

91
2er



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

SINTESIS DE SECUENCIAS DE DESTILACION



EXAMEN PROFESIONAL
FAC. DE QUIMICA

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A :

HUMBERTO RAMIREZ CASTAÑEDA

FALLA DE ORIGEN



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE

PAGINA

INTRODUCCION.....	1
CAPITULO 1	
INTELIGENCIA ARTIFICIAL.....	6
Sistemas Expertos.....	7
Anatomía de un Sistema Experto.....	9
Representación del Conocimiento	
Heurístico.....	12
CAPITULO 2	
SÍNTESIS DE PROCESOS.....	17
Síntesis de secuencias	
de Separación.....	19
Representaciones.....	21
Heurísticas.....	26
1: CES.....	28
2: S. Balanceados.....	31
3: Secuencia Directa.....	32
4: Volatilidades.....	34
5: Composición.....	36
6: CDS.....	37
Aplicación de las Heurísticas.....	39
Acumulación de Heurísticas.....	43
Método alternativo: Evolución.....	44
Evolución.....	46

CAPITULO 3

S3 un SISTEMA para la SÍNTESIS de

SECUENCIAS de DESTILACIÓN.....49

Introducción.....50

Estructura funcional de S3.....52

Módulo de Formulación

Automática.....57

CAPITULO 4

DETRMINACIÓN DE PESOS.....61

Descripción de los ejemplos.....65

Ejemplo completo de

Utilización del sistema.....73

CAPITULO 5

AMPLIACIONES Y CONCLUSIONES.....82

Ampliaciones.....83

Conclusiones.....86

BIBLIOGRAFÍA.....88

INTRODUCCIÓN

INTRODUCCIÓN

Los sistemas de separación tienen una gran importancia dentro de un proceso químico, están presentes en casi cualquier proceso químico; son obligados, por ejemplo, en preparación de alimentaciones, purificación de productos, recuperación de efluentes, etc. Además, es común que los procesos incluyan secuencias de separación que involucren más de dos corrientes de producto.

Hay un gran interés en la síntesis de sistemas de separación, debido ello a que son frecuentes y representan una parte importante del costo total instalado y de operación de una gran variedad de procesos

El problema general de la separación (Floudas, 1987) podría expresarse así: '*Separar un conjunto dado de alimentaciones en otro conjunto especificado de productos*'. El enunciado del problema no incluye ninguna limitación al tipo o método de separación y solo pide que el sistema propuesto sea óptimo, es decir, realice la separación especificada a un costo mínimo. A pesar de ser general y haber sido planteado hace más de 15 años (Rudd, 1973, pág. 169), ha sido abordado con menor frecuencia que versiones simplificadas. Más común ha sido que el problema abordado en la literatura (Nishida et al., 1981; Westerberg, 1985) sea '*Separar una alimentación dadas en sus componentes puros por medio de separadores simples y perfectos*'. Los separadores simples tienen una corriente de alimentación y solo dos de productos (fondos y destilado), y usualmente el método de separación es destilación. Por otra parte, un separador es perfecto cuando un componente que aparece en fondos no aparece en el destilado y

viceversa.

A lo largo de esta tesis se abordó el problema desde el punto de vista de la Inteligencia Artificial. Además solo se consideró como método de separación a la destilación por ser ampliamente utilizado.

Consideramos adecuado el uso de separadores simples y perfectos, por ser el más sencillo de los enfoques en la síntesis de sistemas de separación, al mismo tiempo que suficientemente representativo como para proporcionar intuiciones significativas en torno al problema que sirvieran como base y ejemplo para el análisis de situaciones más generales.

Esta versión simplificada del problema general presenta, no obstante, un espacio de soluciones muy grande, aún para un número reducido de componentes, como se deduce de la siguiente fórmula (Thompson y King, 1972):

$$\frac{\text{Número de } (2^N - 1)!}{\text{Secuencias } N! \cdot (N-1)!} \quad (I.1)$$

donde N es el número de componentes en la alimentación. Para 3 componentes hay 2 secuencias posibles, para 6 son 42, y para 11 componentes el número de secuencias distintas es 16,796.

La más económica, segura, controlable, etc., de esas secuencias es la óptima y deseada. Una estrategia simple para encontrar dicha secuencia sería buscarla directamente entre todas las opciones. Sin embargo, la evaluación de cada una de las secuencias puede ser difícil y lenta, por lo que la resolución del problema puede llegar a requerir una cantidad muy grande de tiempo. Comparativamente, una persona experimentada en la solución

de este tipo de problemas puede llegar a dar una respuesta satisfactoria en un tiempo corto. Es muy probable que no sea la mejor, pero no debe estar muy lejos de serlo.

Enfocándose en aspectos que sabe importantes, el experto humano resuelve el problema haciendo un número menor de cálculos y en menos tiempo que utilizando una estrategia exhaustiva. Este tipo de conocimiento difuso, incompleto, heurístico, que engloba experiencia y conocimientos significativos acerca de un problema, es la base de los llamados sistemas expertos desarrollados en el área de la Inteligencia Artificial y aplicados extensamente donde el conocimiento del problema es imperfecto o no hay métodos rigurosos establecidos para su solución.

El objetivo fundamental de la presente tesis es mostrar la utilidad de la Inteligencia Artificial en la Ingeniería de Procesos, como complemento de los métodos convencionales de cómputo. En particular, en esta tesis se presenta un sistema computacional que emplea técnicas de Inteligencia Artificial para asistir a los ingenieros de procesos en la síntesis de secuencias de destilación, y en la formulación automática de modelos de éstas. Dicho sistema constituye también una herramienta para analizar la importancia de heurísticas de uso más frecuente en el diseño de secuencias de destilación.

Para mostrar el trabajo realizado en la presente tesis, en el primer capítulo se introducen algunos conceptos y términos generales del campo de la Inteligencia Artificial, con el fin de facilitar la explicación de su aplicación posterior en el sistema.

En el segundo capítulo se hace un planteamiento general del problema de síntesis de secuencias de destilación y se introduce

una forma de representarlo. A continuación, se presentan y justifican las heurísticas empleadas y se explica la manera en que fueron aplicadas. Más adelante se muestra una estrategia evolutiva que puede considerarse complementaria para la síntesis.

En el tercer capítulo se describe el sistema, su funcionamiento y sus particularidades.

En el cuarto capítulo se presentan los resultados de la aplicación del sistema a algunos problemas propuestos en la literatura. También se muestra la aplicación completa del sistema a un ejemplo de la literatura, desde la síntesis de la estructura y su posterior evolución, para mejorar la propuesta inicial, hasta desembocar en la formulación automática de las secuencias propuestas.

Finalmente, en el último capítulo se muestran algunas maneras posible de ampliar el presente trabajo y se concluye acerca del cumplimiento de los objetivos la tesis.

CAPITULO 1
INTELIGENCIA ARTIFICIAL

INTELIGENCIA ARTIFICIAL

La inteligencia artificial tiene como objetivo entender y simular mediante computadora la inteligencia humana.

Algunas de las áreas de interés de la Inteligencia Artificial son: robótica, uso de computadoras en visión y percepción, aprendizaje automatizado, resolución de problemas, planeación, procesamiento de lenguaje natural, sistemas para diseño y análisis, y desarrollo de sistemas expertos (Winston y Pendergast, 1985). En esta tesis, nuestra atención se centra en el área de sistemas expertos.

SISTEMAS EXPERTOS

Un experto humano es capaz de resolver solo una gama relativamente estrecha de problemas. Típicamente los expertos tienen características como las siguientes: resuelven fácilmente problemas simples; explican lo que hacen; juzgan la confiabilidad de sus conclusiones; saben cuándo no pueden seguir avanzando; se comunican fluidamente con otros expertos; aprenden de la experiencia; cambian sus puntos de vista para ajustarse a un problema; transfieren conocimiento de un problema a otro; razonan en muchos niveles usando herramientas como reglas heurísticas, modelos matemáticos y simulaciones detalladas.

Un sistema experto es un programa que se comporta como un experto humano en algunas maneras útiles. También resuelven fácilmente problemas simples y ocasionalmente explican su trabajo y dicen algo acerca de su confiabilidad. Algunos hacen análisis (como MYCIN que se emplea en diagnóstico médico) y otros hacen síntesis (como XCON que configura computadoras; Winston y

Pendergast, 1985).

Otro modo más formal de definir un sistema experto sería: 'Se considera un sistema experto a la inclusión dentro de una computadora de una base de conocimientos, derivada de la habilidad de un experto, tal que puede ofrecer un consejo inteligente o tomar una decisión inteligente acerca de un problema. Una característica deseable es hacer que el programa explique su línea de razonamiento de una manera inteligible para el usuario. El estilo de programación más frecuente es el de reglas de producciones' (Forsyth, 1984 capítulo 2.)

En resumen, las principales características de un sistema experto pueden ser las siguientes:

- 1) Está limitado a cierto dominio del conocimiento.
- 2) Razonar con datos inciertos.
- 3) Explica su línea de razonamiento.
- 4) El conocimiento y la máquina de inferencias están claramente separados.
- 5) Está diseñado para crecer de manera incremental.
- 6) Típicamente se basa en reglas de producciones.
- 7) Aconseja acciones.

ANATOMIA DE UN SISTEMA EXPERTO.

El enfoque basado en conocimientos propone un cambio en la forma común de concebir los programas. En lugar de la conocida fórmula de Wirth:

$$\text{Estructuras de Datos} + \text{Algoritmos} = \text{Programas}$$

para sistemas expertos sería

$$\begin{array}{l} \text{Base de} \\ \text{Conocimientos} \end{array} + \begin{array}{l} \text{Máquina de} \\ \text{Inferencias} \end{array} = \text{Sistema}$$

Dos componentes fundamentales de un sistema experto son la base de conocimientos y el motor o máquina de inferencias (ver figura No.1).

COMPONENTES FUNDAMENTALES de un SISTEMA EXPERTO

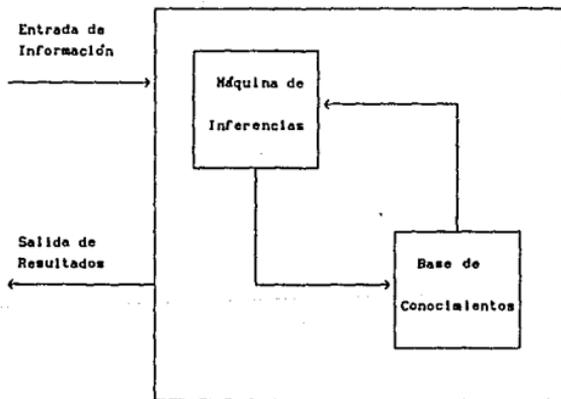


Figura No.1

La base de conocimientos está compuesta de reglas y de hechos o aseveraciones. Los aseveraciones son información que puede cambiar rápidamente durante la sesión o consulta con el programa.

Las reglas son información más duradera acerca de cómo generar nuevas hipótesis a partir de lo conocido.

Respecto a las reglas, se ha comentado: *'La experiencia ha demostrado que este conocimiento es fundamentalmente heurístico, experimental, incierto- intuición y práctica, en vez de hechos y rigor'* (Felgenbaum, 1977).

Por otra parte, Rudd (Rudd et al., 1973) menciona como definición de heurística: *'para guiar, descubrir o revelar: valioso para la investigación empírica pero indemostrada o incapaz de ser demostrada'*.

Una heurística podría decirse que es una técnica que ayuda a encontrar la solución a un problema, pero no hay garantía de que dirija correctamente la búsqueda ni de que encuentre la solución (E. Rich, 1988, pág 71).

La solución de un problema se puede conceptualizar (o enmarcar) como una búsqueda en un espacio de posibilidades: cada vez que se elige una de estas, la situación cambia y se abre una nueva serie de opciones a considerar. A una estrategia de solución podría pedírsele que fuera sistemática y exhaustiva (no dejara de lado el análisis de ninguna posibilidad); sin embargo muchas veces este requerimiento ocasiona que el espacio de búsqueda crezca exponencialmente, siendo imposible el manejo de todas las opciones en un tiempo de proceso o espacio de memoria razonables.

Un ejemplo típico de esto es el juego de ajedrez, en el que número de posibilidades (i.e. el espacio de opciones o soluciones) sería enorme si se tratara de ver todas las posibilidades con tan solo tres o cuatro jugadas de anticipación, siendo inútiles la mayoría de ellas. Por otro lado, un gran maestro de ajedrez

Únicamente analiza, tal vez, una centena de posibilidades, pero la centena correcta, apoyándose solo en sus heurísticas (dominar las casillas centrales, defender las piezas valiosas, etc) (Simon, 1986).

Esto muestra que una forma de aumentar la eficiencia del método de solución es guiar esa búsqueda por medio de heurísticas. Algunas heurísticas pueden ayudar a la búsqueda sin sacrificar la posibilidad de encontrar la solución, pero es muy frecuente que las mejores heurísticas (es decir las más poderosas, las que ahorran más tiempo y espacio de búsqueda) pudieran llegar a evitar una buena ruta de solución o incluso ser incapaces de encontrar alguna solución en absoluto.

REPRESENTACIÓN DEL CONOCIMIENTO HEURÍSTICO.

