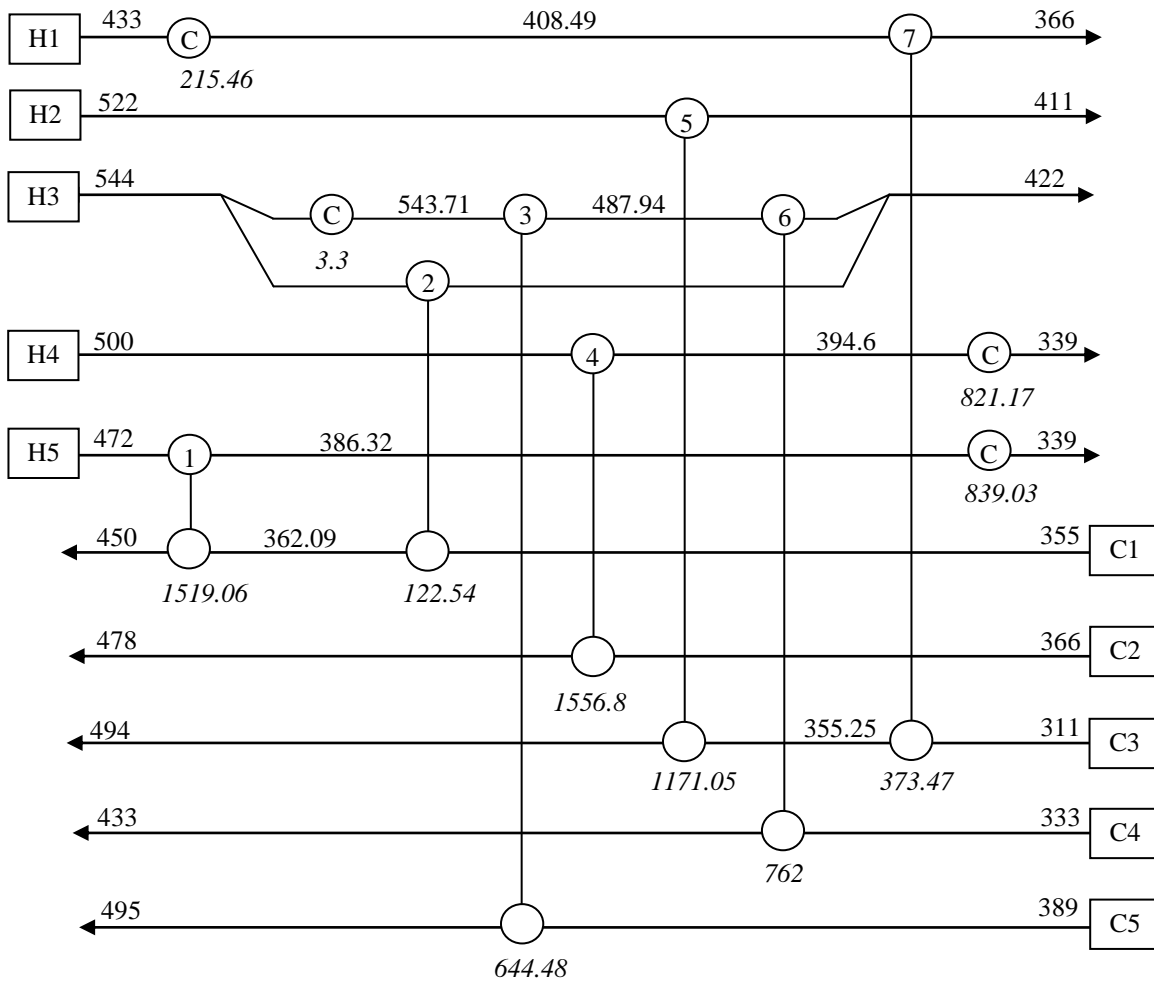
La metodología de síntesis de Pariyani y *col.* se basa en un algoritmo aleatorio que establece la estructura de la red de intercambio de calor y los valores de las variables continuas del problema, considerando división de corrientes con mezclado isotérmico. Para modelar la división de corrientes, estos autores consideran que en cada diseño sólo se divide una corriente de todas las corrientes de proceso del problema, sólo se divide una vez y sólo da origen a dos sub-corrientes. Ya que se establece una red de intercambio de calor, una carga térmica se asigna a cada intercambiador de manera aleatoria, con tres posibles escenarios: *i)* no se le asigna ninguna carga; *ii)* se le asigna un valor aleatorio dentro de sus cotas ó *iii)* se le asigna el máximo valor posible dentro de sus cotas. Finalmente si resta energía que intercambiar, se asigna a un servicio auxiliar. La naturaleza de esta metodología permite que Pariyani y *col.* (2006) utilicen la diferencia media logarítmica de temperaturas rigurosa y establecen el valor de EMAT igual a 10 K.

El diseño base para este Problema Ilustrativo 2.2 se muestra en la Figura 2.6, con un costo total anual reportado de \$ 43,661. Este diseño incluye un total de 11 intercambiadores de calor, de los cuales, 7 son recuperadores de calor y 4 son enfriadores. Los enfriadores de las corrientes H4 y H5 están localizados en el extremo de las corrientes, pero el enfriador de la corriente H1 y el enfriador de una de las sub-corrientes de H3 son intermedios, está sub-corriente de H3 intercambia calor con otras dos corrientes más, en serie (C5 y C4). Estas son características que no es posible representar con un enfoque de superestructura tradicional, mientras que la representación con el diagrama de malla por etapas captura sin problemas todos los elementos topológicos del diseño base, habilitando la generación automática y la resolución del modelo de optimización asociado, el cual es resuelto con la metodología de optimización multi-arranque permitiendo mezclado no isotérmico.

En la solución del problema abordado se consumió un tiempo computacional total de 63.438 s, solamente 9 de las 1000 iteraciones realizadas terminaron en una condición de infactibilidad, en las otras 991 iteraciones se obtuvieron dos soluciones óptimas locales, diseños P1 y P2, con costos totales anuales de \$ 43,733.45 y \$ 43,646.07. Las convergencias por diseño se muestran en la Tabla 2.4.

**Tabla 2.4 Frecuencias en los diseños para el Problema Ilustrativo 2.2.**

Iteraciones factibles: 991	Diseño P1	Diseño P2
Frecuencia por diseño:	913	78

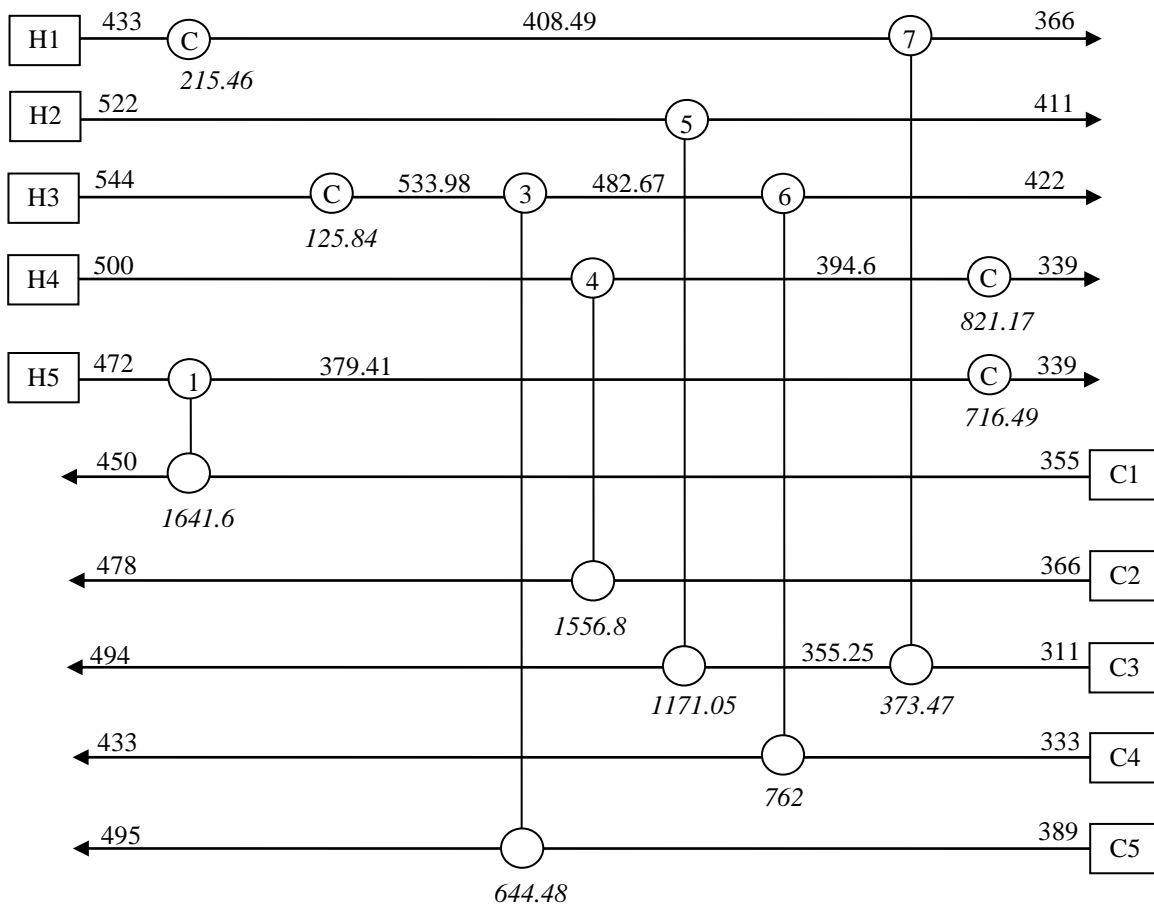


**Figura 2.6** Diseño base para el Problema Ilustrativo 2.2 (Pariyani y col. 2006) con un costo total anual reportado de \$ 43,661 (temperaturas (K) en letra normal, cargas térmicas (kW) en letra cursiva).

El diseño óptimo local P1 se muestra en la Figura 2.7, mostrando un incremento en \$ 72.45 (0.166%) en el costo total anual respecto al costo del diseño base. Es importante destacar que la optimización sugiere la eliminación del equipo de intercambio 2 (H3-C1), con la redistribución de cargas térmicas en el intercambiador 1 y los enfriadores de H3 y H5. Entonces, a cambio de un pequeño incremento en el costo, el diseño de red P1 presenta

una simplificación estructural del diseño base, eliminando la división de la corriente H3, al tiempo que reduce el número total de intercambiadores de calor de 11 a 10.

El diseño óptimo P2 se muestra en la Figura 2.8, con un costo total anual \$ 15 (0.03%) menor que el costo total anual del diseño base. Más importante que la pequeña reducción en costo es el hecho de que presenta cambios en la topología, la optimización elimina el enfriador intermedio colocado en una de las sub-corrientes de H3 redistribuyendo las cargas térmicas entre los intercambiadores 1 (H5-C1) y 2 (H3-C1) y el enfriador de la corriente H5. Las fracciones de flujo de las sub-corrientes de H3 se muestran en paréntesis en la Figura 2.8.



**Figura 2.7** Diseño óptimo local P1 para el Problema Ilustrativo 2.2, con un costo total anual de \$ 43,733 (temperaturas (K) en letra normal, cargas térmicas (kW) en letra cursiva).

Los resultados obtenidos en la optimización del diseño base de Pariyani y col. (2006) proveen evidencia de que al aplicar la metodología de optimización propuesta, es posible obtener diseños de redes alternativos, no sólo redistribuir las cargas térmicas entre los intercambiadores ya presentes en los diseños base, además se pueden presentar reducciones en el número total de intercambiadores con los correspondientes cambios estructurales y simplificaciones de los diseños. Este caso de estudio permitió mostrar la versatilidad de la representación del diagrama de malla por etapas y el modelo matemático (*P*) al poder incluir elementos tales como los servicios auxiliares intermedios y equipos en serie para sub-corrientes.

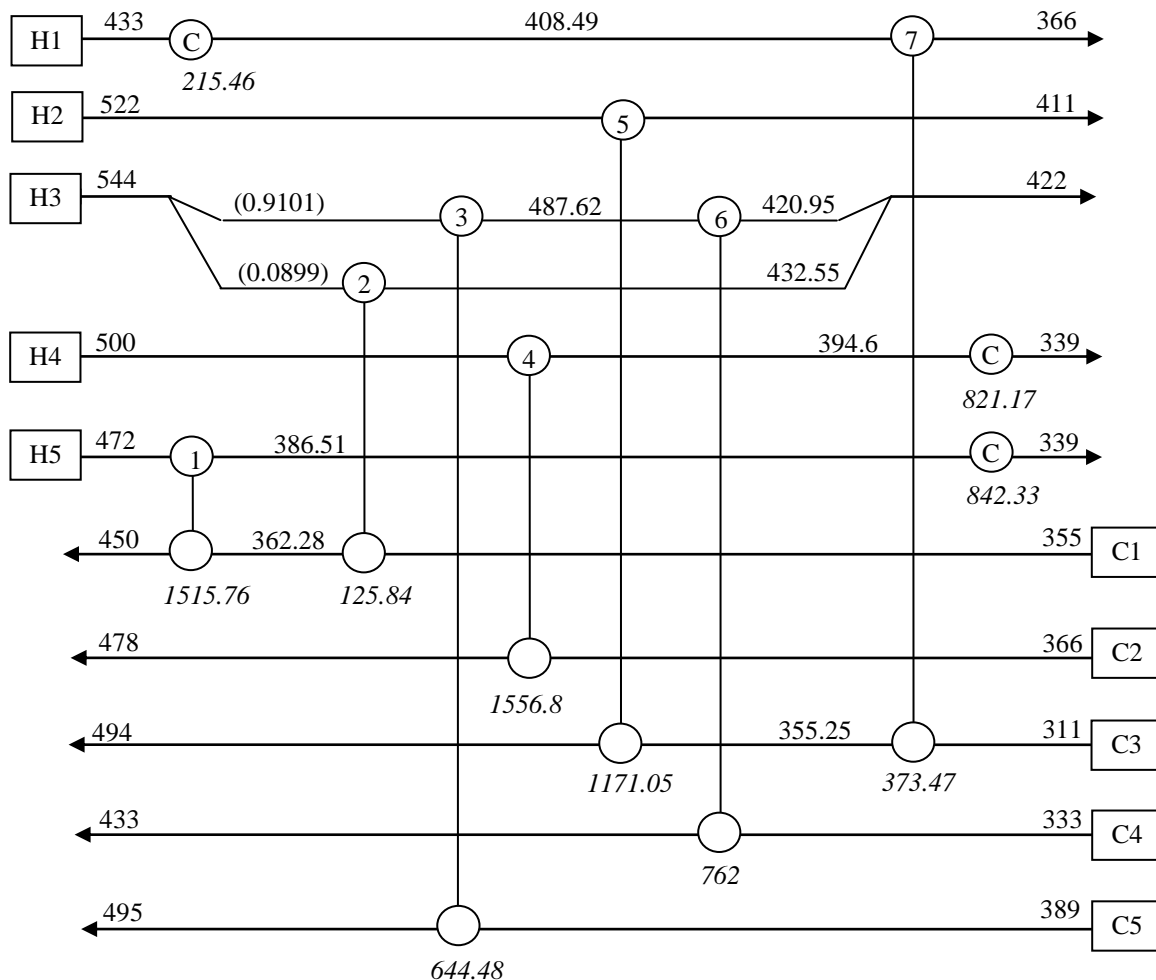


Figura 2.8 Diseño óptimo local P2 para el Problema Ilustrativo 2.2, con un costo total anual de \$ 43,646 (temperaturas (K) en letra normal, cargas térmicas (kW) en letra cursiva y fracciones entre paréntesis).



