

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE QUIMICA



ESTUDIO DE LOS METODOS DE DESCOMPO-
SICION OPTIMA DE SISTEMAS CON
RECIRCULACION

TESIS PROFESIONAL

Que Para Obtener el Título de
INGENIERO QUIMICO
P r e s e n t a

ALEJANDRO ROSAS MIRANDA

México, D. F.

1978



Universidad Nacional
Autónoma de México



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 esta 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.

TESIS 1978
M.C. ~~38~~ 38/B13

FECHA _____
PROC _____
* _____



JURADO ASIGNADO ORIGINALMENTE SEGUN EL TEMA

PRESIDENTE : PROF. ING. JORGE MARTINEZ MONTES
VOCAL : PROF. ING. ENRIQUE BRAVO MEDINA
SECRETARIO : PROF. ING. ALEJANDRO RAMIREZ GRUCUK
1er. SUPLENTE: PROF. ING. CARITINO MORENO PADILLA
2do. SUPLENTE: PROF. ING. ARIEL BAUTISTA SALGADO

SITIO DONDE SE DESARROLLO EL TEMA:

FACULTAD DE QUIMICA U.N.A.M.

SUSTENTANTE:



ALEJANDRO ROSAS MIRANDA

ASESOR DEL TEMA:



ING. QUIM. ENRIQUE BRAVO MEDINA

A MI MADRE:

Profa. Estela Miranda Vda. de Rosas
con todo mi cariño y gratitud por -
su esfuerzo, dedicación, apoyo y --
guia que siempre me brindo para lle
gar a esta meta

A MI PADRE:

La luz de tu memoria
iluminó siempre mi -
camino

A MIS HERMANAS:

Irma Mercedes, Patricia
y Blanca Esthela quie--
nes me brindaron su en-
tusiasmo y apoyo para -
seguir adelante

A MIS ABUELITAS:

Sra Antonia Poblano Vda. de Miranda

Sra Teodora Nuñez Vda. de Rosas

A MIS TIOS:

Ing. Cruz Rosas Nuñez

e Ing. Lino Miranda Poblano

por su ejemplo, sus conse--

jos y su apoyo.

A MIS TIOS:

Sr Manuel Solana

Sr Roberto Ramírez

Sra Lucia de Solana

Profa Herminia de Ramírez

Profa Rosa María Miranda P.

Profa Eufasia T. de Miranda

Que siempre me alentaron a-

seguir adelante

A TODOS MIS PRIMOS.

A ADORACION ZAVALA ROSAS

Tu amor y tu apoyo me
ayudaron a llegar has
ta aqui

A MIS AMIGOS Y COMPAÑEROS:

que me dieron animos y
motivos para seguir a-
delante.

A LA FACULTAD DE QUIMICA:

en tus aulas querida
escuela tratamos de-
ser mejores siempre

A TODOS MIS PROFESORES

Al Ing ENRIQUE BRAVO MEDINA

Por la ayuda que me brindo
para realizar esta tesis

AL HONORABLE JURADO

I N D I C E

INTRODUCCION

CAPITULO PRIMERO.- Generalidades

1.- Descripción de los Procesos con Recirculación

1.- Operaciones Unitarias con recirculación.

- a) Secado
- b) Acondicionamiento de aire
- c) Destilación
- d) Absorción de Gas
- e) Extracción líquido - sólido
- f) Extracción líquido - líquido
- g) Cristalización
- h) Lavado
- i) Cromatografía
- j) Evaporación Flash
- k) Recirculación para la recuperación de energía.

2.- Recirculación con Reacción Química

- a) Recirculación por exceso estequimétrico de alguno de los reactivos.
- b) Recuperación del reactivo secundario
- c) Recirculación para el mejoramiento del rendimiento.
- d) Reacciones Compuestas
- e) Purga.

2.- Descomposición de los procesos con recirculación y su relación con la simulación de procesos por computadora.

1.- Representación de módulos de unidad interconectados.

2.- Definiciones de particionamiento y rompimiento.

CAPITULO SEGUNDO.- Métodos de descomposición de los procesos con recirculación.

1.- Localización de los anillos de recirculación dentro de un proceso.

a) Teoría de gráficas

b) Particionamiento de un proceso recirculado.

2.- Rompimiento óptimo de los circuitos de recirculación.

a) Algoritmo de Upadhye y Grens (1972)

b) Algoritmo de Barkley y Motard (1972)

c) Algoritmo de Pho y Lapidus (1973)

d) Algoritmo de Upadhye y Grens (1975)

CAPITULO TERCERO.- Aplicación de los algoritmos de descomposición.

DISCUSION Y CONCLUSIONES

BIBLIOGRAFIA

INTRODUCCION

Al considerar la economía del diseño y operación de una planta química, una buena política es desperdiciar la menor -- cantidad de materias primas, productos y subproductos.

Para alcanzar estos objetivos, aparte de ajustar las -- condiciones mismas del reactor para alcanzar una operación óptima, la principal arma disponible para el diseñador o el ing -- niero de proceso es la recirculación del reactivo no convertido.

La condición ideal para llevar a cabo una reacción química dada, es remover los productos de reacción tan pronto como ellos se forman. Este sistema perfecto eliminaría reaccio-- nes químicas secundarias las cuales podrían producir otras sub -- stancias no deseadas, minimizaría el tamaño del envase de reacción y daría la conversión completa de la alimentación origi-- nal.

Tal proceso es usualmente imposible de realizar, pero -- la técnica de la recirculación permite una aproximación a la -- idealidad al ser puesta en práctica. De hecho la única forma -- posible de alcanzar la conversión química completa de las mate -- rias primas, sin tomar en cuenta las restricciones impuestas -- por la termodinámica y la cinética, es llevar a cabo la recir -- culación del material que no ha reaccionado.

Otra aplicación importante de la recirculación es el --

aprovechamiento al máximo de la energía suministrada a una planta de proceso, ya que muy frecuentemente se tienen corrientes de salida de productos con temperaturas relativamente altas que pueden aprovecharse como fuentes de energía para precalentar -- las corrientes de entrada al proceso. En este caso se tendría -- una recirculación de energía.

De lo anterior se puede concluir que los procesos que implican recirculación de una o varias corrientes de proceso se encuentran con frecuencia en la industria química y del petróleo.

Cuando se conectan unidades de proceso individuales con el objeto de formar el modelo de un proceso completo, en las etapas iniciales del diseño de una planta, tienen que establecerse los balances de materia y energía con el objeto de determinar el tamaño del equipo se va a utilizar. Cuando existen -- corrientes de recirculación, frecuentemente es difícil obtener una solución de estos balances y si hay más de una corriente de recirculación, el problema tiende a crecer exponencialmente.

De modo que los objetivos de este trabajo son:

- 1.- Poner de relieve la importancia de la recirculación como una operación para incrementar la eficiencia de un proceso.

- 2.- Estudiar los métodos que ayudan a establecer de una manera más sencilla la secuencia de cálculo de los modelos de procesos químicos.

3.- Exponer estos conocimientos de tal manera que sea una fuente de información accesible y rápida para el estudiante que desee relacionarse con el tema.

CAPITULO PRIMERO

GENERALIDADES

Descripción de los Procesos con Recirculación

Se entiende por proceso químico a aquel formado por equipo especial dentro del cual la materia se trata para efectuar = un cambio en su estado físico, contenido de energía o en su com posición...

En el diseño de los procesos cada etapa que los forma -- puede estudiarse individualmente si de alguna manera estas etapas son reconocidas. Algunas de estas etapas son reacciones químicas mientras que otras son solamente cambios físicos.

La versatilidad del ingeniero químico se origina en su - instrucción para la práctica de dividir un proceso complejo en pasos físicos individuales llamados operaciones unitarias y en reacciones químicas.

El concepto de operaciones unitarias en ingeniería química se basa en la filosofía de que las secuencias de pasos que - varían ampliamente pueden reducirse a reacciones u operaciones simples, las cuales son idénticas en sus fundamentos sin tomar en cuenta el material que está siendo procesado.

El número de estas unidades de operación básicas no es - muy grande y relativamente pocas de ellas están involucradas en un proceso particular.

La complejidad de la ingeniería química resulta de la variedad de condiciones de temperatura, presión, etc., bajo las cuales estas unidades de operación pueden estar sometidas en los diferentes procesos y las limitaciones de los materiales de construcción y el diseño de los aparatos, impuestas por el carácter químico y físico de las sustancias reaccionantes.

En general el término operación unitaria ha sido restringido a aquellas operaciones en las cuales los cambios que sufre la materia son esencialmente físicos. Aunque esto no es universalmente verdadero, debido a que el término absorción de gas por ejemplo es usado apropiadamente para la operación de remover gas de una mezcla si la separación se completa por medio de solución física o por reacción química con el solvente.

Entonces un proceso unitario es aquella operación en la cual aparece una reacción química provocada. Como por ejemplo sulfonación, alquilación, oxidación, nitración, hidrólisis etc.

Ahora que se ha hecho una revisión somera de la clasificación de las operaciones que pueden constituir un proceso químico, se puede definir qué es un proceso químico con recirculación o proceso químico recirculado:

Proceso con Recirculación es aquel en el cual se tienen una o varias unidades de proceso, conectadas en serie o en paralelo, en el cual, la salida de la (s) unidad (es) está conectada a la entrada de la (s) misma (s) unidades por una o más -

corrientes que llevan materia y/o energía, y en donde esta conexión se hace con el propósito de aumentar el rendimiento del proceso completo.

Un proceso recirculado puede ser simple o compuesto.--- Simple cuando se tiene una unidad de proceso con recirculaciones propias y compuesto cuando este proceso involucra varias-- unidades en la recirculación.

En seguida se hace una recopilación de las descripciones de las operaciones unitarias en las que se podría tener -- recirculación propia, de hecho la recirculación se puede presentar en casi todas ellas.

I.1.1 Operaciones Unitarias con Recirculación o Procesos Recirculados Simples sin Reacción Química.

I.1.1a) Secado.- En este tipo de operaciones el material húmedo se pone en contacto con una masa de aire seco que -- circula en sentido contrario. Aquí se recircula parte del aire húmedo que sale del secador para regular la humedad del aire - de entrada. La fig.I.1 representa este tipo de operación.

La nomenclatura es la siguiente:

AHR	Aire húmedo recirculado
AH	Aire húmedo
AS	Aire Seco
MS	Material Seco

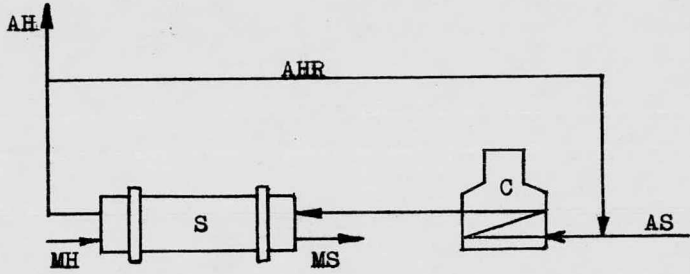


FIG. I.1 .- Sistema de secado con recirculación de aire.

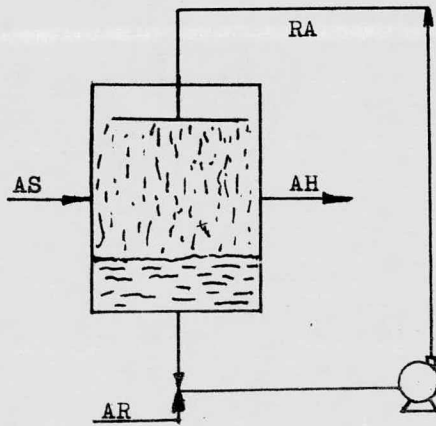


FIG. I.2a .- Humidificador con recirculación de agua.

- MH Material Humedo
 S Secador
 C Calentador.

I.1.1b Acondicionamiento de Aire.- Las operaciones de acondicionamiento de aire son la humidificación y la deshumidificación. En el caso de la humidificación una masa de aire seco se pone en contacto con agua dentro de una cámara en la cual el agua se rocía, la temperatura del aire debe ser mayor que la temperatura del agua. En este caso se recircula totalmente el agua que no ha sido evaporada en el aire y se agrega agua de repuesto.

La humidificación se presenta en la fig. I.2a.

En la deshumidificación se pone en contacto aire húmedo con agua de menor temperatura. Aquí se recircula el agua necesaria para que se lleve a cabo la operación y se extrae del sistema el agua en exceso que es condensada de la masa de aire húmedo. La deshumidificación se representa en la fig. I.2b.

La nomenclatura es la siguiente:

- | | |
|----|-----------------------|
| AH | Aire húmedo |
| RA | Recirculación de agua |
| AS | Aire seco |
| AE | Agua en exceso |
| AR | Agua de repuesto |
| E | Enfriador |

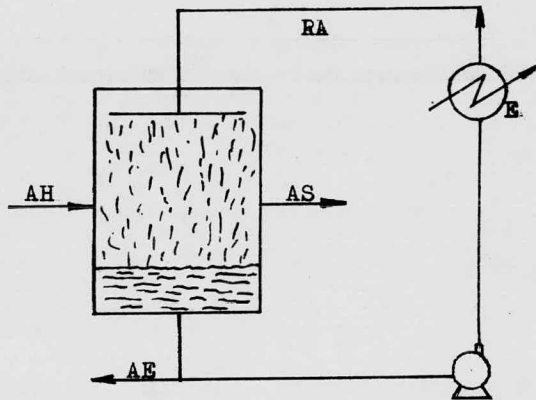


FIG. I.2b .- Deshumidificador con recirculación de agua

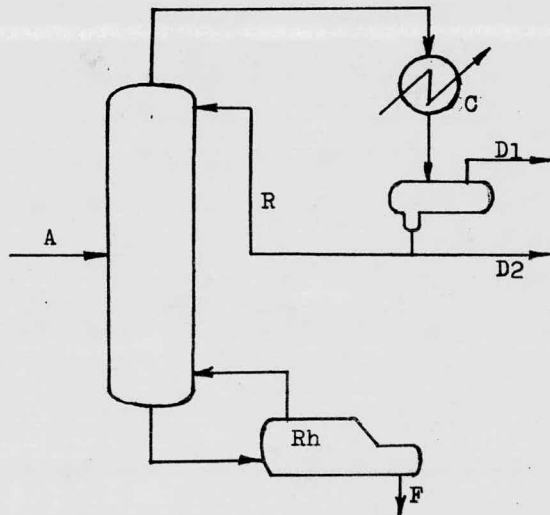


FIGURA I. 3a .- Torre de Destilación con tres productos diferentes.

I.1.1c) Destilación.- Esta es una operación que sirve para separar una mezcla de líquidos en sus componentes. En una columna de destilación, se recircula una parte del producto -- destilado que constituye lo que se conoce como reflujo, esto se hace con el propósito de aumentar la diferencia de concentraciones dentro de la torre, y de esta manera hacerla más eficiente. En algunos tipos de torres de destilación también se recircula parte del producto del fondo después de que este producto ha pasado por un rehervidor, esta es la etapa de calentamiento de las materias que se están procesando y también influye en la eficiencia de la torres.

Las figuras I.3a y 3b representan diferentes arreglos de torres de destilación.

La nomenclatura es la siguiente:

A	Alimentación
R	Reflujo
D	Destilado
F	Producto del fondo
C	Condensador
RH	Rehervidor

I.1.1d) Absorción de gas.- En esta operación una corriente que contiene una mezcla de gases se pone en contacto con el líquido dentro de una torre empacada que tiene como característica la de ser capaz de absorber uno de los gases de dicha

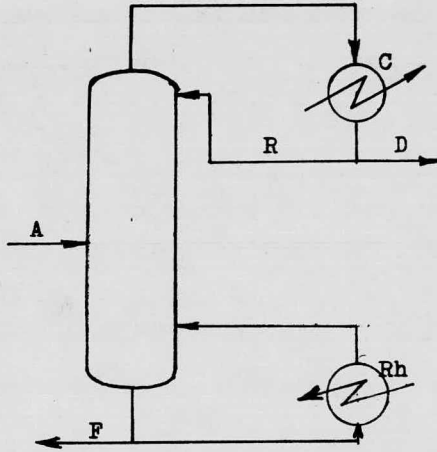


FIG. I. 3b .- Torre de Destilación
con los productos diferentes

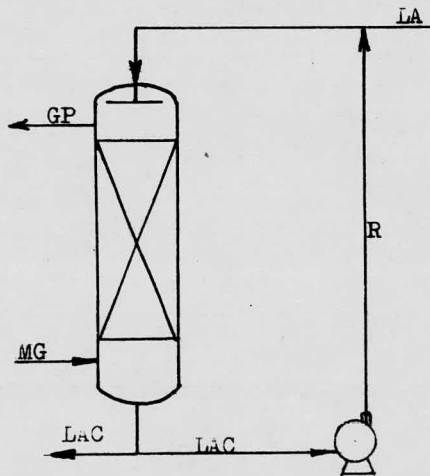


FIG. I. 4a .- Absorción de gas
con recirculación.

mezcla. Se pueden tener dos opciones para aplicar la recirculación: I.- Recircular parte del líquido contaminado con el gas, para formar una mezcla de baja concentración con el líquido absorbente de repuesto, la cual se introduce como líquido de absorción. Esto se representa en la figura I.4a.

2,- Recircular la totalidad del líquido absorbente después de que ha pasado por un sistema de purificación. Esto se representa en la figura I.4b.

La nomenclatura es la siguiente:

MG	Mezcla de gases
GP	Gas purificado
LĀ	Líquido absorbente
LAC	Líquido absorbente contaminado
SG	Subproducto gaseoso
SP	Sistema de purificación

I.1.1e) Extracción líquido - sólido.- En esta operación, la materia prima sólida pasa a través de la columna de extracción pro medio de dispositivos especiales y es puesta en contra corriente con el líquido solvente puro y el solvente recirculado que viene del sistema de concentrado de la sustancia extraída. Como este sistema de concentrado puede tener varias formas, se representa por un bloque.

Este sistema podría ser un evaporador, un cristizador, etc., esto dependerá de la naturaleza de las materias que se

estén manejando.- La figura I.5 representa un esquema de este proceso.

La nomenclatura es la siguiente:

DE	Desecho
MP	Materia prima
TE	Torre de extracción
SC	Sistema de Concentrado
SR	Solvente recirculado
SP	Solvente puro
P	Producto

I.1.1f) Extracción líquido-líquido.- Esta operación involucra dos fases líquidas. En el caso más simple un soluto es removido de fase (el refinado) por solución dentro de otra fase (extracto). En la mayoría de los casos la situación se complica, por la solubilidad parcial mutua de los dos solventes. Cuando las dos fases líquidas son fácilmente separables, se pueden usar columnas de platos perforados.

Cuando las dos fases líquidas tienen densidades aproximadamente iguales o tienden a emulsificarse, se emplean extractores centrifugos. Otro tipo común de equipo para extracciones es el mezclador reposador. En este aparato se mezclan completamente las dos fases líquidas por medio de un agitador o por mezclado a chorro, después las fases son separadas por gravedad o por fuerza centrífuga. Muchas veces es necesario tener varios de

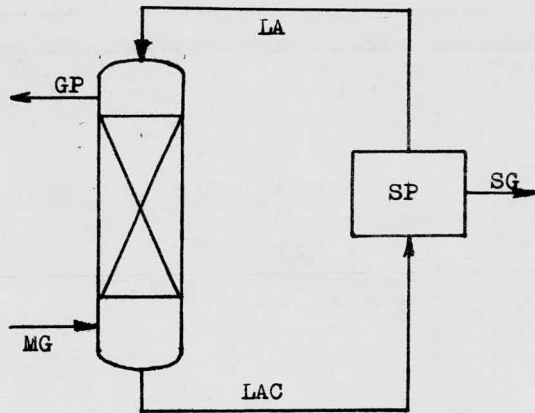


FIG. I. 4.b .- Absorción de gas con recirculación total de líquido absorbente .

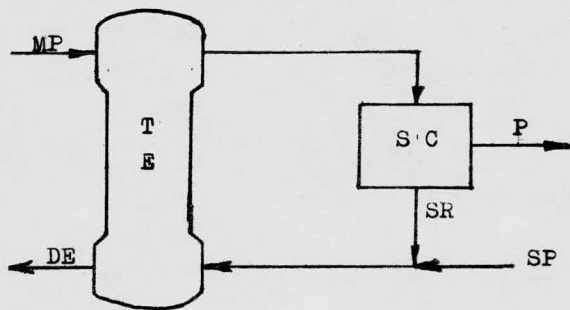


FIG. I.5 .- Torre de extracción líquido - sólido con recirculación de solvente.

estos equipos conectados en serie, con lo cual se tiene recirculación de una de las corrientes. Esto se hace para obtener una separación mayor. La fig. I.6 representa un sistema de dos mezcladores-reposadores en serie.

Nomeclatura

EFL	Entrada fase ligera
EFP	Entrada fase pesada
RFL	Recirculación fase ligera
SFL	Salida fase ligera
SFP	Salida fase pesada

I.1.1g) Cristalización.- La cristalización es una operación por medio de la cual se precipita soluto de una solución concentrada en forma de cristales. Se pueden tener tres formas de obtener tres formas de obtener estos cristales:

1.- Precipitación de cristales por enfriamiento de una solución.

2.- Precipitación de cristales por evaporación de una solución.

3.- Precipitación de cristales por enfriamiento o evaporación adiabáticos. Este tipo de precipitación se lleva a cabo al vacío.

En esta operación se tiene que recircular hacia un evaporador, el residuo del cristizador con el propósito de cristalizar todo el producto.