Uno de los paradigmas usados para modelar el conocimiento heurístico son las reglas de producciones, cuya estructura general es la siguiente:

```
(Si <condición 1>
    <condición 2>
    <condición 3>
    .
    .
    .
    <condición N>
Entonces <acción 1>
    <acción 2>
    .
    .
    .
    <acción M> )
```

Si se cumplen las condiciones se ejecutan o recomiendan las acciones.

Otros paradigmas empleados en Inteligencia Artificial para representar conocimientos en general son: redes semánticas, árboles de decisión, "frames", objetos, y cálculo de predicados.

En lo que respecta a la máquina de inferencias, se puede decir que es el motor que opera sobre la base de conocimientos a fin de probar y establecer hipótesis con base en procedimientos lógicos de inferencia. A partir de la información disponible, dicho motor trata de dar respuesta a las preguntas planteadas por los usuarios. Hay varias estrategias de inferencia, siendo comunes las siguientes: encadenamiento hacia atrás (que trata de encontrar datos que valden o invaliden una hipótesis), y encadenamiento hacia adelante (que parte de datos para llegar a una hipótesis).

El sistema desarrollado en la presente tesis parte de datos de los compuestos para proponer una estructura de separación; a medida que avanza la síntesis se limita el número de posibilidades de manera definitiva, es decir no es posible reconsiderar opciones previamente desechadas.

REPRESENTACIÓN DE CONOCIMIENTOS INCIERTOS

Muy frecuentemente los sistemas expertos tienen que funcionar con datos inciertos. MYCIN fue uno de los primeros sistemas que se vio forzado a trabajar con algo ya sabido: que el conocimiento del mundo es incierto y que la máquina de inferencias debe trabajar con incertidumbre.

Se han desarrollado varias formas de tratar con conocimientos inciertos: conjuntos difusos (fuzzy), enfoque bayesiano, lógica de Lukasiewicz, etc. Por ejemplo, Fan (Fan et al., 1987) ha propuesto el uso de la lógica difusa o borrosa para manejar las expresiones ambiguas e imprecisas en la síntesis de secuencias de separación.

A diferencia de la teoría de conjuntos ordinarios, donde un objeto 'x' pertenece (función de membresía = 1 o $\mu(x)=1$) o no (función de membresía = 0 o $\mu(x)=0$) a un conjunto, la lógica borrosa propone una transición gradual y puede incluir a los números reales contenidos en el intervalo (0,1), donde se establece una función de membresía arbitraria. De esta manera, un objeto puede pertenecer parcialmente a un conjunto, y una proposición puede considerarse casi falsa o casi verdadera.

Formalmente:

Conjuntos ordinarios	Subconjuntos difusos	
$\mu_A(x) = \begin{cases} 1, & x \in A \\ 0, & x \notin A \end{cases}, \forall x \in E$	$\mu_A(x) = f(x), \forall x \in E$ $f(x) \in [0, 1]$	(1.1)

donde E es el conjunto de referencia y A un conjunto dado.

Dados A y B, dos subconjuntos difusos del conjunto de referencia E, los operadores principales en lógica difusa son (A.Kaufmann, 1982, cap. I):

Membresía al conjunto de referencia E :

$$\mu_E(x) = 1 \quad (1.2)$$

Inclusión $A \subset E$:

$$\mu_A(x) \leq \mu_E(x) \quad (1.3)$$

complementación :

$$\mu_{\bar{A}}(x) = 1 - \mu_A(x) \quad (1.4)$$

intersección :

$$\mu_{A \cap B}(x) = \text{MIN}(\mu_A(x), \mu_B(x)) \quad (1.5)$$

unión :

$$\mu_{A \cup B}(x) = \text{MAX}(\mu_A(x), \mu_B(x)) \quad (1.6)$$

En lo referente a sistemas expertos, cada condición de una regla de producciones tiene, usando el lenguaje de la lógica difusa, una cierta membresía. Supongamos ahora que hay varias reglas que recomiendan distintas acciones con base en las mencionadas membresías. Como no todas son igualmente fiables, se les asigna a cada una de ellas un peso que indica la importancia relativa a las demás. A estos pesos se les suele llamar coeficientes de confiabilidad; así se indica el peso o grado de consideración que se le debe dar a cada acción recomendada por las

reglas.

Por ejemplo, si $\mu_{\zeta}(x)$ es la membresía de x al conjunto de las condiciones que se cumplen o deben cumplir de una regla de producciones, W_{ζ} el coeficiente de confiabilidad y $\mu_{\zeta}(x)$ la membresía de x a las acciones que se recomiendan realizar, entonces estas se relacionan así:

$$\mu_{\zeta}(x) = W_{\zeta} \cdot \hat{\mu}_{\zeta}(x) \quad (1.7)$$

Hay casos en que más de una evidencia o condición apunta hacia la misma acción. Para tratar este problema en lógica borrosa se considera una unión de membresías, esto es, se toma en cuenta solo la mayor, lo que equivale a decir que la razón que mueve a realizar una acción o tomar una decisión se basa solo en el motivo más fuerte, sin importar que haya varios motivos que también la apoyen.

En esta tesis se pensó que era inadecuado dejar de lado motivos o razones menores que apoyaran una acción en particular, pues el considerarlas evita empates en la recomendación de las acciones. Para tomarlos en cuenta se empleó una sencilla fórmula propuesta por Shortliffe y usada en MYCIN (Forsyth, 1984):

$$\mu_{\zeta \circ \phi}(x) = \mu_{\phi}(x) + \mu_{\zeta}(x) \cdot (1 - \mu_{\phi}(x)) \quad (1.8)$$

El símbolo $\mu_{\zeta \circ \phi}(x)$ representa el valor de la recomendación o acción x dadas las evidencias, recomendaciones o membresías especificadas por las reglas ζ y ϕ . Las distintas reglas que apoyen la acción x pueden ir acumulándose dos a dos, pues el operador 'o' es binario.

Esta forma de sumar las contribuciones tiene un par de ventajas:

1) Tiende asintóticamente hacia la certeza ($\mu \xrightarrow[\text{acum.}]{} 1$) a medida que se acumula evidencia proveniente de diversas reglas.

2) Es simétrica y el orden de ζ y ϕ no importa.

En este capítulo se han introducido ciertos conceptos del campo de la inteligencia artificial y los sistemas expertos; que luego serán utilizados para tratar con situaciones que involucran diversos tipos de heurísticas y contradicciones entre ellas en el próximo capítulo donde se detallará el problema de síntesis de secuencias de destilación.

CAPITULO 2

SÍNTESIS DE PROCESOS

SÍNTESIS de PROCESOS

La síntesis de procesos determina la interconexión óptima de unidades de proceso, así como el tipo y diseño óptimo de éstas dentro de un proceso en particular (Nishida et al., 1981). La interconexión entre unidades es la estructura del proceso. Cuando se fijan requerimientos a un proceso, la estructura y las unidades no están determinadas de manera única. El objetivo es seleccionar un sistema en particular de una gran cantidad de alternativas distintas que cumplen lo especificado.

Los siguientes pasos constituyen una manera de abordar un problema de síntesis:

- 1) Definir los objetivos del proceso.
- 2) Definir criterios para su evaluación.
- 3) Seleccionar la técnica necesaria para cumplir los objetivos.
- 4) Descomponer el problema en un conjunto de tareas interrelacionadas.
- 5) Ejecutar las tareas con la técnica seleccionada.

A esta secuencia de pasos se le puede llamar una jerarquía de decisión en síntesis de procesos. Una característica común pero profundamente importante de este tipo de problemas es el hecho de que las decisiones secundarias solo pueden ser tomadas hasta haber tomado las iniciales o de alto nivel, pero no se puede decidir óptimamente en el nivel superior sin conocer las decisiones a nivel inferior.

En el marco de la síntesis de procesos, las decisiones superiores son las que determinan la estructura en términos de subsistemas interrelacionados, y las inferiores se refieren a la ejecución de las tareas requeridas a los subsistemas.

SÍNTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACIÓN.

Casi todos los procesos requieren alguna operación de separación.

Un proceso típico consiste en un reactor químico y un sistema de purificación de los productos de salida. En una situación ideal, los procesos serían muy simples en cuanto a su estructura de separación, pero la presencia de otros factores como impurezas en la alimentación y reacciones secundarias aumenta la complejidad de la separación, pues normalmente hay que separar los productos deseados de los secundarios y a estos últimos hay que reciclarlos o transformarlos.

Tanto lo anterior como la presencia de multiproductos a purificar son solo algunos de los factores que aumentan la complejidad del sistema de separación y provocan que sea común que un solo separador no baste para realizar el trabajo de separación requerido, y que sea necesario emplear varios en secuencia, lo que resulta frecuentemente más económico que uno solo más complejo.

Las secuencias más sencillas son aquellas cuyos separadores son simples (solo dos productos) y separan perfectamente sus componentes entre sí. Sobre éstas se ha desarrollado la mayor parte del trabajo en síntesis de secuencias, centrándose en la destilación como método de separación, por ser éste el método más común.

El primer objetivo de la presente tesis es asistir al usuario en la toma de decisiones iniciales en la jerarquía de síntesis, es decir, en la elección de la estructura de un sistema de destilación. Para tal efecto, con base en el conocimiento que se tiene del problema, se propuso una metodología que trata de evitar

que las decisiones iniciales sean contradichas por las decisiones posteriores; dicho en otros términos se intenta que la estructura elegida sea la óptima o este cercana a serlo. Su segundo objetivo es formular automáticamente modelos matemáticos de las secuencias recomendadas, a fin de permitir su análisis formal y, eventualmente, construir también automáticamente el simulador de procesos correspondiente, utilizando herramientas como MP (Carlos Rojas, 1989). Finalmente, su tercer objetivo es derivar a partir del sistema desarrollado a los largo de esta tesis, que ha sido llamado S3, consideraciones cualitativas acerca de la importancia de las heurísticas utilizadas

En las secciones posteriores se presentara la forma de representar los objetos involucrados en el problema (separadores y mezclas), las heurísticas empleadas y como fueron utilizadas, así como el método complementario de evolución.

REPRESENTACIONES

En general, al tratar con un problema de síntesis tiene que haber una manera de representar las etapas de solución de éste; una representación de todos los objetos involucrados, que sea eficiente y útil. Lo ideal sería que la propia representación permitiera: eliminar opciones ilógicas, enfocar fácilmente las partes importantes del proceso sin perder una visión general, representar los cambios en el estado del problema sin ambigüedades y ayudar directamente en la resolución (Nishida et al., 1981).

Una forma ampliamente utilizada (Hendry et al., 1972) representa a cada problema de separación -es decir, cada mezcla que debe ser separada- como una lista ordenada de los componentes, una lista de precedencia de los componentes con respecto a una propiedad de separación.

Para destilación, dicha propiedad es la volatilidad relativa. El primer componente, el que está en la parte superior de la lista, es el más volátil y será obtenido como producto en el destilado.

Por ejemplo, supongamos que se tiene tres métodos de separación para una mezcla cuyos componentes son a, b y c, con las siguientes propiedades:

	α Destilación	α Destilación extractiva con fenol.	α Absorción con etanolamina
a	5	2	1
b	3	1	5
c	1	3	9

Donde : $\alpha_{\text{Destilación}}$ es la volatilidad relativa adyacente entre

claves¹, y para destilación se define así:

$$\alpha_D = \frac{K_{cl}}{K_{cp}} = \frac{y_{cl}/x_{cl}}{y_{cp}/x_{cp}} \quad (2.1)$$

K es la constante de equilibrio entre la fases gaseosa y líquida,

cl y cp se refieren a los claves ligero y pesado, respectivamente.

α Destilación extractiva con fenol, se define de manera análoga a la anterior.

Destilación extractiva con fenol.

α Absorción con etanolamina, es la relación de distribuciones entre las fases

Absorción con etanolamina

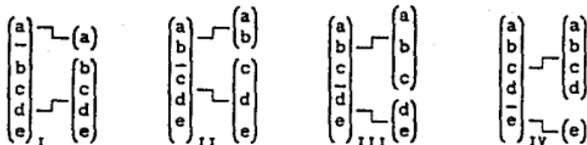
de los productos que se quieren separar. En general se usa ' α ' para denominar a los factores de separación

Consecuentemente, las listas de precedencia son:

- 1) Destilación ordinaria: (a b c),
- 2) Destilación extractiva con fenol: (c a b),
- 3) Absorción con etanolamina: (c b a).

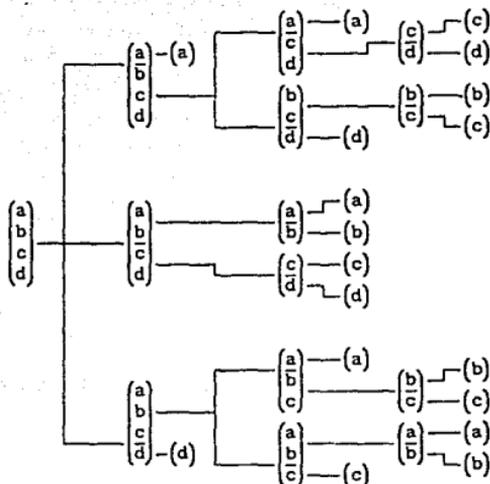
Por otra parte, un separador se representa mediante una línea o corte entre dos componentes de la mezcla (representada a su vez por la lista de precedencia). La parte superior de la lista dividida abandona el separador como destilado y la inferior como fondos. Ejemplos de algunos separadores y sus productos son los siguientes:

¹ Hay dos tipos de claves: ligero y pesado. En el caso de la destilación con separadores perfectos, el clave ligero es el menos volátil de los componentes que abandona el separador en el destilado, y el clave pesado es el más volátil de los productos de fondos. Los claves en una separación son un par de componentes, típicamente adyacentes en una lista de precedencia que determinan mayormente la dificultad de la separación.