## 2.6 Conclusiones

En este capítulo se abordó la optimización del diseño de redes de intercambio de calor cuya topología ha sido previamente establecida por una metodología de síntesis. Para resolver este problema de diseño óptimo se proponen un modelo de programación no lineal que minimiza el costo total anual de la red y un algoritmo de optimización con multi-arranque estocástico en dos fases. Esta novedosa estrategia de modelado consiste de dos elementos, el primero es la representación de las estructuras de redes mediante un diagrama de malla por etapas, definido con base en la asignación de una etapa a cada equipo de intercambio presente en la red y no a posiciones de temperatura, lo que permite capturar diversos elementos topológicos comprendidos en los esquemas tradicionales de superestructura e incorporar otras configuraciones tales como equipos en serie presentes en sub-corrientes o bien calentadores y enfriadores intermedios y en sub-corrientes, entre otros.

El segundo elemento, es la formulación de programación no lineal que incluye no convexidades en la función de costos, en los balances de energía para las sub-corrientes y en la diferencia de temperaturas en los intercambiadores de calor; pero, cabe destacar, que los balances de energía en los mezcladores, para el caso de mezclado no isotérmico que involucran términos bilineales, quedan excluidos del modelo ya que las temperaturas de las corrientes de proceso después del mezclado quedan determinadas por ecuaciones lineales debido a la colocación de las etapas en el diagrama. Para realizar una exploración adecuada de la región factible del modelo no convexo en búsqueda de una solución, se presentó una estrategia iterativa basada en métodos multi-arranque, con la generación de un punto de inicio aleatorio en cada iteración.

La aplicación y el desempeño de estos elementos se ilustraron con la optimización de dos diseños disponibles en la literatura para los problemas 9SP y 10SP1, que involucran la integración térmica de 9 y 10 corrientes de proceso, con un total de 15 y 11 intercambiadores de calor, respectivamente. El primero de los diseños base fue obtenido usando una metodología de optimización global determinista y el segundo diseño base fue obtenido con un algoritmo de optimización global de búsqueda aleatoria. Los resultados obtenidos con la metodología de optimización propuesta muestran que, a pesar de tomar

como punto de partida diseños de redes cuidadosamente optimizados, en ambos casos fue posible obtener diseños de redes alternativos con costos totales anuales similares o por debajo de los diseños base, pero con diferentes distribuciones de temperaturas, cargas térmicas y áreas. Aún más importante, los resultados dan evidencia de la posibilidad que existe de que al optimizar un diseño base dado, se obtengan diseños de redes de intercambio de calor que presenten simplificaciones estructurales y reducciones en el número total de intercambiadores de calor.

### **3. FORMULACIONES DE PROGRAMACIÓN NO LINEAL ENTERA MIXTA Y METODOLOGÍA DETERMINISTA**

#### **3.1 Introducción**

En el contexto del uso eficiente de energía térmica en procesos industriales, en este capítulo se abordan algunos aspectos de la optimización global determinista de redes de recuperación de calor con topología pre-establecida. Diferentes estrategias de optimización global deterministas se encuentran en la literatura; una revisión de los procedimientos pioneros de optimización global aplicados en ingeniería de sistemas de proceso se puede leer en Grossmann y Biegler (2004) y Floudas y col. (2005). En aplicaciones para redes de intercambio de calor se pueden citar los siguientes trabajos.

Quesada y Grossmann (1993) abordan la optimización global con un método de ramificación y acotamiento, suponiendo que la función de costos es una función lineal del área de intercambio de calor y aproximando la diferencia media logarítmica de temperaturas para los intercambiadores de calor con un promedio aritmético. Estos autores consideran que las redes a optimizar corresponden a una configuración particular de la superestructura de Yee y Grossmann (1990), en la cual se plantean una secuencia de etapas con mezclado isotérmico, trabajando así con un modelo de optimización con restricciones lineales.

Ryoo y Sahinidis (1995) desarrollaron el algoritmo de optimización global determinista de ramificación y reducción para problemas no lineales y no convexos, que incorpora una serie de pruebas con base en optimalidad y en factibilidad para reducir el espacio de búsqueda de la solución y acelerar así la convergencia del algoritmo de optimización. Estos autores aplicaron su algoritmo en la optimización de redes de intercambio de calor considerando que las redes corresponden a una configuración particular de la superestructura de Floudas y Ciric (1989), con funciones de costos no convexas y la aproximación de Paterson (1984) para la diferencia media logarítmica de temperaturas.

Zamora y Grossmann (1998a) abordan problemas de optimización de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida, en el contexto del problema de síntesis. Estos autores utilizaron un método de ramificación y acotamiento para redes sin división de corrientes, funciones de costos lineales y un promedio aritmético para la diferencia media logarítmica de temperaturas. Zamora y Grossmann (1998b) introdujeron el concepto de un problema de contracción de cotas para las variables dentro del algoritmo de optimización global de ramificación y contracción, aplicado a modelos para sistemas de proceso estructurados que incluyen términos bilineales, fraccionales lineales y cóncavos univariados. Zamora y Grossmann (1997) utilizaron el algoritmo de ramificación y contracción en la síntesis de redes sin división de corrientes, con una aproximación con hiper-planos para la diferencia media logarítmica de temperaturas. La aplicación del algoritmo de ramificación y contracción en la optimización de una pequeña red de intercambio de calor que incluye mezclado no isotérmico se ilustra en el trabajo de Zamora y Grossmann (2001).

Adjiman y col. (1998, 2000) desarrollaron el método de optimización global determinista  $\alpha$ BB, y presentan su aplicación al problema de optimización global de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida. La idea base es la construcción de una secuencia de cotas superiores e inferiores que permitan la relajación convexa del problema original. Esta relajación se obtiene reemplazando los términos bilineales y fraccionales lineales, con funciones convexas que impongan cotas rigurosas utilizando lo que definen como parámetros  $\alpha$  para generarlas; en la mayoría de los casos calcular los parámetros  $\alpha$  más adecuados es el reto principal.

Björk y Westerlund (2002) formulan el problema de síntesis de redes de intercambio de calor a partir del modelo Synheat, utilizando la aproximación de Paterson (1984) sustituyendo a la diferencia media logarítmica de temperaturas, y presentan una metodología con base en convexificar términos signomiales.

Bergamini y col. (2007) presentan su metodología con base en aproximaciones exteriores para la síntesis de redes de intercambio de calor. Aplican el algoritmo de ramificación y contracción en la optimización global determinista de redes con mezclado isotérmico y con la aproximación de Paterson (1984).

Bogataj y Kravanja (2012) presentan una estrategia para la optimización global de redes de intercambiadores de calor, en la que primero introducen un concepto de superestructura progresiva aumentada por una subestructura agregada y un problema de programación no lineal entera mixta asociado. La estrategia para proporcionar soluciones óptimas globales se basa en incorporar sub-estimadores convexos lineales y no lineales por segmentos de los términos fraccionales lineales no convexos presentes en el modelo. Además, presentan un algoritmo para identificar buenas soluciones localmente óptimas. El enfoque fue probado en dos ejemplos y concluyen que con esta herramienta se puede resolver pequeños problemas de síntesis de HEN para lograr la optimización global con un esfuerzo computacional razonable, mientras que se pueden identificar buenas soluciones locales óptimas para problemas más grandes.

Isafiade y col. (2015) presentan una versión modificada de la superestructura de Yee y Grossman (1990) cuyas etapas se adaptan a la síntesis de redes de intercambiadores de calor que tienen múltiples períodos de operaciones; esto es, variaciones en los parámetros de operación tales como la temperatura de suministro y objetivo y flujos, o bien, múltiples servicios auxiliares. La metodología de solución implica resolver modelos de programación no lineal mixta entera de períodos múltiples en un enfoque de dos pasos.

Kim y col. (2017) resuelven una extensión del modelo Synheat considerando mezclado no isotérmico. El modelo se basa en una superestructura de etapas/sub-etapas restringiendo las ramificaciones y el número de apareamientos en serie en cada rama. Se agrega un control de las diferencias de temperatura en los mezclados. Kim y Bagajewicz (2017) extienden la formulación del modelo de etapas/sub-etapas para considerar flujos de capacidad calorífica variable con la temperatura y estudiar su influencia en el diseño de las redes de intercambiador de calor.

Nemet y col. (2018) centran su trabajo en la síntesis de redes de intercambio de calor a gran escala utilizando programación matemática para lograr soluciones casi óptimas globales con base en un enfoque en dos pasos. En el primer paso, se utiliza un modelo de programación lineal entera mixta para obtener una solución óptima global con una diferencia de temperaturas mínima seleccionada. El segundo paso consiste en usar los apareamientos seleccionados en paso 1 en un modelo de programación no lineal entera

mixta, utilizando una superestructura reducida, para generar una red de intercambio de calor factible.

La optimización global determinista de modelos no convexos de programación no lineal asociados al problema de diseño óptimo de redes de intercambio de calor, aún considerando variaciones en los parámetros de operación, requieren del desarrollo de relajaciones convexas que permitan obtener cotas inferiores justas para la función objetivo de costo. En este capítulo se explora el impacto de introducir estimadores convexas por segmentos para la relajación de los términos fraccionales lineales involucrados en los términos de costo de los equipos de recuperación de calor. La idea principal consiste en particionar el dominio de cada variable de carga térmica, asignando una variable binaria a cada partición, estableciendo un esquema de contribuciones por segmento para el costo total de la red. Se ilustra la estrategia optimizando una red de intercambio de calor que involucra la integración térmica de dos corrientes calientes y tres corrientes frías, con la interconexión de cuatro equipos y mezclado no isotérmico. Los resultados muestran que al introducir los estimadores por segmentos, la cota inferior obtenida es considerablemente más justa que la obtenida con una relajación convexa construida sobre una sola partición.

En la siguiente sección se presenta la formulación del problema abordado. En la Sección 3.3 se presenta el caso de estudio abordado con su modelo de programación no lineal no convexo para minimizar el costo total anual de la red de intercambio de calor y una formulación básica para la sub-estimación rigurosa del costo total de redes de intercambio de calor con estimadores convexas para los términos bilineales con las expresiones de McCormick (1976), Al-Khayyal y Falk (1983) y Al-Khayyal (1990), estimadores convexas para los términos fraccionales lineales con las expresiones de Zamora y Grossmann (1997, 1998 y 1999) y la aproximación de Chen (1987) para la diferencia media logarítmica de temperaturas. Las propuestas principales de este capítulo se presentan en las Secciones 3.4, 3.5 y 3.6, donde se desarrollan tres formulaciones convexas por segmentos para la relajación de los términos fraccionales lineales involucrados en los términos de costo de los equipos de recuperación de calor, y en la Sección 3.7 se presenta su desempeño en el acotamiento inferior riguroso del costo total anual de la red. En la Sección 3.8 se presenta una formulación convexa que permite la relajación por segmentos

de los términos bilineales y tres estrategias de mallado para las particiones en el dominio de cada variable de carga térmica sobre las que se desarrollan las estimaciones por segmentos, y se muestra el impacto que tienen en la sub-estimación del costo; esta sección cierra con un prototipo de algoritmo de optimización global determinista para el diseño óptimo de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida. Finalmente, en la Sección 3.9 de este capítulo se presentan algunas conclusiones.

### 3.2 Formulación del problema

Los modelos matemáticos empleados para la optimización de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida, minimizando el costo total anual de la red, tienen características no convexas por la presencia de potencias y de términos fraccionales lineales para el cálculo de los términos de área en la función objetivo, términos bilineales en los balances de energía de sub-corrientes y en el balance de energía en los mezcladores, y la diferencia media logarítmica de temperaturas en las restricciones. De manera general, el problema de programación no lineal asociado se puede definir así:

$$\begin{aligned}
 & \text{Min } f(x) && f(x) : R^n \rightarrow R \\
 & \text{sujeto a} \\
 & h(x) = 0 && h(x) : R^n \rightarrow R^r && \text{(NLP)} \\
 & g(x) \leq 0 && g(x) : R^n \rightarrow R^m \\
 & x \in X \subseteq R^n \\
 & D = \left\{ x \in R^n : h(x) = 0, g(x) \leq 0, x \in X \subseteq R^n \right\}
 \end{aligned}$$

El problema entonces consiste en encontrar al menos un punto  $x^* \in D$  que satisfice  $f(x^*) \leq f(x)$  para todo  $x \in D$ , o mostrar que ese punto no existe.

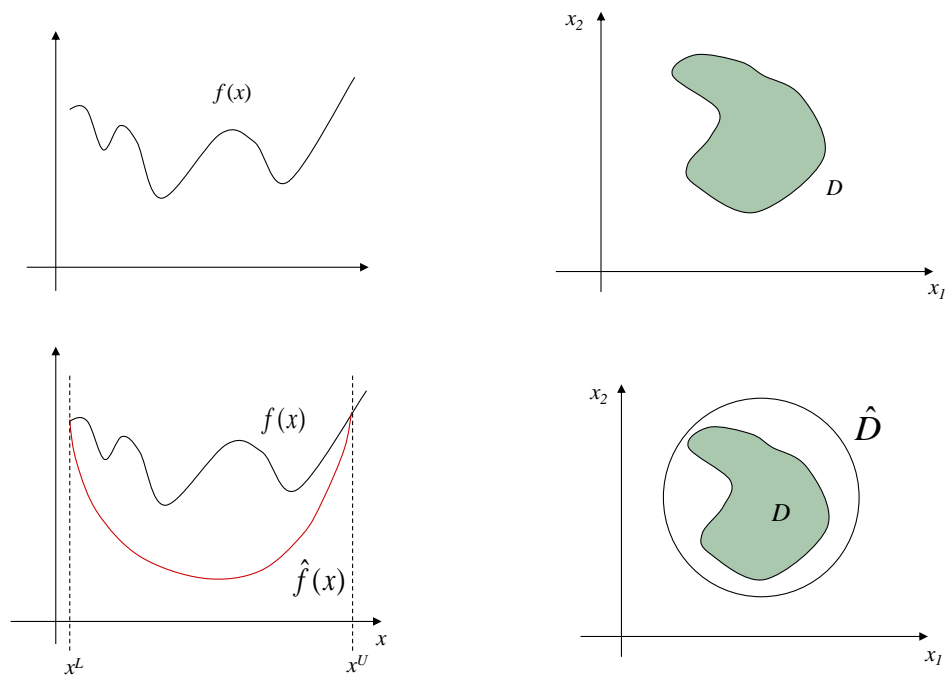
Los métodos de optimización global deterministas para obtener una solución del problema (NLP) con un esquema de ramificación y acotamiento (Horst y Tuy, 2013) se caracterizan por la necesidad de obtener una cota inferior rigurosa para la función objetivo del problema a tratar. Esta cota inferior rigurosa sirve como una base para el recorte de la

región de búsqueda del óptimo global y para determinarla se desarrolla un problema relajado convexo del problema original. Este problema puede tomar la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \text{Min } \hat{f}(x) \\ & \text{sujeto a} \\ & \quad x \in \hat{D} \end{aligned} \tag{LB}$$

donde:  $\hat{f}(x) \leq f(x)$  y  $D \subseteq \hat{D}$ ,  $\hat{f}(x)$  y  $\hat{D}$  son convexos.

En la Figura 3.1 se muestra de manera gráfica la construcción del problema relajado convexo asociado al problema original; la función convexa  $\hat{f}(x)$  sub-estima el valor de  $f(x)$ , mientras que  $\hat{D}$  contiene a  $D$ .



**Figura 3.1 Sub-estimación convexa de un problema no convexo en dos variables.**

El tiempo requerido por un algoritmo de ramificación y acotamiento para resolver un problema de optimización global de programación no lineal no convexo depende de la calidad de la relajación convexa utilizada para la sub-estimación.



Diferentes autores han trabajado dentro de sus metodologías para atender el problema del acotamiento inferior riguroso del costo total mínimo:

Zamora y Grossmann (1997) desarrollaron el modelo no lineal mixto-entero convexo HENS-LB para la operación de acotamiento inferior en la síntesis de redes de intercambio de calor, en donde reemplazan la suposición de mezclado isotérmico con una suposición más estricta de no permitir división de corrientes. La propuesta introduce un conjunto de planos tangentes que permiten acotar por arriba el valor de la diferencia media logarítmica de temperaturas y reemplazan los términos no convexos de la función objetivo por relajaciones convexas, agregando a las restricciones un conjunto de desigualdades lineales que permiten obtener una cota inferior en el costo por área de intercambio de calor, las cuales solo dependen de las cotas de cargas térmicas.