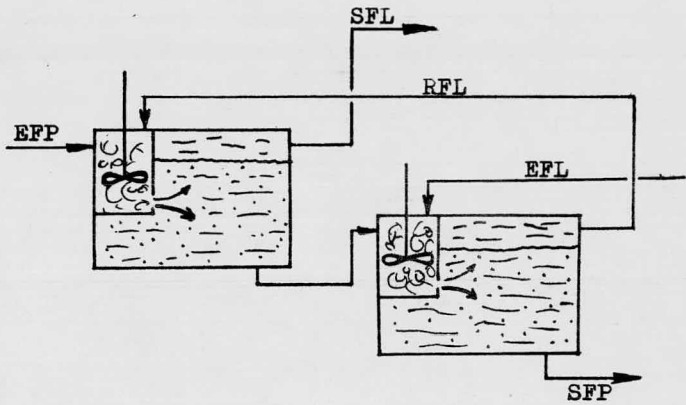


FIG. I.6 .- Extracción líquido-líquido con recirculación de la fase ligera .

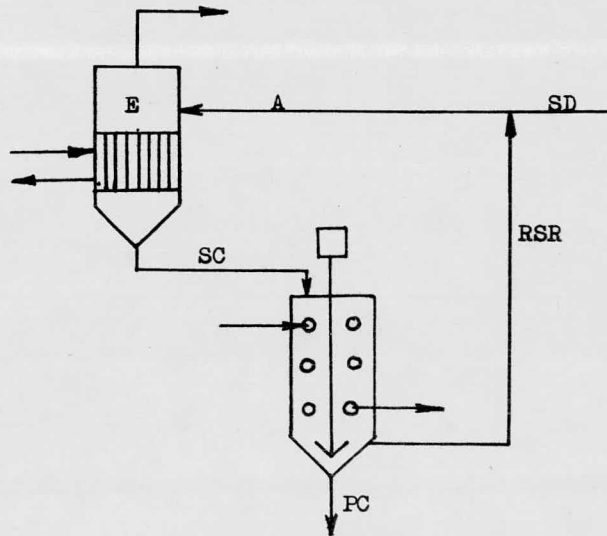


FIG. I.7 .- Cristalización con Recirculación

Un esquema de esta operación se representa en la fig.1.7

Nomenclatura:

E	Evaporador
SC	Solución concentrada
SD	Solución diluida
PC	Producto Cristalizado
RSR	Recirculación de Solución Residual
A	Alimentación al Evaporador

I.1.1h) Lavado.- La figura I.8 representa un sistema de desengrasado de material en el cual se recircula el solvente - después de que ha pasado por un sistema de purificación. La recirculación se hace con el propósito de aprovechar al máximo - el solvente utilizado.

Nomenclatura:

ML	Material limpio
MS	Material Sucio
SP	Sistema de Purificación
RS	Recirculación de Solvente
SR	Solvente de Repuesto
CD	Corriente de Deshechos

I.1.1j) Evaporación Flash.- En esta operación se introduce una corriente caliente de mezcla líquida a un tanque en - donde hay una presión inferior a la de la corriente con lo que se logra que los componentes más volátiles se vaporizen y se---

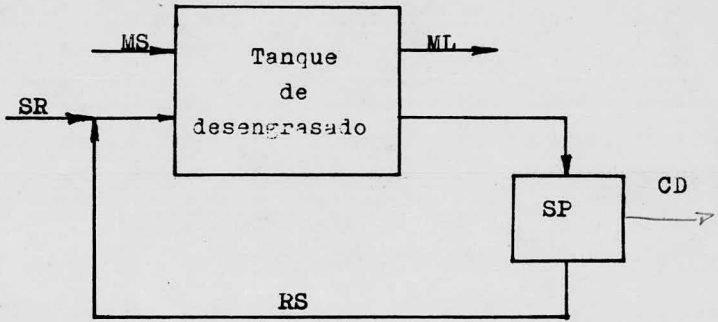


FIGURA I.8

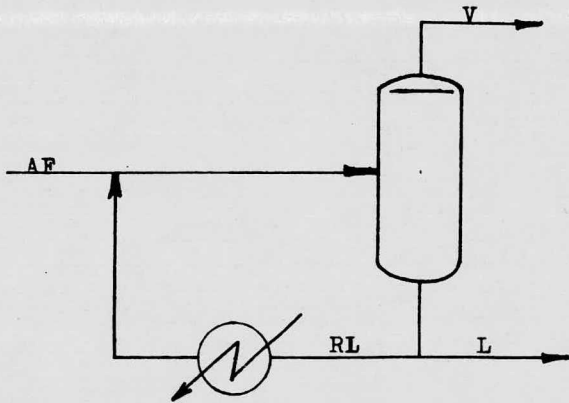


FIGURA I.9 .- Evaporación Flash con recirculación.

separén de los menos volátiles. En esta operación se puede recircular una parte de la corriente líquida con el objeto de calentarla y después unirla a la alimentación fresca. De esta manera la energía requerida para la evaporación es introducida al sistema por calentamiento de la corriente de recirculación. La figura I.9 es una representación de este sistema.

Nomenclatura:

AF	Alimentación fresca
L	Líquido
RL	Recirculación de líquido
V	Vapor

I.1.1k) Recirculación para la recuperación de energía.-

En la mayoría de los procesos industriales se tienen -- siempre corrientes de productos que salen a altas temperaturas es decir que tienen cierto contenido de energía. Para no desperdiciar esa energía en forma de calor, es posible recircular esas corrientes de producto para utilizarlas en intercambiadores de calor en donde precalientan las corrientes de entrada.- Esta es una de las formas más fáciles de ahorrar grandes cantidades de dinero en la operación de un proceso ya que la producción de energía calorífica tiene un costo elevado dentro de -- la economía del mismo. La figura I.10 representa un arreglo este tipo

Nomenclatura:

A	Alimentación
C	Condensador
R	Reflujo
RPF	Recirculación de producto de fondo
P	Precalentador
T_1, T_2, T_3, T_4	Temperatura de cada una de las corrientes del precalentador.
TD	Torre de destilación.

I.1.11) Cromatografía.- En este proceso (fig. I.11), un transportador fluido, el cual puede ser un gas (GC) o un líquido (LC), fluye continuamente a través del sistema. Periódicamente, el material alimentado que va a ser separado es inyectado durante un periodo controlado de tiempo en la columna de separación. Entre más fuerte es la interacción entre el empaque y la alimentación, más lentamente un componente es arrastrado a través de la columna por el transportador. Seleccionando apropiadamente el material de empaque, es posible encontrar interacciones de fuerza diferente para los componentes inertes. Esto conduce a velocidades de paso diferentes en el interior de la columna, y entonces a la separación.

Conforme pasan a través de la columna, los componentes se separan en bandas discretas, dado que, la columna es suficientemente larga. Al salir de la columna, cada componente es detectado y enviado a unidades individuales que aíslan el com-

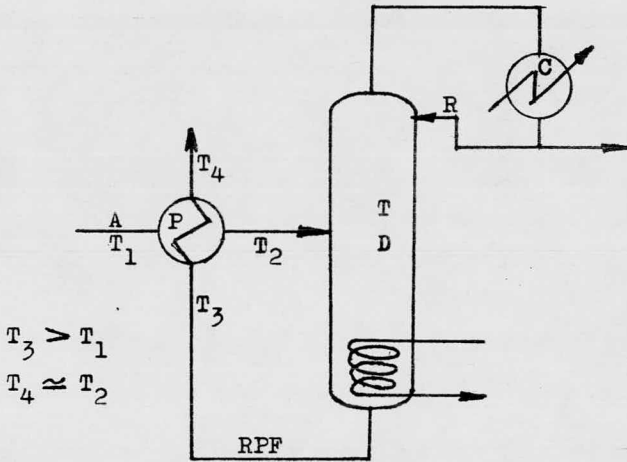


FIG. I. 10 .- Recirculación para la recuperación de energía .

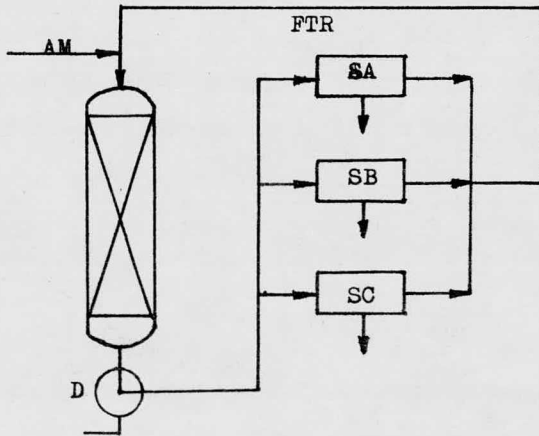


FIG. I.11 .- Separación por Cromatografía con recirculación

ponente purificado del transportador, el cual se recircula para procesar una nueva inyección en la alimentación.

El ciclo de inyección de la alimentación, tiene que --- ajustarse para introducir una nueva inyección tan cercanamente como sea posible a una inyección previa, pero en una forma que evite cualquier sobreposición entre los componentes que se mueven más rápido de la nueva inyección con los componentes que mueven más lento de la inyección previa.

En muchos casos por lo tanto, la columna de separación es capaz de procesar varias inyecciones al mismo tiempo cada una ocupando una parte diferente de la columna.

La nomenclatura en la fig.I.11 es la siguiente:

FTR	Fluido trasportador Recirculado
AM	Alimentación de la Mezcla
SA	Separación de Camponente A
SB	Separación de Componente B
SC	Separación de Componente C
D	Detector

I.1.2.- Recirculación con Reacción Química

En general un proceso con recirculación y reacción química es un proceso en el cual está incluido un reactor químico y la recirculación que se hace es por una de las siguientes razones:

- a) Cuando se usa un exceso estequiométrico de uno de los reactivos
- b) Cuando se quiere recuperar y usar un reactivo secundario
- c) Para el mejoramiento del rendimiento de una reacción
- d) Cuando hay reacciones laterales que involucran productos...

I.1.2a) Existe un exceso estequiométrico de uno de los reactivos cuando se desea que reaccione completamente el llamado "reactivo limitante" el cual por lo general es el más caro de los reactivos que se están usando. Entonces el exceso estequiométrico será del reactivo más barato. Después de que la reacción se ha completado, se separa el exceso de reactivo y se recircula con el objeto de que se aproveche al máximo. La fig I.12 representa esta situación, donde E_A es el exceso del reactivo A, B es el reactivo limitante y C es el producto.

I.1.2b) Recuperación del reactivo secundario.- Un reactivo secundario es aquel que reacciona con las materias primas de un proceso para formar un intermediario, el cual es después

Reacción :

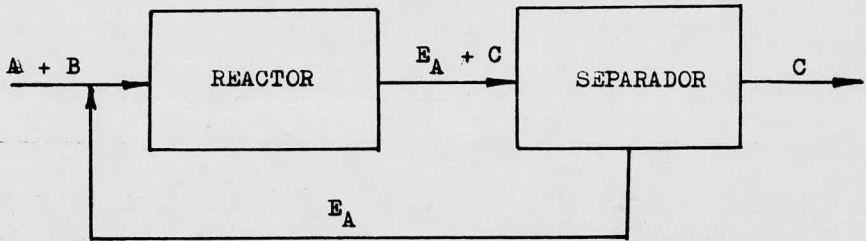
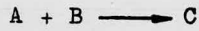
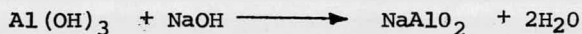


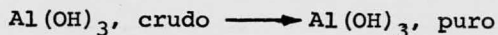
FIGURA I. 12 .- **Proceso de recirculación con Reacción Química.**

descompuesto para regenerar el reactivo secundario y un producto deseado. El reactivo secundario es recirculado y así, excepto por pérdidas, no es consumido en la operación. Un ejemplo típico de tal reactivo secundario es la sosa caústica usada en el proceso Bayer para convertir mineral de aluminio impuro, -- llamado bauxita, a un hidróxido de aluminio purificado, después de ser convertido a alúmina. La bauxita está compuesta de $Al(OH)_3$ asociado tan íntimamente con sílice, óxido de hierro, -- dióxido de Ti, y demás minerales, que la separación por medios físicos no es posible. En el proceso Bayer, la extracción se completa por el tratamiento de la bauxita con sosa caústica -- fuerte, acuosa y caliente, para formar una solución fuerte de aluminato de sodio.



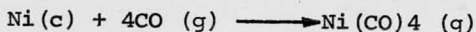
Las impurezas en la bauxita son muy insolubles en sosa caústica y permanecen precipitadas. Después de la clarificación los licores son enfriados y diluidos en agua, invirtiendo la -- reacción anterior y haciendo que una gran parte de la alúmina en la solución se precipite como $Al(OH)_3$ cristalino puro, el cual es recobrado por filtración. Los licores madres diluidos, los -- cuales contienen la sosa caústica usada en la extracción, junto con la alúmina no precipitada, son recalentados y reconcentra-- dos y retornados a los envases de extracción de bauxita para--

su reuso. Notese que la reacción total de una planta de proceso Bayer puede representarse como:



Excepto por pérdidas en los desperdicios de lavado del filtro o por derrame, no se consume sosa caústica en esta operación puesto que no aparece en alguna corriente de producto.

I.1.2.b.1.-Reactivos secundarios gaseosos.- Las reacciones donde un material sólido es gasificado por reacción con un reactivo secundario gaseoso bajo un conjunto de condiciones, seguidas por la redeposición del sólido con la regeneración del reactivo secundario bajo otro conjunto de condiciones, son también operaciones en anillos de recirculación. Entonces la producción de níquel metálico altamente purificado por el proceso Mond está basado en la reversibilidad de la siguiente reacción:



Cuando se pasa CO a 70°C y presión atmosférica sobre níquel crudo que contiene Cu, Co, etc., como impurezas, la reacción anterior procede hacia la derecha y forma carbonilo de níquel volátil, dejando las impurezas detrás. Esta reacción se invierte para depositar níquel puro cuando los gases que contienen el carbonilo son pasados a través de un lecho de níquel aperdigonado mantenido a alrededor de 180 °C. El reactivo secundario, el cual es CO en este caso, es recirculado para reuso. Esta técnica, ilustrada con una reacción inorgánica,---

también se utiliza en el campo orgánico. Así, el ácido tereftálico es purificado por conversión a metil ester el cual, a diferencia del ácido puede ser volatilizado sin descomposición. El ester destilado es entonces saponificado y el reactivo secundario específicamente metanol es recirculado.

I.1.2.b.2.- Recirculación de Catalizador.- Un caso especial de recirculación de reactivo secundario está representado por la recirculación de catalizador. Aunque por definición un catalizador no participa en una reacción química la cual él -- acelera, un catalizador aún así frecuentemente sufre deterioro químico o físico por el uso prolongado.

Así en el craking del petróleo, las partículas de arcilla tratada usadas como catalizador llegan a cubrirse de una capa de carbón cuyo espesor se incrementa conforme la reacción procede. Entonces las superficies del catalizador se vuelven altamente inaccesibles para los reactivos hasta que la reacción finalmente cesa.

En la hidratación de acetileno a acetaldehído, cuando se burbujea gas acetileno a través de una solución acuosa de sulfato mercúrico, los iones Hg^{2+} los cuales actúan como catalizador son lentamente perdidos por reducción a Hg^+ y después, a metal. Simultáneamente detiene polimeros formados los cuales interfieren con el contacto gas - líquido.

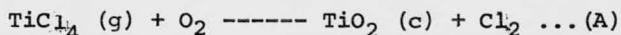
En ambas operaciones citadas anteriormente; craking ca-

talítico o hidratación de acetileno, se separa continuamente una corriente de catalizador del reactor, la cual se regenera y se retorna a la unidad. Existen muchos ejemplos similares de regeneración continua de catalizador. Tal regeneración continua por supuesto, no se practica en unidades de lecho fijo cuando se trata con catalizadores de vida relativamente larga. Bajo estas condiciones, el lote completo de catalizador es reemplazado a intervalos apropiados.

I.1.2c.) Recirculación para el mejoramiento del rendimiento.- En muchas operaciones, ya sea la constante de equilibrio, la velocidad de reacción, o ambas, son suficientemente desfavorables para que la corriente que deja el reactor contenga mucha materia prima no convertida. La recuperación y recirculación de estos reactivos no usados, en teoría, puede siempre mejorar la conversión total hasta un 100%, a pesar de la magnitud de la constante de equilibrio. Así en la síntesis de amoníaco a partir de sus elementos, una alimentación estequiométrica de 3 moles de H_2 a una de N_2 (sin material inerte), muestra una conversión en el equilibrio sobre la base de "un paso" de solamente 38% a 200 atm y 400°C. Recirculando el nitrógeno y el hidrógeno no convertidos se alcanza un rendimiento total de la planta sobre 90%. La utilización completa de las materias primas no es posible en la práctica debido a las pérdidas de hidrógeno y de nitrógeno en el anillo de recircula

culación, por solución en el producto amoniaco líquido y en la corriente de purga de gas operada para remover impurezas como argón y otras sustancias inertes.

I.1.2d).- Reacciones compuestas .- Los ejemplos de --- reacciones simples con recirculación citadas anteriormente --- tienen una característica en común, específicamente que en cada una, el reactivo secundario participa en una reacción reversible la cual puede completarse rápidamente en cualquier dirección. La reacción inversa se alcanza por alteraciones en la -- presión, temperatura o concentración, siendo estos cambios razonables dentro del alcance de las operaciones de una planta - comercial. La recuperación del reactivo secundario no es tan simple sin embargo, cuando la reacción para hacer el intermedio no puede ser invertida sin irse a condiciones extremas. Como un ejemplo considerar la producción de dióxido de titanio blanco (pigmento) del mineral rutilo (TiO_2 crudo) por el proceso cloruro. Se hace reaccionar al rutilo con cloro para formar el tetracloruro de titanio, el cual se purifica cuidadosamente por destilación, se vaporiza, y se quema a alrededor de $1000^\circ C$ con oxígeno para formar partículas de pigmento finamente divididas :



Las partículas de pigmento se separan del producto gaseoso rico en cloro el cual es entonces recirculado para que

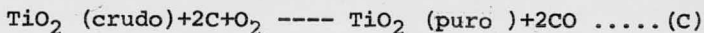
reaccione con más rutilo crudo, produciendo otra vez $TiCl_4$. Por esta operación, el TiO_2 natural, masivo y descolorido es convertido en finas partículas de tamaño controlado, alta pureza y un excelente color blanco.

Desafortunadamente la reacción (A) no puede ser invertida bajo condiciones razonablemente alcanzables, puesto que su constante de equilibrio permanece grande a muy altas temperaturas.- Adicionando coke al rutilo crudo, sin embargo, esta dificultad es sobrellevada, puesto que la constante de equilibrio para la combinación de TiO_2 con cloro y carbono es favorable a altas temperaturas:



En este proceso, por lo tanto, la reacción (A) es invertida no obstante de una constante de equilibrio desfavorable -- por combinación con una segunda reacción.

Obviamente, éste procedimiento requiere el uso del reactivo secundario (cloro), el cual es regenerado, y también de -- otro reactivo el cual es consumido. Entonces la suma de las --- reacciones (A) y (B) resulta en la siguiente reacción total:



El proceso "cloruro" para el pigmento de titanio es complicado por la ocurrencia de reacciones laterales, puesto que -- el cloro en ésta operación reacciona no sólo con el titanio en -- el mineral, sino también con impurezas tales como: hierro, mag-

nesio, etc. Los cloruros resultantes no deseados son separados del TiO_2 por destilación, pero ésto representa una fuente de pérdida de cloro para el proceso.

I.1.2e) Purga.- Las materias primas siempre contienen impurezas. En cualquier proceso si no se da una avenida de escape, entonces estas impurezas se acumularán dentro del sistema y pronto pararán la producción. Esta dificultad es quizá especialmente apta para ocurrir en un anillo de recirculación de bido a los cuidados usados para contener los reactivos secunda rios dentro del sistema. Por lo tanto, siempre tiene que hacer se la provisión de una purga para cualquier impureza o inerte introducida con las materias primas.

En las operaciones de estado estable con purga, los cálculos, frecuentemente son mejor establecidos reconociendo que todas las impurezas en la alimentación tienen que salir en la purga o en suspensión o en solución en la corriente de producto.

Esta purga puede pasarse a través de algún proceso espe cial para remover las impurezas y recobrar los componentes úti les, o puede desecharse si tal proceso de purificación es muy costoso.

I.2.- Descomposición de Procesos con Recirculación y su relación con la simulación de Procesos con Computadora.

Se ha hecho una recopilación de las operaciones unitarias y procesos unitarios en los cuales se puede tener recirculación, cuando se hacen sus balances de materia y energía, los cálculos pueden efectuarse en forma relativamente simple de acuerdo a los principios expresados en la literatura de Ingeniería Química básica.

Cuando se enlazan varias de estas operaciones y procesos unitarios, se tiene un proceso complejo el cual es difícil de calcular manualmente. En la actualidad los cálculos de procesos complejos se llevan a cabo por simulación de los mismos en una computadora.

La simulación de un proceso es su representación por medio de un modelo matemático el cual se resuelve en la computadora para obtener información acerca del funcionamiento a diferentes condiciones de operación del proceso.

La simulación de procesos por computadora es de gran importancia ya que es la forma más barata de obtener información acerca del funcionamiento de un proceso. Esta información así obtenida serviría para la optimización de un proceso que ya se tiene en funcionamiento o para el diseño de un proceso nuevo.

La mayoría de las veces el ingeniero químico tratará --

con sistema de simulación continuos, pero puede también simular eventos discretos y sistemas estocásticos.