Esta representación es adecuada para separadores perfectos, pues ningún componente superior al corte en la lista de precedencia aparece en fondos y viceversa. Los claves ligero y pesado de cada separador son, respectivamente, el inmediatamente superior al corte y el inmediatamente inferior a él.

De acuerdo con lo anterior, una secuencia de separación con separadores simples, donde cada uno de ellos tiene una alimentación y dos salidas de productos, es muy parecida a un árbol binario en que cada nodo está vacío o tiene dos árboles binarios disjuntos. Análogamente, un secuencia de separadores simples o binarios está compuesta de separadores cuyos dos posibles productos pueden ser componentes puros u otra secuencia binaria. Esto puede observarse fácilmente en la gráfica del árbol de posibilidades para una mezcla de cuatro componentes:



Se pueden representar árboles binarios por medio de listas compuestas de tres elementos (Stephanopoulos y Westerberg, 1976):

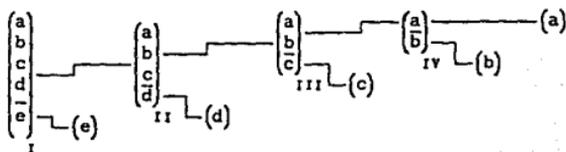
1o. El separador.

2o. El producto de fondos, puede ser un componente puro o una mezcla que debe ser separada, es decir, una subsecuencia de separación.

3o. El producto destilado, de nuevo, puede ser un componente puro o una subsecuencia de separación.

Esto se puede ilustrar comparando la gráfica de una secuencia con su representación simbólica como lista de tres elementos.

SECUENCIA

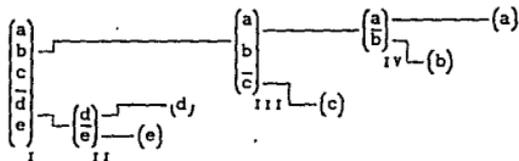


REPRESENTACIÓN

$(S_I \ e \ (S_{II} \ d \ (S_{III} \ c \ (S_{IV} \ b \ a))))$

* $(S_I \ e \ (S_{II} \ d \ (S_{III} \ c \ (S_{IV} \ b \ a))))$

Otro ejemplo:



$(S_I \ (S_{II} \ e \ d) \ (S_{III} \ c \ (S_{IV} \ b \ a)))$

En la siguiente sección se presentarán las heurísticas empleadas a lo largo de la presente tesis, en la síntesis de secuencias de destiladores.

HEURÍSTICAS

En un capítulo anterior se ha mencionado qué es una heurística en el marco de una búsqueda en un espacio de opciones. En el contexto de la síntesis de procesos se utilizan diversas heurísticas para evitar examinar todas las posibles estructuras de proceso. Estas reglas permiten al diseñador encontrar rápidamente una o varias soluciones aceptables.

El fundamento de las reglas heurísticas suele ser la experiencia, el resumen de un saber acumulado, general o en torno a un problema específico o a situaciones similares, el conocimiento de los fenómenos físicos y químicos que ocurren en las operaciones unitarias involucradas, etc. Una heurística puede considerarse, también, una versión simplificada de una regla o principio más general, pero difícil de evaluar, analizar y utilizar.

Por ejemplo, separar una mezcla de piedras por medio de mallas incluye consideraciones generales como *'eliminar primero el más abundante de los componentes'*, y más específicas como *'eliminar primero los objetos de mayor tamaño para no dañar las mallas más finas'* (Stephanopoulos et al., 1976). En general, para resolver un problema de separación, cada método tiene asociado un conjunto de consideraciones, limitaciones, métodos de diseño y de cálculo de costos específicos, y reglas heurísticas. En la presente tesis se emplean reglas heurísticas aplicables a destilación ordinaria.

En los siguientes párrafos se analizan las heurísticas más frecuentemente recomendadas en la literatura, razón por la cual

fueron utilizadas en la presente tesis. Dichas heurísticas se justifican con base en fórmulas aproximadas de diseño de utilidad reconocida (ecuaciones de Fenske, de Underwood, etc.), y se muestra su bibliografía de origen.

HEURISTICA 1: CES.

Son las siglas en inglés de Coefficient of Ease of Separation (coeficiente de facilidad de separación).

'Si la composición de los componentes no varía ampliamente, se deben favorecer las secuencias que den una relación equimolar o 50/50 entre el flujo de fondos y destilado, siempre que la volatilidad relativa entre claves sea razonable para la separación' (Ngadir y Llu, 1983).

Su expresión matemática es:

$$C.E.S. = 100 \cdot (\alpha_{cl, cp} - 1) \cdot \min(D/B, B/D) \quad (2.2)$$

donde $\alpha_{cl, cp}$ es la volatilidad relativa entre claves, en tanto que B y D son los flujos molares de fondos y destilado, respectivamente.

W. R. Paterson (Paterson, 1987), menciona dos formas de desarrollar heurísticas:

- (1) Resumiendo extensa información computacional proveniente del análisis de múltiples casos.
- (2) Haciendo una deducción rigurosa para un caso simplificado y específico.

Usando este último método, el autor mencionado demuestra el fundamento de esta heurística para el siguiente caso particular:

- a) mezcla binaria.
- b) Columna isobárica.
- c) Todos los calores latentes de los componentes son iguales.
- d) Calor de mezclado insignificante.
- e) La curva de equilibrio no llega a ser tangente al diagrama x-y, es decir no hay azeótropos.

f) Volatilidades relativas constantes.

g) Alta pureza de los productos.

h) Reflujo cercano al mínimo.

i) Los efectos de los calores sensibles son despreciables con respecto a los de los calores latentes.

De un diagrama de McCabe-Thiele se puede deducir que los reflujos mínimos para alimentación líquida saturada y gaseosa saturada ($R_{m,L}$ y $R_{m,V}$) están, respectivamente, dados por:

$$\begin{aligned} R_{m,L} &= \frac{1}{\alpha - 1} \frac{x_D}{x_F} - \alpha \frac{1-x_D}{1-x_F} = \frac{L_{m,L}}{D} \\ R_{m,V} &= \frac{\alpha}{\alpha - 1} \frac{x_D}{x_F} - \frac{1-x_D}{1-x_F} = \frac{L_{m,V}}{D} \end{aligned} \quad (2.3)$$

De la suposición (f)

$$x_D = 1 ; x_F = D/F \quad (2.4)$$

donde x_D y x_F son las composiciones molares de destilado y alimentación, en tanto que D y F los flujos molares de destilado y alimentación, por lo tanto

$$R_{m,L} = \frac{1}{\alpha - 1} \frac{F}{D} ; R_{m,V} = \frac{\alpha}{\alpha - 1} \frac{F}{D} \quad (2.5)$$

Usando (h) las cargas térmicas del rehervidor y condensador son:

$$Q_{R,L} = Q_{C,L} = \lambda(R_{m,L} + 1)D \quad (2.6)$$

$$Q_{R,V} = Q_{C,V} - F\lambda = \lambda((R_{m,V} + 1)D - F). \quad (2.7)$$

Substituyendo (2.5) en (2.6) y (2.7)

$$Q_{R,L} = \lambda \left(\frac{1}{\alpha - 1} F + D \right) \quad (2.8)$$

$$\frac{Q_{R,L} - Q_{R,V}}{F\lambda} = \frac{D}{F} \quad (2.9)$$

De (2.8), para una alimentación líquida saturada, la carga

térmica del rehedidor por mol del componente más volátil es

$$\frac{Q_{R,L}}{D} = \lambda \left(\frac{1}{\alpha-1} \frac{B+D}{D} + 1 \right) \quad (2.10)$$

si

$$\frac{D}{B} \ll 1$$

entonces

$$\frac{Q_{R,L}}{D} = \lambda \frac{1}{\alpha-1} \frac{B}{D}. \quad (2.11)$$

De manera similar para una separación difícil con $\alpha \approx 1$, en el caso de $B/D \ll 1$ la carga térmica por mol del componente menos volátil es

$$\frac{Q_{R,L}}{B} = \lambda \frac{1}{\alpha-1} \frac{D}{B}. \quad (2.12)$$

Reordenando términos tenemos

$$\frac{D}{B} \ll 1 \quad ; \quad \frac{D\lambda}{Q_{R,L}} = (\alpha-1) \frac{D}{B}. \quad (2.11b)$$

$$\frac{B}{D} \ll 1 \quad ; \quad \frac{B\lambda}{Q_{R,L}} = (\alpha-1) \frac{B}{D}. \quad (2.12b)$$

La comparación de (2.11b) y (2.12b) con (2.2) muestra que, para una destilación binaria de una alimentación líquida, diluida, el C.E.S. es esencialmente el inverso del calor del condensador por mol del componente menos abundante, es decir, el C.E.S. será mayor en tanto menor sean los requerimientos térmicos del separador.

HEURÍSTICA 2: SEPARADORES BALANCEADOS o EQUIMOLARES.

'Elegir separadores que tengan una relación lo más balanceada posible entre flujos de fondos y destilado'.

Esta heurística ha sido mencionada en (King, 1980), (Thompson y King, 1972), (Seader y Westerberg, 1977) y (Rudd et al., 1973), entre otros.

El reflujo de una torre y el flujo de vapor que viene del rehervidor no pueden ser fijados ambos independientemente si los flujos de fondos y destilados han sido especificados. Si el flujo molar de destilado fuera menor que el de fondos, el valor de L/V en la sección de rectificación sería más cercano a la unidad, esto es, más cercano al reflujo total, que el valor de V'/L' en la sección de recuperación. En ese caso, la sección de recuperación funcionaría a un reflujo del rehervidor mayor del necesario para la separación. A causa de la alta temperatura y los apreciables gradientes de temperatura, se desperdiciaría mucho trabajo en la operación de esta sección. De la misma manera, si el producto de fondos es mucho menor que el de destilado, el razonamiento se invierte y la operación en la sección de rectificación sería muy ineficiente. Si los productos de fondos y destilado estuvieran balanceados, los reflujos a su vez lo estarían y en la operación de la torre se desperdiciaría menos energía; consecuentemente, se reducirían las cargas térmicas.

HEURISTICA 3: SECUENCIA DIRECTA.

'Separar los componentes uno a uno por la parte superior de las columnas de la secuencia de separadores'.

Esta heurística se refiere a la separación en secuencia directa, y ha sido recomendado. Por (Rudd et al, 1973), (King, 1980) y (Seader y Westerberg, 1977).

Para analizar esta heurística, partamos de la fórmula de Underwood para el flujo de vapor mínimo (King, 1980; página 570):

$$V_{\min} = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i x_{i,D} D}{\alpha_i - \phi} \quad (2.13)$$

donde ϕ satisface la ecuación:

$$\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i z_{i,F}}{\alpha_i - \phi} = \frac{D}{F} \quad (2.14)$$

α_i es la volatilidad relativa a un componente de referencia, típicamente el clave pesado; $z_{i,F}$ es la composición molar en la alimentación, y $x_{i,D}$ es la composición molar en el destilado.

En esta fórmula se puede ver que cuando en el destilado están presentes componentes extraclaves, o no claves, aumenta el flujo mínimo entre etapas del separador.

Por otra parte, como la carga de calor es proporcional al flujo de vapor entre etapas

$$Q_C = \lambda \cdot V, \quad (2.15)$$

donde λ es la entalpía de vaporización molar de el destilado.

Si se desprecian los efectos de una alimentación parcialmente vaporizada, se ve la ventaja de tener el menor número posible de productos en el destilado, pues permitiría que el flujo entre etapas sea menor. Esto implica un menor diámetro de columna y,

también, una menor carga térmica. El menor número posible es un solo componente, es decir, una secuencia directa.

También se puede considerar que, para destilación, esta heurística es un caso específico de aquella que indica que '*Siendo todo lo demás igual, evitar extremos en temperatura y presión, pero preferirlos altos a bajos*' (Rudd et al., 1973 página 183) la cual se basa en el costo que tiene cualquier diferencia en operación de las condiciones ambientales, siendo en general más costosa la refrigeración y el vacío que el vapor de alta presión y las altas presiones de operación.

Para explicar cómo se relaciona una heurística con la otra consideremos lo siguiente: la separación se efectúa en parte gracias al calor agregado en el rehervidor y en parte por el calor removido en el condensador. Se alimenta calor en el rehervidor a alta temperatura donde se encuentran los menos volátiles y se retiran en el domo donde se encuentran lo más volátiles y a baja temperatura; por tanto, una forma de eliminar refrigeración es eliminar los productos en el domo uno a uno, disminuyendo el trabajo de separación y aumentando la temperatura de los condensadores a medida que se avanza en la secuencia.

La presión del separador en las secuencias directas tiende a disminuir conforme se avanza en ella, pues sucesivamente los destilados serán menos volátiles y no requerirán presión para ser condensados.