Björk y Westerlund (2002) desarrollaron un problema relajado convexo en el cual la función objetivo es lineal y la ecuación de diseño no lineal para las áreas de intercambio de calor se considera en las restricciones. Reacomodando términos y utilizando la aproximación de Paterson (1984) para reemplazar a la diferencia media logarítmica de temperaturas, la base de la relajación convexa radica en un cambio de variable para las cargas térmicas involucradas en los términos no convexos en las restricciones de diseño; el cambio de variable que realizan introduce restricciones adicionales al modelo con términos cóncavos univariable que son relajados con aproximaciones lineales. Estos autores establecen una malla en el dominio de cargas térmicas, indicando los nodos para la formulación de aproximaciones lineales por segmentos de estas expresiones y parametrizando pendientes y ordenadas al origen.

Bergamini y *col.* (2007) desarrollan un problema relajado convexo en cuya función objetivo aparecen términos cóncavos de las variables de área, los cuales se relajan introduciendo un esquema de aproximaciones lineales por segmentos. Para ello establecen una malla uniforme en el dominio de áreas, asignan una variable binaria y una variable continua adicional a cada partición y establecen un esquema de contribuciones por segmento. La ecuación de diseño se considera en las restricciones; reacomodando términos surgen productos de las variables de diferencia media logarítmica de temperaturas con las variables de área, los cuales se relajan estableciendo cotas en las variables de diferencia de

temperaturas y definiendo las envolturas convexa y cóncava de cada término bilineal en cada subregión delimitada por la intersección de cada intervalo de área con el intervalo de diferencia de temperatura. Adicionalmente, se usa la aproximación de Paterson (1984).

El problema aún consiste en obtener cotas inferiores más justas para reducir el espacio de búsqueda del óptimo global. Para ello, en este capítulo se plantea establecer una malla en el dominio de cargas térmicas y construir una relajación convexa por segmentos para los términos no convexos involucrados en el costo de área de los equipos de recuperación de calor. La idea es que al introducir una relajación convexa en segmentos, la cota inferior obtenida sea considerablemente más justa que la obtenida con una relajación convexa construida sobre todo el dominio.

### 3.3 Caso de estudio 3.1

Este problema de diseño, presentado por Quesada y Grossmann (1993), se refiere a la integración térmica en un proceso que cuenta con dos corrientes calientes y tres corrientes frías con la interconexión de cuatro equipos. Los datos para las corrientes y la información de costos están dados en la Tabla 3.1. La topología preestablecida para este problema se muestra en la Figura 3.2 con la identificación de variables. La mejor solución conocida para este caso de estudio es de \$ 36,199.15 año<sup>-1</sup>.

**Tabla 3.1 Datos para el Caso de estudio 3.1 (Quesada y Grossmann, 1993)**

Corriente	TS (K)	TO (K)	F (kW K <sup>-1</sup> )
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 <sup>-1</sup> ) = 270 área (m <sup>2</sup> ).
Costo del intercambiador 2 (\$ año <sup>-1</sup> ) = 720 área (m <sup>2</sup> ).
Costo del intercambiador 3 (\$ año <sup>-1</sup> ) = 240 área (m <sup>2</sup> ).
Costo del intercambiador 4 (\$ año <sup>-1</sup> ) = 900 área (m <sup>2</sup> ).

$U_1 = U_2 = 0.1 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ ; $U_3 = U_4 = 1.0 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ ;
---

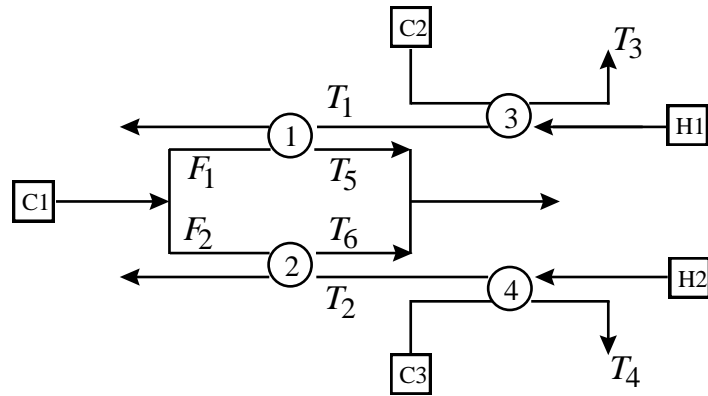


Figura 3.2 Red de intercambio de calor para el Caso de estudio 3.1 (Quesada y Grossmann, 1993)

### 3.3.1 Modelo de programación no lineal no convexo

A partir de los datos para el Caso de estudio y la topología pre-establecida para la red de intercambio de calor considerando mezclado no isotérmico, modelando la diferencia media logarítmica de temperaturas con la aproximación de Chen (1987) y estableciendo el valor de la diferencia mínima de temperaturas aceptable en ambos extremos del intercambiador (EMAT) igual a 5 K, el modelo de programación no lineal para la optimización de la red con mezclado no isotérmico puede establecerse como sigue:

#### Modelo (NLP 1)

*Variables continuas positivas*

$q_1, q_2, q_3, q_4$  = carga térmica de cada intercambiador (kW)

$T_1, T_2, T_3, T_4, T_5, T_6$  = temperaturas en la red (K)

$dth_1, dth_2, dth_3, dth_4$  = diferencia de temperaturas en el extremo caliente de cada intercambiador de calor (K)

$dtc_1, dtc_2, dtc_3, dtc_4$  = diferencia de temperaturas en el extremo frío de cada intercambiador de calor (K)

$\Delta T_1, \Delta T_2, \Delta T_3, \Delta T_4$  = diferencia media logarítmica de temperaturas de cada equipo de intercambio de calor (K)

$F_1, F_2$  = flujos de capacidad calorífica de las sub-corrientes de la corriente C1 (kW K<sup>-1</sup>)

$z$  = función objetivo de costo total anual del modelo (*NLP-I*) (\$ año<sup>-1</sup>)

*Función objetivo*

$$\text{Minimizar } z = 2700 \frac{q_1}{\Delta T_1} + 7200 \frac{q_2}{\Delta T_2} + 240 \frac{q_3}{\Delta T_3} + 900 \frac{q_4}{\Delta T_4} \quad (3.1)$$

sujeto a:

*Restricciones*

*Balances globales de energía para corrientes de proceso*

$$\begin{aligned} q_1 + q_2 &= 1000 \\ q_1 + q_3 &= 999.9 \\ q_2 + q_4 &= 1000 \end{aligned} \quad (3.2)$$

*Balances de energía en los intercambiadores de calor*

$$\begin{aligned} q_1 &= 5.555(T_1 - 395) \\ q_2 &= 3.125(T_2 - 398) \\ q_3 &= 4.545(T_3 - 365) \\ q_3 &= 5.555(575 - T_1) \\ q_4 &= 3.571(T_4 - 358) \\ q_4 &= 3.125(718 - T_2) \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} q_1 &= F_1(T_5 - 300) \\ q_2 &= F_2(T_6 - 300) \end{aligned} \quad (3.4)$$

*Balance de masa en el divisor*

$$F_1 + F_2 = 10 \quad (3.5)$$

*Balance de energía en el mezclador*

$$F_1 T_5 + F_2 T_6 = 4000 \quad (3.6)$$

*Diferencias de temperaturas en cada extremo de los intercambiadores*

$$\begin{aligned}
 dth_1 &= T_1 - T_5 \\
 dth_2 &= T_2 - T_6 \\
 dth_3 &= 575 - T_3 \\
 dth_4 &= 718 - T_4
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

$$\begin{aligned}
 dtc_1 &= 95 \\
 dtc_2 &= 98 \\
 dtc_3 &= T_1 - 365 \\
 dtc_4 &= T_2 - 358
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

*Diferencia media logarítmica de temperaturas en cada intercambiador*

$$\begin{aligned}
 \Delta T_1 &= [(dth_1)(dtc_1)(dth_1 + dtc_1)/2]^{1/3} \\
 \Delta T_2 &= [(dth_2)(dtc_2)(dth_2 + dtc_2)/2]^{1/3} \\
 \Delta T_3 &= [(dth_3)(dtc_3)(dth_3 + dtc_3)/2]^{1/3} \\
 \Delta T_4 &= [(dth_4)(dtc_4)(dth_4 + dtc_4)/2]^{1/3}
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

*Cotas de las variables*

$0 \leq q_1 \leq 999.9$	$395 \leq T_1 \leq 575$	$dth_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4$
$0 \leq q_2 \leq 1000$	$398 \leq T_2 \leq 718$	$dtc_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4$
$0 \leq q_3 \leq 954.45$	$365 \leq T_3 \leq 570$	$30 \leq \Delta T_1 \leq 170$
$0 \leq q_4 \leq 1000$	$358 \leq T_4 \leq 713$	$30 \leq \Delta T_2 \leq 221$
$0 \leq F_1 \leq 10$	$300 \leq T_5 \leq 570$	$13 \leq \Delta T_3 \leq 210$
$0 \leq F_2 \leq 10$	$300 \leq T_6 \leq 713$	$16 \leq \Delta T_4 \leq 360$

### **Comentarios**

1. La función objetivo en la Ec. (3.1) para minimizar el costo total anual de la red de intercambio de calor incluye no convexidades debido a los términos fraccionales lineales en la función de área de los equipos de intercambio de calor.

2. Los balances de energía para las sub-corrientes que participan en equipos de intercambio de calor que se plantean en las Ecs. (3.4) y el balance de energía en el

mezclador, Ec. (3.6), incluyen términos bilineales que también introducen no convexidades en el modelo.

3. Las diferencias media logarítmica de temperaturas en los intercambiadores de calor, Ecs. (3.9), se sustituyen con la aproximación propuesta por Chen (1987). Estas ecuaciones son no lineales e introducen no convexidades en el modelo.

### 3.3.2 Formulación de programación no lineal convexa básica

A partir del modelo (*NLP 1*) se desarrolla el modelo (*LB 1*) para el acotamiento inferior riguroso del costo total anual de la red para el Caso de estudio 3.1. El modelo (*LB 1*) es una formulación de programación no lineal convexa:

#### Modelo (*LB 1*)

*Notación adicional requerida*

*Variables continuas positivas*

$\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$  = variable para la relajación convexa de cada carga térmica de cada intercambiador que participa en el término fraccional lineal ( $\text{kW}^{-2}$ )

$y_{15}$  = variable para la relajación convexa del término bilineal  $F_1 T_5$  (kW)

$y_{26}$  = variable para la relajación convexa del término bilineal  $F_2 T_6$  (kW)

*Función objetivo*

$$\text{Minimizar} \quad \hat{z} = 2700 \frac{\theta_1^2}{\Delta T_1} + 7200 \frac{\theta_2^2}{\Delta T_2} + 240 \frac{\theta_3^2}{\Delta T_3} + 900 \frac{\theta_4^2}{\Delta T_4} \quad (3.10)$$

*Restricciones*

sujeto a:

$$\theta_i \geq (q_i^L)^{1/2} + \frac{(q_i^U)^{1/2} - (q_i^L)^{1/2}}{q_i^U - q_i^L} (q_i - q_i^L) \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.11)$$

Ecuaciones (3.2), (3.3), (3.5), (3.7) y (3.8) del modelo (*NLP 1*)

$$\begin{aligned} q_1 &= y_{15} - 300 F_1 \\ q_2 &= y_{26} - 300 F_2 \end{aligned} \tag{3.12}$$

$$y_{15} + y_{26} = 4000 \tag{3.13}$$

$$\begin{aligned} y_{15} &\geq T_5^L F_1 + F_1^L T_5 - F_1^L T_5^L & y_{15} &\leq T_5^L F_1 + F_1^U T_5 - F_1^U T_5^L \\ y_{15} &\geq T_5^U F_1 + F_1^U T_5 - F_1^U T_5^U & y_{15} &\leq T_5^U F_1 + F_1^L T_5 - F_1^L T_5^U \end{aligned} \tag{3.14}$$

$$\begin{aligned} y_{26} &\geq T_6^L F_2 + F_2^L T_6 - F_2^L T_6^L & y_{26} &\leq T_6^L F_2 + F_2^U T_6 - F_2^U T_6^L \\ y_{26} &\geq T_6^U F_2 + F_2^U T_6 - F_2^U T_6^U & y_{26} &\leq T_6^U F_2 + F_2^L T_6 - F_2^L T_6^U \end{aligned} \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned} \Delta T_1 &\leq [(dth_1)(dte_1)(dth_1 + dte_1)/2]^{1/3} \\ \Delta T_2 &\leq [(dth_2)(dte_2)(dth_2 + dte_2)/2]^{1/3} \\ \Delta T_3 &\leq [(dth_3)(dte_3)(dth_3 + dte_3)/2]^{1/3} \\ \Delta T_4 &\leq [(dth_4)(dte_4)(dth_4 + dte_4)/2]^{1/3} \end{aligned} \tag{3.16}$$

*Cotas de las variables*

$0 \leq q_1 \leq 999.9$	$395 \leq T_1 \leq 575$	$dth_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4$
$0 \leq q_2 \leq 1000$	$398 \leq T_2 \leq 718$	$dte_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4$
$0 \leq q_3 \leq 954.45$	$365 \leq T_3 \leq 570$	$30 \leq \Delta T_1 \leq 170$
$0 \leq q_4 \leq 1000$	$358 \leq T_4 \leq 713$	$30 \leq \Delta T_2 \leq 221$
$0 \leq F_1 \leq 10$	$300 \leq T_5 \leq 570$	$13 \leq \Delta T_3 \leq 210$
$0 \leq F_2 \leq 10$	$300 \leq T_6 \leq 713$	$16 \leq \Delta T_4 \leq 360$
$y_{15} \geq 0$	$y_{26} \geq 0$	$\theta_i \geq 0 \quad i = 1, 2, 3, 4$

### **Comentarios**

1. Para la relajación de los términos fraccionales lineales de la función objetivo del modelo (*NLP 1*), Ec. (3.1), se emplean las expresiones de Zamora y Grossmann (1997, 1998 y 1999) en las Ecs. (3.10) y (3.11).

2. Para los términos bilineales de los balances de energía para las sub-corrientes que participan en equipos de intercambio de calor, Ecs. (3.4), y del balance de energía en el mezclador, Ec. (3.6), se emplean las expresiones de McCormick (1976), Al-Khayyal y Falk (1983) y Al-Khayyal (1990), Ecs. (3.12) - (3.15).

3. Las diferencias media logarítmica de temperaturas con la aproximación propuesta por Chen (1987), Ecs. (3.9), se relajan con desigualdades convexas, Ecs. (3.16).

4. El conjunto de desigualdades en (3.11) y (3.16) permite establecer una cota inferior en el costo por área de los intercambiadores de calor. Para construir las desigualdades (3.11), sólo se necesitan las cotas de las cargas térmicas.

5. La solución de esta formulación de programación no lineal convexa básica es de \$18,719.66 año<sup>-1</sup>; esto es una diferencia de 48.28% respecto a la mejor solución conocida para este Caso de estudio 3.1.

A partir de la formulación de programación no lineal convexa básica (*LB 1*), se plantea la idea de introducir en las estimaciones de los términos fraccionales lineales propuestos por Zamora y Grossmann (1997, 1998 y 1999), Ecs. (3.10) y (3.11), el concepto de estimaciones por segmentos. Para ello, se plantean tres diferentes formulaciones y sus respectivos modelos matemáticos convexos de programación no lineal entera mixta.

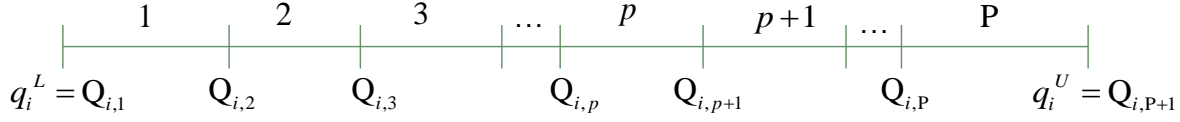
### **3.4 Estimadores convexos por segmentos de los términos fraccionales lineales – Formulación I**

Este esquema se basa en el trabajo de Bergamini y *col.* (2007). La idea principal radica en dividir el dominio de cada variable de carga térmica en segmentos de tamaño uniforme y permitir que se vayan sumando contribuciones que correspondan a cada intervalo anterior a aquel en el que se localice el valor de la carga térmica en la solución.