El programa de simulación puede ser uno específico preparado para simular un proceso particular con una secuencia fija. Tal programa puede resolverse eficientemente usando técnicas numéricas sofisticadas puesto que la simulación puede tratarse como un problema matemático con ecuaciones y restricciones totalmente definidas.

Un tipo más ampliamente aceptado de programa de simulación es el que se construye usando una aproximación modular. De acuerdo a este método cada etapa de procesamiento químico se representa como un modelo matemático separado llamado módulo de unidad. Los módulos de unidad están conectados por conjuntos de datos, los cuales representan las corrientes de materia y energía que fluyen entre las unidades de la planta.

El flujo de información entre los módulos de unidad se supervisa con un programa ejecutivo.

Aunque un programa específico puede usarse más eficientemente desde el punto de vista computacional, el uso de programas específicos se limita a casos especiales debido a su falta de flexibilidad.

Un programa de simulación puede usarse para simulación dinámica o para simulación en el estado estacionario. En el primer caso la operación de la planta se simula variando el --

tiempo. En el segundo caso tiene que hacerse el balance de materia y energía con la planta operando en el estado estacionario.

La simulación dinámica es la más complicada y computacionalmente cara de las dos.

Es característico del método de aproximación modular -- que todas las entradas del sistema y los parámetros de diseño para las unidades estén especificados. El flujo de información en el programa de simulación es en la misma dirección del flujo de calor y de material de la planta química.

La distinción entre programas de simulación y programas de diseño ha sido discutida por Forder y Hutchinson (5) y los sistemas a los que se hace referencia aquí, caen en ambas clases idealmente, en el método de cálculo del diseño, las entradas del sistema y/o parámetros de diseño son calculados a partir de salidas especificadas.

Los cálculos de diseño se hacen frecuentemente por simulación iterada.

La simulación iterada puede hacerse sobre un proceso -- completo con el enlistamiento de los casos a ser computados o puede ser interna para la simulación a través del uso del bloque de control. El método último, es realmente un programa híbrido entre la simulación y el diseño.

Los bloques de control iteran subsistemas que consisten

de uno o más módulos de proceso para la manipulación específica de las variables de diseño impuestas a priori por el usuario tales como relaciones de componente, grado de vaporización, --- temperatura, cantidad total de una corriente, o recuperación de un producto como en la destilación o la absorción. Obviamente--- hay al menos dos clases de variables de diseño.

Aquellas que se fijan por factores no económicos y deri-vados de restricciones físicas y químicas y aquellas que pueden ser manipuladas libremente sobre las bases de la economía total del proceso. Por ejemplo una variable que siempre se restringe--- en una simulación de proceso es la presión.

Uno puede calcular caídas de presión en varios puntos -- del sistema de acuerdo a las condiciones operantes de la corrien--- te. Sin embargo en otros puntos uno tiene que restaurar los da--- tos de presión vía una bomba/compresor y válvula/expansor. De--- otro modo la simulación no tiene significado.

Algunos programas de simulación de proceso ejecutan optimización, dimensionamiento de equipo o evaluación económica. En muchos casos, la conexión entre los programas que ejecutan es--- tas tareas y el programa de simulación de un proceso es débil.--- Puesto que la simulación de procesos en el estado estacionario--- es la más ampliamente usada, la discusión se limita a este tipo.

En un simulador de proceso típico, los datos de entrada--- contienen la topología del proceso, los parámetros de diseño y---

operación de unidades, y la composición y estado de las corrientes de alimentación al proceso así como quizá alguna estimación de las corrientes de recirculación. Esto se lee y se verifica en la subrutina de entrada al simulador de procesos. Los datos de entrada se transfieren al programa ejecutivo el cual determina el orden de cálculo.

Entonces el programa ejecutivo llama a las subrutinas de módulos de unidad de acuerdo a este orden y pasa la información de entrada requerida para estas subrutinas. Cuando se detectan una o más corrientes de recirculación, el programa ejecutivo da un valor inicial estimado para la composición y variables de estado de las corrientes que no pueden conocerse de antemano y procede a obtener los valores correctos para estas corrientes por algún método iterativo.

Las subrutinas de módulos de unidad calculan la salida física de las unidades cuando la entrada física y los parámetros de diseño de la unidad son conocidos. Para estos cálculos, las subrutinas de módulo de unidad necesitan datos físicos y termodinámicos. Estos datos se obtienen de los paquetes de propiedades físicas y termodinámicas los cuales contienen los parámetros de estimación para las propiedades requeridas.

Los parámetros de estimación son aquellos parámetros de componentes puros usados en ecuaciones de correlación para las representaciones de propiedades físicas, por ejemplo, los

coeficientes de Antoine para presión de vapor.

Después de que un proceso químico ha sido calculado -- completamente, la unidad de salida convierte la gran cantidad de información obtenida en la forma de un reporte técnico fácil de leer.

La preparación de una simulación por computadora se -- controla generalmente por el requerimiento de que el programa sea capaz de resolver la mayoría de los problemas con exactitud tolerable para un costo razonable en tiempo de computadora. El estado de este arte es tal que es posible frecuentemente ejecutar un gran número de simulaciones y alcanzar aún los requerimientos anteriores. Sin embargo, hay situaciones de simulación de procesos donde es completamente difícil hacerlo.-- No obstante el uso juicioso de un paquete de simulación puede incrementar grandemente la productividad de ingeniería.

El diseño de un programa de simulación de un proceso -- tiene tres grandes aspectos, los cuales se pueden clasificar-- como sigue:

1.- Procesamiento de Datos.- Comprende todas las tareas que tratan con los datos de entrada mismos, los mejores métodos para probarlos, almacenarlos, recuperarlos y la posibilidad de cambiar los datos en un medio iterativo.

2.- Modelos de Ingeniería.- La preparación de un mode+lo matemático exacto de las unidades de un proceso químico y-

la preparación de buenas correlaciones para propiedades físicas y termodinámicas requiere un conocimiento profundo de los procesos químicos.

3.- Procedimientos Numéricos.- Estas situaciones aparecen en los algoritmos o métodos de ordenamiento de los cálculos de las unidades, en los cálculos de recirculaciones y también en la solución iterativa de los módulos de unidad más complicados.

Este es el punto con el que se relaciona el presente -- trabajo.

I.2.1.- Representación de módulos de unidad interconectados

El diagrama de flujo de proceso ha sido reconocido durante mucho tiempo como una representación útil de un proceso. En él están incluidas las representaciones de ciertas piezas - de equipo y sus interconexiones.

La figura I.13 representa el diagrama de flujo de un -- proceso. Como se dijo antes para la simulación por computadora, es conveniente representar las unidades en un diagrama de flujo por subrutinas de computadora o módulos de unidad interconectados. Estos módulos tienen una naturaleza suficientemente general para que al unirlos puedan representar una amplia variedad de diagramas de flujo. Puede no haber sin embargo, una correspondencia uno a uno entre diagrama de flujo y su representación de módulos interconectados. El módulo se escribe generalmente para describir las corrientes de salida de un módulo como una función de las corrientes de entrada de mismo, o sea que representa el flujo de información del proceso.

Por ejemplo: un módulo que es una representación de una columna de destilación calcularía las corrientes de productos de domo y productos de fondo como una función de las corrientes de alimentación. Las condiciones del equipo o proceso fijaría el número de platos, la relación de reflujo y cualquier otra condición necesaria (los parámetros del bloque) para determinar completamente las corrientes de salida.

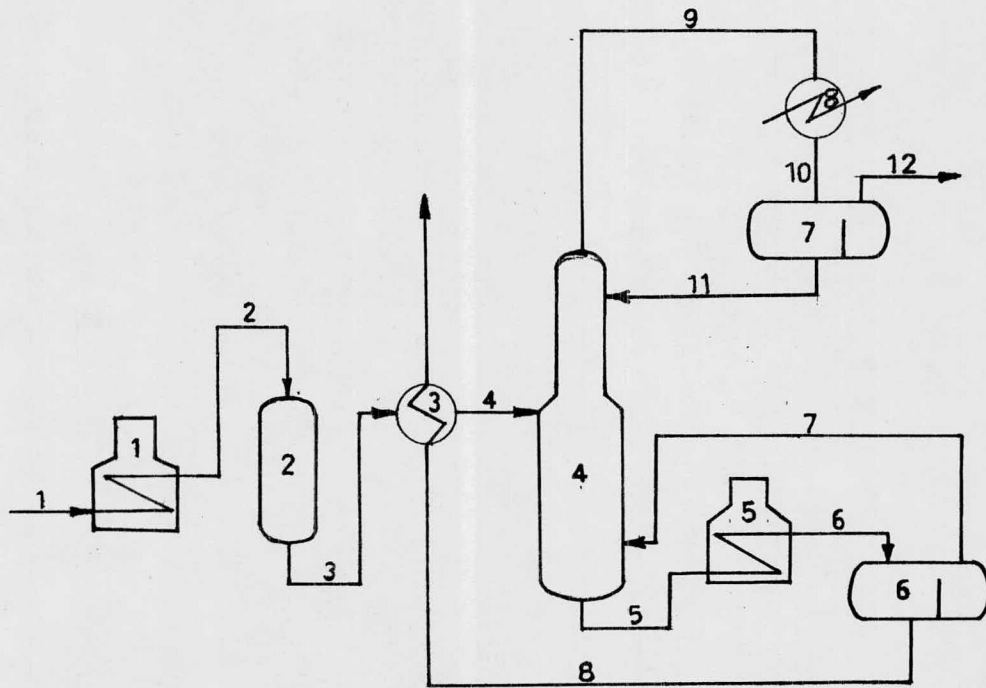


FIG. I.13.- Diagrama de flujo de un proceso químico

Un módulo de unidad puede simular también una operación muy simple, un mezclado de dos corrientes por ejemplo o puede ser simplemente un calentador que cambia la temperatura de una corriente, etc. En el módulo de unidad se pueden incorporar va rios grados de rigos ya que puede representar por ejemplo un método corto o un método largo para simular una destilación.

En la figura I.14 se tiene la representación de módulos de unidad interconectados del proceso de la figura I.13. La -- cual es un diagrama de bloques en donde cada bloque representa un modulo de unidad.

I.2.2.) Definiciones de Rompimiento y Particionamiento de un proceso con recirculaciones.- Si un proceso no contiene ninguna recirculación de material o de información, puede simularse facilmente calculando secuencialmente módulo tras módulo, empezando por aquel que recibe unicamente alimentacio-- nes conocidas. Pero cuando se encuentran corrientes la recirculación, se presenta el problema de que no se conocen estas corrientes de antemano.

Un proceso de cálculo directo se muestra en la figura I.15. Empezando con la corriente C1 especificada, se pueden -- calcular los módulos B1, B2, B6 determinando secuencialmente la corrientes en el siguiente orden C2, C3 y C6, -- C4, C5, C7 y C8.

Cuando los anillos de recirculación están presentes no

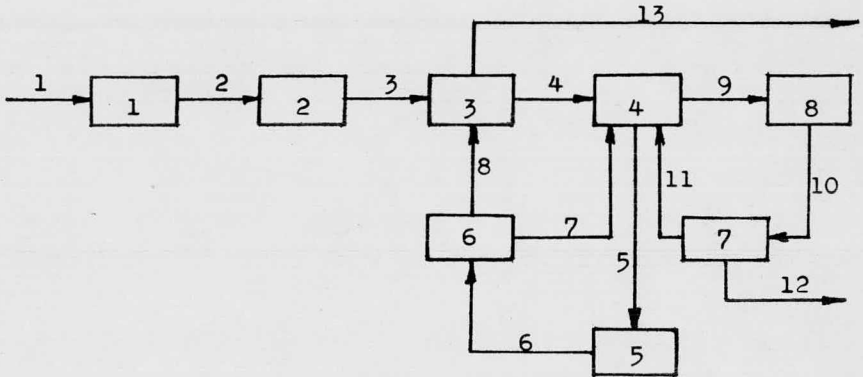


FIG. I.14.- Representación de módulos de unidad interconectados del diagrama de flujo de la FIG. I.13.

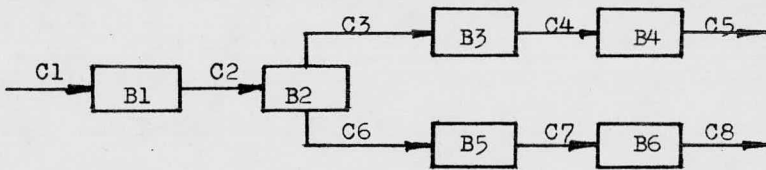


FIG. I.15

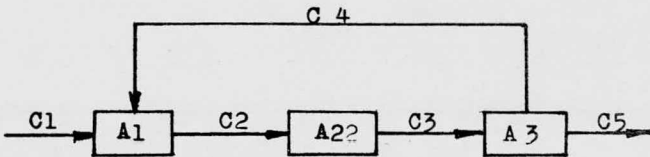


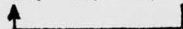
FIG. I.16.- Proceso con anillo de recirculación

se pueden llevar a cabo los cálculos en forma directa. Considerar por ejemplo la fig. I.16. Aunque la corriente C1 es conocida, el módulo A1 no se puede calcular puesto que la corriente C4 no es conocida. Entonces para hacer los cálculos del módulo A1 se debe suponer el valor de la corriente C4 y de esta manera empezar a calcular el bloque A1. Al procedimiento de suponer los valores de algunas o todas las variables de una corriente con el objeto de calcular otras corrientes de un proceso químico se le llama "ROMPIMIENTO DE LA CORRIENTE DE PROCESO".

Después de romper la corriente C4 se pueden calcular sucesivamente C2, C3, C4 y C5 por medio del cálculo de los módulos A1, A2, A3. Puesto que los valores de la corriente C4 originalmente supuesta no serán los mismos que los de la corriente C4 calculada, el proceso de cálculo no ha terminado. De aquí que se tiene que reetiquetar la corriente C4 calculada como C6 e insertar un "módulo de convergencia", en el lugar donde se rompió C4 como se muestra en la fig. I.17. La ventaja de hacer esto es que se puede tratar al módulo de convergencia como otro módulo de unidad interconectado. Su función es forzar a la corriente C4 (corriente de salida) a ser igual a la corriente C6 que es una corriente de entrada. Dentro del módulo de convergencia, se comparan C6 y C4, si han convergido es decir si son iguales o cercamente iguales den--

tro de cierta tolerancia, el proceso de cálculo habrá terminado, si no se reestima C4 y se retorna a calcular A1.

El orden en el cual se resolverían los módulos interconectados después de estimar C4 sería: A1, A2, A3, A4.



Para la convergencia de las corrientes dentro del módulo de convergencia se podría utilizar cualquiera de los métodos conocidos, el más sencillos de los cuales el de sustitución directa, que consistirá en dar a la corriente C 4, el valor de la corriente C 6 y entonces empezar a calcular A1.

Otros métodos que podría incluir éste módulo de convergencia sería por ejemplo: el método de Newton Raphson, el método de Wegstein, etc. Que son métodos que sirven para acelerar la convergencia.

Cuando los procesos con recirculación son grandes pueden dividirse en subconjuntos de redes cíclicas máximas, es decir: que cada subconjunto se puede resolver en un orden determinado. El proceso de la Fig. I. 18. por ejemplo: es un proceso que puede dividirse en un subconjunto A consistiendo de los módulos A1, A2, A3, A4; y el subconjunto B, consistiendo de los módulos B1, B2 y B3. Empezando con la corriente C1, se puede resolver primero el subconjunto A, cortando sus correspondientes corrientes de recirculación, lo cual daría la corriente C 7, y entonces se procedería a resolver el subconjunto B.

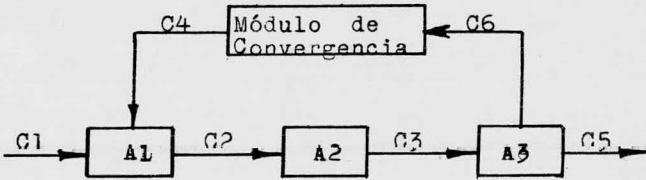


FIG. I.17.- Inserción del módulo de convergencia

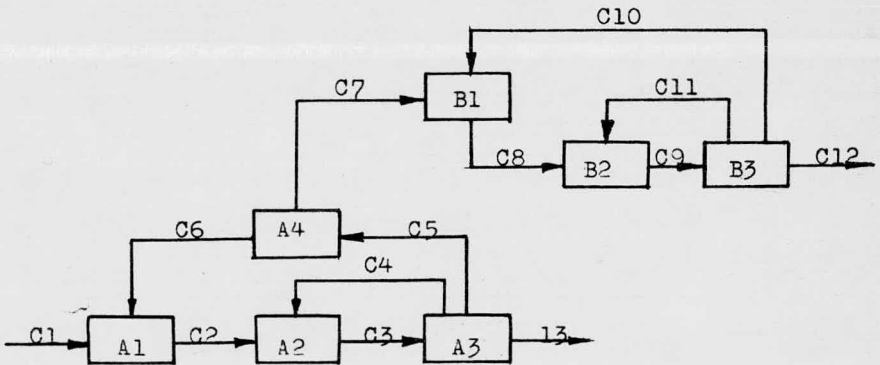


FIG. I.18.- Particionamiento de un proceso con más de un anillo de recirculación

Al proceso de identificación y ordenamiento de las redes cíclicas máximas y de los módulos que no están incluidos en tales redes se le llama "PARTICIONAMIENTO".

El particionamiento es usualmente obvio cuando se conoce y se inspecciona adecuadamente un proceso, pero se han desarrollado métodos para cuando se necesita particionar un proceso complejo, los cuales se discutirán en otro capítulo.

El rompimiento generalmente es más difícil que el particionamiento. Ya que muchas veces es necesario romper dos o mas corrientes simultaneamente. Como se verá esto llevaría mucho del tiempo requerido para efectuar el cálculo de un proceso.

Se han propuesto un número de métodos para reducir el esfuerzo requerido para los cálculos de recirculación, que se basan en diferentes criterios los cuales se discutiran en las siguientes secciones de este trabajo.

CAPITULO SEGUNDO

METODOS DE DESCOMPOSICION DE LOS PROCESOS CON RECIRCULACIONES

II.1.- Localización de los anillos de recirculación dentro de un proceso.

II.1.a.)- Teoría de gráficas.- La teoría de gráficas proporciona una de las bases importantes para localizar los -- anillos de recirculación dentro de un proceso complejo, esta es la razón de que se haga mención de ella.

Una gráfica finita dirigida $G(V,E)$ es una colección finita de nodos V cuyos elementos están unidos por un conjunto finito de arcos dirigidos E . Dos nodos v_i y v_j de V están unidos por un arco dirigido e_{ij} si y solo si el arco e_{ij} se origina en v_i y termina en v_j . El nodo v_i se refiere como un predecesor inmediato de v_j y v_j es un sucesor inmediato de v_i . El conjunto de todos los sucesores inmediatos a un nodo v se llama el mapeo de v por una función T y se denota por $T(v)$. Conversamente el conjunto de todos los predecesores a v se denota por el mapeo inverso $T^{-1}(v)$.

Una trayectoria entre dos nodos v_{i0} y v_{in} en $G(V,E)$ es una colección ordenada de arcos dirigidos e_{i0i1} , e_{i1i2} , . . . $e_{in-1 in}$ tal que e_{i0i1} se origina en v_{i0} y $e_{in-1 in}$ termina en v_{in} .

Como cada arco está dirigido hacia un nodo, una senda es llamada simple si no encuentra a un mismo nodo dos veces, y cíclica si se origina y termina en el mismo nodo, esto es $v_{i0} = v_{in}$. Un anillo simple es una trayectoria cíclica simple con salida estimada en sus puntos finales. Una gráfica cíclica es un subconjunto de $G(V,E)$ tal que aquí existe una trayectoria simple dentro del conjunto de cualquier nodo a otro nodo.

Puede demostrarse fácilmente que una gráfica cíclica contiene al menos un anillo simple. Un anillo cíclico es máximo si y solo si es cíclico y contiene todas las demás gráficas cíclicas como sus subgráficas. Si una gráfica no contiene un anillo simple, es llamada acíclica.

El entrada-grado $\delta^+(v)$ de un nodo v en $G(V,E)$ es el número de arcos dirigidos hacia él, y su grado-salida $\delta^-(v)$ es el número de arcos dirigidos a la salida de v . La suma de los arcos de entrada y los arcos de salida es llamada el grado de v y se denota por $\delta(v)$.

II.1.b).- Particionamiento de un Proceso o Localización de los anillos de Recirculación.

Los algoritmos o métodos matemáticos que se han propuesto para localizar anillos de recirculación dentro de un proceso se dividen principalmente en dos grupos:

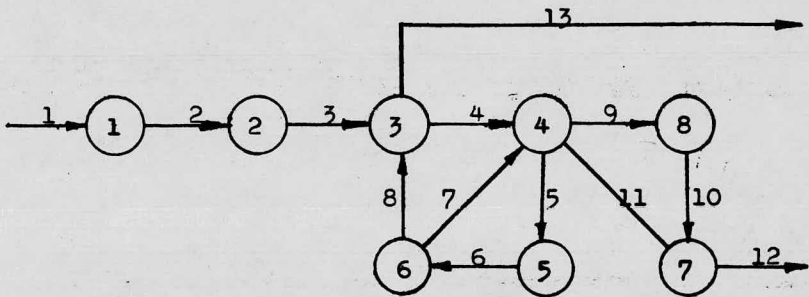


FIG. III.1 .- Digráfica del diagrama de flujo de la
FIG. I . 13 .