Hay otra razón por la que es preferible que algún producto deseado en especial abandone la torre como destilado: en general no estará contaminado por impurezas, como sería el caso si se retirara como fondos.

HEURISTICA 4: VOLATILIDADES.

'Si las volatilidades varían ampliamente, ordenar las separaciones a realizar de acuerdo con el orden decreciente de volatilidades relativas adyacentes entre claves'.

Otra forma de expresar esta heurística es: 'las separaciones más difíciles deben ser hechas al final'. Es mencionada en (Rudd et al, 1973), (King, 1980) y (Seader y Westerberg, 1977).

En general una separación es difícil si se requiere una gran pureza y sobre todo si las volatilidades relativas adyacentes de los claves son cercanas a 1. Ambos casos requieren un número elevado de etapas ideales para una pureza fija (por ejemplo, el 98% de separación entre claves, cifra empleada a lo largo de esta tesis) como se puede observar en la ecuación de Fenske:

$$N_{\min} = \frac{\log \left(\frac{x_{cl,D}}{x_{cl,B}} \frac{x_{cp,B}}{x_{cp,D}} \right)}{\log \alpha_{cl,cp}} \quad (2.16)$$

La exigencia de una pureza elevada provoca un numerador mayor en la ecuación. Volatilidades relativas cercanas a uno provocan un denominador tendiente a cero, los dos efectos aumentan el número de platos ideales necesarios para lograr la separación.

La volatilidad también tiene efecto sobre flujo molar entre etapas. De la ecuación (2.3):

$$R_{m,L} = \frac{1}{\alpha - 1} \frac{x_D}{x_F} - \alpha \frac{1-x_D}{1-x_F} \quad (2.17)$$

$$R_{m,L} = \frac{L_{\min}}{D} \quad (2.18)$$

y posteriormente de la ecuación (2.5) que considera productos puros, se puede ver que los flujos molares entre etapas son aproximadamente:

$$L_{n+1} = D^* R_{n,L} = \frac{1}{\alpha-1} F \quad (2.19)$$

Al mismo tiempo, las cargas térmicas son proporcionales a este flujo (ecuación 2.6):

$$Q_c = \lambda (L_{n+1} + D) \approx \frac{\lambda}{\alpha-1} F \quad (2.20)$$

Se puede notar entonces el efecto que la volatilidad relativa entre claves α , tiene sobre: a) la altura de la torre (i.e. el número de platos determinado mediante la ecuación 2.16, b) el diámetro (que es proporcional a los flujos molares entre etapas como se ve en la ecuación 2.19), y c) la carga térmica del condensador. Dicho en otros términos, las ecuaciones 2.16, 2.19 y 2.20 muestran el efecto de la volatilidad relativa sobre los costos instalados (altura y diámetro) y de operación (cargas térmicas).

Además, el ordenar los cortes de acuerdo con esta heurística permite que las separaciones más difíciles se hagan con los menos componentes extraclaves posibles, pues lo contrario provocaría un aumento en los flujos entre etapas al haber una mayor cantidad de material involucrada.

HEURISTICA 5: COMPOSICION.

'Si todas las condiciones son equivalentes, eliminar el más abundante de los componentes lo más pronto posible'. (Rudd et al, 1973).

Si todos los posibles cortes en la lista de composición son similarmente difíciles, entonces al separar el componente más abundante se reducirá el flujo másico en los separadores siguientes, disminuyendo el tamaño del equipo. La abundancia de un componente no afecta la altura de la torre; afecta mayormente el diámetro por su efecto sobre los flujos entre etapas:

$$L_{n+1} = D \cdot R_{n,L} = \frac{1}{\alpha-1} F \quad (2.21)$$

$$V_{n+1} = L_{n+1} + D = D(1+R_{n,L}) \quad (2.22)$$

Estos son proporcionales al flujo molar de alimentación. Al disminuir la alimentación de destiladores subsecuentes, separando al componente más abundante, se disminuyen los flujos entre etapas en los siguientes separadores.

C.D.S. son en inglés las iniciales de Coefficient of Difficulty of Separation, propuesto por (Nath y Motard, 1981). Su expresión es:

$$\text{C.D.S.} = \frac{\log \left(\frac{sp_{cl}}{1-sp_{cl}} \frac{sp_{cp}}{1-sp_{cp}} \right)}{\log \alpha_{cl, cp}} \frac{V}{V+L} \left(1 + \left| \frac{V-L}{V+L} \right| \right) \quad (2.23)$$

donde los subíndices cl y cp se refieren al clave ligero y pesado, respectivamente,

$$\alpha_{cl, cp} = \frac{K_{cl}}{K_{cp}} = \frac{y_{cl}/x_{cl}}{y_{cp}/x_{cp}} \quad (2.24)$$

$$sp_i = \frac{D^* x_{D1}}{F^* x_{F1}} \quad , \quad i \in cl, cp \quad (2.25)$$

en tanto que D y F son los flujos molares de destilado y fondos respectivamente.

Se recomienda la elección del separador con un C.D.S. de menor valor si hay conflictos entre heurísticas.

Esta se explica de la siguiente manera:

1. El primer término es la ecuación de Fenske-Underwood, que permite determinar el número mínimo de platos ideales necesarios para lograr la separación especificada entre claves, se refiere a la heurística 4 que favorece las separaciones con mayor volatilidad relativa adyacente entre claves.

2. El segundo término,

(2.26)

$$\frac{V}{V+L}$$

es la fracción destilada , y toma en cuenta la heurística que favorece la secuencia directa.

3.El tercer término,

(2.27)

$$\left(1 + \left| \frac{V-L}{V+L} \right| \right)$$

es una penalización para separadores no balanceados, y se refiere a la heurística 2, que favorece flujos balanceados o equimolares de productos.

Esta fórmula considera de una manera semicuantitativa varias heurísticas, pero la elección de un triple producto de términos con pesos unitarios para cada uno de los factores involucrados es arbitraria (Malone et al., 1985). En esta tesis se ha pretendido tratar las contradicciones entre heurísticas de alguna manera más natural, por lo que esta regla no se tomó en cuenta en el programa, a menos que el usuario así lo desee.

En la siguiente sección se mostrará la forma en que se calculó la contribución o efecto de cada regla en la recomendación final de estructura de separación.

APLICACIÓN DE LAS HEURÍSTICAS

Al analizar una regla heurística en particular (por ejemplo: 'Si las volatilidades relativas varían ampliamente, ordenar las separaciones en orden decreciente de acuerdo con las volatilidades' (Seader y Westerberg, 1977)), se presenta el problema de determinar el valor o significado de expresiones como: '...varían ampliamente...'. Esta ambigüedad hace difícil cuantificar y comparar heurísticas entre sí de manera objetiva. Fan et al. proponen el uso de la lógica difusa (Fan et al., 1987), para tratar estas expresiones imprecisas. Para este caso concreto (Huang y Fan, 1988) proponen cuantificar la expresión antes mencionada calculando la relación R_{α} para cada problema o subproblema de separación

$$R_{\alpha} = \frac{\alpha^{\min}}{\alpha^{\max}} \quad (2.28)$$

donde α^{\max} es la volatilidad relativa adyacente máxima, y α^{\min} la mínima para el mismo problema o subproblema de separación.

Esta cantidad indica el rango de variación de la volatilidad: si el valor es 1, ambas volatilidades son iguales y no varían en absoluto; por lo tanto, la negación o complemento difuso $\mu_{\alpha}(x) = 1 - R_{\alpha}$ es el grado en que varían, es decir, la función de membresía del separador al conjunto de los separadores que varían ampliamente en su volatilidad; esto dentro del conjunto de separadores aplicables a problema específico de separación¹.

Esta propuesta solo toma en cuenta los valores extremos de la

¹Un separador se considera aplicable a un problema de separación si separa perfectamente los componentes del problema. Para N componentes solo son aplicables $N-1$ separadores; es decir, solo hay $N-1$ maneras de separar perfectamente una mezcla de N componentes.

propiedad involucrada (en este caso la volatilidad relativa), y eso puede no ser representativo. Como la función de membresía es arbitraria, puede elegirse otra que tome en cuenta cada uno de los separadores aplicables al problema de separación. Por ejemplo, en esta tesis se empleó la siguiente función para aplicar la regla No. 4:

$$\hat{\mu}_{\alpha}(x) = \frac{\alpha^x - \alpha^{\min}}{\alpha^{\max}} \quad (2.29)$$

donde α^x es la volatilidad relativa entre claves del separador 'x', y el símbolo $\hat{\mu}_{\alpha}$ significa que la función de membresía es incompleta y ha de ser multiplicada por el peso (W_{α}) asignado a la regla. Esta función coincide con la propuesta por (Huang y Fan, 1988) cuando α^x es igual a α^{\max} .

Similarmente, para la heurística 'Separa el componente más abundante primero', en vez de $\mu_W(x) = 1 - R_W$, donde

$$R_W = \frac{W^{\min}}{W} \quad (2.30)$$

W^{\max} es el flujo molar máximo y W^{\min} es el mínimo entre los componentes de la mezcla a separar, en esta tesis se propuso:

$$\hat{\mu}_W(x) = \frac{W^* - W^{\min}}{W^{\max}} \quad (2.31)$$

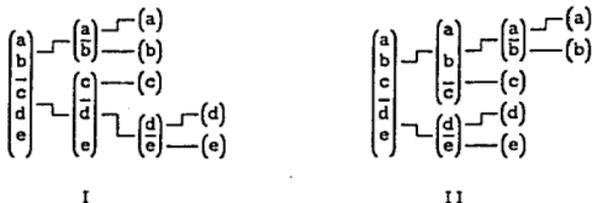
donde

$$W^* = \max(W_X^{\text{CP}}, W_X^{\text{cl}})$$

siendo W_X^{cl} y W_X^{CP} los flujos molares del clave ligero y pesado del separador 'x', respectivamente. Esto último se hizo porque se interpretó 'separar el más abundante' como 'el más abundante a

separar debe ser un clave'. Si el más abundante es el más ligero y volátil o el más pesado y menos volátil, es posible separarlo en un paso, de otra manera se necesitan dos separadores.

Supongamos que 'c' es el más abundante:



en la forma I 'c' es primero clave pesado e inmediatamente el ligero; en la forma II ocurre lo contrario. En este caso la regla No.4 podría seleccionar la forma I o la forma II, en forma arbitraria. Sin embargo en esta tesis se prefirió que dicha heurística no haga esa distinción, y que sean las otras heurísticas las que decidan: tal vez la forma II resulte en separadores más balanceados o con menos platos, y la forma I resulte en una secuencia directa.

Se prefirió que sean las interacciones entre las heurísticas las que propongan la mejor secuencia en función de sus pesos asignados por medio de la 'máquina de inferencias', es decir, que al acumular las 'membresías' o razones a favor del uso de separador, por medio de la fórmula propuesta por Shortliffe, se decidirá la forma I o II, como será explicado más adelante.

La membresía de la heurística No.4 que recomienda la secuencia directa, será simplemente:

$$\hat{\mu}_D(x) = \begin{cases} 1, & \text{si el separador 'x' es directo} \\ 0, & \text{si no lo es.} \end{cases} \quad (2.32)$$

pues que un separador sea directo o no, no es algo que pueda ser incierto.

En el caso de la heurística No.2, que favorece a los separadores balanceados, la función de membresía es:

$$\hat{\mu}_{Bal}(x) = \min \left[\frac{D}{B}, \frac{B}{D} \right] \quad (2.33)$$

donde D y B son, respectivamente, los flujos molares de destilado y fondos.

Por último, para el uso del C.E.S o heurística No.1 se utilizó la siguiente fórmula:

$$\hat{\mu}_{CES}(x) = \frac{CES^x - CES^{min}}{CES^{min}} \quad (2.34)$$

No se empleó la heurística que recomienda minimizar el CDS para determinar los cortes en la lista de precedencia, dado que podría considerarse una agrupación de heurísticas ya consideradas, sin tomar en cuenta la importancia relativa de cada una.

A nivel del programa, cada vez que se invoca una regla devuelve el valor de la función de membresía, multiplicada por el peso asignado. Si la regla no es aplicable el valor de la función es cero.

ACUMULACIÓN DE HEURÍSTICAS

Supongamos que exista un caso en que la regla de volatilidades y de composición propongan, cada una en cierta medida, un mismo corte en la lista de precedencia (i.e., un mismo separador) y que queremos saber en qué medida se fortalece la recomendación de ese corte o separador a causa de las dos reglas que favorecen lo mismo, en otras palabras, cuál es la membresía total dadas las membresías de las dos reglas.

Cada regla tiene asignado un peso que indica su importancia relativa (sean estos, respectivamente, W_α y W_w , para un separador 'S').

De acuerdo con la fórmula (1.8) propuesta por Shortliffe:

$$\mu_{\zeta\phi}(x) = \mu_\zeta(x) + \mu_\phi(x) \cdot (1 - \mu_\zeta(x)) \quad (1.8)$$

aplicada a nuestro ejemplo se tendría:

$$\mu_{\alpha w}(S) = \hat{\mu}_\alpha(S) \cdot W_\alpha + \hat{\mu}_w(S) \cdot W_w \cdot (1 - \hat{\mu}_\alpha(S) \cdot W_\alpha) \quad (2.35)$$

Si se quisiera agregar la contribución de la regla de separadores balanceados se aplicaría $\mu_{(\alpha w) \text{Dbal}}(S)$, y así sucesivamente hasta agotar las reglas consideradas, de modo que se tomen en cuenta las contribuciones de todas las heurísticas.