El modelo no lineal entero mixto construido por segmentos propuesto en esta formulación necesita que se establezca una malla en el dominio de las variables de carga térmica de cada intercambiador presente en la red. En la Figura 3.3 se muestra la malla



uniforme para la carga térmica del equipo  $i$ . Cada intervalo está determinado por la colocación de los nodos.



**Figura 3.3** Malla uniforme en el dominio de la variable de carga térmica  $q_i$

Considere una partición  $K$  del intervalo  $[q_i^L, q_i^U]$ , con  $P+1$  nodos,  $K = \{Q_{i,1}, Q_{i,2}, \dots, Q_{i,P+1}\}$  distribuidos de manera uniforme, donde  $Q_{i,1} = q_i^L$  y  $Q_{i,P+1} = q_i^U$ . Se agregan variables continuas adicionales,  $\delta_{i,p}$ , que denotan la contribución del intervalo  $[Q_{i,p}, Q_{i,p+1}]$  en el valor actual de  $q_i$ , mediante la expresión:

$$q_i = Q_{i,1} + \sum_{p=1}^P \delta_{i,p}$$

También, es necesario agregar variables binarias,  $w_{i,p}$ , que permitan determinar, mediante restricciones adicionales, en cuál segmento se ubica el valor de  $q_i$ .

Con estos nuevos elementos, la suma de términos convexos asociados al costo de área por equipo de intercambio presente en la red se establece en la formulación convexa como una sumatoria de términos convexos por segmentos, y el conjunto de restricciones que establecen una cota inferior en las variables  $\theta_i$  se expresa en cada intervalo como restricciones lógicas asociadas a las variables continuas y binarias que identifican cada intervalo. De manera formal, este es el modelo de programación no lineal entera mixta construido por segmentos para la Formulación I:

## Modelo (CI-MINLP)

Notación adicional requerida

### Índices

$i$  = índice para el número de intercambiador de calor

$p$  = índice para el segmento de la partición

### Variables continuas positivas

$\bar{\theta}_{i,p}$  = variable para la relajación convexa de la carga térmica del intercambiador  $i$  en el segmento  $p$  ( $\text{kW}^2$ )

$\delta_{i,p}$  = variable para la contribución del segmento  $p$  al valor de la carga térmica del intercambiador  $i$  ( $\text{kW}$ )

### Variables binarias

$w_{i,p}$  = variable para determinar en cuál segmento  $p$  se ubica el valor de la carga térmica del intercambiador  $i$

### Función objetivo

Minimizar

$$2700 \left[ \frac{Q_{1,1}}{\Delta T_1} + \sum_{p=1}^P \frac{\bar{\theta}_{1,p}^2}{\Delta T_1} \right] + 7200 \left[ \frac{Q_{2,1}}{\Delta T_2} + \sum_{p=1}^P \frac{\bar{\theta}_{2,p}^2}{\Delta T_2} \right] + 240 \left[ \frac{Q_{3,1}}{\Delta T_3} + \sum_{p=1}^P \frac{\bar{\theta}_{3,p}^2}{\Delta T_3} \right] + 900 \left[ \frac{Q_{4,1}}{\Delta T_4} + \sum_{p=1}^P \frac{\bar{\theta}_{4,p}^2}{\Delta T_4} \right] \quad (3.17)$$

sujeto a:

$$\bar{\theta}_{i,p} \geq \frac{\delta_{i,p}}{(\delta_{i,p}^U)^{1/2}} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P \quad (3.18)$$

$$(Q_{i,2} - Q_{i,1}) w_{i,1} \leq \delta_{i,1} \leq Q_{i,2} - Q_{i,1} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.19)$$

$$(Q_{i,p+1} - Q_{i,p}) w_{i,p} \leq \delta_{i,p} \leq (Q_{i,p+1} - Q_{i,p}) w_{i,p-1} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 2, 3, \dots, P-1 \quad (3.20)$$

$$\delta_{i,P} \leq (Q_{i,P+1} - Q_{i,P}) w_{i,P-1} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.21)$$

$$q_i = Q_{i,1} + \sum_{p=1}^P \delta_{i,p} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.22)$$

$$w_{i,p} \geq w_{i,p+1} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P-2 \quad (3.23)$$

Ecuaciones (3.2), (3.3), (3.5), (3.7) y (3.8) del modelo (*NLP 1*)

Ecuaciones (3.12) – (3.16) del modelo (*LB 1*)

*Cotas de las variables*

$$\begin{array}{lll} 0 \leq q_1 \leq 999.9 & 395 \leq T_1 \leq 575 & dth_i, dtc_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4 \\ 0 \leq q_2 \leq 1000 & 398 \leq T_2 \leq 718 & y_{15}, y_{26} \geq 0 \\ 0 \leq q_3 \leq 954.45 & 365 \leq T_3 \leq 570 & 30 \leq \Delta T_1 \leq 170 \\ 0 \leq q_4 \leq 1000 & 358 \leq T_4 \leq 713 & 30 \leq \Delta T_2 \leq 221 \\ 0 \leq F_1 \leq 10 & 300 \leq T_5 \leq 570 & 13 \leq \Delta T_3 \leq 210 \\ 0 \leq F_2 \leq 10 & 300 \leq T_6 \leq 713 & 16 \leq \Delta T_4 \leq 360 \end{array}$$

$$\bar{\theta}_{i,p} \geq 0 \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P$$

$$w_{i,p} \in \{0, 1\} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P-1$$

$$0 \leq \delta_{i,p} \leq \delta_{i,p}^U \quad i = 1, 2, 3, 4, \quad p = 1, 2, \dots, P$$

### **Comentarios**

1. Para los términos fraccionales lineales de la función objetivo del modelo (*NLP 1*), Ec. (3.1), se emplean las expresiones de Zamora y Grossmann (1997, 1998 y 1999) por segmentos con un esquema de contribuciones con base en Bergamini y *col.* (2007) en las ecs. (3.17) - (3.23).

2. Para construir las expresiones (3.18) - (3.22), sólo se necesitan las cotas de las cargas térmicas y la malla en el dominio de cada una.

3. La cota superior  $\delta_{i,p}^U$  corresponde al tamaño del intervalo, que para el caso de una malla uniforme se establece como:

$$\delta_{i,p}^U = \frac{q_i^U - q_i^L}{P} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P.$$

### 3.5 Estimadores convexos por segmentos de los términos fraccionales lineales – Formulación II

Este esquema se basa en el trabajo de Björk y Westerlund (2002). Estos autores refieren que es similar a un esquema presentado en Floudas (1995). La idea principal radica en dividir el dominio de la variable de carga térmica en segmentos de tamaño uniforme (Figura 3.3) y asignar una variable continua,  $\delta_{i,p}$ , y una variable binaria,  $\lambda_{i,p}$ , a cada intervalo. Se establece que la variable de carga térmica es la suma de las variables continuas recién introducidas, mediante la expresión:

$$q_i = \sum_{p=1}^P \delta_{i,p}$$

Cada una de estas variables continuas está acotada entre cero y el extremo del intervalo al que pertenece. Sólo una variable binaria es igual a 1, lo que corresponde a elegir sólo un intervalo, aquel en el que se encuentre el valor de la carga térmica.

Se establece la formulación convexa, al igual que en el caso anterior, considerando una sumatoria de términos convexos por segmentos pero con la diferencia de usar estas nuevas expresiones recién mostradas. El conjunto de restricciones que establecen una cota inferior en las variables  $\theta_i$  se expresa en cada intervalo como restricciones asociadas a las variables continuas y binarias que identifican cada intervalo. De manera formal, este es el modelo de programación no lineal entera mixta construido por segmentos para la formulación II:

#### **Modelo (CII-MINLP)**

*Notación adicional requerida*

*Índices*

$i$  = índice para el número de intercambiador de calor

$p$  = índice para el segmento de la partición

*Variables continuas positivas*

$\bar{\theta}_{i,p}$  = variable para la relajación convexa de la carga térmica del intercambiador  $i$  en el segmento  $p$  ( $\text{kW}^{-2}$ )

$\delta_{i,p}$  = variable para la contribución del segmento  $p$  al valor de la carga térmica del intercambiador  $i$  (kW)

*Variables binarias*

$\lambda_{i,p}$  = variable para elegir el segmento  $p$  en el que se ubica el valor de la carga térmica del intercambiador  $i$

*Función objetivo*

$$\text{Minimizar} \quad 2700 \left[ \sum_{p=1}^P \frac{\bar{\theta}_{1,p}^2}{\Delta T_1} \right] + 7200 \left[ \sum_{p=1}^P \frac{\bar{\theta}_{2,p}^2}{\Delta T_2} \right] + 240 \left[ \sum_{p=1}^P \frac{\bar{\theta}_{3,p}^2}{\Delta T_3} \right] + 900 \left[ \sum_{p=1}^P \frac{\bar{\theta}_{4,p}^2}{\Delta T_4} \right] \quad (3.24)$$

sujeto a:

$$\bar{\theta}_{i,p} \geq \frac{\delta_{i,p}}{(\delta_{i,p}^U)^{1/2}} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P \quad (3.25)$$

$$\sum_{p=1}^P \lambda_{ip} = 1 \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.26)$$

$$\delta_{i,p} \geq Q_{i,p} \lambda_{ip} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P \quad (3.27)$$

$$\delta_{i,p} \leq Q_{i,p+1} \lambda_{ip} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P \quad (3.28)$$

$$q_i = \sum_{p=1}^P \delta_{i,p} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.29)$$

Ecuaciones (3.2), (3.3), (3.5), (3.7) y (3.8) del modelo (*NLP 1*)

Ecuaciones (3.12) – (3.16) del modelo (*LB 1*)

*Cotas de las variables*

$$0 \leq q_1 \leq 999.9 \quad 395 \leq T_1 \leq 575 \quad dth_i, dtc_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4$$

$$0 \leq q_2 \leq 1000 \quad 398 \leq T_2 \leq 718 \quad y_{15}, y_{26} \geq 0$$

$$\begin{aligned}
0 \leq q_3 \leq 954.45 & & 365 \leq T_3 \leq 570 & & 30 \leq \Delta T_1 \leq 170 \\
0 \leq q_4 \leq 1000 & & 358 \leq T_4 \leq 713 & & 30 \leq \Delta T_2 \leq 221 \\
0 \leq F_1 \leq 10 & & 300 \leq T_5 \leq 570 & & 13 \leq \Delta T_3 \leq 210 \\
0 \leq F_2 \leq 10 & & 300 \leq T_6 \leq 713 & & 16 \leq \Delta T_4 \leq 360 \\
\bar{\theta}_{i,p} \geq 0 & & i = 1, 2, 3, 4 & & p = 1, 2, \dots, P \\
\lambda_{i,p} \in \{0, 1\} & & i = 1, 2, 3, 4 & & p = 1, 2, \dots, P \\
0 \leq \delta_{i,p} \leq Q_{i,p+1} & & i = 1, 2, 3, 4, & & p = 1, 2, \dots, P
\end{aligned}$$

### **Comentarios**

1. Para los términos fraccionales lineales de la función objetivo del modelo (*NLP 1*), Ec. (3.1), se emplean las expresiones de Zamora y Grossmann (1997, 1998 y 1999) por segmentos con un esquema de contribuciones con base en Björk y Westerlund (2002), en las Ecs. (3.24) - (3.29).

### **3.6 Estimadores convexos por segmentos de los términos fraccionales lineales – Formulación III**

En esta formulación se toman las ideas de cambio de variable de Björk y Westerlund (2002). La función objetivo entonces se establece en términos de una nueva variable  $A_i$  y en las restricciones aparecen términos fraccionales lineales de la forma  $\frac{q_i}{A_i}$ .

El modelo de programación no lineal no convexo para la optimización de la red del Caso de estudio 3.1, puede reformularse como sigue:

#### **Modelo (*NLP 2*)**

$$\text{Minimizar} \quad z = 2700A_1 + 7200A_2 + 240A_3 + 900A_4 \quad (3.30)$$

sujeto a:

$$\frac{q_i}{A_i} - \Delta T_i \leq 0 \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.31)$$

Ecuaciones (3.2) – (3.9) del modelo (*NLP 1*)

*Cotas de las variables*

$$\begin{array}{lll}
 0 \leq q_1 \leq 999.9 & 395 \leq T_1 \leq 575 & dth_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4 \\
 0 \leq q_2 \leq 1000 & 398 \leq T_2 \leq 718 & dtc_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4 \\
 0 \leq q_3 \leq 954.45 & 365 \leq T_3 \leq 570 & 30 \leq \Delta T_1 \leq 170 \\
 0 \leq q_4 \leq 1000 & 358 \leq T_4 \leq 713 & 30 \leq \Delta T_2 \leq 221 \\
 0 \leq F_1 \leq 10 & 300 \leq T_5 \leq 570 & 13 \leq \Delta T_3 \leq 210 \\
 0 \leq F_2 \leq 10 & 300 \leq T_6 \leq 713 & 16 \leq \Delta T_4 \leq 360
 \end{array}$$

$$A_i^L \leq A_i \leq A_i^U, \quad A_i^L = \frac{q_i^L}{\Delta T_i^U}, \quad A_i^U = \frac{q_i^U}{\Delta T_i^L} \quad i = 1, 2, 3, 4$$

### **Comentarios**

1. La función objetivo del modelo (*NLP 2*), Ec. (3.30), es una función lineal. Las no convexidades por los términos fraccionales lineales aparecen en las restricciones, en las ecuaciones para el cambio de variable, Ecs. (3.31).

La propuesta para el desarrollo del modelo convexo para sub-estimar el costo total anual de la red del Caso de estudio 3.1 es estimar los términos fraccionales lineales empleando las expresiones de Zamora y Grossmann (1997, 1998 y 1999) en las restricciones. Además, se usan aproximaciones por segmentos con un esquema de contribuciones con base en Björk y Westerlund (2002), considerando dividir el dominio de la variable de carga térmica en segmentos de tamaño uniforme (Figura 3.3). De manera formal, este es el modelo de programación no lineal entera mixta por segmentos para la Formulación III:

### **Modelo (CIII-MINLP)**

*Notación adicional requerida*

*Índices*

$i$  = índice para el número de intercambiador de calor

$p$  = índice para el segmento de la partición

*Variables binarias*

$\lambda_{i,p}$  = variable para elegir el segmento  $p$  en el que se ubica el valor de la carga térmica del intercambiador  $i$

*Parámetros*

$M_{i,p}$  = parámetro tipo gran  $M$  para ajustar la relajación a las cotas del segmento  $p$  en el que se ubica el valor de la carga térmica del intercambiador  $i$

*Función objetivo*

$$\text{Minimizar } 2700A_1 + 7200A_2 + 240A_3 + 900A_4 \quad (3.32)$$

sujeto a:

$$\frac{\theta_i^2}{A_i} - \Delta T_i \leq 0 \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.33)$$

$$\theta_i \geq (Q_{ip})^{1/2} + \frac{(Q_{ip+1})^{1/2} - (Q_{ip})^{1/2}}{Q_{ip+1} - Q_{ip}} (q_i - Q_{ip}) - M_{ip} (1 - \lambda_{ip}) \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P \quad (3.34)$$

$$M_{ip} = (Q_{ip})^{1/2} + \frac{(Q_{ip+1})^{1/2} - (Q_{ip})^{1/2}}{Q_{ip+1} - Q_{ip}} (q_i^U - Q_{ip}) \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P \quad (3.35)$$

$$\sum_{p=1}^P \lambda_{ip} = 1 \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.36)$$

$$q_i \geq \sum_{p=1}^P Q_{ip} \lambda_{ip} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.37)$$

$$q_i \leq \sum_{p=1}^P Q_{ip+1} \lambda_{ip} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.38)$$

Ecuaciones (3.2), (3.3), (3.5), (3.7) y (3.8) del modelo (*NLP 1*)

Ecuaciones (3.12) – (3.16) del modelo (*LB 1*)



### Cotas de las variables

$$\begin{array}{lll}
 0 \leq q_1 \leq 999.9 & 395 \leq T_1 \leq 575 & dth_i, dtc_i \geq 5 \quad i=1,2,3,4 \\
 0 \leq q_2 \leq 1000 & 398 \leq T_2 \leq 718 & y_{15}, y_{26} \geq 0 \\
 0 \leq q_3 \leq 954.45 & 365 \leq T_3 \leq 570 & 30 \leq \Delta T_1 \leq 170 \\
 0 \leq q_4 \leq 1000 & 358 \leq T_4 \leq 713 & 30 \leq \Delta T_2 \leq 221 \\
 0 \leq F_1 \leq 10 & 300 \leq T_5 \leq 570 & 13 \leq \Delta T_3 \leq 210 \\
 0 \leq F_2 \leq 10 & 300 \leq T_6 \leq 713 & 16 \leq \Delta T_4 \leq 360
 \end{array}$$

$$A_i^L \leq A_i \leq A_i^U, \quad A_i^L = \frac{q_i^L}{\Delta T_i^U}, \quad A_i^U = \frac{q_i^U}{\Delta T_i^L} \quad i=1,2,3,4$$

$$\theta_i \geq 0 \quad i=1,2,3,4$$

$$\lambda_{i,p} \in \{0,1\} \quad i=1,2,3,4 \quad p=1,2,\dots,P$$

### Comentarios

1. Para los términos fraccionales lineales de las restricciones del modelo (*NLP 2*), Ecs. (3.31), se emplean las expresiones de Zamora y Grossmann (1997, 1998 y 1999) por segmentos con un esquema de contribuciones con base en Björk y Westerlund (2002), en las Ecs. (3.33) - (3.38).