Grupo I.- Algoritmos que trabajan trazando las trayectorias del proceso por medio del manejo de listas formadas con la información de la matriz de proceso la cual contiene información de las entradas y salidas de la unidad de proceso codificados con letras y números principalmente.

Entre estos algoritmos estan el de Sargent y Westerberg (1965), Steward (1965), Billingsley (1967) y no se discuten a fondo en este trabajo.

Grupo II.- Algoritmos que trabajan con la matriz adyacente y la matriz de alcance (reachability) del proceso.

Este grupo está representado específicamente por el algoritmo de Norman (1965), el cual ha sido modificado varias veces: Himmelblau (1966), Ledet y Himmelblau (1970), R.S. H Mahw (1974).

El algoritmo de Norman es como sigue:

Para los propósitos del particionamiento, el diagrama de flujo de información se presenta por una gráfica dirigida o digráfica, en la cual el equipo químico se representa por nodos, y las corrientes por arcos dirigidos. Una digráfica del diagrama de flujo de información de la fig. I.13 se representa en la fig. II.1.

El siguiente paso consiste en formar la matriz adyacente R , la cual es una matriz cuadrada $n \times n$, donde n es el número de unidades de proceso y cuyos elementos r_{ij} son iguales a 1 -

si existe flujo de la unidad i a la unidad j y son iguales a -
cero si no lo hay.

Si se calcula la K -ésima potencia de la matriz R usando
el algebra booleana de modo que:

$$a + b = a \cup b = \max(a, b) \quad \text{ó} \quad 1+1 = 1$$

y

$$a \cdot b = \min(a, b) \quad \text{ó} \quad 0 \cdot 1 = 0$$

y teniendo en cuenta además que la multiplicación Booleana es -
distributiva con respecto a la unión booleana; esto es

$$c \cdot (a \cup b) = (c \cdot a) \cup (c \cdot b)$$

donde los paréntesis sobre el lado derecho usualmente se omiten
entendiendose que las multiplicaciones se ejecutan antes que -
las uniones a menos que los paréntesis indiquen otra cosa.

También la unión Booleana es distributiva con respecto-
a la multiplicación Booleana, esto es:

$$a \cup (b \cdot c) = (a \cup b) \cdot (a \cup c)$$

pero aquí los paréntesis no pueden removerse sobre la derecha-
sin ambigüedad.

La multiplicación de matrices booleanas se lleva a cabo
de acuerdo a las reglas de matrices usuales, expresada en tér-
minos del producto y la suma lógica como se definieron anterior-
mente.

Entonces los elementos c_{ij} de la matriz $C = A \cdot B$ se encuentran por la fórmula

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} \cdot b_{kj}$$

dónde el símbolo operacional $\sum_{k=1}^n$ indica la unión de los términos tipificados por el producto siguiéndolo con k tomada sucesivamente como 1, 2, 3, n y n es la dimensión común -- (u orden) de las matrices A, B y C.

La nueva matriz R así formada tiene la propiedad de que si el elemento $r_{ij}^k=1$, existe una trayectoria que conecta la -- unidad i con la unidad j empleando k corrientes.

Por lo tanto si un elemento en la diagonal principal -- $r_{ii}^k=1$, existe una vía que conecta a la unidad i consigo misma -- y se puede concluir que forma parte de un ciclo.

La simplificación hecha por Himmelblau fué trabajar con la matriz $\sum_{i=1}^n R^i$ que representa todas las rutas que compren-- den K corrientes o menos conectando dos unidades del proceso -- y que tiene la propiedad de que alcanza un valor constante R^* cuando K excede un valor $L \leq n$, donde L es el número de unida-- des en el circuito más grande. Esta nueva matriz R^* se llama "matriz de penetrabilidad" o matriz de alcance dado que si el elemento $r_{ij}=1$, ésto significa que la unidad j está siendo alimentada por la unidad i a través de alguna vía entre no-- dos. Si después se cambia la dirección de todos los flujos en-

el diseño y se calcula la nueva matriz de alcance, ésta será igual a R^{*t} . Puesto que las unidades pertenecientes a un ciclo seguirán interconectadas tendrán elementos comunes en ambas matrices R^* y R^{*t} y por lo tanto la intersección $R^* \cap R^{*t}$, mostrará todas las unidades interconectadas en el mismo ciclo.

Los anillos máximos encontrados de ésta manera, están representados por aquellos conjuntos de nodos en la matriz que cumplen las siguientes condiciones:

a).- $r_{ij}=r_{ji}=1$ donde i y j toman el valor de todas las combinaciones posibles de los números de nodos en el conjunto.

b).- Ningún otro nodo, no incluido en el conjunto satisface la condición a).

La primera condición requiere que cada nodo en el conjunto se pueda alcanzar por alguna vía desde todos los demás nodos del conjunto.

La segunda condición requiere que no haya trayectoria de un nodo en el conjunto a un nodo exterior del conjunto y otra vez de regreso a un nodo en el conjunto. Si un conjunto de nodos cumple éstas dos condiciones, tiene que haber una trayectoria cerrada que pasa a través de cada nodo en el conjunto, la cual es por definición un anillo. El anillo encontrado de ésta manera es máximo porque si hubiera un anillo más grande que lo incluya, la segunda condición no sería satisfecha.

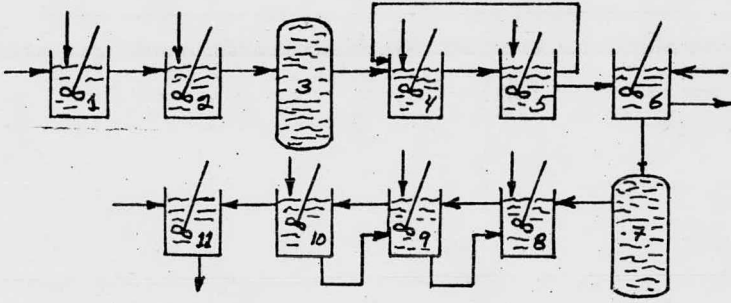


FIGURA II.2 .- Diagrama de flujo de un proceso de mezclado.

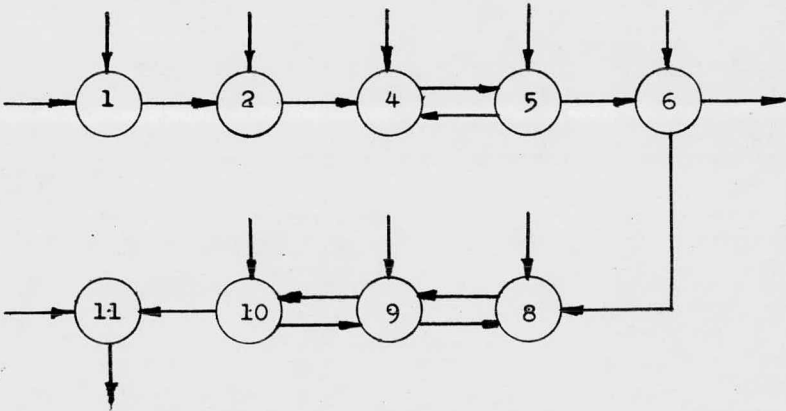


FIGURA II.3 .- Diagrama de flujo de información del proceso de mezclado de la FIG. III.2

	1	2	4	5	6	8	9	10	11
1	1								
2		1							
4			1						
5				1					
6					1				
8						1			
9							1		
10								1	
11									1

FIGURA II. 4 .- Matriz adyacente del diagrama de flujo de la Figura II.3 .

	2	4	5	6	8	9	10	11
2	1							
4		1						
5			1					
6				1				
8					1			
9						1		
10							1	
11								1

(a)

	4	5	6	8	9	10	11
4	1						
5		1					
6			1				
8				1			
9					1		
10						1	
11							1

(b)

	4	5	6	8	9	10
4	1					
5		1				
6			1			
8				1		
9					1	
10						1

(c)

FIGURA II. 5 .- Reducción de la matriz adyacente

	4	5	6	8	9	10
4	1		1			
5		1		1		
6					1	
8				1		1
9					1	
10						1

$A^2 =$

	4	5	6	8	9	10
4	1		1			
5		1		1		
6					1	
8				1		1
9					1	
10						1

$A^3 =$

FIGURA II. 6.a.- Potencias de la matriz adyacente

Para ejemplificar el procedimiento anterior considerese el diagrama de flujo de proceso en la fig. II. 2 el cual consiste de mezcladores simples y de tanques de compensación:

Su diagrama de flujo de información se muestra en la fig. II. 3 el cual se codifica normalmente con números para facilitar su cálculo.

La figura II.4 representa la matriz adyacente del diagrama de flujo de información la cual después se reduce, separando a los números de aquellas unidades que a simple vista se ve, no se encuentran dentro de los anillos de recirculación, esto se muestra en las figuras II.5a), II.5b), II.5c).

La fig. II. 6a) representa las potencias de la matriz adyacente A y la fig. II. 6 b) representa las matrices de alcance R_n que se forman con las sumas booleanas de las potencias de la matriz adyacente.

La fig. II. 6c) representa la matriz R_∞ que es la matriz de alcance infinita y que es igual a $R_n = \sum A_j$. Transponiendo R_∞ se obtiene R_∞^T que se representa en la Figura II.7a. En la matriz transpuesta como ya se dijo antes, se tienen invertidas las direcciones de los flujos de información entre los nodos. Tomando la intersección de las matrices R_∞ y R_∞^T se obtiene una matriz en la que se identifican plenamente los anillos máximos dentro del diagrama de flujo de proceso. Esta matriz se representa en la fig. II.7b).

Se han hecho modificaciones a este método con el propósito de reducir el tiempo necesario para su cálculo cuando se implementa en una computadora.

Resumiendo todo esto se tiene que:

La matriz de alcance R de una gráfica G puede definirse en términos de la matriz adyacente A.

$$R = (A + A^2 + A^3 + \dots + A^n)^* = B^*$$

Donde B denota una matriz de ceros y unos (una matriz booleana) formada de B como sigue:

$$B_{ij}^* = \begin{cases} 0 & \text{si } B_{ij} = 0 \\ 1 & \text{si } B_{ij} = 1 \end{cases}$$

Los esquemas alternativos para calcular la matriz de alcance que fueron discutidos por Ledet y Himmelblau (1970) son:

1.- Cálculo directo de las potencias de A usando álgebra Boolema. Esto es $a + b = \max(a, b)$ y $a \times b = \min(a, b)$. Para formar el producto de dos matrices en esta forma se requieren n^2 ($n + (n-1)$) comparaciones, y puesto que hay $(n-1)$ productos que se tienen que formar, se requieren aproximadamente $2n^4$ comparaciones para calcular R.

2.- Puesto que A es una matriz de ceros y unos, el renglón j del producto $(AB)^*$ es la unión de los renglones de B --

	4	5	6	8	9	10
4		1				
5	1		1			
6				1		
8					1	
9				1		1
10					1	

 $R_1 =$

	4	5	6	8	9	10
4	1	1	1			
5	1	1	1	1		
6				1	1	
8				1	1	1
9				1	1	1
10				1	1	1

 $R_2 =$

	4	5	6	8	9	10
4	1	1	1	1		
5	1	1	1	1		
6				1	1	
8				1	1	1
9				1	1	1
10				1	1	1

 $R_3 =$

	4	5	6	8	9	10
4	1	1	1	1		
5	1	1	1	1		
6				1	1	1
8				1	1	1
9				1	1	1
10				1	1	1

FIGURA II. 6.b .- Matrices de alcance

	4	5	6	8	9	10
4	1	1	1	1	1	1
5	1	1	1	1	1	1
6				1	1	1
8				1	1	1
9				1	1	1
10				1	1	1

 $R_n =$

FIGURA II. 6.c .- Matriz de alcance infinita

	4	5	6	8	9	10
4	1	1				
5	1	1				
6	1	1				
8	1	1	1	1	1	1
9	1	1	1	1	1	1
10	1	1	1	1	1	1

 $R_{\infty}^T =$

	4	5	6	8	9	10
4	1	1				
5	1	1				
6	1	1				
8				1	1	1
9				1	1	1
10				1	1	1

 $R_{\infty}^T R_{\infty} =$

	4	5	6	8	9	10
4	1	1				
5	1	1				
6						
8				1	1	1
9				1	1	1
10				1	1	1

(a)

(b)

FIGURA II. 7 .- Matriz traspuesta de la matriz de alcance infinita y Matriz intersección de la matriz traspuesta y la matriz de alcance.

correspondientes a los elementos no cero de renglón i de A . Si se usa la unión de renglones en lugar de las multiplicaciones y sumas booleanas para formar la potencia de A , el tiempo de cálculo puede reducirse tanto como un factor de cuatro de acuerdo a Ledet y Himmelblau (1970).

3.- La matriz de alcance puede expresarse también como

$$R = (A (I + A^2 + \dots + A^{n-1}))^* = [A(I+A)^{n-1}]^*$$

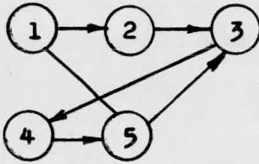
y puesto que no se generan elementos no cero adicionales en potencias de A más altas que A^n en lugar de calcular $(I+A)^{n-1}$ se podría también calcular $(I+A)^p$ tal que $p = 2^m \geq n-1$

Si se utiliza la elevación al cuadrado sucesivamente $m \geq \log_2 (n-1)$. Entonces el número total de operaciones requeridas para calcular R es aproximadamente $I/2 n^3 \log_2 n$.

4.- En 1974 R.S.H. Mah propuso una aproximación alternativa que consiste en aumentar G sucesivamente por medio de la adición de un arco. Cuando una trayectoria es descubierta entre dos nodos G . Después de que tales posibles arcos han sido adicionados, la gráfica aumentada corresponderá a la matriz de alcance R .

El plan general del esquema para el aumento sistemático de arcos es como sigue:

Sea la matriz $C^{(i)}$ que denota la matriz adyacente de la gráfica aumentada después de i pasos. Entonces se define



" G "

	1	2	3	4	5
1		1			1
2			1		
3				1	
4					1
5		1			

 $C^{(0)} = A$

	1	2	3	4	5
1		1			1
2			1		
3				1	
4					1
5		1			

 $C^{(1)}$

	1	2	3	4	5
1		1	1		
2			1		
3				1	
4					1
5		1			

 $C^{(2)}$

	1	2	3	4	5
1		1	1	1	
2			1	1	
3				1	
4					1
5		1			

 $C^{(3)}$

	1	2	3	4	5
1		1	1	1	
2			1	1	
3				1	
4					1
5		1	1	1	

 $C^{(4)}$

	1	2	3	4	5
1		1	1	1	
2			1	1	
3				1	
4					1
5		1	1	1	

 $C^{(5)} = R$

FIGURA II.8 .- Aplicación del algoritmo de aumento de arcos

$$C^{(0)} = A$$

$$C_{jK}^{(i)} = \begin{cases} 1 & \text{si } C_{ji}^{(i-1)} = 1 \text{ y } C_{iK}^{(i-1)} = 1 \\ C_{jK}^{(i-1)} & \text{de otro modo} \end{cases}$$

Si esta ecuación se aplica sucesivamente a $i = 1, 2, \dots, n$ se demanda que

$$C^{(n)} = R$$

En cada paso de este algoritmo se hacen $2(n-1)$ comparaciones para buscar los elementos no cero en el renglón i de la columna i , y se hacen s^2 asignamientos para el aumento de arco, donde $s = n-1$. De aquí que para calcular R usando este procedimiento se requirieran $2n(n-1) + ns^2$ operaciones.

La aplicación de este algoritmo a un ejemplo simple se ilustra en la figura II.8, la cual muestra una gráfica de diagrama de flujo G , su matriz adyacente $C^{(0)} = A$, las matrices aumentadas sucesivamente y la matriz de alcance $C^{(5)} = R$.

Para seguir más fácilmente los pasos intermedios vease lo siguiente: para obtener por ejemplo el elemento $C_{34}^{(2)}$ se comparan los elementos $C_{32}^{(1)} = 0$ y $C_{24}^{(1)} = 0$, como son elementos iguales a cero entonces $C_{34}^{(2)} = C_{34}^{(1)} = 1$. Para obtener el elemento $C_{25}^{(4)}$ se compararon los elementos $C_{24}^{(3)} = 1$ y $C_{45}^{(4)} = 1$. De esta forma se calculan todos los demás elementos de las matrices aumentadas.

Todas las modificaciones estudiadas simplifican los cálculos necesarios para obtener la matriz de alcance R . El procedimiento para identificar los anillos máximos permanece igual.

II.2) Rompimiento óptimo de los circuitos de Recirculación.

El objeto de los diferentes algoritmos o métodos de rompimiento de los circuitos de recirculación de un proceso es encontrar un orden de computación óptimo, tal que este orden de computación conducirá a la solución de un sistema recirculado, con los mínimos requerimientos de almacenamiento en la computadora y el mínimo tiempo de computación.

Existen tres criterios diferentes para el rompimiento: -

- a) Requerimiento del número mínimo de corrientes de rompimiento.
- b) Requerimiento del número mínimo de variables de corte.
- c) Requerimiento del número mínimo de factores de peso para las corrientes de corte.

Para el primer criterio se toma en cuenta solamente el número de corrientes, para el segundo se toma en cuenta también el número de variables de cada corriente. Para el tercer criterio, se adicionan factores de peso a las diferentes corrientes o a los diferentes conjuntos de corrientes de acuerdo a la sensibilidad estimada del cálculo del proceso para esas corrientes.

Ninguno de estos criterios ha probado ser óptimo para todo tipo de aceleración de la convergencia.

De hecho Shachan y Motard (1974) mostraron que el número mínimo de corrientes de corte o el número mínimo de variables -

de corte no conduce necesariamente a una convergencia más rápida por el metodo de sustitución directa.

La sensibilidad a la aceleración de la convergencia de las diferentes corrientes de corte. La cual se requiere para el tercer tipo de criterio no es absolutamente definitiva.

Una experiencia reportada para encontrar las corrientes de corte menos sensitivas, fué hecha por Genna y Motard (1973). En este experimento preliminar, el procedimiento para localizar las mejores corrientes de corte puede consumir más tiempo que la solución del sistema recirculado total, puesto que se requiere una estimación del valor propio máximo del Jacobiano para varios conjuntos de corte alternados. Sin embargo Upadhye y Grens (1975) mostraron conclusivamente que el conjunto óptimo de corte, puede identificarse por el metodo de sustitución directa -- por un criterio a priori. El conjunto óptimo de corte pertenece a una familia de conjuntos de corte caracterizada como no redundante en relación a una regla llamada teorema de remplazamiento.

Obviamente aunque los dos primeros criterios mencionados no son óptimos para todo tipo de convergencia, tienen que serlo para algún tipo, esto dependera de la estructura del proceso -- que se esté analizando. Por lo tanto son dignos de estudio como una base para encontrar la descomposición óptima de los procesos con recirculación.

Como se dijo anteriormente se puede asignar un factor de

peso arbitrario a cada corriente del proceso, para el criterio del número mínimo de variables de corte este factor de peso es igual al número de variables que tiene cada corriente, de aquí que se busca un orden de precedencia el cual da origen a un conjunto de corrientes de corte con la mínima suma de factores de peso.

Para el criterio del número mínimo de corrientes de rompimiento, el factor de peso de cada corriente es igual a la --
unidad.

Un procedimiento eficiente el cual no garantiza la solución del problema en todos los casos, es la técnica de simplificación directa de gráficas, propuesta primero por Sargent --
y Westerberg (1964) y después extendida por Christensen y Rudd (1969).

Esta técnica, busca reducir una grafica de diagrama de flujo de proceso a una gráfica nula por medio de la eliminación sistemática de corrientes y la fusión de nodos de tal manera que la solución del problema es inalterable.

Las simplificaciones involucran:

1) La reducción de arcos de dos vías, la cual corta los anillos de recirculación formados por dos corrientes de proceso unicamente.

2) La eliminación de corrientes de proceso las cuales son inelegibles para ser miembros del conjunto óptimo de corte.

En muchos casos considerados, la técnica resulta en una gráfica residual la cual tiene que analizarse por otras técnicas combinatorias.

Sargent y Westerberg usaron la aproximación de programación dinámica y Christensen y Rudd sugirieron examinar todas las posibles combinaciones de los nodos indicados.

Estas dos aproximaciones además de las de Rubin (27), - Forder y Hutchinson (1969), fueron analizadas y estudiadas ampliamente por Ernesto Valdez Krieg (24), (1971)

→ Valdez Krieg llegó a los siguientes resultados:

a) El ordenamiento y determinación de ciclos máximos de recirculación de información produce en todos los casos soluciones únicas.

b) La secuencia de cálculo obtenida para procesos con recirculación depende del criterio empleado para encontrarla.

c) Cualquiera que sea el criterio de optimalidad empleado para encontrar una secuencia, debe contarse con procedimientos confiables en todos los casos. ←

El algoritmo de Rubin, con su enfoque hacia un ciclo máximo de recirculación no produce resultados satisfactorios en un número considerable de casos.

d) De los algoritmos estudiados, los únicos que llevan a obtener una solución única en todos los casos son los que emplean análisis combinatorio, ya sea, encontrar una permutación de nodos correspondiente a la secuencia óptima de cálculo, o -

combinaciones de corrientes que produzcan aciclicidad en el sistema. El primer metodo, correspondiente al algoritmo de Sargent y Westerberg, puede aplicarse a diagramas con un reducido número de nodos, debido a la cantidad de permutaciones que deben analizarse. El método de encontrar combinaciones de corrientes que produzcan aciclicidad en el sistema, siguiendo el criterio de optimalidad propuesto por Shanon y Morse, es un procedimiento más eficaz, sin embargo queda limitado también a un número reducido de corrientes que intervengan en las combinaciones analizadas.

e) El procedimiento de simplificación de nodos de diagrama de flujo por unión de nodos y corrientes de Rudd y Christensen, puede en muchos casos encontrar la secuencia de cálculo óptima para un proceso. En caso de no lograrlo, simplifica bastante el diagrama a analizar.