MÉTODO ALTERNATIVO : EVOLUCIÓN

En general pueden considerarse tres modos, no mutuamente excluyentes, de resolver el problema de sintetizar un proceso:

- 1) Heurístico
- 2) Algorítmico
- 3) Evolutivo.

Ejemplos de métodos algorítmicos se encuentran descritos en: (Rodrigo y Seader, 1975) y (Gomez y Seader, 1976). Métodos heurísticos se describen en: (Rudd, Powers y Sirola, 1973), (Cheng y Liu, 1988), (Bamopoulos y Nath, 1988) y la presente tesis. Ejemplos de métodos evolutivos se encuentran en (Seader y Westerberg, 1977) y (Nath y Motard, 1981). Asimismo a manera de ilustración y aplicado específicamente a la síntesis de secuencias de separación, esta sección contiene un ejemplo de evolución de estructuras, que más que un método es un paradigma de diseño.

Dicha evolución requiere la evaluación de cada situación o estructura encontrada durante la búsqueda o desarrollo de la estrategia de solución, con el fin de dirigir y controlar dicha búsqueda. Esta evaluación es una necesidad importante dentro de la síntesis, aún cuando se debe establecer un equilibrio entre el tiempo y la exactitud en la determinación del estado de ésta.

En el caso de síntesis de secuencias, lo que distingue la mejor de dos estructuras o secuencias es una función aproximada de costo, pues es deseable una secuencia económica.

Para determinar el costo de una secuencia se consideró que el costo de un separador es independiente de los demás en la secuencia, y que ellos determinan completamente el costo total de ésta; así se calcula el costo de la secuencia como la suma del

costo de los separadores presentes en ella.

En el presente trabajo se consideraron solamente torres a presión atmosférica, y el ΔT_{\min} de intercambio térmico fue de 10°C . Las ecuaciones y datos para determinar el costo aproximado de cada separador se tomaron de (Rathore et al., 1974a y 1974b), también fueron usadas las modificaciones a este cálculo propuestas por (Muraki y Hayakawa, 1981). Se eligieron éstas con fines comparativos, por ser utilizadas por varios autores al abordar la síntesis de secuencias de destilación.

EVOLUCIÓN

Se considera este método como uno de los más usado por los diseñadores. Se parte de una configuración o estructura inicial y por medio de pequeños cambios se intenta mejorarla. Las modificaciones continúan en tanto haya forma de mejorar la estructura. Esta estrategia permite conservar las características deseables de la configuración inicial, al mismo tiempo que las indeseables son modificadas con la intención de mejorar el proceso en general.

Este método se parece en cierta manera a los métodos de pendiente máxima usados en la optimización de funciones de variables continuas (Stephanopoulos y Westerberg 1976). No garantiza encontrar el óptimo global del problema sino solo un óptimo local, como en los problemas de optimización clásicos, y únicamente se garantiza encontrar el óptimo global si la función es de alguna manera 'unimodal'.

Si no es así, se podría partir de varias estructuras distintas con la esperanza de encontrar varios óptimos locales y poder elegir entre ellos el mejor.

Una noción fundamental en el desarrollo de una estrategia evolutiva es la de estructura vecina (Stephanopoulos y Westerberg, 1976). Dos estructuras son vecinas si se puede pasar de una a otra con el mínimo posible de cambios útiles, que tengan sentido. De esa manera una estructura dada está rodeada de vecinos obtenidos haciendo cambios mínimos en ella. También se considera que una estructura puede ser vecina de sí misma.

Las reglas que permiten generar las estructuras vecinas se denominan reglas evolutivas e ideales si satisfacen las siguientes

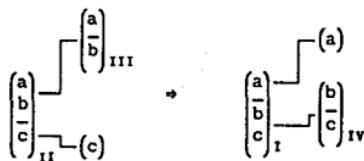
condiciones (Stephanopoulos y Westerberg 1976):

- 1)Eficiencia. Debe generar estructuras plausibles y no solo estructuras erróneas.
- 2)Complejidad. Poder pasar de una estructura a otra por aplicación repetida de las reglas.
- 3)Reversibilidad. Si A es vecina de B entonces B lo es de A.
- 4)Intuitividad. Las reglas deben generar estructuras vecinas que un diseñador experimentado también consideraría vecinas.

Una sencilla regla evolutiva para secuencias de destilación, que cumple todo lo anterior, es:

'Si hay dos separadores adyacentes en una secuencia, intercambiar el orden de la separación que realizan'.

Por ejemplo:



En este problema, representado por la lista de componentes (a,b,c), hay dos posibles tareas de separación: (1) a/b que es realizado por los separadores I y III, y (2) b/c que es realizado por los separadores II y IV. En la primera de las secuencias o configuraciones, los separadores II y III son adyacentes, y la regla evolutiva indica que hay que intercambiar el orden de las tareas de separación realizadas: en vez de primero b/c y luego a/b a inicialmente a/b y luego b/c.

En esta tesis se empleó la estrategia propuesta por (Stephanopoulos y Westerberg, 1976) para guiar la evolución de las

estructuras o secuencias:

1) Partiendo de una estructura o secuencia base, encontrar todos sus vecinos.

2) Elegir la mejor estructura de entre ellas.

3) Si la estructura elegida es distinta de la base, tomarla como base y regresar a (1). Si son iguales, terminar, pues se ha llegado a un óptimo local.

Un ejemplo concreto de la estrategia se presenta en el cuarto capítulo, junto con un ejemplo completo de utilización del sistema.

CAPITULO 3

S3: Un SISTEMA para la SÍNTESIS de SECUENCIAS de DESTILACIÓN.

INTRODUCCIÓN:

El objetivo del sistema S3 es asistir al ingeniero de procesos en la síntesis de secuencias de destilación. Dicho sistema se basa en heurísticas cuya justificación y utilización se mostraron en el segundo capítulo de esta tesis. Para el desarrollo de S3 se han empleado algunas técnicas y conceptos de Inteligencia Artificial mencionados en el primer capítulo. En los siguientes párrafos se muestra el lugar que podría tener el sistema en una situación real de síntesis de procesos.

Supongamos que se nos pide separar una mezcla de componentes de la mejor manera posible. El primer paso es proponer varias secuencias capaces de separar la mezcla. Cada una de estas propuestas se somete a un análisis detallado, que incluye simulaciones dinámicas y en estado estacionario con el fin de detectar alguna limitación intrínseca del sistema, como poca controlabilidad y seguridad, excesivo diámetro o altura, etc. Si el sistema no presenta algún impedimento intrínseco, se procede al diseño mecánico de la torre: diámetro de orificio, cálculo de soportes, espesor de placa, tipo de empaque, etc.

En cualquier momento del análisis y diseño, por el efecto que tienen las decisiones secundarias o posteriores sobre las primarias o de estructura, se puede presentar la necesidad de desechar la secuencia propuesta a causa de situaciones que van desde limitaciones puramente mecánicas hasta la inestabilidad resultante de una baja controlabilidad, y un excesivo costo de servicios y operación inferido del análisis dinámico y en estado estacionario del sistema.

El proceso detallado de análisis y diseño consume mucho

tiempo y recursos, además muchas consideraciones (p.ej. las relativas a seguridad) solo pueden ser hechas por gente con amplia experiencia en el campo. Para minimizar el tiempo dedicado a este proceso un experto puede proponer varias secuencias que considera factibles, con base en su experiencia, muy posiblemente estas secuencias serán adecuadas y satisfarán los requerimientos de separación.

En este contexto, el uso y desarrollo de heurísticas para la síntesis es muy atractivo, ya que permiten obtener recomendaciones rápida y simplemente, con un grado de confiabilidad aceptable y en muchos casos comparable al de una persona con amplia experiencia (un experto en el campo), eliminando el análisis detallado de opciones descalificables en etapas más tempranas.

S3 se pensó como una ayuda en etapas tempranas del proceso antes mencionado, proponiendo estructuras basadas en consideraciones simples, del tipo que estarían al alcance de un experto humano, tratando de reflejar su intuición y experiencia.

La diferencia fundamental entre un experto y un sistema experto es de información, de conocimiento; los métodos de inferencia y el tratamiento de la incertidumbre pueden ser distintos, pero sus resultados no demasiado diferentes. El presente sistema no pretende substituir a un experto, sino ayudar a enfrentar el problema a alguien que no lo es.

ESTRUCTURA FUNCIONAL DE S3

El sistema S3 recorre varias fases en lo que podría ser llamada una consulta, estas fases van desde recabar información hasta escribir los modelos, todo esto con la intención de lograr lo anteriormente descrito:

1: Captura de información

El sistema inicialmente acerca de las características de la mezcla, hay dos opciones: leer de disco la información o que el usuario la introduzca directamente.

2: Generación de separadores

En siguiente paso, la función inicia-separadores ordena los componentes de acuerdo al valor decreciente de las volatilidades de cada componente, y calcula los coeficientes de la ecuación de presión de vapor para cada componente. Posteriormente, genera todos los posibles productos y alimentaciones siguiendo el procedimiento recomendado por (Hendry y Hughes, 1972).

3: Máquina de inferencias

En la siguiente fase se propone una secuencia que separe la mezcla 1 en sus componentes puros y es realizada por la función separa.

Se parte de un problema de separación (i.e. una lista de componentes a separar) 1 y un conjunto de reglas rg_1 , cada una de ellas tiene asociado un peso que indica la importancia relativa de una regla con respecto a las demás, éstos son propuestos por el usuario u obtenidos de alguna manera. --

Inicialmente la función verifica si la lista l solo contiene un elemento, si es así no hay necesidad de elegir un separador, el resultado es el componente puro. En caso de que la lista l sea una mezcla, a continuación la función elige los separadores capaces de separarla.

De estos separadores la 'máquina de inferencias' recomienda un separador con base en la suma de las contribuciones de cada una de las reglas a cada separador. Como, los productos de un separador (si no son componentes puros), son a su vez problemas de separación o mezclas a separar, el mismo procedimiento (separa) es aplicado recursivamente a los productos del separador elegido y a los subsecuentes hasta que se separan totalmente los componentes de la mezcla.

En cada momento, se le muestra al usuario el valor de las recomendaciones; si, desea más información, el sistema puede dar una somera explicación del origen de sus recomendaciones. El usuario puede obtener del sistema la contribución de cada regla a un separador en particular, las contribuciones de una regla a todos los separadores aplicables a la mezcla y puede proponer uno distinto del recomendado por el programa en cada paso de la síntesis.

4: Cálculo del costo aproximado de los separadores

Lo realiza la función costo-sep, que calcula las propiedades características de un separador de manera aproximada: número de platos, reflujo mínimo, cargas térmicas, costos fijos y de operación, por medio de métodos simplificados para el cálculo de propiedades termodinámicas (Reid et al. 77) y las ecuaciones

propuestas por (Muraki et al., 1981). El costo total de una secuencia se considera igual a la suma de los costos de los separadores que lo componen.

5: Evolución de estructuras

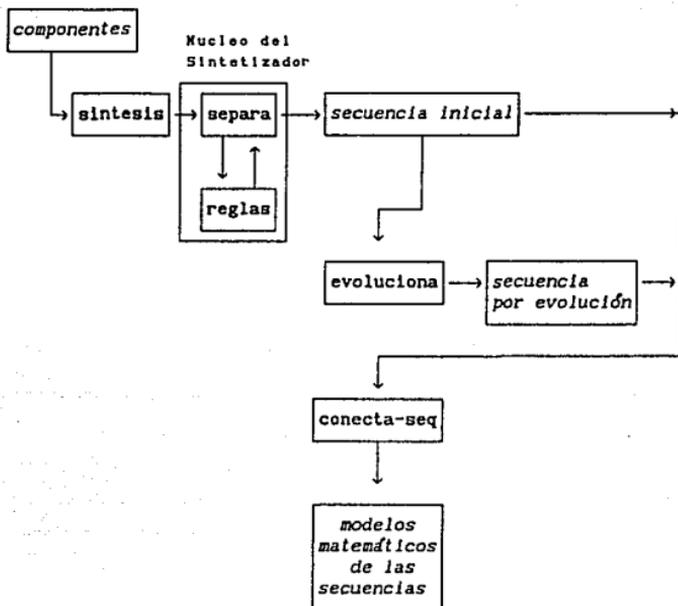
La siguiente fase consiste en la modificación de la estructura propuesta anteriormente por medio de intercambios de tareas de separación. Se aplica la estrategia de evolución presentada en el segundo capítulo y que será detallada en un ejemplo en el próximo capítulo, esta función es desempeñada por *evoluciona*. El resultado de este proceso es una secuencia 'mejor' que la propuesta por la máquina de inferencias, que sea mejor o no depende de la exactitud de la función de costo.

6: Formulación automática

La última etapa del proceso consiste en la formulación automática de modelos matemáticos de las secuencias. Lo realiza la función *conecta-seq*, que se encarga de escribir las ecuaciones de los separadores y de conexión entre ellos que constituyen el modelo de la secuencia, llama a otras funciones a su vez que se encargan de formular el modelo de los separadores y de las conexiones, para luego ser escritas a disco.