## 3.7 Resultados

Para evaluar si el esquema de acotamiento por segmentos tiene posibilidades de contribuir de una manera efectiva dentro de un algoritmo de optimización global determinista para el problema de diseño óptimo de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida, se establece el experimento computacional 1, el cual consiste en ir incrementando en uno el número de nodos en la construcción de la malla para el desarrollo de las aproximaciones y distribuirlos de manera uniforme.

Adicionalmente se calcula el valor de  $\varepsilon$ , definido como la diferencia porcentual entre el valor de la función objetivo del problema no convexo (para este Caso de estudio

3.1 la mejor solución conocida es de \$ 36, 199.15 año<sup>-1</sup>) y el valor de la función objetivo del problema relajado convexo,  $\hat{z}$ , para conocer el desempeño de cada estimación.

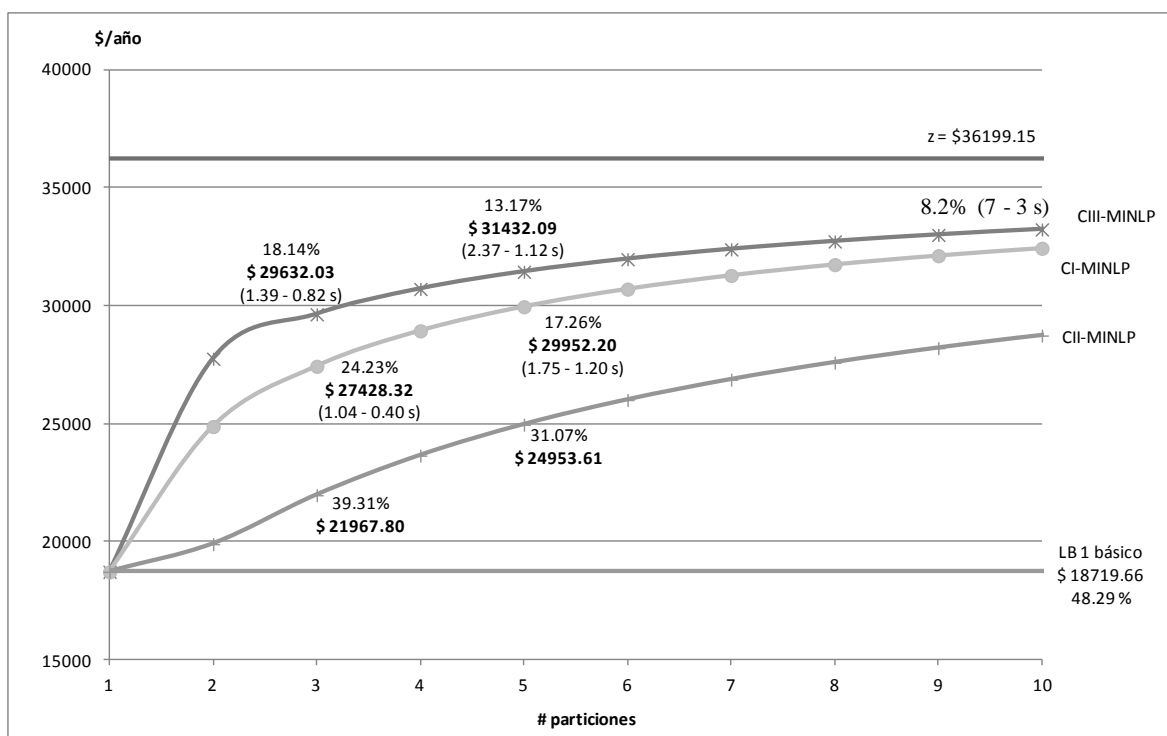
Los modelos de programación no lineal entera mixta convexos (*CI-MINLP*), (*CII-MINLP*) y (*CIII-MINLP*), considerando mallas uniformes, fueron implementados en el ambiente GAMS (Brooke y col., 2015) con GAMS 21.4/ DICOPT, con CPLEX 9.0 y CONOPT 3, estableciendo como criterio de paro para DICOPT el cruce de cotas, en una computadora personal con procesador Intel Core 2 Quad de 2.4 GHz y 4 GB de memoria RAM.

En la Tabla 3.2 se muestran los valores de la función objetivo (\$ año<sup>-1</sup>) para los diferentes modelos convexos presentados en función del número de particiones del dominio; también se muestra el efecto en el esfuerzo computacional de solución al ir incrementando el número de intervalos en la malla. Se observa que la formulación III es la que presenta el mejor desempeño, al ir obteniendo un valor de la sub-estimación más alto que las demás. Los tiempos computacionales en las tres formulaciones aumentan en la misma proporción conforme crece el número de intervalos.

**Tabla 3.2 Desempeños de las formulaciones convexas por segmentos**

# Intervalos	CI-MINLP		CII-MINLP		CIII-MINLP	
	$\hat{z}$ (\$ año <sup>-1</sup> )	CPU s	$\hat{z}$ (\$ año <sup>-1</sup> )	CPU s	$\hat{z}$ (\$ año <sup>-1</sup> )	CPU s
1	18719.66	0.15537	18719.66	0.04688	18719.66	0.04688
2	24876.84	0.29525	19895.45	0.481	27746.60	0.51125
3	27428.31	0.4035	21967.79	0.85163	29632.02	0.82125
4	28932.26	0.54325	23645.44	1.59472	30705.41	0.75759
5	29952.20	1.19912	24953.60	1.66475	31432.08	1.11675
10	32429.75	3.81313	28730.48	4.76725	33228.41	2.91244

Los resultados muestran que al introducir los estimadores por segmentos, la cota inferior obtenida en este caso de estudio es considerablemente más justa que la obtenida con una relajación convexa construida sobre una sola partición. En la Figura 3.4, se aprecia el comportamiento de las formulaciones al incrementar el número de intervalos.



**Figura 3.4** Estimación de la cota inferior rigurosa en función del número de intervalos presentes en las mallas de las variables de carga térmica.

En la Figura 3.4 se puede observar cómo va incrementando el valor de la cota inferior rigurosa y va disminuyendo  $\epsilon$  al crecer el número de segmentos utilizados en el acotamiento. Para un intervalo (el dominio completo de cada carga térmica) se determina una cota inferior rigurosa de  $\$ 18,719.66 \text{ año}^{-1}$  ( $\epsilon = 48.29\%$ ), que corresponde al valor de la cota inferior rigurosa determinada con la formulación de programación no lineal convexa básica (*LB 1*), pero para cinco intervalos se determinan cotas inferiores rigurosas más justas, lo que representa haber reducido el espacio de búsqueda de la solución óptima global. A partir de los resultados, se considera que existirá un valor límite para la diferencia entre cotas, aún cuando sigamos incrementando el número de particiones, debido a los

estimadores de los términos bilineales presentes en las formulaciones convexas que no están diseñados por segmentos.

### 3.8 Metodología de optimización global determinista

#### 3.8.1 Reformulación del modelo de programación no lineal no convexo

El modelo de programación no lineal no convexo (*NLP 1*) presentado en la Sección 3.3.1 para el Caso de estudio 3.1 se reformula con base en las ideas de cambio de variable de Björk y Westerlund (2002). Al igual que en la Formulación III, la función objetivo se establece en términos de una nueva variable  $A_i$ , y en las restricciones aparecen términos fraccionales lineales de la forma  $q_i/A_i$ . En este capítulo se propone, además, reescribir los términos bilineales en los balances de energía de la forma  $q = F(T - T_s)$  por términos fraccionales lineales de la forma  $q/F = T - T_s$  y de esta manera aproximar por segmentos los nuevos términos fraccionales lineales aprovechando la infraestructura ya desarrollada previamente para el dominio de cargas térmicas. De manera formal, el modelo de programación no lineal no convexo para la optimización de la red del Caso de estudio 3.1, puede reformularse como sigue:

#### Modelo (*NLP 3*)

$$\text{Minimizar} \quad z = 2700A_1 + 7200A_2 + 240A_3 + 900A_4 \quad (3.38)$$

sujeto a:

$$\frac{q_i}{A_i} - \Delta T_i \leq 0 \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.39)$$

Ecuaciones (3.2) y (3.3) del modelo (*NLP 1*)

$$\begin{aligned} \frac{q_1}{F_1} - T_5 + 300 &\leq 0 \\ \frac{q_2}{F_2} - T_6 + 300 &\leq 0 \end{aligned} \quad (3.40)$$

Ecuaciones (3.5), (3.7) – (3.9) del modelo (*NLP 1*)

### Cotas de las variables

$$\begin{array}{lll} 0 \leq q_1 \leq 999.9 & 395 \leq T_1 \leq 575 & dth_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4 \\ 0 \leq q_2 \leq 1000 & 398 \leq T_2 \leq 718 & dtc_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4 \\ 0 \leq q_3 \leq 954.45 & 365 \leq T_3 \leq 570 & 30 \leq \Delta T_1 \leq 170 \\ 0 \leq q_4 \leq 1000 & 358 \leq T_4 \leq 713 & 30 \leq \Delta T_2 \leq 221 \\ 0 \leq F_1 \leq 10 & 300 \leq T_5 \leq 570 & 13 \leq \Delta T_3 \leq 210 \\ 0 \leq F_2 \leq 10 & 300 \leq T_6 \leq 713 & 16 \leq \Delta T_4 \leq 360 \end{array}$$
$$A_i^L \leq A_i \leq A_i^U, \quad A_i^L = \frac{q_i^L}{\Delta T_i^U}, \quad A_i^U = \frac{q_i^U}{\Delta T_i^L} \quad i = 1, 2, 3, 4$$

### Comentarios

1. La función objetivo del modelo (*NLP 3*), Ec. (3.38), es una función lineal. Las no convexidades por los términos fraccionales lineales aparecen en las restricciones, en las ecuaciones para el cambio de variable, Ecs. (3.39).

2. Las Ecs. (3.40) permiten sustituir los términos bilineales por términos fraccionales lineales.

### 3.8.2 Estimadores convexos por segmentos de los términos fraccionales lineales – Formulación IV

La propuesta para el desarrollo del modelo convexo para sub-estimar el costo total anual de la red del Caso de estudio 3.1 a partir de este modelo (*NLP 3*), es estimar los términos fraccionales lineales empleando las expresiones de Zamora y Grossmann (1997, 1998 y 1999) en las restricciones y utilizar aproximaciones por segmentos con un esquema de contribuciones con base en Björk y Westerlund (2002), considerando dividir el dominio de la variable de carga térmica en segmentos de tamaño uniforme (Figura 3.3). De manera formal, este es el modelo de programación no lineal entera mixta por segmentos:

## Modelo (CIV-MINLP)

*Notación adicional requerida*

### *Índices*

$i$  = índice para el número de intercambiador de calor

$p$  = índice para el segmento de la partición

### *Variables binarias*

$\lambda_{i,p}$  = variable para elegir el segmento  $p$  en el que se ubica el valor de la carga térmica del intercambiador  $i$

### *Parámetros*

$M_{i,p}$  = parámetro tipo gran M para ajustar la relajación a las cotas del segmento  $p$  en el que se ubica el valor de la carga térmica del intercambiador  $i$

### *Función objetivo*

$$\text{Minimizar } 2700A_1 + 7200A_2 + 240A_3 + 900A_4 \quad (3.41)$$

sujeto a:

$$\frac{\theta_i^2}{A_i} - \Delta T_i \leq 0 \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} \frac{\theta_1^2}{F_1} - T_5 + 300 &\leq 0 \\ \frac{\theta_2^2}{F_2} - T_6 + 300 &\leq 0 \end{aligned} \quad (3.43)$$

$$\theta_i \geq (Q_{ip})^{1/2} + \frac{(Q_{ip+1})^{1/2} - (Q_{ip})^{1/2}}{Q_{ip+1} - Q_{ip}} (q_i - Q_{ip}) - M_{ip} (1 - \lambda_{ip}) \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P \quad (3.44)$$

$$M_{ip} = (Q_{ip})^{1/2} + \frac{(Q_{ip+1})^{1/2} - (Q_{ip})^{1/2}}{Q_{ip+1} - Q_{ip}} (q_i^U - Q_{ip}) \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P \quad (3.45)$$

$$\sum_{p=1}^P \lambda_{ip} = 1 \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.46)$$

$$q_i \geq \sum_{p=1}^P Q_{ip} \lambda_{ip} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.47)$$

$$q_i \leq \sum_{p=1}^P Q_{ip+1} \lambda_{ip} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.48)$$

Ecuaciones (3.2), (3.3), (3.5), (3.7) y (3.8) del modelo (*NLP 1*)

Ecuaciones (3.16) del modelo (*LB 1*)

*Cotas de las variables*

$$0 \leq q_1 \leq 999.9 \quad 395 \leq T_1 \leq 575 \quad dth_i, dtc_i \geq 5 \quad i = 1, 2, 3, 4$$

$$0 \leq q_2 \leq 1000 \quad 398 \leq T_2 \leq 718 \quad y_{15}, y_{26} \geq 0$$

$$0 \leq q_3 \leq 954.45 \quad 365 \leq T_3 \leq 570 \quad 30 \leq \Delta T_1 \leq 170$$

$$0 \leq q_4 \leq 1000 \quad 358 \leq T_4 \leq 713 \quad 30 \leq \Delta T_2 \leq 221$$

$$0 \leq F_1 \leq 10 \quad 300 \leq T_5 \leq 570 \quad 13 \leq \Delta T_3 \leq 210$$

$$0 \leq F_2 \leq 10 \quad 300 \leq T_6 \leq 713 \quad 16 \leq \Delta T_4 \leq 360$$

$$A_i^L \leq A_i \leq A_i^U, \quad A_i^L = \frac{q_i^L}{\Delta T_i^U}, \quad A_i^U = \frac{q_i^U}{\Delta T_i^L} \quad i = 1, 2, 3, 4$$

$$\theta_i \geq 0 \quad i = 1, 2, 3, 4$$

$$\lambda_{i,p} \in \{0, 1\} \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad p = 1, 2, \dots, P$$

### **Comentarios**

1. Para los términos fraccionales lineales de las restricciones del modelo (*NLP 3*), Ecs. (3.39) – (3.40), se emplean las expresiones de Zamora y Grossmann (1997, 1998 y 1999) por segmentos con un esquema de contribuciones con base en Björk y Westerlund (2002), en las Ecs. (3.44) - (3.48).