Los nuevos algoritmos para rompimiento de sistemas con recirculaciones que han sido publicados en los últimos años -- están resumidos en la Tabla II.1.

TABLA II.1 .- CLASIFICACION DE ALGORITMOS DE CORTE

Autores	Tipo	Sistema Máximo Resuelto
Upadhye y Grens (1975)	Probabilidad	6 nodos, 9 arcos
Pho y Lapidus (1973)	Exacto	Planta de Ac. Sulfúrico, 42 nodos, 68 arcos.
Kehat y Shacham (1973b)	Probabilidad	42 nodos, 68 arcos
Upadhye y Grens (1972)	Exacto	6 nodos, 9 arcos
Barkley y Motard (1972)	Probabilidad	Planta de Ac. Sulfúrico.
Batstone y Prince (1970)	Probabilidad	27 nodos, 49 arcos

Generalmente hablando, todos los algoritmos contienen dos fases. La primera fase es la simplificación de la recirculación, la segunda fase es la búsqueda del punto óptimo de corte sobre una gráfica dirigida simplificada.

En la primera fase, los arcos que no se pueden usar como corrientes de corte se reducen, y las corrientes de corte se encuentran entonces. Para la ejecución de la segunda fase hay dos aproximaciones:

1.- Metodos exactos que usan programación dinámica o metodos de "branch and Bound" (ramificar y acotar)

2.- Metodos de Probabilidad, donde las corrientes de corte se localizan de acuerdo a alguna suposición que da gran

probabilidad de que el punto de corte será escogido de tal manera que cortara un número máximo de ciclos internos.

II.2.1) ALGORITMOS DE DESCOMPOSICION

La formulación de un procedimiento eficiente para la -- descomposición de sistemas con recirculaciones, requiere la -- consideración de sus propiedades fundamentales.

Un proceso con recirculaciones puede representarse siem-- pre por una gráfica dirigida que contiene trayectorias en cir-- cuito o ciclos. Los métodos disponibles para la localización - de estos ciclos en una gráfica ya se han descrito. Las corrien-- tes que constituyen un ciclo, se dice que están incluidas en - el. Una condición necesaria y suficiente para que un esquema - de descomposición sea válido es que el conjunto de corrientes-- de corte sea tal que para cada ciclo haya al menos una corrien-- te en el conjunto que abra el ciclo.

Un ciclo contiene dos o más corrientes, y una corriente puede abrir más de un ciclo. Por lo tanto es obvio, que usual-- mente existirá más de un conjunto de corrientes de corte que - constituyen una descomposición válida. Estos conceptos se ilus-- tran en el proceso mostrado en la figura II.9. La naturaleza - de las conexiones entre las unidades de este proceso puede re-- presentarse por una matriz ciclo/corriente como se muestra en-- la Tabla II.2.

Aquí los renglones representan los ciclos y las colum-- nas representan las corrientes. Un elemento en la matriz es la unidad, si la corriente correspondiente está incluida en el ci

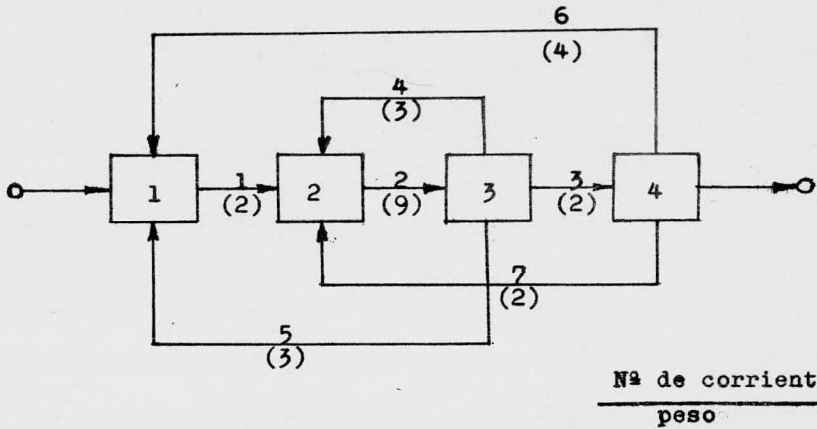


Figura II.9.- Diagrama de flujo de proceso para un ejemplo simple.

Tabla II. 2.- Matriz ciclo/ corriente para el proceso mostrado en la Figura II.9.

Ciclo	corrientes						
	1	2	3	4	5	6	7
1		1		1			
2	1	1			1		
3	1	1	1			1	
4		1	1				1
peso	2	9	2	3	3	4	2

clo, de otra manera es un espacio vacío. Esta matriz requiere determinarse una sola vez aunque se necesiten descomposiciones repetidas del proceso. El último renglón representa la suma de los pesos de las variables de las corrientes.

Para este ejemplo particular, las descomposiciones válidas están dadas por los siguientes conjuntos de corrientes: $\{1,3,4\}$, $\{1,4,7\}$, $\{3,4,5\}$, $\{2\}$ y $\{4,5,6,7\}$.

Una vez que la matriz ciclo/corriente se ha obtenido, el problema de la selección de una descomposición válida se reduce a la elección de un conjunto de columnas (correspondientes a las corrientes), la unión de las cuales resulte en una columna con todos sus elementos iguales a la unidad. La mejor descomposición será entonces la descomposición válida con el mínimo total de pesos de las corrientes sumando sobre todas las corrientes.

ALGORITMO DE UPADHYE Y GRENS.

El algoritmo formulado por Upadhye y Grens (22), hace la selección de la mejor descomposición considerando las propiedades de la matriz ciclo/corriente. Esta aproximación ve el problema considerando dos estados terminales definidos, uno inicial y otro final. El estado inicial corresponde al sistema original, sin ciclos abiertos. El estado final corresponde al sistema acíclico, con todos los ciclos abiertos.

Entre estos dos estados terminales existen muchos esta-

dos intermedios, correspondiendo cada uno a varias combinaciones de ciclos abiertos. La solución al problema puede considerarse como un avance a través de estos. Si estos estados se representan como nodos sobre una gráfica, entonces las corrientes seleccionadas para rompimiento pueden representarse por flechas o arcos que unen a los nodos. Con cada arco está asociado un costo que es la suma de los pesos de las variables incluidas en la corriente correspondiente. En general existen muchas trayectorias para alcanzar el estado final del estado inicial. La trayectoria óptima es la trayectoria con la menor suma de costo total. Para cualquier estado intermedio alcanzado por una trayectoria, esta trayectoria puede estar dividida en dos o más subtrayectorias. Una subtrayectoria conecta el estado inicial con algún estado intermedio y otras subtrayectorias conectan el estado intermedio con un estado final. Cada una de las subtrayectorias tienen que ser óptimas entre los estados que conectan. Si esto no fuera así, una de las subtrayectorias podría reemplazarse por una subtrayectoria alternativa con un costo más pequeño y esto daría origen a una trayectoria entre los dos estados terminales con un costo total más pequeño que la trayectoria original, violando la suposición de que la trayectoria original fuera óptima.

Cuando el problema se ve desde este punto de vista entonces es naturalmente propio para el uso de la programación -

dmánica .

En este sistema un estado está definido por la especificación de los ciclos abiertos. Se puede mostrar Upadhye y Grens, (22) que si el número de ciclos en un sistema es "a", el número total de estados posibles es 2^a . Se puede establecer una correspondencia uno a uno entre estos estados y los enteros positivos $0, 1, 2, \dots, (2^a - 1)$, con el primero y el último entero correspondiendo a los estados final e inicial, respectivamente.

La operación de este algoritmo puede verse fácilmente en su aplicación al ejemplo simple de la fig. II.9. Aquí el número posible de estados es 2^4 ó 16. Estos estados y sus enteros representativos se muestran en la tabla II.3. El procedimiento puede visualizarse a través de las figuras II.10. a y II.10. b, las cuales representan los estados por nodos y las corrientes de rompimiento por arcos que conectan a los nodos. En los diagramas los estados están numerados de acuerdo a la tabla II.3. A la derecha de cada nodo aparecen dos conjuntos de números. El número superior es el costo mínimo en curso para el estado. Los números inferiores representan el mejor conjunto en curso de corrientes de rompimiento para alcanzar el estado en curso desde el estado inicial.

Los arcos están etiquetados por los números de las correspondientes corrientes de rompimiento. La fig. II.10. a, "

Tabla II . 3 .- Estados posibles de descomposición del proceso de la figura II . 9 . Usando el algoritmo de Upadhye y Grens .

Indice de estado	ciclos abiertos	indice de estado	ciclos abiertos
0	ninguno	8	4
1	1	9	1,4
2	2	10	2,4
3	1 , 2	11	1,2,4
4	3	12	3,4
5	1,3	13	1,3,4
6	2,3	14	2,3,4
7	1,2,3	15	todos

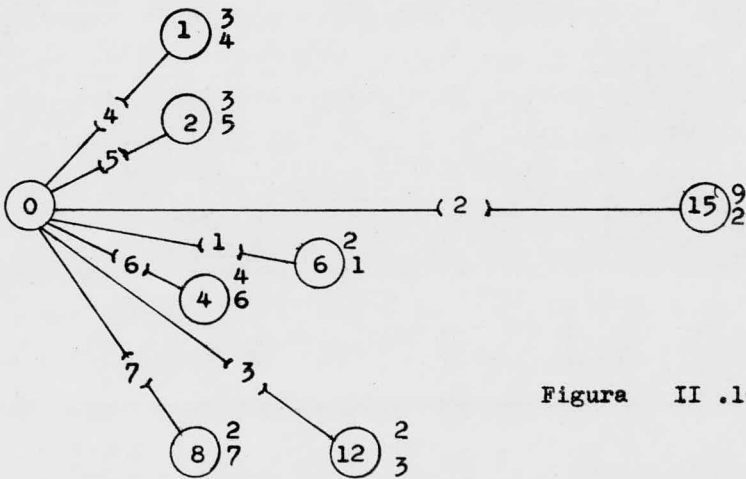


Figura II .10.a

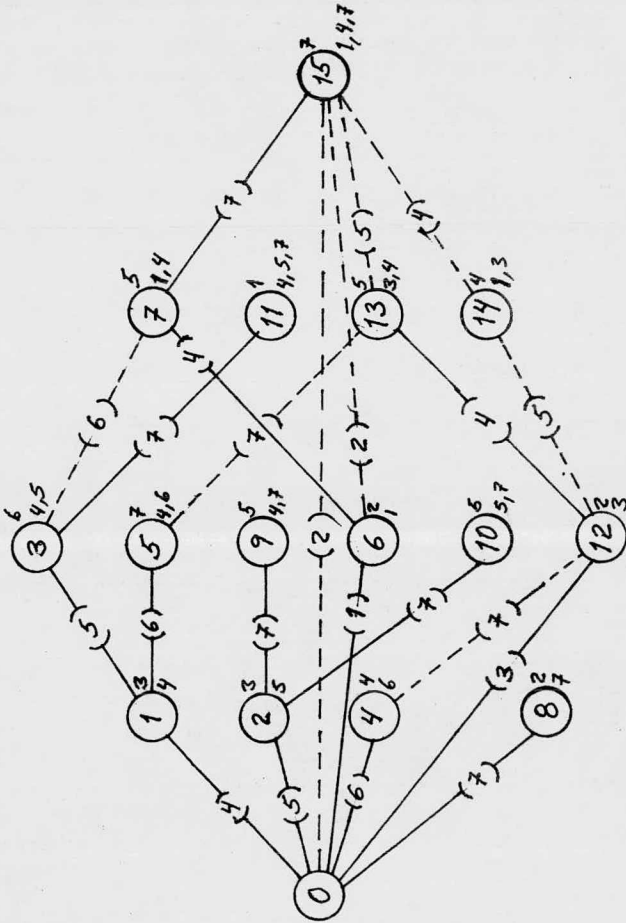


Figura II . 10 . b

muestra todos los estados alcanzados en un paso desde el estado inicial. Notese que la solución óptima en está dada por la corriente 2 con un costo de 9, que representa la solución para el problema del número mínimo de corrientes de corte. La fig.- II.10.b ilustra la aplicación continuada del algoritmo. En ambas figuras, las trayectorias óptimas a todos los nodos (estados) se muestran por líneas sólidas y las trayectorias no óptimas se muestran por líneas punteadas; esto más tarde en la --- práctica no necesita recordarse. En el caso de que existan mas de un trayectoria óptima a un nodo, todas las trayectorias en contradas después de la primera trayectoria se consideran no óptimas. El conjunto óptimo de rompimiento encontrado está dado entonces por $\{1,4,7\}$, con un costo de 7.

Comparación del algoritmo de Upadhye y Grens

Upadhye y Grens (22) compararon su algoritmo con el algoritmo de Sargent y Westerberg (20) y el algoritmo de Lee Y - Rudd (12), los cuales tienen ciertas similitudes fundamentales en sus sistemas de caracterización de los sistemas. Aunque una comparación verdaderamente comprensiva no fué posible, la comparación hecha indicó que el algoritmo de Upadhye y Grens requiere menos operaciones en su implementación.

Sin embargo el algoritmo de Upadhye y Grens tiene en si mismo ciertas desventajas potenciales. Los requerimientos de -

almacenamiento tienden a ser mas bien grandes; para un sistema con "a" ciclos se requieren alrededor de $3(2^a - 1)$ localizaciones. Una modificación simple en el procedimiento puede reducir este número a

$$3 \left[\binom{a}{a/2} + 2 \sum_{i=1}^{f/2} \binom{a}{a/2 - i} \right]$$

si a y f son pares, con resultados similares para a o para f siendo ambos impares. Aquí f es la máxima frecuencia de ciclo (esto es, el número de ciclos abiertos por una corriente cuando se rompe). Esta reducción en el número de localizaciones de almacenamiento será significativa solamente si f es significativamente más pequeño que a. El número de operaciones requeridas para implementar este procedimiento modificado será, -- por supuesto, más grande que sin la modificación. Con el gran de incremento de capacidad a que están llegando las computadoras disponibles, el requerimiento de almacenamiento de este algoritmo de programación dinámica no parece ser una desventaja seria. Otra consideración es que este algoritmo no parece ser ventajoso para el cálculo a mano. ; la trayectoria eficiente de los mecanismos de reconocimiento de los humanos -- tiende a favorecer el tipo de operaciones involucradas en -- otros algoritmos.

ALGORITMO DE BARKLEY Y MOTARD.

Barkley y Motard propusieron el establecimiento de la gráfica de señales de flujo, obtenida a partir de la gráfica dirigida de diagrama de flujo.

La distinción básica entre las dos representaciones reside en el reconocimiento de las corrientes o arcos en la gráfica de diagrama de flujo, como señales o nodos en la gráfica de señales de flujo. Los nodos de la gráfica de diagrama de flujo, están exentos de información útil y se representan como arcos en el diagrama de señales de flujo.

La relación entre las dos gráficas se muestra en la figura II.11 para una red cíclica típica.

El procedimiento de descomposición sobre la gráfica de señales de flujo se efectúa por el corte de nodos, más bien que por el corte de arcos de la gráfica de señales de flujo. En esta aproximación no se tomó en cuenta el número de variables de cada corriente. Así que el objetivo fué encontrar el conjunto mínimo de nodos o vértices cortados, lo cual reduce la red cíclica a una red acíclica.

En esta nueva formulación del problema se produce la ocurrencia de anillos propios.

Las propiedades de las gráficas de señal de flujo de los procesos recirculados usadas en el análisis, se aplican -

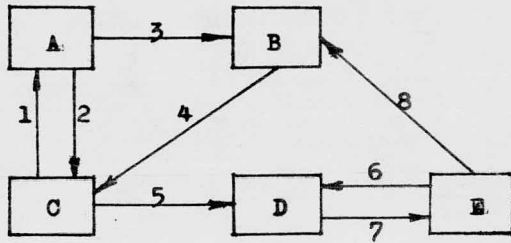


Figura II . 11. a .- Gráfica de diagrama flujo

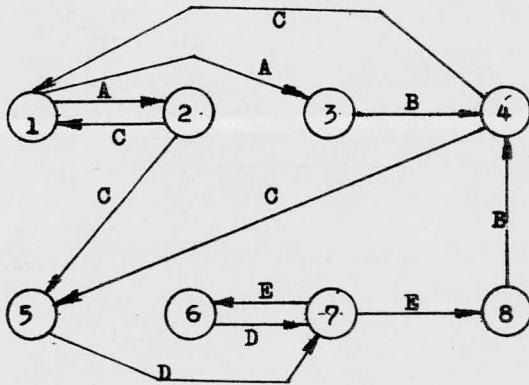


Figura II . 11. b .- Gráfica de señal de flujo. Los nodos son las corrientes de información .



en el siguiente orden, de la condición más fuerte a la condición más débil.

- 1).- Identificación de redes cíclicas máximas.
- 2).- Reducción de la gráfica a intervalos.
- 3).- Eliminación de nodos con anillos propios.
- 4).- Procesamiento de nodos asociados con arcos, de dos vías.
- 5).- Corte del nodo con el número máximo de arcos de salida.

Este algoritmo propone un método alternativo al método de la matriz de alcance para identificar las redes cíclicas máximas de la siguiente manera:

Un intervalo en la gráfica es la subgráfica de entrada-máxima simple para la cual h es el nodo de entrada y en la cual todas las trayectorias cerradas contienen h .

Ningún nodo de la gráfica puede incluirse en el intervalo encabezado a menos que sus precursores estén ya en el intervalo.

Identificado todos los intervalos en la gráfica, esta se puede particionar en subgráficas y el demás procesamiento ocurre solamente sobre la gráfica reducida que contiene solamente los cabezales de las demás subgráficas.

Todos los arcos que unen cualquier nodo en el intervalo con cualquier nodo fuera del intervalo llegan a ser propiedad-

del nodo cabezal de la gráfica reducida.

Refiriéndose a las figuras II.11.b , II.12.a , y la tabla II.4., una gráfica de 8 nodos se reduce a 4 intervalos : - los nodos 2y3 pertenecen al intervalo encabezado por el nodo 1 y los nodos 6y8 pertenecen al intervalo encabezado por 7. La gráfica de la fig. II.12. a es irreducible sin corte de nodos, el algoritmo para identificación de intervalos comienza con dos listas:

Una lista de todos los nodos y sus nodos precursores. - "Aquellos nodos con arcos dirigidos hacia un nodo". Cualquier nodo con un precursor simple se dice que pertenece a este precursor y es eliminado; cuando tal nodo aparece previamente como un precursor, se reemplaza por su nodo cabezal en la lista de precursores. La tabla II.5, resume la reducción a intervalos de la fig. II.11.b. Los pasos reiterados se hacen a través de la lista de precursores hasta que todos los nodos con precursor han sido eliminados. Notese que 6 puede incluirse en un intervalo encabezado por 7 debido a que la trayectoria cerrada 6-7-6 termina sobre el cabezal. El algoritmo de reducción tiene cuidado de tal trayectoria sin una consideración especial.

El proceso real de corte o rompimiento comienza con la aparición de anillos propios en la gráfica reducida.

Estos tienen que ser miembros del conjunto mínimo, de nodos de corte, puesto que no hay alternativa la cual reduzca-

TABLA II.4 .- Resumen de la red desconpuesta en la figura II.12

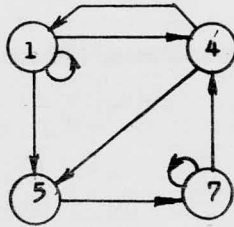
Intervalos	Conjunto mínimo de nodos de corte	Intervalos de salida
1, 2, 3	7, 1	4, 5
4		
5		
7, 6, 3		

TABLA II.5 .- Reducción a intervalos

Lista de nodos	Precursores	Intervalos	Precursores
1	2, 4	1 (2,3)	1, 4
2	1		
3	1		
4	3, 8	4	1, 7
5	2, 4	5	1, 4
6	7		
7	5, 6	7 (6,8)	5, 7
8	7		

TABLA II.6 .- Reducción despues de cortar el nodo 7.

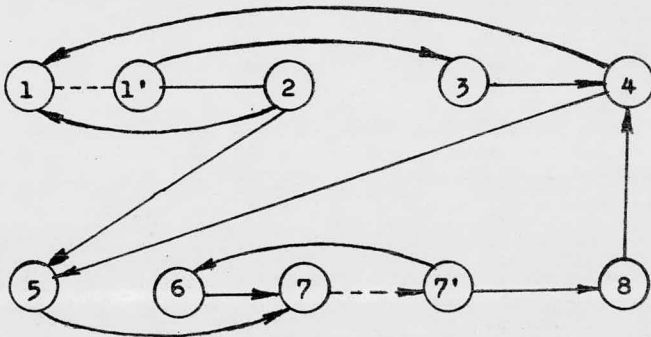
Intervalos	Precursores	Intervalos	Precursores
1 (2,3)	1, 4	1 (2,3)(4,5)	1
4	1		
5	1, 4		



a) gráfica de intervalos

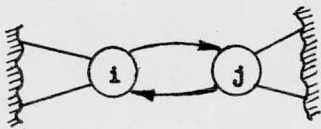


b) Después de cortar el nodo 7 con anillo propio.