Todas las distintas fases del proceso anterior son conjuntadas por la función *síntesis* desde la captura de información hasta la escritura en disco.

S3 tiene la estructura funcional ilustrada en la figura siguiente:



Relacionando el anterior esquema del primer capítulo con el sistema S3 se puede decir que la máquina de inferencias está compuesta mayormente por la función separa que implementa la tercera etapa. Esta función envía a las reglas heurísticas, para, a su vez, obtener conocimiento sobre el cual basar sus recomendaciones.

Llama una a una a todas las reglas involucradas y las aplica a todos los separadores elegibles para realizar la separación, resultando en una propuesta de estructura, infiere la estructura recomendada a partir de la información contenida en la base de conocimientos, que está compuesta por las funciones explicadas en

el segundo capítulo que implementan las reglas heurísticas, la información acerca de los separadores y componentes, y las funciones auxiliares de cálculo de costos, propiedades termodinámicas, etc.

Habría que añadir que la base de conocimientos y el motor de inferencias están contenidos completamente en unidades separadas e independientes y esta modularidad permite ampliar sin dificultades el sistema.

En S3 hay también un cierto número de funciones de apoyo que manejan los archivos, la entrada de información y la interacción con el usuario, que no se describen en esta tesis.

MODULO de FORMULACIÓN AUTOMÁTICA.

Este módulo requiere una descripción más detallada del modelo utilizado; su objetivo es escribir las ecuaciones matemáticas que describen una secuencia de separadores, de forma tal que puedan ser utilizadas por programas como MP (Carlos Rojas, 1989) desarrollado dentro del proyecto DIPAC (Diseño de Procesos Asistido por Computadora) de esta Facultad de Química.

Un modelo de una secuencia incluye un modelo de los separadores o destiladores y las conexiones entre ellos. Se eligió el modelo propuesto por Smith y Brinkley (Smith y Brinkley, 1960), dado que es posible su aplicación directa y de modo uniforme para sistemas multicomponentes. Es directa su aplicación porque se puede considerar como una fórmula que calcula la composición de salida de un separador en función de las entradas y parámetros como el reflujo, el número de platos totales, el número de platos a la alimentación y las propiedades de equilibrio. Es uniforme porque no hace distinciones entre componentes claves o no claves.

Básicamente el modelo de destilador de Smith y Brinkley está compuesto por la siguiente ecuación:

$$\phi_1 = \frac{(1-S_{n,1}^{N-M}) + R^*(1-S_{n,1})}{(1-S_{n,1}^{N-M}) + R^*(1-S_{n,1}) + h_1 * S_{n,1}^{N-M} (1-S_{n,1}^{M+1})} \quad (3.1)$$

$$\phi_1 = \frac{B^* X_{1B}}{F^* X_{1F}}$$

donde N es el número de platos total de la torre, M es el número del plato de alimentación, $S_{n,1}$ es el factor absorción en la parte superior de la columna y se determina mediante la fórmula:

$$S_{n,1} = (K_{D,1} * K_{F,1})^{1/2} V_n / L_n$$

tal que 'n' se refiere a la sección superior al plato de

alimentación, $K_{D,1}$ es la constante de equilibrio a las condiciones del destilado, $K_{F,1}$ es la constante de equilibrio a las condiciones de la alimentación. De manera análoga, $S_{m,1}$ es el factor de absorción para la zona inferior de la columna y se determina así:

$$S_{m,1} = (K_{B,1} \cdot K_{F,1})^{1/2} V_m / L_m$$

donde m se refiere a la sección inferior, $K_{B,1}$ es la constante de equilibrio a las condiciones del producto de fondos.

En (3.1), R es el reflujo L/D y h_1 se define mediante la fórmula:

$$h_1 = \frac{L_n}{L_m} \left(\psi + (1-\psi) \frac{(K_{B,1} \cdot K_{F,1})^{1/2}}{(K_{D,1} \cdot K_{F,1})^{1/2}} \right)$$

donde ψ es la fracción de vapor en la alimentación, $\psi = V/F$. A lo largo de esta tesis se consideraron siempre, productos y alimentaciones en fase líquida saturada, por lo tanto $\psi = 0$.

La siguiente ecuación comprende el balance de materia por componente:

$$F \cdot x_{1F} - B \cdot x_{1B} - D \cdot x_{1D} = 0$$

Las propiedades termodinámicas se calculan por medio de la ley de Raoult:

$$\ln(K_1 \cdot P) = \ln(P_1^0/P_c) = p v_1 - p v_2 / T_r - p v_3 \ln(T_r) + p v_4 \cdot T_r^6$$

donde

$$T_r = T/T_c$$

¹La constante de equilibrio se define así: $K_{D,1} = \frac{y_{D,1}}{x_{D,1}}$

$$pv_1 = 5.92714 + 15.2518 \cdot \omega_1$$

$$pv_2 = 1.28862 + 13.4721 \cdot \omega_1$$

$$pv_3 = 6.09648 + 15.6875 \cdot \omega_1$$

$$pv_4 = 0.16955 + 0.43577 \cdot \omega_1$$

para las secciones de alimentación, superior e inferior:

$$K_{F,1} = f(P, T_F)$$

$$K_{D,1} = f(P, T_D)$$

$$K_{B,1} = f(P, T_B)$$

También se tienen las ecuaciones que comprenden el punto de burbuja para fondos y destilado,

$$\sum K_{B,1} \cdot x_{B,1} - 1 = 0$$

$$\sum K_{D,1} \cdot x_{D,1} - 1 = 0$$

la suma de composiciones de ambos productos,

$$\sum x_{B,1} - 1 = 0$$

$$\sum x_{D,1} - 1 = 0$$

y los siguientes balances de materia, que consideran alimentaciones líquidas saturadas:

$$V_m - V_n = 0$$

$$L_n + F = L_m$$

$$D + B = F$$

$$L_n + D = V_n$$

CONEXIONES:

Hay dos tipos de conexiones entre separadores: (1) el destilado de un separador es la alimentación del siguiente, (2) el producto de fondos es la alimentación del siguiente. En ambos casos la composición, flujo molar y temperatura del producto es igual a la de la alimentación. Formalmente:

conexión tipo (1):

$$\begin{aligned}D^1 &= F^2 \\T_D^1 &= T_F^2 \\K_{D,i}^1 &= K_{F,i}^1 \\x_{D,i}^1 &= x_{F,i}^2\end{aligned}$$

conexión tipo (2):

$$\begin{aligned}B^1 &= F^2 \\T_B^1 &= T_F^2 \\K_{B,i}^1 &= K_{F,i}^1 \\x_{B,i}^1 &= x_{F,i}^2\end{aligned}$$

donde i debe ser uno de los componentes presentes en la mezcla, F , B y D se refieren a la alimentación fondos y destilado, respectivamente, D , B y F son los flujos molares de destilado, fondos y alimentación; el superíndice 2 se refiere al separador que tiene como alimentación un producto del separador a que se refiere el superíndice 1.

CAPITULO 4
DETERMINACIÓN DE PESOS

DETERMINACIÓN DE PESOS.

Supongamos que alguien decide utilizar un sistema basado en heurísticas para resolver cierto problema. Normalmente hay un conjunto de pesos asociados a las reglas heurísticas. Estos pesos determinan la importancia relativa de cada regla con respecto a las demás reglas. Comúnmente estos pesos son proporcionados por el usuario, si éste ha utilizado las heurísticas es muy probable que con base en su experiencia les asigne valores de manera apropiada, pero si carece de experiencia en el problema es muy probable que se vea en problemas para elegir los valores de los pesos adecuadamente.

Esta dificultad ha sido la base de críticas en contra de los sistemas heurísticos (Malone et al., 1985), pues hay ambigüedad en la determinación de los pesos; además se supone la existencia de un experto que los asigna, cuando se supone que el sistema trata de simular el comportamiento del experto y realizar en cierta medida su trabajo.

Ante esto, las estructuras de separación propuestas o existentes se podrían considerar como resultados experimentales de la aplicación del saber heurístico y, por lo tanto, ser utilizadas en la determinación de los pesos, buscando aquellos que produzcan las estructuras reportadas.

Para el trabajo de esta tesis se tomaron 6 ejemplos de problemas de separación de la literatura sobre síntesis de secuencias de destilación. En la bibliografía se incluían, además, las estructuras de separación recomendadas por los autores.

Para cada ejemplo empleado se encontraron por prueba y error

los juegos de pesos¹ que generaban la secuencia recomendada. Una vez obtenidos, se procedió a compararlos entre sí, eliminando todos aquellos que no fueran comunes a todos los ejemplos. Los juegos de pesos resultantes eran capaces, por lo tanto, de generar todas las secuencias propuestas en la literatura para los ejemplos considerados.

Además se obtuvo un promedio ponderado de los juegos de pesos obtenidos para cada ejemplo de acuerdo con la siguiente fórmula:

$$\langle W_i^k \rangle = \frac{\sum_{j \in P^k} W_{i,j}}{C P^k}, \quad j \in P^k, i \in R$$

donde P^k es el conjunto de juegos de pesos obtenidos para el ejemplo k -ésimo, $C P^k$ es el número de elementos de ese conjunto, R es el conjunto de reglas consideradas, $W_{i,j}$ es el valor del peso para la regla i -ésima en el juego de pesos j -ésimo. La lista de pesos promedio sería:

$$\langle \bar{W}^k \rangle = (\langle W_1^k \rangle, \langle W_2^k \rangle, \langle W_3^k \rangle, \dots, \langle W_n^k \rangle)$$

En otras palabras, se obtuvo el promedio para cada regla y para cada peso. Se llegó a un juego de pesos para cada estructura tomada de la literatura, y se vio que el promedio de estos pesos generaba la secuencia propuesta para cada ejemplo. Asimismo el promedio de los juegos de pesos comunes a todos los ejemplos, generaba todas las secuencias.

Esto llevo a pensar que si se considerara a P^k como un

¹un juego de pesos es un vector o una lista de números, cada uno asignado a cierta regla. Si, se consideran n reglas, la lista tendrá n elementos.

conjunto de puntos en un espacio n -dimensional (n es el número de reglas consideradas) este sería convexo; en otras palabras, que los puntos de la línea recta que une dos puntos cualesquiera del conjunto también están contenidos en él, es decir también generan la secuencia propuesta.

Esto explicaría porque los promedios de los ejemplos también generan la secuencia pedida. El hecho de que la intersección de cualquier número de conjuntos convexos es a su vez un conjunto convexo, explica porqué el promedio de los puntos comunes a todos los ejemplos (i.e. su intersección) también genera todas las secuencias de los ejemplos. Este análisis intuitivo nos permiten referirnos solo al promedio de los juegos de pesos.

No se pretende derivar de los promedios de los pesos obtenidos valores absolutos y cuantitativos de éstos, sino usarlos como base de un análisis cualitativo en torno a la importancia relativa de las distintas reglas.

DESCRIPCIÓN DE LOS EJEMPLOS

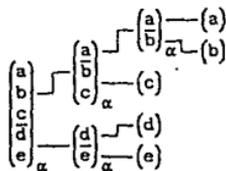
A continuación se presentan las características de los problemas considerados y las estructuras recomendadas para su separación, para luego mostrar los resultados:

Ejemplo No.1

Separación de parafinas por destilación ordinaria

Componente	Fracción molar	Volatilidad relativa
Propano : A	0.05	2.0
Butano : B	0.15	1.33
n-Butano : C	0.25	2.4
i-Butano : D	0.2	1.25
n-Pentano : E	0.35	

Este problema fue analizado por primera vez por (Heaven, 1969), la secuencia propuesta como solución por (Ngadir y Liu, 1983) y (Seader y Westerberg, 1977) es:



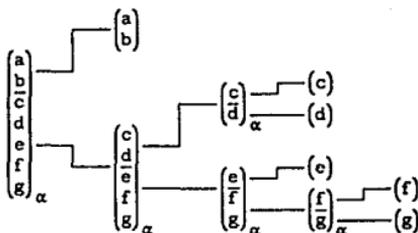
Ejemplo No.2

Separación de productos de termorrompimiento

(Craking)

Componente		Flujo molar, mol/h	Volatilidad relativa
Hidrógeno	: A	18	13.0
Metano	: B	5	22.8
Etileno	: C	24	2.51
Etano	: D	15	14.865
Propileno	: E	14	1.37
Propano	: F	6	18.35
Pesados	: G	8	

La estructura usada en la práctica para este problema ha sido tomada de (Rudd et al., 1973) pág 185, y (King, 1980; pág 718) y es la siguiente:



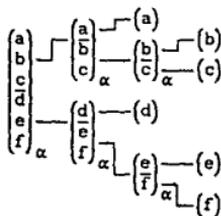
Ejemplo No.3

Separación de parafinas y olefinas

por destilación ordinaria

Componente	Fracción molar	Volatilidad relativa
Etano : A	0.20	3.5
Propileno : B	0.15	1.2
Propano : C	0.20	2.7
Buteno : D	0.15	1.21
n-Butano : E	0.15	3.0
n-Pentano : F	0.15	

Este problema de separación fue presentado inicialmente por (Thompson y King, 1972). La estructura propuesta por (Ngadir y Liu, 1983) y (Seader y Westerberg, 1977) es:

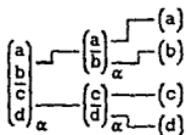


Ejemplo No.4

Separación de del producto de una planta de gas

Componente	Flujo molar, mol/h	Volatilidad relativa
Etano : A	35.55	4.04
Propano : B	124.22	3.948
1-Butano : C	58.98	1.736
n-Butano : D	116.54	

Este ejemplo fue provino de (Watkins, 1979) pagina 151. Ahí se propone la siguiente solución:

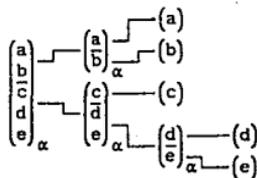


Ejemplo No.5

Separación de una mezcla de hidrocarburos con cinco componentes

Componente		Fracción molar	Volatilidad relativa
n-Pentano	: A	0.15	2.855
n-Hexano	: B	0.20	2.761
n-Heptano	: C	0.30	2.718
1-Octano	: D	0.20	7.18
n-Decano	: E	0.15	

Este ejemplo fue tomado de (Gómez-Muñoz y Seader, 1985) la siguiente estructura es la que resulta de aplicar el algoritmo que se propone en la referencia antes citada:

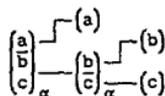


Ejemplo No.6

Separación de una mezcla ternaria

Componente	Flujo molar, mol/h	Volatilidad relativa
n-Hexano : A	35.55	7.51
n-Octano : B	124.22	7.18
n-Decano : C	58.98	7.18

Este ejemplo también fue tomado de (Gómez-Muñoz y Seader, 1985), la estructura recomendada es la secuencia directa:



RESULTADOS OBTENIDOS

A continuación se muestran los valores resultante para cada uno de los ejemplos:

Ejemplo	Valores				
	Volat	Comp	Direc	Balan	CES
1	0.5006	0.5019	0.267	0.6222	0.6069
2	0.5178	0.4649	0.273	0.3198	0.7896
3	0.506	0.5	0.239	0.5788	0.7
4	0.4975	0.5	0.288	0.5848	0.5848
5	0.2775	0.6755	0.241	0.696	0.5257
6	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
Global	0.1667	0.7153	0.2157	0.4314	0.8104

Se pueden observar varias tendencias, por ejemplo, en el ejemplo No.6 ninguna heurística es más importante que otra, el

único juego de pesos que no generó la secuencia propuesta fue aquel que no tomaba en cuenta ninguna regla. El solo hecho de tomar en cuenta alguna heurística generaba la secuencia pedida.

También se observa del ejemplo No.1 al No.4 que los pesos promedio no varían mucho. Casi son los mismos puntos comunes de un ejemplo a otro. Contrasta con ellos fuertemente el ejemplo No.5, que es determinante para el promedio global. El problema tiene como característica más notoria cierta abundancia de un producto intermedio, capaz de participar en dos separaciones casi igualmente difíciles ($\alpha_{BC} = 2.761$ y $\alpha_{CD} = 2.718$).

En la referencia del ejemplo No.5 (Gomez-Muñoz y Seader, 1985) se recomienda el uso de un prefraccionador cuyos productos sean equilibrados (de ahí la importancia que se le da a las heurísticas balan y CES), en vez de una secuencia convencional como la usada en el ejemplo.

Puede decirse, entonces, que las reglas Volat Comp y Balan son aproximadamente equivalentes, con una cierta tendencia de Balan a ser mayor. La regla CES, al conjuntar a dos reglas parece ser más importante que las demás, cuando se explicó esta heurística en el segundo capítulo se mostró que está relacionada con la carga térmica, que es una parte importante del costo total.

Casi sorprendentemente las reglas relacionadas con los servicios (balan y CES) son relativamente más importantes que aquellas que toman en cuentas de manera mas directa el costo instalado (volat y comp). Esto habla de la importancia de los servicios en el costo total.

La regla de secuencia directa aparenta ser la menos importante, en promedio, en la determinación de las estructuras de

separación. La abundancia de secuencias directas en los diagramas de proceso se explica quizás en función de otras características y consideraciones en torno a las mezclas involucradas y al proceso en general.

A continuación mostramos un ejemplo en el que se usan estos pesos obtenidos para sintetizar una estructura de separación para un problema particular.

EJEMPLO COMPLETO de UTILIZACIÓN del PROGRAMA

Este ejemplo esta basado en el problema propuesto por (Gomez-Muñoz y Seader, 1985):

Componente	Flujo Molar mol/h
A: Propano	4.55
B: 1-Buteno	45.5
C: n-Butano	155.0
D: Trans-2-Buteno	48.6
E: Cis-2-Buteno	36.8
F: n-Pentano	18.2

Se eligió este ejemplo por su dificultad, la volatilidad relativa entre n-butano y trans-2-buteno es de 1.03, tan pequeña que se recomienda utilizar destilación extractiva con furfural, así se pone a prueba el sistema S3, pues éste está limitado a la destilación como método de separación.

En el siguiente ejemplo se describe una consulta al sistema S3 de manera somera, se ha detallado más la descripción de la estrategia evolutiva por haber quedado la explicación de ésta pendiente.

Para iniciar el sistema hay que cargar dentro del interprete GCLISP el archivo "SEP.LSP", una vez hecho esto se llama a la función `síntesis`, que conjunta las distintas funciones del sistema.

• A continuación pide información acerca de la mezcla. Hay dos maneras de proporcionársela: 1) indicándole el archivo donde se encuentra o 2) introduciendo la información directamente.

Después de la captura, se procede a la generación de todos los separadores posibles. Antes de iniciar la síntesis se le pregunta al usuario los valores de los pesos, en este ejemplo se eligió la siguiente asignación:

Regla 1, C.E.S. = 0.7

Regla 2, S. Balanceados = 0.6

Regla 3, Secuencia Directa = 0.25

Regla 4, Volatilidades = 0.5

Regla 5, Composición = 0.5

La función separa muestra la lista de separadores, cada uno de ellos con los componentes de alimentación y de productos, y el valor de la recomendación; por ejemplo para el primer caso, la mezcla de alimentación fué:

(a b c d e f)

y los separadores elegibles:

S5

Destilado = (a b c d e) Fondos = (f)

Recomendación = 0.785

S2

Destilado = (a b) Fondos = (c d e f)

Recomendación = 0.647

S3

Destilado = (a b c) Fondos = (d e f)

Recomendación = 0.64

S1

Destilado = (a) Fondos = (b c d e f)

Recomendación = 0.613

S4

Destilado = (a b c d) Fondos = (e f)

Recomendación = 0.358

Se pregunta si desea ver las contribuciones de cada regla a algun separador, o de una regla a todos los separadores; después se pregunta si desea elegir un separador de entre los posibles, si se responde negativamente, se continua el desarrollo de la síntesis con el separador con una mayor recomendación.

Para el ejemplo los siguientes separadores fueron elegidos para formar parte de la secuencia:

S11

Alimentación = (a b c d e) Recomendación = 0.821

Destilado = (a b) Fondos = (c d e)

S25

Alimentación = (c d e) Recomendación = 0.688

Destilado = (c) Fondos = (d e)

S32

Alimentación = (d e) Recomendación = 0.821

Destilado = (d) Fondos = (e)

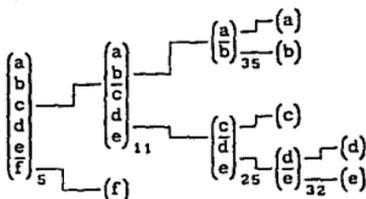
S35

Alimentación = (a b) Recomendación = 0.612

Destilado = (a) Fondos = (b)

Resultando en la secuencia:

(S5 f (S11 (S25 (S32 e d) c) (S35 b a)))



A continuación se procede a la fase de cálculo aproximado de separadores, que luego desemboca en la fase complementaria de evolución, cuya estrategia se describe en las siguientes secciones.

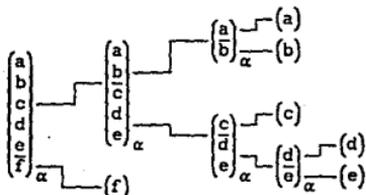
En la descripción de la estrategia evolutiva solo inicialmente se mostrarán las gráficas de todas las secuencias implicadas. Las listas anidadas con que se las representa se muestran siempre, pues se quiere mostrar la estrategia seguida y no el uso de la regla evolutiva. No se distingue entre separadores, solo se les representara por medio de una letra 'α'.

Problema de separación.

(a b c d e f)

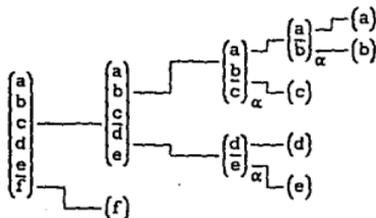
1.1. Secuencia inicial propuesta por S3, el sistema desarrollado en esta tesis, es:

($\alpha f (\alpha (\alpha (\alpha e d) c) (\alpha b a)))$)



Estructuras vecinas¹ (en orden de costo decreciente).

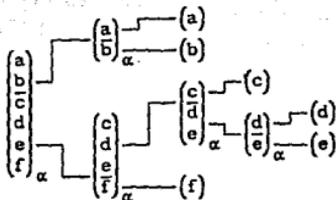
($\alpha f (\alpha (\alpha e d) (\alpha c (\alpha b a))))$)



Costo 3 563 770.0

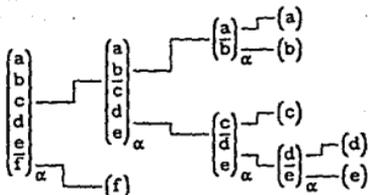
¹se considera que una estructura es vecina de si misma.

(α (α f (α (α e d) c)) (α b a))



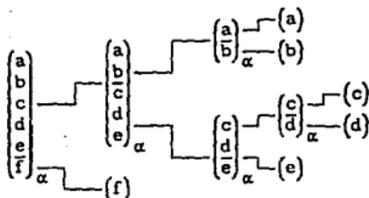
Costo 3 567 940.0

(α f (α (α (α e d) c) (α b a)))



Costo 3 573 950.0

(α f (α (α e (α d c)) (α b a)))



Costo 3 635 710

2.1. Se elige la mejor estructura de entre las vecinas.

(α f (α (α e d) (α c (α b a))))

3.1. Se compara esta con la estructura base, para saber si es igual.

$$(\alpha f (\alpha(\alpha e d) c)(\alpha b a))) \neq (\alpha f(\alpha (\alpha e d)(\alpha c (\alpha b a))))$$

1.2. Como son diferentes se toma la estructura como nueva base.

$$(\alpha f (\alpha (\alpha e d) (\alpha c (\alpha b a))))$$

Se generan todas las estructuras vecinas de la nueva base.

$$(\alpha (\alpha f (\alpha e d)) (\alpha c (\alpha b a))))$$

Costo 3 538 750.0

$$(\alpha f (\alpha (\alpha f e) (\alpha c (\alpha b a)))))$$

Costo 3 563 770.0

$$(\alpha f (\alpha e (\alpha d (\alpha c (\alpha b a))))))$$

Costo 3 635 940.0

$$(\alpha f (\alpha (\alpha f e) (\alpha (\alpha c b) a))))$$

Costo 3 816 250.0

2.2. Nuevamente se elige la mejor estructura.

$$(\alpha (\alpha f (\alpha e d)) (\alpha c (\alpha b a))))$$

3.2. Se averigua si es igual a la base de que se partió.

$$(\alpha(\alpha f(\alpha e d))(\alpha c(\alpha b a))) \neq (\alpha f(\alpha(\alpha e d)(\alpha c(\alpha b a))))$$

1.3. Dado que es distinta se le considera la nueva base.

$$(\alpha (\alpha f (\alpha e d)) (\alpha c (\alpha b a))))$$

Se generan sus estructuras vecinas

$$(\alpha (\alpha (\alpha f e) d) (\alpha c (\alpha b a)))$$
$$(\alpha (\alpha f (\alpha e d)) (\alpha c (\alpha b a)))$$
$$(\alpha f (\alpha (\alpha e d) (\alpha c (\alpha b a))))$$
$$(\alpha (\alpha f (\alpha e d)) (\alpha (\alpha c b) a))$$

2.3. Se elige la estructura más económica.

$$(\alpha (\alpha (\alpha f e) d) (\alpha c (\alpha b a)))$$

Costo 3 418 340.0

3.3. Se compara con la estructura base.

$$(\alpha(\alpha(\alpha f e) d)(\alpha c(\alpha b a))) \neq (\alpha(\alpha f(\alpha e d))(\alpha c(\alpha b a)))$$

1.4. Como es distinta se convierte en la primera nueva base.

$$(\alpha (\alpha f (\alpha e d)) (\alpha c (\alpha b a)))$$

Estructuras vecinas

$$(\alpha (\alpha f (\alpha e d)) (\alpha c (\alpha b a)))$$
$$(\alpha (\alpha f e) (\alpha d (\alpha c (\alpha b a))))$$
$$(\alpha (\alpha f (\alpha e d)) (\alpha c (\alpha b a)))$$
$$(\alpha (\alpha (\alpha f e) d) (\alpha (\alpha c b) a))$$

2.5 Se elige la estructura más económica

$$(\alpha (\alpha f (\alpha e d)) (\alpha c (\alpha b a)))$$

3.5. Se compara con la base de evolución.

$$(\alpha(\alpha f(\alpha e d))(\alpha c(\alpha b a))) = (\alpha(\alpha f(\alpha e d))(\alpha c(\alpha b a)))$$

La estrategia llega a su fin, pues son iguales ambas estructuras. El costo de la más económica fué de 3 418 340.0\$.