2. En esta formulación ya no es necesario emplear las formulaciones de McCormick (1976), Al-Khayyal y Falk (1983) y Al-Khayyal (1990), para relajar los términos bilineales, ya que no están presentes en el modelo no lineal no convexo.

3. El parámetro  $M_{i,p}$  se establece para cada equipo en cada segmento mediante las expresiones (3.45) para realizar un buen acotamiento.

### 3.8.3 Estrategias de mallado

Por construcción, a medida que se agregan nodos en la malla, la subestimación mediante segmentos es más justa, por lo que se propone actualizar la malla agregando nodos de una manera sistematizada. Debido a la importancia de cómo se define la malla y en dónde se establecen nuevos nodos para mejorar la aproximación, en esta sección se presenta un estudio sistemático de tres diferentes estrategias para establecer el mallado en la formulación con aproximaciones lineales por segmentos, aplicado en la construcción de un problema relajado convexo asociado al Caso de estudio 3.1 en la optimización de redes de intercambio de calor con topología preestablecida, con el fin de dar una pauta para el mejor desempeño de la aproximación.

Para poder comparar el impacto en el desempeño de la aproximación de diferentes esquemas de mallado, se propone el desarrollo de iteraciones. En la primera iteración se establecen cuatro nodos de manera uniforme en la malla asociada al dominio de la carga térmica de cada equipo de intercambio presente en la red, y en cada iteración posterior se realiza una actualización de cada malla de acuerdo con tres estrategias:

**Estrategia E1.** Incrementar en 1 el número de nodos y ubicarlos todos de manera uniforme.

**Estrategia E2.** Agregar un nodo en el valor de cada carga térmica para la solución del problema relajado convexo.

Se establece un esquema de iteraciones, en el que se actualiza el número de particiones, ahora los intervalos establecidos en el dominio de cada variable de carga térmica no son uniformes. En la primera iteración se crean cuatro intervalos uniformes, y a partir de la segunda iteración se agrega un intervalo creando un nodo en la solución obtenida en la iteración anterior.



**Estrategia E3.** En la segunda iteración, agregar un nodo en el valor de cada carga térmica para la mejor solución conocida del problema no convexo original, y a partir de la tercera iteración, agregar un nodo para la solución del problema relajado convexo.

En este esquema de iteraciones se actualiza el número de particiones no uniformes en los intervalos establecidos en el dominio de cada variable de carga térmica. Al igual que con su antecesora, en la primera iteración se crean cuatro intervalos uniformes pero la gran diferencia es que en la segunda iteración se agrega un intervalo más creando un nodo en la mejor solución conocida. A partir de la tercera iteración al igual que en la estrategia E2 se agregan nodos en la solución de la iteración anterior.

### 3.8.4 Resultados

El modelo de programación no lineal mixta entera convexo (*CIV-MINLP*), con mallas no uniformes de acuerdo a las estrategias planteadas, fue implementado en el ambiente GAMS (Brooke y *col.*, 2015) con GAMS 21.4/ DICOPT, con CPLEX 9.0 y CONOPT 3, estableciendo como criterio de paro para DICOPT el cruce de cotas, en una computadora personal con procesador Intel Core 2 Quad de 2.4 GHz y 4 GB de memoria RAM. En cada iteración se calcula el valor de  $\varepsilon$ .

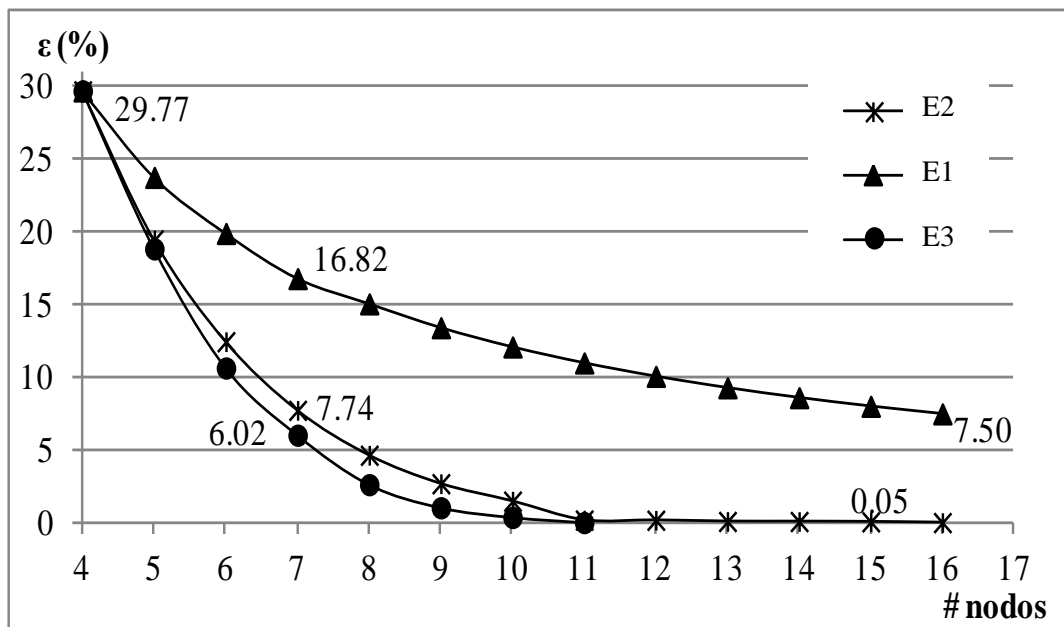


Figura 3.5 Evolución del acercamiento entre cotas con diferentes estrategias de mallado

En la Figura 3.5 se muestra cómo va disminuyendo el valor de  $\epsilon$  conforme se van agregando más nodos en la malla del dominio de carga térmica para los cuatro equipos de intercambio presentes en la red, con las tres estrategias planteadas.

Los resultados obtenidos muestran que avanzar en la actualización de nodos con distribución uniforme como se establece en E1 es ineficiente pues para 16 nodos se tiene todavía un 7.5% de separación entre cotas, mientras que con E2 el valor de  $\epsilon$  es menor. Los resultados para la estrategia E3 muestran cómo el agregar de manera inmediata la mejor solución del problema no convexo logró cerrar aún más el espacio de búsqueda del óptimo global.

### **3.8.5 Prototipo de algoritmo para la optimización global determinista de redes de intercambio de calor.**

Con la finalidad de encontrar la solución óptima global para el modelo no convexo asociado al diseño óptimo de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida y con base en los resultados mostrados, se presenta la siguiente metodología como la resolución de una serie de problemas sub-estimadores convexos.

Se propone utilizar la reformulación no convexa (*NLP 3*) con el problema sub-estimador convexo utilizando el modelo convexo (*CIV-MINLP*) y explotando el concepto de que la subestimación del costo total se hace más justa si las mallas se hacen más densas con la estrategia de mallado E3, mostrada en la Sección 3.8.4.

En la segunda iteración se agrega un nodo en el valor de cada carga térmica para la mejor solución conocida del problema no convexo original, y a partir de la tercera iteración, se agrega un nodo para la solución del problema relajado convexo. Así se agregan nodos a las mallas de manera sucesiva y estratégica, colocándolos en la solución de un problema convexo previo o incluso la mejor solución factible disponible para el modelo no convexo; buscando que al hacerlo de esta manera se determine una cota inferior cada vez más justa.

El procedimiento de optimización global propuesto se puede resumir como sigue:

- Paso 1. El algoritmo inicia con una búsqueda local en el problema no convexo original (*NLP 3*) asociado a la topología pre-establecida del caso de estudio que se esté abordando para, en caso de ser posible, determinar un candidato a óptimo global. Si se identifica un diseño, se establece su costo mínimo, UB.
- Paso 2. A partir de las cotas para las variables de cargas térmicas del problema, se diseñan mallas uniformes con dos intervalos para todos los equipos de intercambio de calor presentes en la red. Si se cuenta con una solución en el Paso 1, se modifican los nodos de cargas térmicas asociados a los equipos presentes en la mejor solución disponible.
- Paso 3. Se resuelve el problema sub-estimador convexo a partir del modelo (*CIV-MINLP*) con las mallas como se encuentran actualmente. La solución constituye una cota inferior rigurosa, LB, del problema de optimización global. Si el valor de  $\varepsilon = (UB - LB)/UB$  es menor o igual que una tolerancia, entonces el procedimiento de búsqueda termina; en caso contrario sigue en el Paso 4.
- Paso 4. Se incrementa en uno el número de intervalos en el diseño de las mallas uniformes para todos los equipos potenciales de la red. Se modifican los nodos de cargas térmicas asociados a los equipos presentes en la mejor solución disponible, si se cuenta con ella, y en las soluciones de los problemas convexos de acotamiento resueltos previamente. Regresa al Paso 3.

La Figura 3.6 muestra el desempeño de la metodología propuesta aplicada al Caso de estudio 3.1. Se puede observar que la metodología determinista para la obtención de soluciones óptimas globales permite hacer optimización global sin la necesidad de implementar un esquema riguroso de ramificación y acotamiento; solamente es necesario resolver los problemas sub-estimadores convexos por segmentos. Para ello, se construyó un conjunto de mallas no equidistantes con la partición estratégica del dominio de cargas térmicas. La nueva formulación entera-mixta convexa por segmentos se resuelve haciendo más densas las mallas de manera progresiva, con un mejor ajuste de la cota inferior en el transcurso del algoritmo. La búsqueda de soluciones óptimas globales a los problemas de optimización de redes de intercambio de calor ha demostrado ser una tarea difícil, y los

resultados obtenidos en este Caso de estudio 3.1 indican que el enfoque propuesto resuelve de manera adecuada este problema.

En la Figura 3.6 se puede observar que con 5 particiones del dominio, incluyendo nodos en la mejor solución conocida y en la solución de los últimos problemas convexos, ya estamos cerca del óptimo global. Con 6 particiones ya casi estamos en el valor. Con 8 iteraciones el valor de  $\epsilon$  es de tan solo 0.3%.

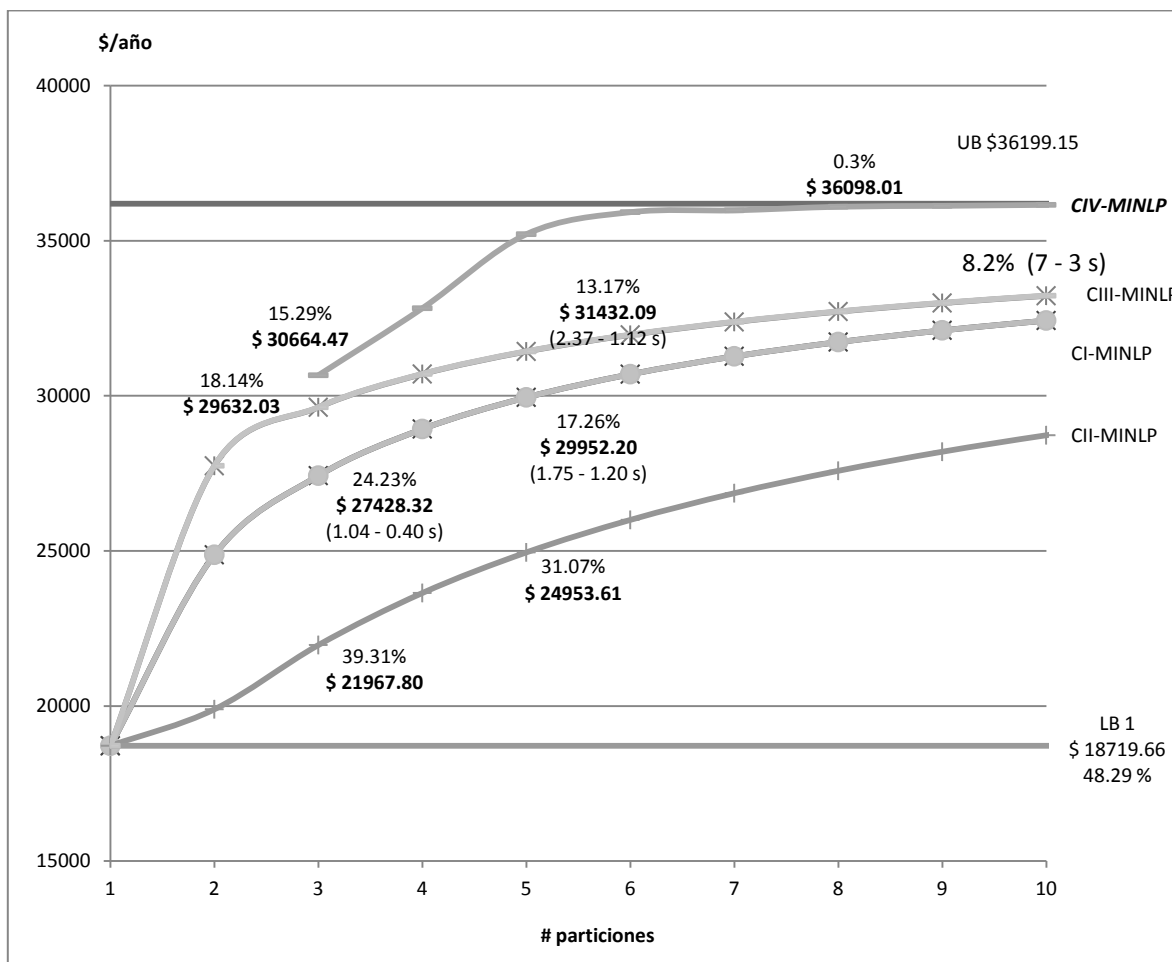


Figura 3.6 Estimación de la cota inferior rigurosa en función del número de intervalos presentes en las mallas de las variables de carga térmica para la metodología determinista.

### 3.9 Conclusiones

Las aproximaciones por segmentos se han vuelto más atractivas como alternativa para manejar funciones no lineales, incluso a costa de aumentar el tamaño del modelo en el espacio continuo y entero. Varias formulaciones de aproximaciones por segmentos han sido

desarrolladas, considerando variables binarias y continuas. En este capítulo se exploró el acotamiento inferior riguroso del costo total anual de una red de intercambio de calor con topología pre-establecida y se presentan cuatro formulaciones convexas que sub-estiman el costo de la red. Los resultados obtenidos hasta ahora indican que es una buena estrategia implementar aproximaciones por segmentos para obtener cotas inferiores rigurosas más justas que las que se determinan sin este procedimiento para el problema de diseño óptimo, con tiempos computacionales razonables. Es importante no perder de vista que la Formulación (*CIV-MINLP*) propuesta permitió cerrar el espacio que aún quedaba entre cotas por la aproximación que se hace de los términos bilineales en las tres formulaciones previas, permitiendo desarrollar un prototipo de algoritmo de optimización global determinista para el problema de diseño óptimo de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida.

En este capítulo, además, se explora la implementación de tres estrategias para establecer el mallado en una formulación con aproximaciones lineales por segmentos. Los resultados obtenidos al aplicar las diferentes estrategias de mallado al caso de estudio abordado sugieren que la alternativa a elegir para el desarrollo de las aproximaciones es incluir de manera inmediata nodos en el valor de las cargas térmicas para la mejor solución conocida, con lo cual se determina una cota inferior más justa en comparación con las otras estrategias. Resulta de mucho interés estudiar el comportamiento de esta estrategia de mallado en otros problemas de mayor complejidad, esto es, con un mayor número de corrientes y/o equipos de intercambio.

## **4. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO**

El desarrollo de herramientas para la optimización global estocástica y determinista de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida ha sido la principal preocupación de esta investigación. En este capítulo se resumen los principales resultados y contribuciones de la disertación, se comentan algunas conclusiones y se esbozan algunas recomendaciones para el trabajo futuro.