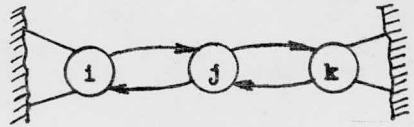


c) Gráfica descompuesta después de cortar los nodos 1 y 7 .

FIGURA II .12.



(a)



(b)

FIGURA II . 13 .- Elementos con arcos de dos vias en una gráfica de señal de flujo.

la aciclicidad. Sin embargo un nodo cortado se elimina de la gráfica y se adiciona a la lista de corrientes de corte. Cuando la corriente de corte aparece en una lista de precursores, también se elimina y esto hace a la gráfica reducible otra vez, ya que los nodos pueden aparecer con precursores simples. Después de un proceso de corte, se hacen pasos adicionales de corte con el algoritmo de reducción a través de la gráfica para encontrar cualquier intervalo que pueda extenderse como un resultado del corte.

La tabla II.6, indica el efecto de cortar el anillo propio del nodo 7.

El siguiente paso del algoritmo es el procesamiento de los arcos de dos vías.

Los arcos de dos vías fueron reconocidos por Chistensen y Rudd (1966) y Sargent y Westerberg (1964), como un par de corrientes en las cuales una tiene que pertenecer necesariamente al conjunto de corte.

En la fig.II.13.a, el nodo i ó el nodo j pertenecerán al conjunto de nodos cortados. Cuando el conjunto de nodos cuyos elementos son arcos de vías, incluye un elemento común como en la fig.II.13.b, el nodo común se asigna inmediatamente al conjunto de nodos de corte.

Si todos los pares de nodos con arcos de dos vías son disjuntos se hace una selección del nodo con el número máximo

de arcos de salida puesto que esto ofrece una posibilidad más grande afectar a más nodos en la gráfica remanente. En el caso de un solo enlace se hace una elección arbitraria.

La condición final y más débil del algoritmo se invoca si todas las demás condiciones aparecen. El nodo con el número máximo de arcos de salida se selecciona para formar parte del conjunto de corte por la misma razón establecida anteriormente.

En el caso de un solo enlace se hace una elección arbitraria. Esto completa la descripción verbal del algoritmo.

ALGORITMO DE PHO Y LAPIDUS

El algoritmo de Pho y Lapidus llamado Basic Tearing - - Algorithm (Algoritmo Básico de Rompimiento) o BTA es una generalización de los conceptos de corrientes inelegibles y reducción de intervalos.

Este algoritmo resuelve el problema de encontrar el conjunto de corrientes de corte con la mínima suma de factores de peso asignados arbitrariamente a cada corriente.

Esta aproximación incluye los problemas de encontrar el número mínimo de variables de corte y el número mínimo de corrientes de corte como casos especiales.

El primero se obtiene igualando el factor de peso al número de variables que están presentes en una corriente y la segunda permitiendo que todos los factores de peso sean la unidad.

El BTA identifica y elimina las corrientes inelegibles directamente sobre un diagrama de señal de flujo y entonces alcanza una reducción de la solución del problema.

El concepto de reducción de arcos de dos vías también se extiende al diagrama de señal de flujo para auxiliar a la efectividad del BTA.

Si la gráfica no es reducible por el BTA y la reducción de arcos de dos vías, puede analizarse por el método de "branch

and bound" (ramificar y acotar), lo cual asegura la reducción-completa de un problema de recirculación.

Este algoritmo involucra los siguientes puntos:

1.- Establecimiento de la gráfica de diagrama de flujo de proceso.

2.- Establecimiento de la gráfica de señal de flujo a partir de la gráfica de diagrama de flujo de proceso como se indicó en el algoritmo anterior. Los anillos se preservan después de esta transformación de gráficas, lo que significa que los anillos pueden cortarse en cualquiera de ellas.

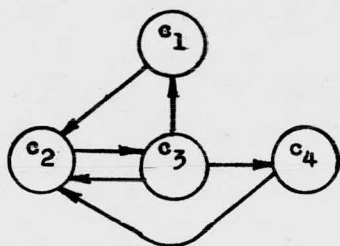
3.- Reducción del diagrama de señal de flujo de acuerdo a los criterios de nodo-corriente inelegible y nodo-corriente esencial.

El primer criterio está dado por el siguiente teorema:

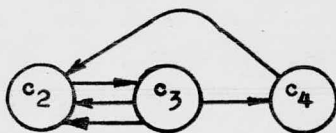
Teorema de inelegibilidad: Si un nodo-corriente c_m tiene un factor de peso $p(c_m)$ el cual es más grande o igual a la suma de pesos de sus sucesores inmediatos $T(c_m)$ ó sus predecesores inmediatos $T^{-1}(c_m)$, entonces se dice que esta dominado por sus sucesores inmediatos o por sus predecesores inmediatos y es inelegible como corriente de corte.

Esto es:

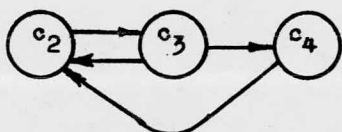
$$\text{si } p(c_m) \geq \sum_{i \in \Gamma} p(c_i)$$



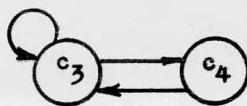
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura II. 14.- Reducción de una gráfica de señal de flujo.

entonces c_m es inelegible. Γ es el conjunto de corrientes que representa ya sea a $T(c_m)$ ó a $T^{-1}(c_m)$.

La reducción del diagrama de señal de flujo por este -- teorema es equivalente a los siguientes procedimientos:

1.- Separar el nodo-corriente inelegible c_m de la grá-- fica de señal de flujo, y unir el conjunto de nodos en $T^{-1}(c_m)$ al conjunto de nodos en $T(c_m)$ por arcos que se originen en --- $T^{-1}(c_m)$ y terminen en $T(c_m)$.

2.- Si más de dos arcos están dirigidos de un nodo-co-- rriente a otro nodo-corriente, combinar los arcos en un arco - simple dirigido.

La figura II.14 por ejemplo muestra una gráfica de se-- ñal de flujo que consiste de cuatro nodo-corrientes con todos- sus factores de peso iguales a la unidad.

El nodo-corriente c_1 esta dominado por c_2 ó c_3 y el -- anillo es removido por separación de c_1 y uniendo a c_2 y c_3 -- por un arco dirigido, como su muestra en la figura II.14.b.

Al fusionar los nodos que se dirigen de c_3 a c_2 se tie- ne la figura II.14.c.

Concepto de Nodo-corriente Esencial

Una posibilidad que puede resultar de la separación re- petida de corrientes inelegibles de un diagrama de señal de -- flujo, es la ocurrencia de nodos con anillos propio.

Un anillo propio consiste solamente de un nodo-corrien-

te. Por lo tanto cualquier nodo-corriente con un anillo propio tiene que ser esencial, es decir que es un miembro del conjunto óptimo de corte.

En la figura II.14.c, el nodo corriente c_2 esta dominado por c_3 ; su separación resulta en la gráfica reducida mostrada en la fig. II.14.d la cual tiene un anillo propio que aparece en c_3 .

La separación de este nodo-corriente esencial c_3 , de la gráfica de señal de flujo cortará todos los anillos. Por lo tanto una solución al problema de recirculación en la figura II.14.a. está dada por c_3 como única corriente de corte.

Implementación de Algoritmo

La implementación del BTA en una computadora depende de como una gráfica finita sea almacenada en la computadora.

Un método sugerido por los autores y que tiene la ventaja de la simplicidad y es apropiado para los cálculos a mano está basado en la representación de la gráfica de señal de flujo, por su matriz adyacente.

Una matriz adyacente para una gráfica de señal de flujo es una matriz no cero cuyo renglón i y columna j representan los nodo-corrientes c_i y c_j respectivamente.

El elemento (i,j) se establece igual a 1 si y solo si hay un arco dirigido del nodo c_i al nodo c_j en el diagrama de

señal de flujo, de otro modo se establece igual a cero. Por lo tanto, dado un nodo-corriente c_m , sus sucesores inmediatos están dados por las columnas que tienen elementos no cero en el renglón m ; y el conjunto de sus predecesores inmediatos está dado por los renglones que tienen elementos no cero en la columna m . Un anillo propio sobre un nodo-corriente c_q está caracterizado por la aparición de un 1 sobre el elemento diagonal (q, q) .

Por el teorema de inelegibilidad, se puede determinar la inelegibilidad de un nodo-corriente c_m simplemente escudriñando el renglón m y la columna m y comparando los factores de peso con los de sus predecesores inmediatos y sucesores inmediatos. Si c_m está dominado por sus sucesores inmediatos $T(c_m)$, la corriente inelegible c_m se separa de la matriz adyacente tachando el renglón m y la columna m ; entonces para cada corriente c_p en $T(c_m)$, se modifican los elementos de la columna p formando la suma booleana con los elementos correspondientes en la columna m . Similarmente, si c_m está dominado por sus predecesores inmediatos $T^{-1}(c_m)$, se separa de la matriz adyacente tachando el renglón m y la columna m , y para cada c_q en $T^{-1}(c_m)$, los elementos del renglón q se modifican formando una suma booleana con los elementos correspondientes del renglón m . Si c_m es esencial, se separa de la matriz adyacente simplemente tachando el renglón m y la columna m .

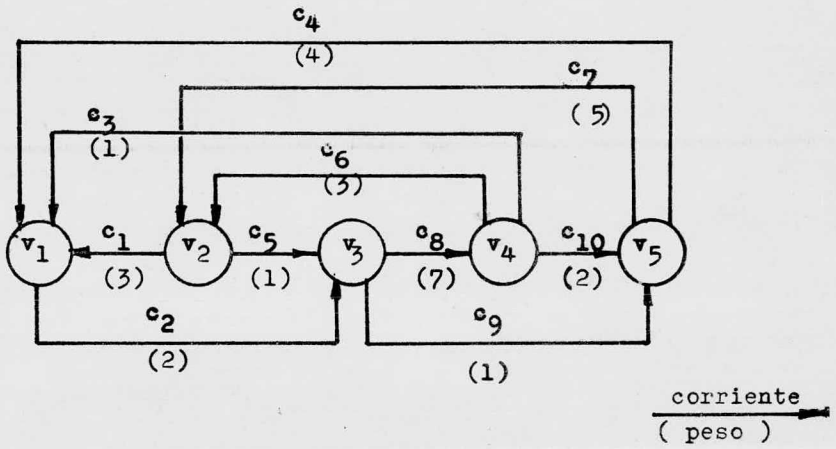


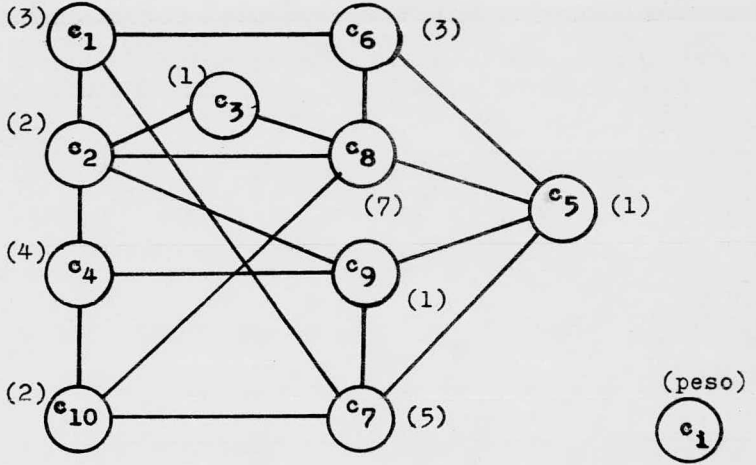
Figura II. 15 .- Un sistema recirculado.

Para ilustrar el BTA usando la matriz adyacente, considerar el sistema recirculado mostrado en la figura II.15.

Su gráfica de señal de flujo y su matriz adyacente equivalente su muestran en la figura II.16.

Las corrientes c_1 y c_4 están dominadas por su sucesor inmediato c_2 . Separando ambas corrientes inelegibles resulta la matriz mostrada en la figura II.17.a. con los renglones 1,4 y las columnas 1,4 tachados. De la matriz en II.17. a, las corrientes c_6 y c_7 están dominadas por sus sucesores inmediatos c_2 y c_5 . Separando c_6 y c_7 se obtiene la matriz II.17.b, la corriente c_8 está dominada por sus sucesores inmediatos c_2, c_3, c_5, c_{10} . Separando c_8 se origina la matriz II.17.c. La última matriz tiene dos elementos no cero que aparecen sobre la diagonal principal en las entradas (2,2) y (5,5) por lo tanto c_2 y c_5 tienen anillos propios y pertenecen al conjunto óptimo de corte o rompimiento.

Separando las corrientes esenciales c_2 y c_5 , tachando los renglones 2,5 y las columnas 2,5 se dejan las columnas 3,9 y 10 todas sin elementos no cero. Esto implica que son nodo-corrientes sin arcos de entrada y por lo tanto se separa tachando los respectivos renglones y columnas. Esto deja una matriz adyacente con todos los renglones y columnas tachados, implicando una gráfica de señal de flujo vacía. Así termina el BTA habiendo identificado c_2 y c_5 como el conjunto óptimo de corte.



(a)

	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	c_8	c_9	c_{10}	$p(c_i)$
c_1	1							1	1		3
c_2		1									2
c_3		1									1
c_4		1									4
c_5					1			1	1		1
c_6	1					1					3
c_7	1					1					5
c_8			1				1				7
c_9				1				1			1
c_{10}				1			1				2

(b)

FIG. II. 16 .- Diagrama de señal de flujo para la Fig. II. 15 . y su matriz adyacente.

	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	c_8	c_9	c_{10}	$p(c_j)$
c_1	1										3
c_2							1	1			2
c_3		1									1
c_4		1									4
c_5							1	1			1
c_6	1	1			1						3
c_7	1	1			1						5
c_8			1			1				1	7
c_9		1		1			1				1
c_{10}		1		1			1				2

(a)

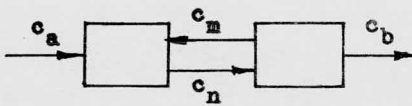
	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	c_8	c_9	c_{10}
c_1	1									
c_2							1	1		
c_3		1								
c_4		1								
c_5							1	1		
c_6	1	1			1					
c_7	1	1			1					
c_8		1	1		1	1				1
c_9		1		1	1		1			
c_{10}		1		1	1		1			

(B)

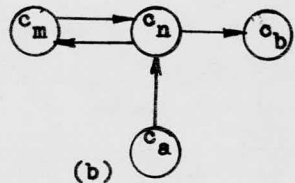
	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	c_8	c_9	c_{10}
c_1		1								
c_2		1	1		1			1	1	1
c_3		1								
c_4		1								
c_5		1	1		1			1	1	1
c_6	1	1			1					
c_7	1	1			1					
c_8		1	1		1	1				1
c_9		1			1	1	1			
c_{10}		1			1	1	1			

(c)

Figura III. 17 .- Aplicación del BTA usando la matriz adyacente.



(a)



(b)

Figura II. 18 .- Arcos de dos vías

Reducción de arcos de dos vías

El BTA falla cuando ninguno de los nodo-corrientes en la gráfica de señal de flujo puede identificarse como inelegible. Se ha encontrado, sin embargo, en muchos casos considerados que el BTA puede reducir el diagrama de señal de flujo suficientemente tal que pueden aparecer anillos formados por arcos de dos vías.

La figura II.18 muestra una gráfica de diagrama de flujo de proceso y su gráfica de señal de flujo con un arco de dos vías.

Para cortar este anillo simple, es necesario y suficiente seleccionar solamente uno de los dos nodo-corrientes como corriente de corte y nunca ambos. Por esta razón se escoge a la corriente c_m con el más bajo factor de peso como una probable corriente de corte y se separa del diagrama de señal de flujo. Al mismo tiempo el peso de la otra corriente c_n la cual forma el arco de dos vías con c_m se reduce por una cantidad $p(c_m)$. El BTA puede aplicarse entonces a la gráfica de señal de flujo resultante. La probable corriente de corte c_m se hace una verdadera corriente de corte, si su corriente complementaria c_n es encontrada después como una corriente inelegible por el BTA, de otra manera c_m es descartada y c_n se vuelve la corriente de corte.

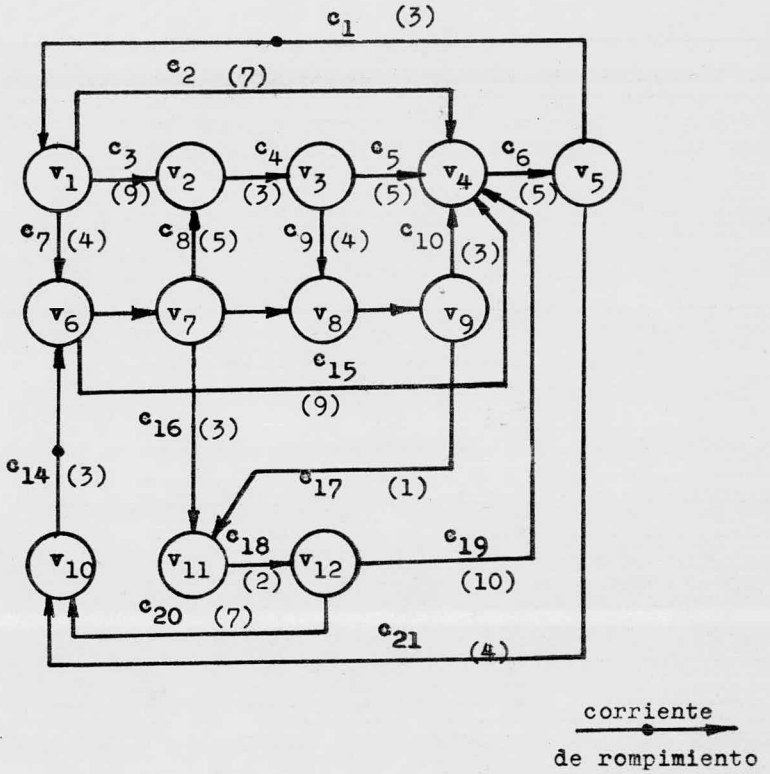


FIGURA II. 19 .- Contra ejemplo del algoritmo de Rudd y Christensen .

	c_1	c_4	c_6	c_{11}	c_{13}	c_{14}	c_{17}	c_{18}	$p(c_i)$
c_1	1	1					1		3
c_4		1		1					3
c_6	1					1		1	5
c_{11}		1		1					2
c_{13}			1				1		2
c_{14}			1	1					3
c_{17}								1	1
c_{18}			1			1			2

(a)

	c_N	c_4	c_6	c_{11}	c_{13}	c_N	c_{17}	c_{18}	$p(c_i)$
c_N	1					1			3
c_4		1		1					3
c_6						1			2
c_{11}	1			1			1		2
c_{13}							1		2
c_N				1					1
c_{17}								1	1
c_{18}						1			2

(b)

- - -

	c_1	c_4	c_6	c_{11}	c_{13}	c_{17}	c_{18}	$p(c_i)$
c_1								
c_4								
c_6		1				1		
c_{11}								
c_{13}								
c_{17}						1	1	1
c_{18}						1		

(c)

FIGURA II.20.- Un ejemplo de la reducción de bordes de dos caminos .

Arcos de dos vías compuestos

Un arco de dos vías entre las corrientes c_m y c_{n1} es compuesto si al menos una de las corrientes es compartida por otro arco de dos vías. Supongase que c_m también forma un arco de dos vías con c_{n2} , c_{n3} , ..., c_{nq} , respectivamente. Para cortar todos los anillos formados por los arcos de dos vías entre c_m y el conjunto de corrientes $C_N = \{c_{n1}, c_{n2}, \dots, c_{nq}\}$ es necesario y suficiente cortar a c_m ó al conjunto de corrientes C_N y nunca a ambos. Por lo tanto si una corriente de C_N está dominado por otro conjunto de corrientes, todas las corrientes de C_N tienen que tomarse como si fueran corrientes dominadas, y si alguna corriente es esencial también todas serán esenciales.

En lo que sigue se ilustrará la aplicación de la reducción de los arcos de dos vías para la gráfica de diagrama de flujo de proceso de la figura II.19. Los factores de peso se seleccionaron de tal modo que el sistema no puede descomponerse por la técnica de simplificación de gráficas de Sargent y Westerberg (1964) y Chistensen y Rudd (1969).

Una gráfica de señal de flujo está representada por su matriz adyacente mostrada en la figura II.20. Como no se pueden encontrar corrientes inelegibles al algoritmo se detiene. Hay dos pares de arcos de dos vías formados entre c_1 y c_6 , y c_{14} y c_6 , teniendo a c_6 como el nodo-corriente común; por lo

tanto son compuestos. Entonces se tiene $C_N = c_1, c_{14}$ y $p(C_N) = p(c_1) + p(c_{14}) = 3 + 3 = 6$ que es más grande que $p(c_6) = 5$ donde c_6 es el nodo complementario a C_N .

Por lo tanto, se establece c_6 como una probable corriente corte y se tachan el renglón 3 y la columna 3 de la matriz adyacente. La columna 1 esta ahora sin un elemento no cero que y se tacha junto con el renglón 1. Esto origina la matriz mostrada en la figura II.20.c, la cual tiene un elemento no cero que aparece en la entrada diagonal (6,6). Puesto que la columna 6 ha sido llamada C_N , esto implica que el conjunto de corrientes en C_N , esto es c_1 y c_{14} son esenciales.

Esto implica también que la probable corriente de rompimiento la cual forma arcos de dos vías con C_N , no es una corriente de corte. Removiendo la corriente en C_N de la matriz de la figura II.20.c se producirá una gráfica de señal de flujo vacía, por lo tanto, un conjunto óptimo de corte para el sistema de recirculación en la figura II.19 se encuentra como $\{c_1, c_{14}\}$.