El procedimiento puede parecer laborioso, pero la eficiencia con que LISP maneja listas permite hacerlo rapidamente.

La última fase consiste en la formulación de los modelos de las secuencias, que resulta en un número elevado de líneas de

código (25 Kbites para este caso), por ejemplo, la ecuación de igualdad entre temperaturas de alimentación del separador S23 y de producto de fondos del separador S3 (pues la alimentación de uno es el producto de otro es:

```
( CBS3S23F69
```

```
  ( VARIABLES S3TB S23TF )
```

```
  ( FÓRMULA ( S3TB - S23TF )))
```

A pesar de ser una fórmula sencilla, es larga su expresión, de ahí que no se muestre, por ejemplo, la ecuación completa que modela un separador.

CAPITULO 5
AMPLIACIONES Y CONCLUSIONES

AMPLIACIONES.

1. Otros Métodos de separación.

Una posible extensión sería eliminar solo la restricción que limita la elección de separadores a un solo método de separación es sencillo, en algún momento se mencionó que cada método de separación tenía sus reglas heurísticas, sus procedimientos de cálculo y excepciones.

La modificación consistiría en generar todos los separadores posibles a partir de la lista de precedencia del nuevo método a considerar pues esta sería diferente, por lo general.

2. Integración de calor.

El problema de integrar térmicamente entre sí una secuencia de separadores, y de integrar térmicamente el sistema de separación y el proceso que lo incluye ha sido abordado mayormente con métodos algorítmicos (Rathore et al., 1974a y 1974b), (Morari y Faith, 1980), (Andreovich y Westerberg, 1985b), (Meszaros y Fonyo, 1988), etc., y generalmente destiladores pues la energía es su medio de separación. El problema tiene cierta complejidad debido a la retroalimentación entre la estructura de separación y la estructura de integración térmica.

Un enfoque distinto es presentado por (Islas y Cerdá, 1988). Aprovechando los resultados obtenidos por métodos algorítmicos los autores han derivado heurísticas que permiten integrar entre sí una secuencia rápidamente, mediante cálculos y consideraciones sencillas acerca de características de la secuencia como: la magnitud de la carga térmica, el rango de temperaturas en que

operan los separadores, limitaciones de presión, etc., apoyándose en métodos aproximados de diseño y usando ampliamente la representación T vs. Q propuesta por (Andreovich y Westerberg, 1985a y 1985c).

Como todo método heurístico, no garantiza que la solución sea óptima. Si se integran con este método varias secuencias promisorias se aumentan las posibilidades de encontrar una solución óptima sin necesitar un tiempo considerable de cálculo. Se podría conjuntar este método y la estrategia evolutiva presentada en el segundo capítulo:

1) Partir de una estructura inicial y sus estructuras vecinas e integrarlas de acuerdo con el método de Islas y Cerdá.

2) Elegir la mejor o más económica, esa será la nueva estructura inicial.

3) Repetir los pasos anteriores hasta que la evolución no mejore las estructuras.

3. Codificación automática de reglas.

Una posible ampliación sería que S3 constuyera automáticamente las funciones que implementan las reglas heurísticas, a partir de su especificación no algorítmica, de la misma manera que MP (Carlos Rojas, 1989) construye simuladores a partir de su especificación matemática.

4. Otras ampliaciones.

Algunas posibilidades más de ampliar el presente trabajo podrían ser: adición de algunas reglas evolutivas, estructuras de separación complejas (Tedder y Rudd, 1978), productos no

necesariamente puros (Muraki et al., 1986), (Floudas, 1987), (Floudas y Anastasiadis, 1988) y separadores no perfectos (Muraki y Hayakawa, 1988), (Bamopoulos et al., 1988) y (Cheng y Liu, 1988).

CONCLUSIONES

El objetivo primordial de esta tesis fue mostrar la utilidad de la aplicación de la Inteligencia Artificial en la ingeniería de procesos, producto de este esfuerzo es un sistema que asiste al usuario en la síntesis de secuencias de destilación y genera automáticamente modelos matemáticos de las secuencias sintetizadas. Operando de manera inversa, el sistema permite además, evaluar la importancia de las heurísticas utilizadas en la síntesis de secuencias de destilación, tomando como base estructuras ya existentes. Todo esto fue posible apoyándose en conceptos y técnicas de la Inteligencia Artificial.

Al automatizar una fase del diseño y análisis el presente sistema pretende liberar de alguna carga al usuario que, entonces, puede dedicar más recursos y tiempo a partes que sean más complejas o requieran más imaginación y creatividad.

El sistema permite sintetizar muchas secuencias y generar sus modelos en poco tiempo. Con estos modelos es posible generar de manera automática simuladores de las secuencias sintetizadas, valiéndose de herramientas de codificación automática como MP (Carlos Rojas, 1989), acortando rápidamente el intervalo que hay entre la síntesis y su simulación. Esto permite un análisis más amplio y exhaustivo de las posibles estructuras de proceso, facilitando la elección de una estructura adecuada, en menos tiempo y con menor margen de error.

Al evaluar la importancia relativa de las heurísticas, el sistema posibilita, la identificación de las reglas más útiles y poderosas, es decir, aquellas a las que se debe prestar más atención para la síntesis de estructuras y el posterior desarrollo

de nuevas heurísticas. Investigaciones posteriores a esta tesis podrían tener como objetivo el explicar formalmente la razón por la que algunas heurística resultaron más importante que otras. Algunas consideraciones preliminares a este respecto fueron presentadas en el capítulo 4.

Una posible ampliación sería que S3 constuyera automáticamente las funciones que implementan las reglas heurísticas, a partir de su especificación no algorítmica, de la misma manera que MP (Carlos Rojas, 1989) construye simuladores a partir de su especificación matemática.

BIBLIOGRAFIA

M. J. Andrecovich y A. W. Westerberg:

a) Simple Synthesis Method Based on Utility Bounding for Heat-Integrated Distillation Sequences, *AIChE J.* , 31, 3, 363-375, 1985.

b) MILP Formulation for Heat-Integrated Distillation Sequence Synthesis, *AIChE J.* , 31, 9, 1461-1474, 1985.

c) Utility Bounds for Nonconstant QAT for Heat-Integrated Distillation Sequences Synthesis, *AIChE J.* , 31, 9, 1475-1479, 1985.

G. Bamopoulos, R. Nath, y R. L. Motard, Heuristic Synthesis of Nonsharp Separation Sequences, *AIChE J.* , 34, 5, 763-780, 1988.

B. D. Smith y W. K. Brinkley, General Short-cut Equation for Equilibrium Stage Processes, *AIChE J.* , 6, 3, 446-450, 1960.

S. H. Cheng y Y. A. Liu, Studies in Chemical Process Design and Synthesis. 8. A Simple Heuristic Method for the Synthesis of Initial Sequences for Sloppy Multicomponent Separations, *Ind. Eng. Chem. Res.* 27, 2304-2322, 1988.

L. T. Fan, M. M. Ghapuray y Y. W. Huang, Sequencing Separation Via Fuzzy Heuristics, *Chem. Eng.*, March 2, 57-59, 1987.

E. Feigenbaum, The art of Artificial Intelligence: Theme and Case Studies in Knowledge Engineering en Proceedings of the International Joint Conference in Artificial Intelligence V, 1977.

C. A. Floudas, Separation Synthesis of Multicomponent Feed Streams into Multicomponent Product Streams. AIChE J. 33, 540-550, 1987.

C. A. Floudas y S. H. Anastasiadis, Synthesis of Distillation Sequences with Several Multicomponent Feed and Product Streams, Chem.Eng.Sci., 43, 9, 2407-2419, 1988.

R. Forsyth , editor; EXPERT SYSTEMS Principles and case studies, Chapman and Hall, 1984, capítulo 2.

A. Gomez M. y J. D. Seader, Separation Sequenece Synthesis by a Predictor Based Ordered Search, AIChE J, 22, 6, 970-979, 1976.

A. Gomez-Muñoz y J. D. Seader, Synthesis of Distillation Trains by Thermodynamic Analysis, Comp. Chem. Eng., 9, 4, 311-341, 1985.

J. E. Hendry y R. R. Hughes, Generating Separation Process Flowsheets, Chem. Eng. Prog., 68, 6, 71-76, 1972.

Y. W. Huang y L. T. Fan, Fuzzy Logic Rule Based System for Separation Sequences Synthesis: An Object Oriented Approach, Comp. Chem. Eng., 12, 6, 601-607, 1988.

Miguel A. Isla y Jaime Cerda, A Heuristic Method for the synthesis of Heat-Integrated Distillation Systems, The Chemical Engineering Journal, 38, 161-177, 1988.

A. Kaufmann, Introduccion a la Teoria de los Subconjuntos Borrosos, tomo I, C.E.C.S.A., Mexico, 1982, capitulo I.

C. J. King, Separation Processes, McGraw Hill, Nueva York, 1980, pagina 715.

M. F. Malone, K. Glinos, F. E. Marquez, y J. M. Douglas, Simple Analytical Criteria for the Sequencing of Distillation Columns, AIChE J, 31, 4, 683-689, 1985. Ver pagina 684.

I. Meszaros y Z. Fonyo, A Simple Heuristic Method to Select Heat-Integrated Distillation Schemes, Chem.Eng.Sci., 43, 11, 3109-3112, 1988.

M. Morari y D. C. Faith, The Synthesis of Distillation Trains with Heat Integration, AIChE J., 26, 6, 916-928, 1980.

M. Muraki y T. Hayakawa, Synthesis of Distillation Separation Process with Energy Integration, J. Chem. Eng. Jap., Vol.14, No.3, pags. 233-238., 1981.

M. Muraki y T. Hayakawa, Synthesis of a Multicomponent Multiproduct Separation Process with Nonsharp Separators, Chem.Eng.Sci., 43,

2, 259-268, 1988.

M. Muraki, K. Kataoka y T. Hayakawa, Evolutionary Synthesis of a Multicomponent Multiproduct Separation Process, Chem.Eng.Sci., 41, 7, 1843-51, 1986.

R. Nath y R. L. Motard, Evolutionary Synthesis of Separation Processes, AIChE J, 27, 4, 578-587, 1981.

V. M. Ngadir y Y. A. Liu, Studies in Chemical Process Design and Synthesis, Part V, AIChE J, 29, 6, 926-934, 1983.

N. Nishida, G. Stephanopoulos, y A. W. Westerberg, A Review of Process Synthesis. AIChE J., 27, 321-51, 1981.

W. R. Paterson, On Some Separation Heuristics, Chem.Eng.Sci., 42, 1, 186-187, 1987.

R. N. S. Rathore, K. A. Vanwormer y G. J. Powers, Synthesis Strategies for Multicomponent Separation Systems with Energy Integration, AIChE J. , 20, 3, 491-502, 1974.

R. N. S. Rathore, K. A. Vanwormer y G. J. Powers, Synthesis of Distillation Systems with Energy Integration, AIChE J. , 20, 5, 940-50, 1974.

R. C. Reid, J. M. Prausnitz y T. K. Sherwood, Properties of Gases

and Liquids 3ed, Mc. Graw-Hill, Nueva York, 1977.

E. Rich, Artificial Intelligence, McGraw-Hill, 1988; pag 71.

F. E. Rodrigo y J. D. Seader, Synthesis of Separatio Sequences by Ordered Branch Search, AIChE J, 21, 5, 885-894, 1976.

Carlos Rojas Guzman, Construcción Automática de Simuladores a partir de su Especificación Matemática. Tesis de licenciatura en Ingeniería Química. Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico D.F., Agosto de 1989.

D. F. Rudd, G. J. Powers, y J. J. Siirola, Process Synthesis, Prentice-Hall, Englewood Cliffs N.J., 1973.

J. D. Seader y A. W. Westerberg, A Combined Hueristic and Evolutionary Strategies for the Synthesis of Simple Separation Sequences, AIChE J. 18, 941-954, 1977.

Herbert A. Simon, Whether Software Engineering Needs to Be Artificially Intelligent, IEEE Trans. Soft. Eng., Vol SE-12, No.7, July 1986, pags 726-732.

G. Stephanopoulos y A. W. Westerberg; Studies in Process Synthesis-II, Evolutionary Synthesis of Optimal Process Flowsheets, Chem. Eng. Sci., 31, 195-204, 1976.

Tedder, D. W. y Rudd, D. F. , Parametric Studies in Industrial Distillation, Partes I, II y III, AIChE J. , 24, 303-334, 1978.

Thompson, D. W. y King, C. J. , Systematic Synthesis of separation Schemes, AIChE J. , 18, 941, 1972.

Westerberg, A. W. , The Synthesis of Distillation-Based Separation Systems. Comput. Chem. Eng., 9, 421, 1985.

R. N. Watkins, Petroleum Refinery Distillation 2nd. Ed., Gulf Publishing Company, 1979.

Patrick Henry Winston y Karen Pendergast, The AI Business, Pag 1., Addison-Wesley, 1985.

Patrick Henry Winston y Klaus Berthold Horn, Lisp, 3rd Edition, Addison-Wesley, 1989. Capitulo 19.