### **4.1 Resumen de esta investigación**

#### **4.1.1 Optimización global estocástica de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida**

En el Capítulo 2 de esta tesis, se plantea el problema de diseño óptimo de una red de intercambio de calor, dada una topología que ha sido pre-establecida por una metodología de síntesis. Para resolver este problema de diseño óptimo fue presentado un modelo de programación no lineal ( $P$ ) que minimiza el costo total anual de la red. La estrategia de modelado propuesta comienza con la representación de la estructura de la red mediante un diagrama de malla por etapas que permite incorporar elementos comprendidos en las superestructuras e incorporar otros elementos topológicos como equipos en serie presentes en sub-corrientes o bien calentadores y enfriadores intermedios y en sub-corrientes. Para desarrollar el modelo matemático ( $P$ ), se traduce el diagrama de malla por etapas a lenguaje matemático con teoría de conjuntos, con las ecuaciones detalladas en la Sección 2.3.2. Esta novedosa formulación matemática no lineal generalizada incluye no convexidades en la función de costos, en los balances de energía para las sub-corrientes y en la diferencia de temperatura en los intercambiadores de calor.

Una estrategia iterativa basada en métodos multi-arranque fue propuesta para la solución del problema de diseño óptimo, con la generación de un punto de inicio aleatorio y el modelo matemático ( $P$ ) siendo resuelto en cada iteración del algoritmo para realizar una exploración adecuada de la región factible del modelo no convexo en búsqueda de una solución. El algoritmo explora la región factible buscando incrementar la probabilidad de obtener diseños de red óptimos globales. El algoritmo propuesto se describe con detalle en la Sección 2.4.1.

La aplicación de las estrategias de modelado y el algoritmo de optimización global, esto es, el modelo de programación no lineal ( $P$ ) propuesto y la metodología con multi-arranque estocástico en dos fases, se ilustra con la solución detallada de dos problemas ilustrativos, el tamaño de estos problemas es de 9 y 10 corrientes de proceso, con un total de 15 y 11 intercambiadores de calor, respectivamente. Los resultados computacionales muestran que el algoritmo es capaz de resolver estos problemas de optimización fijando el número de iteraciones para el multi-arranque en 1000. En ambos problemas ilustrativos se determinaron cotas básicas para cada variable de decisión y cotas numéricas para las variables de cargas térmicas.

Los elementos de modelado y el algoritmo de optimización probaron ser valiosos en la resolución de dos problemas de diseño: El primero de estos ejemplos, Problema Ilustrativo 2.1, trata con la integración térmica en un proceso que cuenta con cuatro corrientes calientes y cinco corrientes frías, con aceite como servicio auxiliar de calentamiento y agua para enfriamiento. La topología pre-establecida considerada diseño base para este problema fue obtenida usando una metodología de optimización global determinista. La metodología de optimización multi-arranque se usa con la aproximación

de Paterson (1984) para efectos de comparación directa de los resultados; se consumió un tiempo computacional total de 82.367 s, 545 de las 1000 iteraciones realizadas terminaron en una condición de infactibilidad y 455 convergieron a una única solución óptima local.

El segundo de estos problemas, Problema Ilustrativo 2.2, trata sobre la integración térmica en un proceso que cuenta con cinco corrientes calientes y cinco corrientes frías, con vapor de agua como servicio auxiliar de calentamiento y agua para enfriamiento. El diseño base para este problema fue obtenido con un algoritmo de optimización global de búsqueda aleatoria y tiene elementos que no es posible representar con los esquemas tradicionales de superestructura, mientras que la representación con el diagrama de malla por etapas captura sin problemas todos los elementos topológicos del diseño base; se consumió un tiempo computacional total de 63.438 s, solamente 9 de las 1000 iteraciones realizadas terminaron en una condición de infactibilidad, en las otras 991 iteraciones se obtuvieron dos soluciones óptimas locales.

Las propuestas y los resultados presentados y obtenidos en el Capítulo 2 proveen guías para la solución de problemas de diseño óptimo de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida, ya que a pesar de tomar como punto de partida diseños de redes cuidadosamente optimizados, fue posible obtener diseños de redes alternativos con costos totales anuales similares o por debajo de los diseños base, pero con diferentes distribuciones de temperaturas, cargas térmicas y áreas. Los resultados muestran además que es posible obtener diseños de redes de intercambio de calor que presenten simplificaciones estructurales y reducciones en el número total de intercambiadores de calor.



#### **4.1.2 Optimización global determinista de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida**

En el Capítulo 3 de esta tesis se exploró el acotamiento inferior riguroso del costo total anual de una red de intercambio de calor con topología pre-establecida usando estimadores convexos por segmentos, considerando el problema de optimización global determinista con un esquema de ramificación y acotamiento. Se presenta el Caso de estudio 3.1 que se refiere a la integración térmica en un proceso que cuenta con dos corrientes calientes y tres corrientes frías con la interconexión de cuatro equipos en la red. Para el caso de estudio se muestra el modelo de programación no lineal no convexo (*NLP 1*) para minimizar el costo total anual de la red de intercambio de calor.

Con el propósito de obtener cotas inferiores en el costo total anual de la red, para la optimización global determinista del modelo (*NLP 1*) que incluyen términos bilineales y fraccionales lineales, se presenta el problema sub-estimador convexo con una formulación de programación no lineal convexa básica (*LB 1*) con estimadores convexos para los términos bilineales con las expresiones de McCormick (1976), Al-Khayyal y Falk (1983) y Al-Khayyal (1990), estimadores convexos para los términos fraccionales lineales con las expresiones de Zamora y Grossmann (1997, 1998 y 1999) y la diferencia de temperaturas en cada intercambiador de calor se acota desde arriba por una desigualdad en términos de la aproximación de Chen (1987).

Con base en el problema sub-estimador convexo establecido en la formulación (*LB 1*), se desarrollaron tres formulaciones convexas por segmentos para la relajación de los términos fraccionales lineales involucrados en los términos de costo de los equipos de

recuperación de calor, cuya relajación convexa sólo requiere cotas de cargas térmicas, por lo que se establecen mallas uniformes en el dominio de las cargas térmicas de los equipos de intercambio de calor. Se analizó el desempeño de cada formulación en el acotamiento inferior riguroso del costo total anual de la red del caso de estudio incrementando el número de segmentos para la aproximación. Las formulaciones I, II y III proveen una relajación convexa para el modelo no lineal y no convexo (NLP 1) y aunque son similares en la construcción de los segmentos, las diferencias entre ellas radican en cómo se considera la aportación de cada segmento a la aproximación. Los resultados obtenidos muestran que es una buena estrategia implementar aproximaciones por segmentos para obtener cotas inferiores rigurosas más justas que las que se determinan sin este procedimiento para el problema de diseño óptimo, con tiempos computacionales razonables. Más aún, se presenta un prototipo de algoritmo de optimización global determinista para el problema de optimización de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida que evita la ramificación, resolviendo de manera iterativa el problema de acotamiento.

En este Capítulo 3, además, se exploró la implementación de tres estrategias para establecer el mallado en una formulación con aproximaciones lineales por segmentos. Los resultados obtenidos sugieren que la alternativa a elegir para el desarrollo de las aproximaciones es incluir de manera inmediata nodos en el valor de las cargas térmicas para la mejor solución conocida, con esto se determina una cota inferior más justa en comparación con las otras estrategias.

Si bien se transformó un modelo de programación no lineal convexo en un modelo de programación no lineal entera mixta convexo, los resultados muestran que el esfuerzo

computacional no es grande y es posible que se reduzca considerablemente el espacio de búsqueda del óptimo global para problemas de tamaño pequeño.

## **4.2 Contribuciones del trabajo de investigación**

Las principales contribuciones de este trabajo de investigación se resumen en esta sección.

### **4.2.1 Optimización global estocástica de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida**

Una estrategia de modelado y una metodología de optimización global con multi-arranque estocástico en dos fases para la solución del problema de diseño óptimo de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida fueron presentadas. En orden de desarrollar estas propuestas, las siguientes ideas y resultados particulares fueron producidos:

1. Una representación versátil de los diseños de redes, el *diagrama de malla por etapas*, definido con base en la asignación de una etapa a cada equipo de intercambio presente en la red y no a posiciones de temperatura, lo que permite capturar diversos elementos topológicos comprendidos en los esquemas tradicionales de superestructura e incorporar otras configuraciones tales como equipos en serie presentes en sub-corrientes o bien calentadores y enfriadores intermedios y en sub-corrientes, entre otros.

2. Un modelo generalizado de programación no lineal que minimiza el costo total anual de la red y que incluye no convexidades en la función de costos, en los balances de energía para las sub-corrientes y en la diferencia de temperatura en los intercambiadores de

calor. Es importante hacer notar, que los balances de energía en los mezcladores, para el caso de mezclado no isotérmico que involucran términos bilineales, quedan excluidos del modelo ya que las temperaturas de las corrientes de proceso después del mezclado quedan determinadas por ecuaciones lineales debido a la colocación de las etapas en el diagrama.

3. Procedimientos específicos para calcular cotas analíticas y numéricas de las cotas de las variables de decisión. Aunque parece algo que se da por sentado, en este documento han quedado plasmados de manera explícita.

4. Una metodología que es novedosa en su aplicación a este problema, ya que a pesar de su simplicidad, es importante mencionar que algoritmos estocásticos multi-arranque en dos fases no se han utilizado en la literatura para la optimización de redes de intercambio de calor, hasta este trabajo, y vale decir que se hizo de manera exitosa.

5. Disminuciones en los costos para los mismos diseños base; a pesar de tomar como punto de partida diseños de redes cuidadosamente optimizados, los resultados muestran diseños de redes con costos totales anuales similares o por debajo de los diseños base, pero con diferentes distribuciones de temperaturas, cargas térmicas y áreas.

6. Diseños alternativos; los resultados dan evidencia de la posibilidad que existe de que al optimizar un diseño base dado, se obtengan diseños de redes de intercambio de calor que presenten simplificaciones estructurales y reducciones en el número total de intercambiadores de calor.

#### **4.2.2 Optimización global determinista de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida**

Relajaciones convexas con estimadores por segmentos fueron desarrolladas, para un modelo de programación lineal no convexo que incluye términos bilineales y términos fraccionales lineales, en la sub-estimación rigurosa del costo total de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida. A fin de desarrollar estas formulaciones convexas, las siguientes ideas y resultados particulares fueron producidos:

1. Cuatro formulaciones convexas que incluyen estimadores convexos por segmentos para la relajación de los términos fraccionales lineales involucrados en los términos no convexos del modelo asociado al problema abordado. Para el desarrollo de los estimadores convexos por segmentos sólo se necesitan las cotas de cargas térmicas, por lo cual se establecen mallas con intervalos equidistantes en el dominio de las cargas térmicas.

2. La eliminación del espacio entre cotas debido a la aproximación de los términos bilineales en los balances de energía para las sub-corrientes, al reescribir las ecuaciones de tal manera que exhibían términos fraccionales lineales en lugar de bilineales; así se logró extender el esquema de aproximaciones por segmentos a estas no convexidades de igual manera que se hizo con los términos fraccionales lineales de la función de costos.

3. Tres estrategias de mallado para las particiones en el dominio de cada variable de carga térmica sobre las que se desarrollan las estimaciones por segmentos mostrando el impacto que tienen en la sub-estimación del costo. Se observa que es más eficiente una malla con intervalos no equidistantes en el dominio de cargas térmicas y que uno de los

nodos corresponda al valor de la carga térmica es la mejor solución conocida para el problema atendido.

4. Alternativa a la ramificación; los resultados obtenidos hasta ahora, indican que es una buena estrategia implementar aproximaciones por segmentos para obtener cotas inferiores rigurosas más justas que las que se determinan sin este procedimiento para el problema de diseño óptimo, con tiempos computacionales razonables y eliminando gran parte de la región de búsqueda del óptimo global. En el caso de estudio abordado, se determinó la solución óptima global solamente con los problemas de acotamiento, con lo que se presenta un prototipo de algoritmo de optimización global determinista.

### **4.3 Sugerencias para posibles líneas de investigación en un trabajo futuro**

Las siguientes recomendaciones para trabajo futuro llevarán a mejoras y extensiones del trabajo desarrollado y presentado en esta tesis.

#### **4.3.1 En la optimización global estocástica de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida**

1. Es necesario extender la aplicación de la estrategia de modelado y la metodología estocástica multi-arranque a problemas de gran tamaño. El reto aquí es atender problemas con un mínimo de 20 corrientes de proceso y estudiar qué pasa con el desempeño de estas herramientas.

2. Se propone hacer cambios en los diseños base, enriqueciendo las topologías con servicios auxiliares adicionales a los que ya requiere la red, esto es, aumentar el número de calentadores y enfriadores colocándolos en los extremos de todas las corrientes de proceso,

o bien, colocándolos de manera intermedia en las corrientes. Esto con la finalidad de enriquecer la región de búsqueda de soluciones óptimas, considerando que la propuesta es robusta y hace una exploración adecuada.

3. La extensión de la metodología de optimización global a otro tipo de distribuciones aleatorias para la asignación de los puntos de inicio en cada iteración es muy interesante y puede producir resultados alternativos.

#### **4.3.2 En la optimización global determinista de redes de intercambio de calor con topología pre-establecida**

1. Con la finalidad de ganar experiencia computacional que ayude a validar el comportamiento de las aproximaciones por segmentos es necesario desarrollar otros problemas. Es importante determinar cuál es el tamaño de problema más grande que puede atenderse con estas formulaciones. Resulta de mucho interés estudiar el comportamiento de esta estrategia de mallado en otros problemas de mayor complejidad.

2. Aunque la solución de este único caso de estudio tiene un carácter preliminar estamos convencidos que la propuesta se puede aplicar de manera exitosa en otros problemas en ingeniería química donde las mismas estructuras matemáticas pueden ser explotadas.

3. Finalmente, también recomendamos explorar como posibilidad la combinación de nuestras propuestas con el desarrollo de una formulación convexa con un esquema por segmentos para el modelo de programación no lineal generalizado presentado en la parte estocástica. El hacer esto facilitaría la implementación para problemas de mayor tamaño y esto plantea un problema muy interesante y desafiante.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abadie, J. Carpentier (1969) Generalization of the Wolfe reduced gradient method to the case of nonlinear constraints, in: R. Fletcher (Ed.), Optimization, Academic Press, London, pp. 37–47.

Adjiman, C.S., Androulakis, I.P. y Floudas, C.A. (1998) A global optimization method,  $\alpha$ BB, for general twice-differentiable constrained NLPs - II. Implementation and computational results, Comput. Chem. Eng., 22, 9, 1159-1179.

Adjiman, C.S., Androulakis, I.P. y Floudas, C.A. (2000) Global optimization of mixed-integer nonlinear problems, AIChE J. 46 , 1769–1797.

Ahmad, Linnhoff, B. y Smith, R. (1990) Cost optimum heat exchanger networks – 2. Targets and design for detail capital cost models, Comput. Chem. Eng. 14, 751–767.

Al- Khayyal, F.A. y Falk, J.E. (1983) Jointly constrained biconvex programming. Mathematics of Operations Research 8, 273-286.

Al-Khayyal, F.A. (1990). Jointly constrained bilinear programs and related problems: an overview. Computers and Mathematics with Applications 19, 53-62.

Andersen y Bloomfield, P. (1975) Properties of the random search in global optimization, J. Optim. Theory Appl. 16 (1975) 383–398.

Athier, Floquet, P., Pibouleau, L. y Domenech, S. (1996) Optimization of heat exchanger networks by coupled simulated annealing and NLP procedures, Comput. Chem. Eng. 20 S13–S18.

Athier, Floquet, P., Pibouleau, L. y Domenech, S. (1997) Process optimization by simulated annealing and NLP procedures. Application to heat exchanger network synthesis, Comput. Chem. Eng. 21, S475–S480.

Bao, Z., Cui, G., Chen, J., Sun, T. y Xiao Y. (2018) A novel random walk algorithm with compulsive evolution combined with an optimum-protection strategy for heat exchanger network synthesis. Energy, 152, 694-708.