Como el conjunto óptimo de corte para un problema de recirculación no es necesariamente único, algunas veces un conjunto de corte alternativo al conjunto actualmente encontrado puede probar se más deseable. Esto puede alcanzarse por el presente método de varias formas diferentes:

Una es declarar como inelegibles, al principio de la --

aplicación del BTA, a las corrientes de corte no deseadas, sin considerar si estas corrientes satisfacen el Teorema de Inelegibilidad.

Otra es suponer un factor de peso arbitrariamente alto para la corriente no deseada como corriente de corte.

Método de "branch and bound"

En el caso de que el BTA acoplado con la reducción de arcos de dos vías falle para reducir un diagrama de flujo, la fase final del algoritmo hace uso del método de "branch and bound" (ramificar y acotar). Este método garantiza la solución óptima en todos los casos.

El método de "branch and bound" es un esquema enumerativo hábil para resolver problemas de optimización. Su ventaja deriva del hecho de que en general, solamente una pequeña fracción de todas las soluciones posibles necesitan realmente enumerarse, las soluciones sobrantes se eliminan de consideración por medio de la aplicación de límites que establecen que tales soluciones no pueden ser óptimas. Considerar por ejemplo, un problema que se puede ramificar en dos subproblemas A y B, y cuya solución incluye la solución óptima del problema original. Si el límite más bajo (l.b.)_B para el subproblema B se obtiene rápidamente y se sabe que la solución óptima al problema A es menor que (l.b.)_B, entonces es claro que no necesita re-

solverse la solución óptima al subproblema B, ya que la solución óptima al problema original no se obtiene al resolver el subproblema B.

La operación de ramificación y acotamiento puede aplicarse recursivamente a cualquier subproblema cuya solución óptima no se puede resolver rápidamente. El proceso de ramificación eventualmente conducirá a subproblemas los cuales pueden resolverse para su valor óptimo.

Una vez que este valor es obtenido, cualquier subproblema cuyo límite más bajo es más grande o igual a este valor, - puede eliminarse de consideración. Los subproblemas cuyo límite más bajo es menor que el valor óptimo tienen que ramificarse aún más en otros subproblemas y los nuevos límites más bajos tienen que determinarse. Pueden resultar dos cosas del -- procedimiento anterior. Una es que algunos subproblemas sean eliminados de más consideración y la otra es que los subproblemas remanentes sean resueltos para sus valores óptimos. La solución óptima al problema original está dada entonces por el mínimo de aquellos problemas resueltos.

La aplicación del método de "branch and bound" a un -- problema de recirculación requiere que él límite arbitrario -- mas bajo una gráfica de señal de flujo sea evaluado eficientemente.

Se puede alcanzar esto observando que para resolver pa

ra la variable en la corriente c_m , todos los nodo-corrientes - los cuales preceden inmediatamente a c_m en la gráfica de señal de flujo tienen que estar especificados. Por lo tanto, si una gráfica de señal de flujo H_R no se puede descomponer por medio del BTA, un límite más bajo para la descomposición de H_R está dado por:

$$(l.b.)_{H_R} = \min_{\{c_i\}} \left[\sum_{j \in \Gamma} p(c_j) \right] \dots\dots\dots (2.1)$$

donde la minimización se toma sobre todos los nodo-corrientes en H_R y Γ es el índice de corriente para el conjunto de todos los predecesores inmediatos a c_j , esto es, $T^{-1}(c_j)$.

Una gráfica de señal de flujo H usualmente consiste de una subgráfica que se puede descomponer por medio del BTA y -- una subgráfica remanente que no se puede descomponer por el -- BTA. Si se encuentra un conjunto de corte usando el BTA, entonces su suma de factores de peso tiene que adicionarse al límite más bajo encontrado por (2.1) para dar el límite más bajo - a la gráfica de señal de flujo.

Para ilustrar el método de "branch and bound", se aplicará al diagrama de señal de flujo de una planta de ácido sulfúrico. La matriz adyacente semisimplificada por el BTA, está dada en la figura II.21.

Para definir la operación de ramificación, se observa -

	c_5	c_9	c_{11}	c_{13}	c_{15}	c_{18}	c_{25}	c_{29}	c_{62}	c_{63}	c_{64}	$P(c_i)$
c_5	1				1			1	1	1		3
c_9		1										1
c_{11}			1	1					1	1		2
c_{13}				1						1		1
c_{15}						1					1	2
c_{18}					1				1	1		1
c_{25}			1	1	1				1	1	1	2
c_{29}		1										1
c_{62}						1					1	2
c_{63}	1		1				1					1
c_{64}	1		1				1					3

Figura II. 21

	c_5	c_9	c_{11}	c_{13}	c_{15}	c_{18}	c_{29}	c_{62}	c_{63}	c_{64}	$p(c_i)$
c_5	1				1		1	1	1		3
c_9		1									1
c_{11}			1		1			1	1		2
c_{13}				1					1		1
c_{15}						1				1	2
c_{18}					1			1	1		1
c_{29}		1					1			1	1
c_{62}							1			1	2
c_{63}	1	1	1	1	1			1	1	1	1
c_{64}	1	1	1	1	1			1	1	1	3

(a) c_{25} inelegible

	c_5	c_9	c_{11}	c_{13}	c_{15}	c_{18}	c_{29}	c_{62}	c_{63}	c_{64}	$p(c_i)$	$\delta(c_i)$	$\sum_{i \in E} p(c_i)$
c_5	1				1		1	1	1		3	7	4
c_9		1									1	2	3
c_{11}			1		1			1	1		2	8	6
c_{13}				1					1		1	3	2
c_{15}						1				1	2	6	7
c_{18}				1				1	1		1	5	4
c_{29}		1					1			1	1	2	3
c_{62}							1			1	2	5	6
c_{63}	1	1									1	6	7
c_{64}	1	1									3	4	4

(b) c_{25} esencial

FIGURA II.22 .-Ejemplo para el metodo de branch y bound.

que un nodo-corriente c_m de la gráfica de señal de flujo tiene que ser inelegible o esencial.

Se pueden definir por lo tanto los dos subproblemas siguientes: Subproblema $G(c_m^{(i)})$ es decir: Todas las soluciones del problema original tal que c_m es inelegible, y Subproblema $G(c_m^{(e)})$ es decir: Todas las soluciones al problema original tal que c_m es esencial.

Es obvio que la solución óptima tiene que caer en uno de los dos subproblemas. El nodo-corriente c_m se elige arbitrariamente como el nodo de la gráfica de señal de flujo con un grado máximo. (el grado δ de un nodo se definió en la Teoría de gráficas (inciso II.1.a)).

De la matriz adyacente en la figura II.21., los nodos c_{11} , c_{25} y c_{63} tiene todos un grado $\delta(c_i)$ máximo de 8, de estos se escoge arbitrariamente a c_{25} como c_m . Las matrices adyacentes después de que c_{25} se supuso inelegible y esencial se muestran en las figuras II.22a y II.22.B, respectivamente.

En el problema $G(c_{25}^{(i)})$, aparecen dos anillos propios sobre los nodo-corrientes c_{63} y c_{64} después de que c_{25} se toma como inelegible (figura II.22.a).

La aplicación del BTA después de que c_{63} y c_{64} han sido removidos identificará además c_{18} como esencial y reducirá la matriz adyacente completamente. Por lo tanto la ramificación del subproblema $G(c_{25}^{(i)})$ terminará con c_{18} , c_{63} , c_{64} co

mo el conjunto óptimo de corte, con una suma de factores de peso igual a 5.

En el subproblema $G(c_{25}^{(e)})$ donde c_{25} se supone esencial, la matriz adyacente reducida en la figura II.22.b. se puede descomponer por medio del BTA. El límite más bajo se calcula usando la ecuación (2.1) y se encuentra tomando el valor mínimo de la columna donde $\sum_{i \in \Gamma} p(c_i)$ está calculado (fig. II.22.b). Esto da un valor de 2.

Adicionando este valor $p(c_{25}) = 2$ debido a que c_{25} se toma como esencial, se da entonces un límite más bajo de 4 para el subproblema $G(c_{25}^{(e)})$. Puesto que este límite más bajo es menor que el valor óptimo del subproblema $G(c_{25}^{(i)})$, se requiere más ramificación sobre el subproblema $G(c_{25}^{(e)})$.

De la columna donde el grado $\delta(c_i)$ se calcula, el nodo c_{11} tiene el grado máximo de 8. Por lo tanto, se puede ramificar $G(c_{25}^{(e)})$ en los siguientes subproblemas:

Subproblemas $G(c_{25}^{(e)}, c_{11}^{(i)})$: El conjunto de todas las soluciones tal que c_{25} es esencial y c_{11} es inelegible.

Subproblema $G(c_{25}^{(e)}, c_{11}^{(e)})$: El conjunto de todas las soluciones tal que c_{25} y c_{11} ambas son esenciales.

Se puede mostrar que los límites más bajos para los dos subproblemas son iguales a 6 y 7 respectivamente. Debido a que los dos valores son más grandes que el valor óptimo del subproblema $G(c_{25}^{(i)})$, se pueden eliminar todas las solucio--

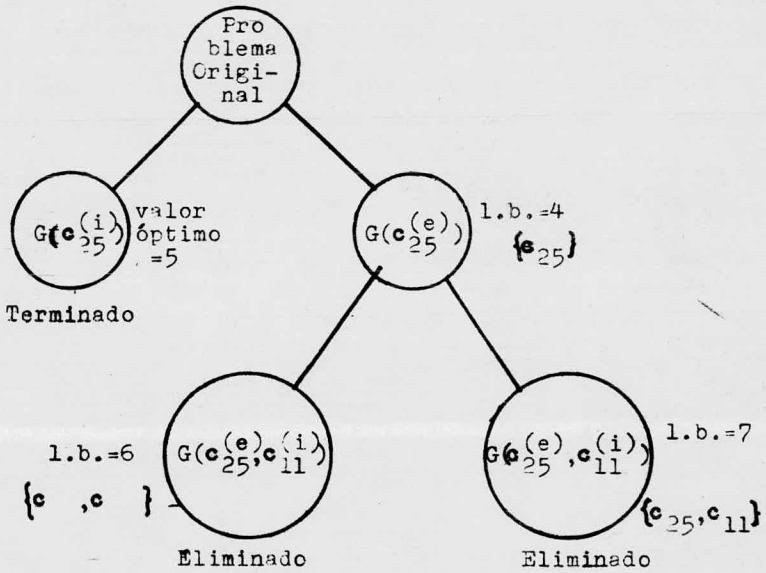


FIGURA II.23 .- Arbol de decisiones para el método de "branch and bound"

nes a los subproblemas con límites 6 y 7.

Por lo tanto la solución óptima al problema original - donde la matriz II.21 es la matriz adyacente está dada por la solución al subproblema $G(c_{25}^{(i)})$ con el conjunto óptimo de corte c_{18} , c_{63} , c_{64} y la suma óptima de factores de peso igual a 5.

Los pasos de solución involucrados en el método de - - "branch and bound" estan representados convenientemente por - el arbol de decisiones mostrado en la figura II.23.

ALGORITMO DE UPADHYE Y GRENS (1975)

Hasta quí se han analizado los métodos disponibles para la descomposición de procesos recirculados los cuales están basados en el número mínimo de corrientes de corte o en el número mínimo de variables de corte. Desgraciadamente se ha mostrado (Shacham y Motard, 1974), que estos objetivos no son --consistentes con la meta deseada obtener el mínimo esfuerzo --computacional, al menos para cuando la convergencia se lleva a cabo por sustitución directa.

Para minimizar el costo computacional de un proceso de simulación usando la sustitución directa, se tiene que encontrar la descomposición que converja, desde una estimación inicial y a la precisión deseada, con el número mínimo de iteraciones. Debido al gran número de descomposiciones posibles para un proceso real, no es práctico hacer una búsqueda exaustiva sobre todas las posibilidades.

Upadhye y Grens (1975) trataron de evitar tal búsqueda, haciendo una clasificación de los tipos de descomposiciones-- que pueden eliminarse a priori, de ser tomadas en cuenta. Esta clasificación la hicieron por medio del agrupamiento en familias, de las descomposiciones con propiedades de convergencia similares, es decir, los miembros de cada familia tienen una conducta de convergencia idéntica.

Estas familias de descomposición pueden considerarse -- como una generalización y extensión del concepto de ordena -- miento de unidades. El orden de los calculos de las unidades -- (permutable aciclicamente) caracteriza a algunas familias, pe ro tal ordenamiento no puede representar a la mayoría de las -- familias y el concepto restringido de ordenamiento no da ba -- ses para la selección de la descomposición que debe usarse.

Encontraron también que el número de familias de des -- composición es más pequeño que el número de descomposiciones -- por un factor del número de unidades de proceso.

Existen tres tipos de familias de descomposición:

1.- Aquellas que contienen solamente descomposiciones -- no redundantes.

2.- Aquellas que contienen solamente descomposiciones -- redundantes.

3.- Aquellas que contienen ambos tipos mezclados.

Una descomposición redundante es una descomposición vá lida de la cual, al menos una corriente puede separarse sin -- volver inválida la descomposición resultante; una descomposi -- ción no redundante no tiene tal corriente.

Sobre las bases de un número de argumentos Upadhye y -- Grens concluyeron que la conducta de convergencia de familias -- con solamente miembros no redundantes debe ser superior a la -- conducta de convergencia de los otros dos tipos. Además, del -- exámen exhaustivo de un gran número de procesos químicos rea --

les, encontraron que solamente existe una familia de descomposición no redundante.

A partir de estos resultados generaron un procedimiento simple para localizar una descomposición en la familia no-redundante, y de aquí por medio de una regla de remplazamiento, encontrar todas las descomposiciones en esta familia. Cualquiera de las cuales tendrá propiedades de convergencia óptima en simulación por sustitución directa.

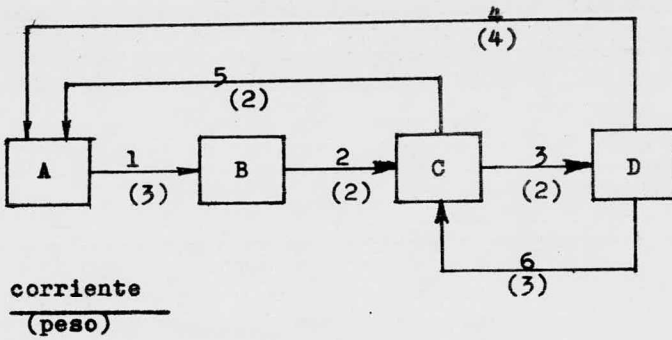
El algoritmo de Upadhye y Grens (1975) es como sigue:

Empezando con la matriz ciclo/corriente para el proceso en cuestión, considerar cualquier corriente j . Definase un factor de peso b_j para la corriente j como:

$$b_j = \sum_{i=1}^a L_{ij} \dots \dots \dots (2.2)$$

donde a es el número de ciclos en el proceso y L_{ij} es la entrada para la j -ésima corriente y el i -ésimo ciclo en la matriz ciclo/corriente. Entonces encuentrese una descomposición con la suma mínima de factores de peso de las corrientes, siendo los b_j 's, los factores de peso. Los métodos para llevar a cabo esta minimización ya se han discutido en este trabajo y se puede utilizar cualquiera de ellos.

La descomposición encontrada en esta forma nunca puede pertenecer a una familia redundante o mezclada (Upadhye, 1974). Esta descomposición no es única: otros miembros de la familia-

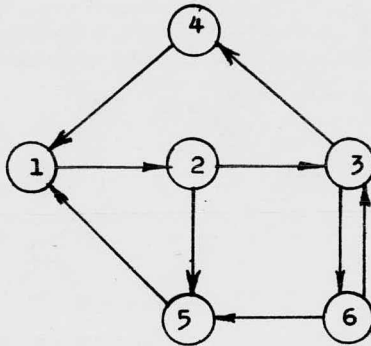


(a)

	corriente					
ciclo	1	2	3	4	5	6
1	1	1			1	
2			1			1
3	1	1	1	1		
$p(c_j)$	3	2	2	4	2	3
b_j	2	2	2	1	1	1

(b)

UFigura II. 24.- Un proceso recirculado
y su matriz ciclo/corriente.



(a)

	1	2	3	4	5	6
1		1				
2			1		1	
3				1		1
4	1					
5	1					
6			1		1	

(b)

Figura II. 25 .- Gráfica de señal de flujo para la figura II. 24 y su matriz adyacente.

correspondiente pueden encontrarse (si uno desea ver si son posiblemente más convenientes en su aplicación) por la aplicación de la regla de Remplazamiento para esta descomposición:

Esta regla se enuncia a continuación:

Regla de remplazamiento: Sea $\{D_1\}$ una descomposición válida. Sea A_i una unidad tal que todas sus entradas están incluidas en el conjunto $\{D_1\}$. (Al menos una de tales unidades tiene que existir, de otro modo $\{D_1\}$ no sería válida).-- Reemplace todas las entradas de A_i en $\{D_1\}$ por todas las salidas de A_i . Sea la nueva descomposición $\{D_2\}$. Entonces:

- a) $\{D_2\}$ es también una descomposición válida, y
- b) $\{D_2\}$ y $\{D_1\}$ tienen las mismas propiedades de convergencia tanto como los cálculos por sustitución directa sean tomados en cuenta.

Como un ejemplo considerar la gráfica de diagrama de flujo de proceso mostrado en la figura II.24.a. Su matriz ciclo/corriente se muestra en la figura II.24.b. Los factores de pesos b_j 's calculados con la ecuación (2.2) se muestran en el último renglón de la matriz ciclo/corriente, hay que observar que son diferentes a los factores de peso $p(c_j)$ debidos al número de variables involucradas en cada corriente.

Para llevar a cabo la descomposición con la suma mínima de factores de peso se escogió al BTA. De aquí que la gráfica de señal de flujo de la figura II.24.a se muestra en la figura III.25.a. junto con su matriz adyacente. La reducción por el -

BTA de esta matriz adyacente obtiene al conjunto - - - - -
 $\{c_4, c_5, c_6\}$ como el conjunto óptimo de corte.

Para encontrar los otros conjuntos de corrientes de corte que pertenezcan a la familia no redundante se aplica la regla de remplazamiento de tal manera que los otros miembros de la familia no redundante son los conjuntos $\{3,5\}$, $\{1,6\}$ y $\{2,6\}$.

Así termina la aplicación de este algoritmo.

CAPITULO TERCERO

APLICACION DE LOS ALGORITMOS DE DESCOMPOSICION

Para mostrar la utilidad de los algoritmos de descomposición, se aplicaron al diagrama de flujo de la figura III.1.a.

Este diagrama de flujo fué descompuesto anteriormente - por un programa de computadora implementado por varios investigadores del Instituto Mexicano del Petroleo (13) (Enero, 1978), - el cual determina la secuencia de cálculo de las unidades en - un proceso en el que existen recirculaciones.

Este programa consta de dos etapas:

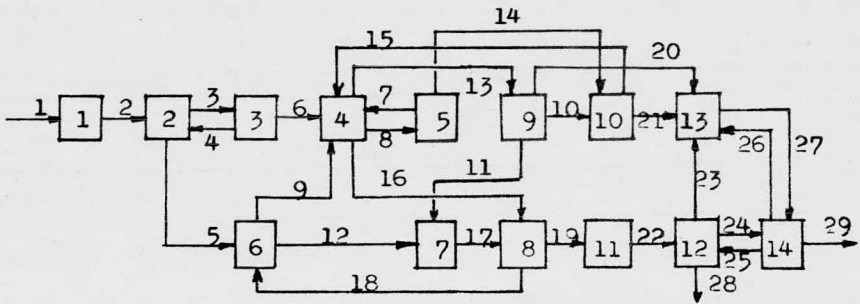
En la primera se determinan los anillos máximos de recirculación, indicando las unidades contenidas en ellos. Esta etapa está constituida por varios algoritmos relacionados con propiedades de las matrices booleanas. La matriz de alcance -- se calcula usando el algoritmo de Mah (1974) que ya se discutió en este trabajo.

En la segunda etapa se determinan las secuencias de cálculo para cada anillo máximo de recirculación.

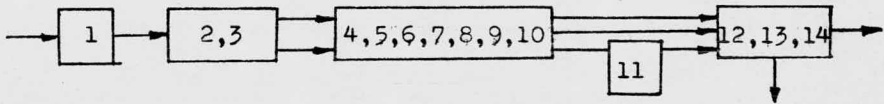
El programa se estructuró de tal forma que para cada -- bloque se determinan las secuencias de cálculo las cuales se -- obtienen de minimizar:

a) El número de corrientes de corte

b) el número de variables involucradas en las corrientes de corte.



(a)



(b)

Figura III. i .- Un proceso recirculado
y su partición en anillos máximos.

La segunda etapa está constituida por una modificación del algoritmo de Kehat y Schacham (1973), el cual no se discutió en este trabajo por falta de información.

Los resultados de este programa fueron los siguientes:

En la primera etapa se identificaron tres anillos máximos de recirculación: que contienen a las unidades:

(2,3), (4,5,6,7,8,9,10) y (12,13,14)

los cuales se representan en la figura III.1.b.

Las corrientes propuestas como miembros del conjunto -- óptimo de corte, obtenidas de minimizar el número de corrientes son:

$$c_4, c_8, c_{13}, c_{18}, c_{25}, c_{27} \dots \dots \dots (3.1)$$

con un total de 35 variables involucradas.

Las corrientes propuestas, obtenidas minimizando el número de variables involucradas en las corrientes propuestas -- son:

$$c_3, c_8, c_{18}, c_{10}, c_{26}, c_{23}, c_{24} \dots \dots (3.2)$$

con un total de 22 variables involucradas.

El número de variables para cada corriente del diagrama de flujo de la figura III.1a se muestran en la Tabla III.I.

Teniendo conocimiento de estos resultados se procedió -- a la aplicación de los algoritmos estudiados aquí en la siguiente forma:

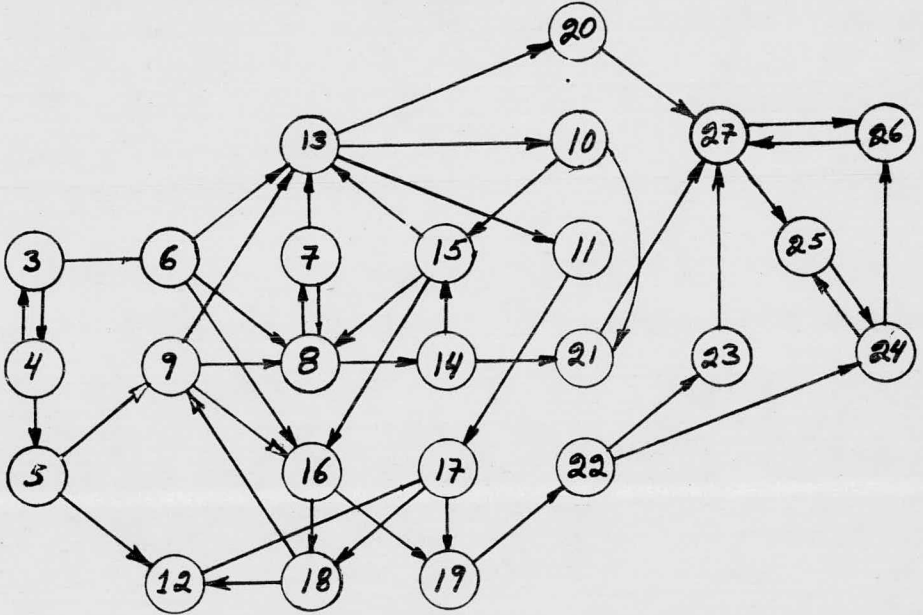


FIGURA III.2.- Diagrama de señal de flujo
del diagrama de flujo de la FIGURA
III.1.a

NUMERO DE VARIABLES DE CADA CORRIENTE			
NUMERO DE CORRIENTE	NUMERO DE VARIABLES	NUMERO DE CORRIENTE	NUMERO DE VARIABLES
1	4	16	4
2	2	17	3
3	3	18	2
4	6	19	5
5	9	20	2
6	5	21	6
7	7	22	8
8	3	23	2
9	5	24	4
10	3	25	7
11	4	26	5
12	2	27	9
13	8	28	6
14	2	29	2
15	8		

TABLA III.I.- Número de variables para cada corriente en la Figura III.1.a.

1.- Se aplicó el Algoritmo Básico de Rompimiento al diagrama de flujo de la figura III.1.a. Se escogió este algoritmo por su facilidad de manejo. La gráfica de señal de flujo para el diagrama de flujo de la figura III.1.a se muestra en la figura III.2 y su matriz adyacente se muestra en la figura III.3

Los resultados que se obtuvieron de la reducción de la matriz adyacente por medio del BTA fueron los siguientes:

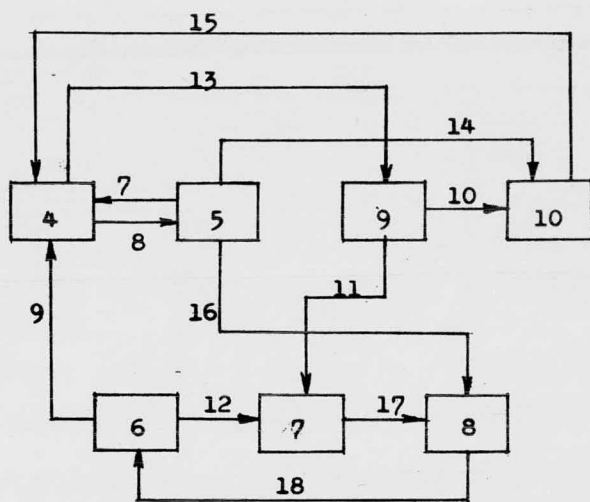
Para el problema del número mínimo de corrientes se obtuvo el conjunto $\{c_3, c_8, c_{13}, c_{25}, c_{27}\}$. Este resultado varía con el de los investigadores del IMP solo por una corriente que es la c_3 . Este conjunto tiene un total de 32 variables involucradas. El cambio efectuado puede ser de importancia al llegar a la etapa de convergencia debido al número de variables involucradas.

Para el problema de obtener el número mínimo de variables involucradas en el conjunto de corte se obtuvo el mismo resultado que los investigadores del IMP o sea el conjunto:

$$\{c_3, c_8, c_{10}, c_{18}, c_{23}, c_{24}, c_{26}\}$$

2.- Se aplicó el algoritmo de Upadhye y Grens (1975) junto con el Algoritmo Básico de Rompimiento.

Se han identificado 3 anillos máximos de recirculación, que son los que están formados por las unidades.

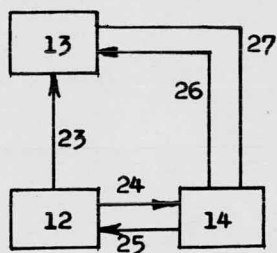


(a)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
a_1	1	1																
a_2						1											1	1
a_3				1												1		1
a_4				1		1		1									1	1
a_5					1			1		1								
a_6		1								1	1							
b_j	1	2	2		1	1	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	3	

(b)

Figura III.4 . Subgráfica máxima y su matriz de anillos .



(a)

	23	24	25	26	27
a ₇				1	1
a ₈		1	1		
a ₉	1		1		1
b _j	1	1	2	1	2

(b)

Figura III.5 Subgráfica máxima y su matriz de anillos

(2,3) 4,5,6,7,8,9,10) (12,13,14)

Para el primer anillo se puede identificar ya sea a la corriente c_3 o a la c_4 como corriente de corte. Aunque sería mejor elegir a c_3 porque tiene un número menor de variables involucradas.

Para el segundo anillo se tiene la subgráfica máxima de la figura III.4. a. junto con su matriz de anillos en la figura III.4.b. en el último renglón de la matriz de anillo se encuentran los factores de peso b_j 's de cada corriente calculados para poder aplicar el algoritmo básico de rompimiento, en su aproximación del número mínimo de factores de peso.

Para esta subgráfica se encuentra al conjunto:

$\{c_7, c_{10}, c_{11}, c_{12}, c_{14}, c_{16}\}$ como el conjunto óptimo de corte.

Siguiendo el mismo procedimiento para la subgráfica máxima mostrada junto con su matriz de anillo en la figura III.5, se tiene el conjunto $\{c_{23}, c_{24}, c_{26}\}$ como el conjunto óptimo de corte.

De tal forma que uniendo los conjuntos de corte para cada subgráfica se tiene el conjunto de corte óptimo para el sistema completo de la figura III.1.a. Siendo este conjunto óptimo de corte.

De tal forma que uniendo los conjuntos de corte para cada subgráfica se tiene el conjunto de corte óptimo para el

sistema completo de la figura III.1.a. Siendo este conjunto:

$$\{c_3, c_7, c_{10}, c_{11}, c_{12}, c_{14}, c_{16}, c_{23}, c_{24}, c_{26}\}$$

que es el conjunto que pertenece a la familia de descomposiciones no redundantes para el proceso de la figura III.1.a.

Si se aplica la regla de remplazamiento se encuentran los otros conjuntos miembros de esta familia, los cuales son:

$$\{c_3, c_7, c_{15}, c_{11}, c_{12}, c_{16}, c_{23}, c_{24}, c_{26}\}$$

$$\{c_3, c_7, c_{15}, c_{16}, c_{17}, c_{23}, c_{24}, c_{26}\}$$

$$\{c_3, c_7, c_{15}, c_{18}, c_{23}, c_{24}, c_{26}\}$$

$$\{c_3, c_7, c_9, c_{12}, c_{15}, c_{23}, c_{24}, c_{26}\}$$

$$\{c_3, c_8, c_{13}, c_{16}, c_{12}, c_{23}, c_{24}, c_{26}\}$$

$$\{c_3, c_8, c_{10}, c_{11}, c_{12}, c_{23}, c_{24}, c_{26}\}$$

$$\{c_3, c_8, c_{10}, c_{17}, c_{16}, c_{23}, c_{24}, c_{26}\}$$

$$\{c_3, c_8, c_{10}, c_{18}, c_{23}, c_{24}, c_{26}\} \#$$

$$\{c_3, c_8, c_{10}, c_{18}, c_{24}, c_{27}\}$$

$$\{c_3, c_8, c_{10}, c_{18}, c_{25}, c_{26}\}$$

Puede haber otras combinaciones de corrientes que pertenecen a esta familia.

Se puede observar que el conjunto marcado con # es el mismo que el obtenido por el programa del IMP y por el algoritmo básico de rompimiento para el número mínimo de variables involucradas.

También se puede observar que los conjuntos obtenidos - por el programa del IMP y por el algoritmo Básico de rompimiento para el problema del número mínimo de corrientes de corte, - nunca va a aparecer en la familia de conjuntos de descomposición no redundante ya que la combinación de las corrientes - - c_{25} y c_{27} no se va a obtener en algún conjunto de esta familia por más remplazamientos que se hagan.

DISCUSION Y CONCLUSIONES

Se han estudiado los algoritmos que se han publicado para la localización de los anillos máximos de recirculación dentro de una gráfica de diagrama de flujo de un proceso con recirculaciones

Esta localización de anillos máximos siempre se hace necesaria cuando se quiere encontrar la secuencia de cálculos óptima para un proceso con recirculaciones, y es la primera fase por la que debe pasar un proceso recirculado para su descomposición

Se han estudiado los algoritmos que se han publicado en los últimos años, para encontrar las corrientes de corte o rompimiento de un proceso con recirculaciones, estos algoritmos son el de Upadhye y Grens (1972), Barkley y Motard (1972), Pho y Lapidus (1973), Upadhye y Grens (1975).

Los algoritmos anteriores a estos no se estudiaron en este trabajo, pues ya habían sido estudiados anteriormente en otra tesis profesional anterior a esta (25). La cual fué revisada y se encontró que los algoritmos estudiados dentro de ese trabajo no son del todo eficientes para el propósito deseado.

Respecto a los algoritmos estudiados aquí, se puede afirmar que son más eficientes que los anteriores para los propósitos deseados de encontrar el número mínimo de corrientes de corte y el número mínimo de variables involucradas en las co-

rientes de corte.

No se puede hacer una comparación general de los algoritmos ya que presentan diferencias en la forma en que caracterizan a los sistemas que se van a descomponer, pero se pueden enunciar sus ventajas y desventajas y de esta forma llegar a conclusiones para determinar su mejor utilización.

Así que para el algoritmo de Upadhye y Grens (1972) se considera lo siguiente:

1.- Su aplicación se hace necesariamente sobre una gráfica cíclica máxima así que se necesita de un método adicional para localizar las gráficas cíclicas máximas de un proceso.

2.- Por su forma de analizar los procesos se hace necesaria su implementación en la computadora ya que no es apropiado para su aplicación manual.

3.- Es un algoritmo que utiliza la programación lineal y aunque es considerado por sus autores, más eficiente que otros algoritmos anteriores, también se considera que presentaría problemas al tratar de descomponer un proceso recirculado grande ya que requiere gran cantidad de almacenamiento en la memoria de la computadora.

4.- Este algoritmo está orientado a encontrar el conjunto de corrientes con la suma mínima de variables o factores de peso asociados. El conjunto mínimo de corrientes de --

corte se encuentra en esta aproximación como una trayectoria - no óptima.

El algoritmo de Barkley y Motard (1972) tiene los siguientes puntos a considerar:

1.- Se introdujo para su formulación el concepto de concepto de "gráfica de señal de flujo". Sobre esta gráfica se lleva a cabo la reducción.

2.- En esta aproximación solo se toma en cuenta para la reducción al número mínimo de corrientes de corte.

3.- Este algoritmo proporciona un método alternativo al de la matriz de alcance para localizar los anillos de recirculación, de tal manera que no es necesario encontrarlos previamente a su aplicación.

4.- Para su implementación se utiliza el manejo de listas de números, por lo que para procesos no muy grandes se puede aplicar manualmente, pero para procesos grandes se hace necesaria su implementación en la computadora.

En el algoritmo de Pho y Lapidus se considera lo siguiente:

1.- Este algoritmo resuelve los problemas considerados que son: minimización del número de variables o factores de peso para cortar los ciclos del sistema y , minimización del número de corrientes de corte.

2.- No necesita del establecimiento previo de los anillos máximos de recirculación.

3.- La reducción del sistema se lleva a cabo sobre la matriz adyacente de la gráfica de señal de flujo introducida por Barkley y Motard.

4.- La matriz adyacente de la gráfica de señal de flujo se puede implementar en la computadora, pero también da la facilidad de llevar a cabo la descomposición manualmente en forma fácil y rápida. De esta manera pueden descomponer sistemas moderadamente grandes sin hacer uso de la computadora.

5.- Obtiene la solución óptima en cualquier caso haciendo uso de método de "branch and bound".

El algoritmo de Upadhye y Grens (1975) tiene los siguientes puntos a considerar.

1.- Debido a que otros autores (26) han demostrado que las soluciones encontradas por los algoritmos anteriores en muchos casos no llegan al objetivo del mínimo esfuerzo computacional cuando se llega a la etapa de convergencias, este algoritmo tiene como finalidad encontrar la descomposición que converja en el número mínimo de iteraciones.

2.- Este punto de vista aparentemente descarta la posibilidad de utilizar los algoritmos anteriores, pero al final solamente introduce una pequeña modificación y utiliza la solución de encontrar el número mínimo de factores de peso para lograr sus propósitos.

3.- Para utilizar este algoritmo es necesario encontrar encontrar primero las redes cíclicas máximas dentro de un proceso.

4.- La utilización de este algoritmo dá varias soluciones posibles que tienen la misma conducta de convergencia no redundante, cuando se utiliza el método de sustitución directa para llevar a cabo la convergencia.

Conclusiones.-

1.- La utilización de los algoritmos para obtener el conjunto de corrientes de corte y con esto la secuencia óptima de cálculo de las unidades que forman el proceso, es justificable cuando se analizan procesos complejos cuya naturaleza obligue a un análisis profundo del método de cálculo a seguir.

Estos algoritmos se pueden incluir como partes de un programa de computadora que realice el balance de materia y energía para la simulación de un proceso complejo, aunque también se pueden utilizar por separado y tienen la posibilidad de aplicarse manualmente, cuando no se disponga de una computadora o se considere que no es necesaria su utilización.

2.- Del estudio realizado, puede concluirse que el método más conveniente para llevar a cabo la determinación de la secuencia óptima de cálculo, será emplear un algoritmo de ordenamiento y partición de los anillos máximos de recirculación (Mah 1974), seguido de la aplicación de un algoritmo que determina la secuencia óptima de cálculo dentro de estos anillos -

máximos.

El mejor algoritmo para llevar a cabo esto será el algoritmo de Upadhye y Grens (1975) pues trata de encontrar la secuencia óptima de cálculo, buscando el conjunto de corrientes de corte que conduzca a la convergencia más rápida cuando se utiliza el método de sustitución directa.

Este algoritmo utiliza a los algoritmos que tratan de encontrar al conjunto de corrientes con el número mínimo de factores de peso asociados, como una herramienta para sus propósitos.

3.- Las soluciones del número mínimo de corrientes de corte y el número mínimo de variables de corte pueden en algunos casos encontrarse dentro de la familia de descomposiciones no redundantes pero no hay ninguna seguridad de que así suceda por lo que quedan descartadas la posibilidad de que la solución encontrada por estos algoritmos sea la óptima.

4.- La solución óptima deberá buscarse entre los miembros de la familia de conjuntos de corrientes de corte, que tienen conducta de convergencia no redundante, encontrada por el algoritmo de Upadhye y Grens (1975).

BIBLIOGRAFIA

- 1.- Barkley, W.R. and R.L. Motard
"DECOMPOSITION OF NETS". Chemical
Engineering J. 3 (1972)
- 2.- Barnés. J. Francisco y C. Judson King.
"DISEÑO DE PROCESOS CON COMPUTADORA"
Memorias del Tercer Seminario Latino Americano
de Química. Facultad de Química. U.N.A.M.
p. 259. Cd. de México. Nov. (1970)
- 3.- Correa, V.A, M.A. Rosales, M.S. Kaufman. CyR. Hidalgo S.
" DETERMINACIÓN DE LA SECUENCIA DE CALCULO
EN UN PROCESO CON RECIRCULACION".
Revista del Instituto Mexicano del Petróleo.
Enero (1978).
- 4.- Crowe, et al. "CHEMICAL PLANT SIMULATION".
Prentice-Hall. Englewood Cliffs. N.J.
International Series in the Physical and Chemical
Engineering Sciences.
- 5.- Christensen H.J. y Dale F. Rudd.
" ESTRUTURING DESING COMPUTATIONS "
AICHE J. 15,94, (1969)
- 6.- Forder G.J. y H.P Hutchinson Chemical
Engineering Science. Vol. 24, pág. 771 (1969).
- 7.- Foust, A.S. et al. "PRINCIPLES OF UNIT OPERATIONS"
NEW YORK AND LONDON. John Wiley (1960).
- 8.- Henley, E.J. and E.M. Rosen. "MATERIAL AND
ENERGY BALANCE COMPUTATIONS". New York.
John Wiley (1969).
- 9.- Hougen, Watson y Ragatz. "CHEMICAL PROCESS
PRINCIPLES", Part I, New York. John Wily.
- 10.- Kehat E. and Shacham M. "CHEMICAL PROCESS
SIMULATION PROGRAMS-2 PARTITIONING AND
TEARING SYSTEM FLOWSHEETS". Process Technology.
18 (3), 115, (1973).

- 11.- K.F.Lee, A.H. Masso, and D.F. Rudd
"BRANCH AND BOUND SYNTHESIS OF INTEGRATED PROCESS
DESIGNS". I and E.C. Fundamentals. Vol. 9, No 1
February (1970).
- 12.- Ledet W.D. and D.M. Himmelblau
"DECOMPOSITION OF LARGE SCALE SYSTEMS"
Adv. Chemical Engineering. Vol. 8, 186 (1970).
- 13.- Lee, W., Dale, F. Rudd
"ON THE ORDERING OF RECYCLE CALCULATIONS"
AIChE Journal. Vol. 12, No. 6, 1184. Nov. (1966)
- 14.- Mah, S.R. "CONSTRUCTIVE ALGORITHM FOR
COMPUTING THE REACHABILITY MATRIX" AIChE Journal.
Vol 20, No. 6, 1227, Nov. (1974).
- 15.- Meissner, P.H. "PROCESS AND SYSTEMS IN INDUSTRIAL
CHEMISTRY". Englewood Cliffs, N.J., Prentice-Hall,
International Series (1971)
- 16.- Motard, L.R., M. Shacham and E.M. Rosen
"STEADY STATE CHEMICAL PROCESS SIMULATION"
AIChE Journal. Vol. 21, No. 3, 417, Mayo (1975)
- 17.- Norman L.R. A MATRIX METHOD FOR LOCATION OF
CYCLES OF A DIRECTED GRAPH". AIChE Journal Vol. 11
No. 3, 450, Mayo (1965).
- 18.- Pho, K.T. and L. Lapidus
"TOPICS IN COMPUTER-AIDED DESIGN. PART I. AN OPTIMUM
TEARING ALGORITHM FOR RECYCLE SYSTEMS. AIChE Journal
Vol. 19, No. 6, 1170, Nov, (1973).
- 19.- Rudd, D.F. and C.C. Watson, " STRATEGY IN PROCESS
ENGINEERING". New York. John Wiley (19).
- 20.- Rudd, Powers and Siirola
"PROCESS SYNTHESIS". Englewood Cliffs. N.J.
Prentice-Hall International Series.
- 21.- Sargent H.W. and A.W. Westerberg.
"SPEED-UP" IN CHEMICAL ENGINEERING DESIGN"
Trans. Instn. Chem. Engrs. Vol. 42, 190, (1964).

- 22.- Shaheen I Esber, "BASIC PRACTICE OF CHEMICAL ENGINEERING". Boston, Houghton Mifflin Co. (1975).
- 23.- Upadhye S. Ravindra and Edward A. Grens II. "A EFFICIENT ALGORITHM FOR OPTIMUM DECOMPOSITION OF RECYCLE SYSTEMS". AICHE Journal, Vol. 18, No. 3 533, Mayo 1972.
- 24.- Upadhye R.S. and E.A. Grens " SELECTION OF DECOMPOSITION OF RECYCLE SYSTEMS". AICHE Journal 21, 136, (1975).
- 25.- Valdez Krieg Ernesto " ESTUDIO DE LOS ALGORITMOS DE RUDD Y CHRISTENSEN PARA LA DETERMINACION DE SECUENCIAS OPTIMAS DE PROCESOS". Tesis Fac. de Química U.N.A.M. (1971).
- 26.- Shacham M, and R.L. Motard " APPLICATIONS OF THE THEORY OF LINEAR RECYCLE SYSTEMS ". Articulo presentado en el AICHE 78th National Meeting, Salt Lake City (1974)
- 27.- Rubin D.I. "GENERALIZED MATERIAL BALANCE" Chemical Eng. Progress Symposium Series N°37, Vol. 58