- Bergamini, M.L., Scenna, N.J. y Aguirre, P.A. (2007) Global optimal structures of heat exchanger networks by piecewise relaxation. *Ind. Eng. Chem. Res.* 46, 1752-1763.
- Björk y Westerlund, T. (2002), Global optimization of heat exchanger network synthesis problems with and without the isothermal mixing assumption, *Comput. Chem. Eng.* 26. 1581–1593.
- Boender y Romeijn, H.E. (1995) Stochastic methods, in: R. Horst, P.M. Pardalos (Eds.), *Handbook of Global Optimization*, vol. 2, Springer US, New York, 1995, pp. 829–869.
- Bogataj y Kravanja, Z. (2012) An alternative strategy for global optimization of heat exchanger networks, *Appl. Therm. Eng.* 43, 75–90.
- Brooke, A., Kendrick, D., Meeraus, A. y Raman, R. (2015). *GAMS: a user's guide*. GAMS Development Corporation, Estados Unidos de América.
- Castellanos, J. (1981). Algoritmo para la optimización de funciones no lineales de múltiples variables. *Revista del Instituto Mexicano del Petróleo* 13, 56-62.
- Ciric, y Floudas, C.A. (1991) Heat exchanger network synthesis without decomposition, *Comput. Chem. Eng.* 15, 385–396.
- Chakraborty y Ghosh (1999) Heat exchanger network synthesis: the possibility of randomization, *Chem. Eng. J.* 72, 209–216.
- Chen, J. J. J. (1987). Letter to the editors: Comments on improvement on a replacement for the logarithmic mean, *Chem. Eng. Sci.* 42, 2488-2489.
- Chen, S. Yang, X. Luo, Q. Wen, H. Ma, (2007) An explicit solution for thermal calculation and synthesis of superstructure heat exchanger networks, *Chin. J. Chem. Eng.* 15, 296–301.
- Chen, Z. Li, J. Yang, Z. Shao, L. Zhu, (2008) Nested tabu search (TS) and sequential quadratic programming (SQP) method, combined with adaptive model reformulation for heat exchanger network synthesis (HENS), *Ind. Eng. Chem. Res.* 47, 2320–2330.
- Dipama, A. Teysseidou, M. Sorin, (2008) Synthesis of heat exchanger networks using genetic algorithms, *Appl. Therm. Eng.* 28, 1763–1773.

- Dolan, P.T. Cummings, M.D. Levan, (1989) Process optimization via simulated annealing: application to network design, *AIChE J.* 35, 725–736.
- Dolan, P.T. Cummings, M.D. Levan, (1990) Algorithmic efficiency of simulated annealing for heat exchanger network design, *Comput. Chem. Eng.* 14, 1039–1050.
- Drud, (1985) A GRG code for large sparse dynamic nonlinear optimization problems, *Math. Program.* 31, 153–191.
- Drud, (1992) CONOPT – a large-scale GRG code, *INFORMS J. Comput.* 6, 207–216.
- Drud, A. (1996). A system for large scale nonlinear optimization. Reference manual for CONOPT Subroutine Library. ARKI Consulting and Development A/S, Dinamarca.
- Edgar, D.M. Himmelblau, L.S. Lasdon, (2001) *Optimization of Chemical Processes*, second ed., McGraw-Hill, New York.
- Fieg, X. Luo, J. Jezowski, (2009) A monogenetic algorithm for optimal design of large-scale heat exchanger networks, *Chem. Eng. Process* 48, 1506–1516.
- Floudas, C.A. y Ciric, A.R. (1989) Strategies for overcoming uncertainties in heat exchanger network synthesis. *Comput. Chem. Eng.* 13, 1133-1152.
- Floudas, C.A., Akrotirianakis, I.G., Caratzoulas, S., Meyer, C.A. y Kallrath, J. (2005) Global Optimization in the 21<sup>st</sup> century: Advances and challenges, *Comput. Chem. Eng.* 29, 1185-1202
- Furman, K.C. y Sahinidis, N.V. (2002a) Computational complexity of heat exchanger network synthesis, *Comput. Chem. Eng.* 25, 1371–1390.
- Furman, K.C. y Sahinidis, N.V. (2002b) A critical review and annotated bibliography for heat exchanger network synthesis in the 20th century. *Ind. Eng. Chem. Res.* 41, 10, 2335-2370
- Glover, F. (1990) Tabu Search: A Tutorial. *Interfaces*, 20, 4

- Glover, F. y Laguna, M. (1998) Tabu Search. En: Du DZ., Pardalos P.M. (eds) Handbook of Combinatorial Optimization. Springer, Boston, MA
- Gorji-Bandpy, H. Yahyazadeh-Jelodar, M. Khalili, (2011) Optimization of heat exchanger network, *Appl. Therm. Eng.* 31, 779–784.
- Grossmann, I. E. y Biegler, L. T. (2004), Part II. Future perspective on optimization, *Comput. Chem. Eng.*, 28, 1193-1218
- Gundersen, L. Naess, (1988) The synthesis of cost optimal heat exchanger networks: an industrial review of the state-of-the-art, *Comput. Chem. Eng.* 12, 503–530.
- Gupta, P. Ghosh, (2010), A randomized algorithm for the efficient synthesis of heat exchanger networks, *Comput. Chem. Eng.* 34, 1632–1639.
- Hall, S. Ahmad, R. Smith, (1990), Capital cost targets for heat exchanger networks comprising mixed materials of construction, pressure ratings, and exchanger types, *Comput. Chem. Eng.* 14, 319–335.
- Hashemi-Ahmady, A., Zamora, J.M. y Gundersen, T. (1999) A sequential framework for optimal synthesis of industrial size heat exchanger networks. *PRES*, 99, 329-334.
- Holland, (1975), *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, University of Michigan Press, Ann Arbor.
- Horst, R., Tuy, H. (2013), *Global Optimization: Deterministic Approaches*, second edition. Ed. Springer-Verlag, Berlin.
- Huang, E.M. Al-mutairi, I.A. Karimi, (2012), Heat exchanger network synthesis using a stagewise superstructure with non-isothermal mixing, *Chem. Eng. Sci.* 73, 30–43.
- Isafiade y Fraser, D. (2008) Interval-based MINLP superstructure synthesis of heat exchange networks, *Chem. Eng. Res. Des.* 86, 245–257.
- Isafiade, A., Bogataj, M., Fraser, D. y Kravanja, Z. (2015) Optimal synthesis of heat exchanger networks for multi-period operations involving single and multiple utilities. *Chem. Eng. Sci.* 127, 175-188.

Jeżowski J. (1994a). Heat exchanger network grassroots and retrofit design: The review of the state-of the art: Part I. *Hungarian J. Industr Chem* 22, 279-294.

Jeżowski J. (1994b). Heat exchanger network grassroots and retrofit design: The review of the state-of the art: Part II. *Hungarian J. Industr Chem* 22, 295-308.

Khorasany, M. Fesanghary (2009), A novel approach for synthesis of cost-optimal heat exchanger networks, *Comput. Chem. Eng.* 33, 1363–1370.

Kim, S.Y., Jongsuwat, P., Suriyapraphadilok, U. y Bagajewicz, M. (2017) Global Optimization of Heat Exchanger Networks. Part 1: Stages/Substages Superstructure, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 56, 5944–5957.

Kim, S.Y. y Bagajewicz, M. (2017) Global Optimization of Heat Exchanger Networks. Part 2: Stages/Substages Superstructure with Variable Cp, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 56, 5958–5969

Lewin, D.R. (1998). A generalized method for HEN synthesis using stochastic optimization – II. The synthesis of cost-optimal networks. *Comp. Chem. Eng.* 22, 1387-1405.

Lewin, H.Wang, O. Shalev, (1998), A generalized method for HEN synthesis using stochastic optimisation-I. General framework and MER optimal synthesis, *Comput. Chem. Eng.* 22 1503–1513.

Linnhoff, B., Flower, J.R. (1978). Synthesis of heat exchanger networks, Part I. Systematic generation of energy optimal networks. *AIChE Journal* 24, 633-642.

Linnhoff, E. Hindmarsh, (1983) The pinch design method for heat exchanger networks, *Chem. Eng. Sci.* 38, 745–763.

Linnhoff, B., Ahmad, S. (1990). Cost optimum heat exchanger networks-1. Minimum energy and capital using simple models for capital cost. *Computers and Chemical Engineering* 14, 729-750.

Luo, Q. Wen, G. Fieg, (2009) A hybrid genetic algorithm for synthesis of heat exchanger networks, *Comput. Chem. Eng.* 33, 1169–1181.

McCormick, G.P. (1976) Computability of global solutions to factorable nonconvex programs: part I-convex underestimating problems. *Math. Program.* 10, 146-175.

Myankooh y Shafiei (2015) Application of ACOR to find optimal no stream splitting heat exchanger networks for pre-designed heat exchanger networks, *Chem. Eng. Res. Des.* 96, 158–171.

Na, J., Jung, C., Park y Han, C. (2015) Simultaneous synthesis of a heat exchanger network with multiple utilities using utility substages, *Comput. Chem. Eng.* 79, 70–79.

Nemet, A., Isafiade, A.J., Klemeš, J.J. y Kravanja, Z.(2018) Two-step MILP/MINLP approach for the synthesis of large-scale HENs, *Chem. Eng. Sci.* Available online 15 June.

Pariyani, A., Gupta, A., Ghosh, P. (2006). Design of heat exchanger networks using randomized algorithm. *Comp. Chem. Eng.* 30, 1046-1053.

Paterson, W.R. (1984). A replacement for the logarithmic mean. *Chem. Eng. Sci.* 39, 1635-1636.

Pavao, L., Costa, C., Ravagnani, M.A.S.S. (2017) Heat Exchanger Network Synthesis without stream splits using parallelized and simplified simulated Annealing and Particle Swarm Optimization, *Volume 158, 2*, 96-107.

Pavão, L., Costa, C., Ravagnani, M.A.S.S. y Jiménez, L. (2017) Large-scale heat exchanger networks synthesis using simulated annealing and the novel rocket fireworks optimization, *AIChE J*, 63, 1582–1601.

Pavão, L. y Ravagnani, M.A.S.S. (2018) A new stage-wise superstructure for heat exchanger network synthesis considering substages, sub-splits and cross flows, *Appl. Therm. Eng.* 143, 719-735.

Peng, G. Cui, (2015) Efficient simultaneous synthesis for heat exchanger network with simulated annealing algorithm, *Appl. Therm. Eng.* 78, 136–149.

- Pho, T.K. y Lapidus, L. (1973) Topics in computer-aided design: Part II. Synthesis of optimal heat exchanger networks by tree searching algorithms. *AIChE Journal* 19(6), 1182-1189.
- Ponce-Ortega, M. Serna-González, A. Jiménez-Gutiérrez, (2010) Synthesis of heat exchanger networks with optimal placement of multiple utilities, *Ind. Eng. Chem. Res.* 49, 2849–2856.
- Quesada, I., Grossmann, I.E. (1993). Global optimization algorithm for heat exchanger networks. *Ind. Eng. Chem. Res.* 32, 487-499.
- Ravagnani, A.P. Silva, P.A. Arroyo, A.A. Constantino, (2005) Heat exchanger network synthesis and optimisation using genetic algorithm, *Appl. Therm. Eng.* 25, 1003–1017.
- Ravindran, K.M. Ragsdell, G.V. Reklaitis, (2006) *Engineering Optimization –Methods and Applications*, second ed., John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Romeijn, (2009) Random search methods, in: C.A. Floudas, P.M. Pardalos (Eds.), *Encyclopedia of Optimization*, Springer US, New York, pp. 3245–3251.
- Ryoo, H.S., Sahinidis, N.V. (1995). Global optimization of nonconvex NLPs and MINLPs with applications in process design. *Computers and Chemical Engineering* 19, 551-566.
- Short, M., Isafiade, A., Fraser, D. y Kravanja, Z. (2016) Synthesis of heat exchanger networks using mathematical programming and heuristics in a two-step optimisation procedure with detailed exchanger design, *Chem. Eng. Sci.*, 144, 372-385.
- Soršak y Kravanja, Z. (2002) Simultaneous MINLP synthesis of heat exchanger networks comprising different exchanger types, *Comput. Chem. Eng.* 26, 599–615.
- Westerberg, A.W. y Shah, J.V. (1978). Assuring a global optimum by the use of an upper bound on the lower (dual) bound. *Comput. Chem. Eng.* 2, 83-92.
- Yan, D. Ma, (2001) Global optimization of non-convex nonlinear programs using line-up competition algorithm, *Comput. Chem. Eng* 25, 1601–1610.

Yee, T.F., Grossmann, I.E. (1990). Simultaneous optimization models for heat integration-II. Heat exchanger network synthesis. *Comput. Chem. Eng.* 14, 1165-1184.

Yerramsetty, C.V.S. Murty, (2008) Synthesis of cost-optimal heat exchanger networks using differential evolution, *Comput. Chem. Eng.* 32, 1861–1876.

Yu, H. Fang, P. Yao, Y. Yuan, (2000) A combined genetic algorithm/simulated annealing algorithm for large scale system energy integration, *Comput. Chem. Eng.* 24, 2023–2035.

Zamora, J.M. y Grossmann, I.E. (1997). A comprehensive global optimization approach for the synthesis of heat exchangers networks with no stream splits. *Comput. Chem. Eng.* 21, S65-S70.

Zamora, J.M. y Grossmann, I.E. (1998a). A global MINLP optimization algorithm for the synthesis of heat exchanger networks with no stream splits. *Comput. Chem. Eng.* 22, 367-384.

Zamora, J.M. y Grossmann, I.E. (1998b). Continuous global optimization of structured process systems models. *Comput. Chem. Eng.* 22, 1749-1770.

Zamora, J.M. y Grossmann, I.E. (1999). A branch and contract algorithm for problems with concave univariate, bilinear and linear fractional terms. *Journal of Global Optimization* 14, 217-219.

Zamora, J.M. y Grossmann, I.E. (2001). Global optimization of heat exchanger networks. En: *Encyclopedia of Optimization Volume II*, (C.A. Floudas y P.M. Pardalos, eds.), Pp. 340-345. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Países Bajos.

Zhang, H. Cui, G. (2018) Optimal heat exchanger network synthesis based on improved cuckoo search via Lévy flights. *Chemical Engineering Research and Design* Volume 134, 62-79

Zhaoyi, Z. Liang, Y. Hongchao, Y. Jianxiong, (2013) Simultaneous synthesis of structural-constrained heat exchanger networks with and without stream splits, *Can. J. Chem. Eng.* 91, 830–842.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# ACTA DE DISERTACIÓN PÚBLICA

No 0002  
México 2020/476

METODOLOGÍA DE PROGRAMACIÓN NO LINEAL Y FORMULACIONES DE PROGRAMACION NO LINEAL ENTERA MIXTA PARA LA OPTIMIZACIÓN DE REDES DE INTERCAMBIO DE CALOR CON TOPOLOGÍA PRE-ESTABLECIDA.

En la Ciudad de México, se presentaron a las 11:00 horas del día 4 del mes de diciembre del año 2018 en la Unidad Ixtapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

DR. HECTOR FELIPE LOPEZ ISUNZA  
DR. HECTOR FERNANDO PUEBLA NUÑEZ  
DR. ARTURO JIMENEZ GUTIERREZ  
DR. VICENTE RICO RAMIREZ  
DR. CARLOS MARTINEZ VERA

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron a la presentación de la Disertación Pública cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

DOCTORA EN CIENCIAS (INGENIERIA QUIMICA)

DR. ROSA IRIS NUÑEZ SERNA

y de acuerdo con el artículo 78 fracción IV del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

*Aprobar*

Por lo tanto, el presidente del jurado comunicó a la interesada el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.



ROSA IRIS NUÑEZ SERNA  
ALUMNA

REVISÓ

DR. JOSE ANTONIO DE LOS REYES HEREDIA  
SECRETARIO GENERAL

DIRECTOR DE LA DIVISION DE CBI

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

PRESIDENTE

DR. HECTOR FELIPE LOPEZ ISUNZA

VOCAL

DR. HECTOR FERNANDO PUEBLA NUÑEZ

VOCAL

DR. ARTURO JIMENEZ GUTIERREZ

VOCAL

DR. VICENTE RICO RAMIREZ

SECRETARIO

DR. CARLOS MARTINEZ VERA