

4  
Zeje.



**Universidad Nacional Autónoma de México**

**Facultad de Estudios Superiores  
ZARAGOZA**

**SISTEMA EXPERTO PARA LA SINTESIS DE  
SECUENCIAS DE SEPARACION (SESS)**

**TESIS MANCOMUNADA**  
Que para obtener el Título de  
**INGENIERO QUIMICO**  
*P r e s e n t a n*  
*Jorge Baños Hernández*  
*José Luis Cote Guzmán*  
*Carlos Manuel González Ruiz*

Director de Tesis: ING. EDUARDO VAZQUEZ ZAMORA

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN** 1994  
México, D. F.



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**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.

## A G R A D E C I M I E N T O S .

Con todo cariño y admiración, para la mujer que me dió todo sin esperar nada a cambio: Elvira Hernández C., mi madre.

Con todo respeto, para quien me dió el privilegio de llamarlo padre: Zenaido Baños G.

Con todo aprecio, para quienes me brindaron su dedicación y apoyo durante esta etapa de mi vida: Mis hermanos y hermanas.

Con todo amor, para quien compartió conmigo la vida de estudiante: Celina Gutierrez V.

Para ellos y demás personas que me ayudaron durante mi formación profesional, mi más grande agradecimiento.

*JORGE.*

Primeramente doy gracias a Dios el permitirme la realización y culminación de este trabajo, puedo decir como dice una parte bíblica " Todo lo puedo en Cristo que me fortalece. Fil. 4:13 ".

Quiero resaltar el agradecimiento a mis padres, Julián y Elvira, que con mucho esfuerzo me dieron a lo largo de todos mis estudios su apoyo, comprensión y motivación constante, aspectos que considero importantes en mi vida como estudiante.

Finalmente agradezco a mis profesores, compañeros y amigos que fortalecieron mi espíritu y formación profesional.

*JOSE LUIS.*

Con mucho cariño y agradecimiento para mis padres, Ismael y María Teresa, pues a ellos debo todo cuanto tengo y soy. También con especial afecto para mis hermanas Tere, Claudia y Beatriz, por compartir conmigo momentos de apoyo y reflexión.

Con gratitud para el Arq. José Luis Reséndiz, por su invaluable ayuda en la realización de este trabajo.

Gracias a Dios, por darme a mi familia y la oportunidad de alcanzar mis metas.

*CARLOS MANUEL.*

Agradecemos cordialmente al Ing. Eduardo Vázquez Zamora, amigo y profesor, por su valiosa colaboración en el desarrollo de este trabajo, así como su entusiasmo y generosidad.

Con respeto y afecto a todos los profesores que nos acompañaron durante nueve semestres.

A nuestros amigos y compañeros que compartieron con nosotros una inolvidable etapa en nuestras vidas.

Marzo de 1994.

J. B. H.

J. L. C. G.

C. H. G. R.

# **C O N T E N I D O**

## **INTRODUCCION.**

## **CAPITULO UNO: INTELIGENCIA ARTIFICIAL Y SISTEMAS EXPERTOS.**

### **1.1 INTELIGENCIA ARTIFICIAL.**

- 1.1.1 ELEMENTOS BASICOS DE I. A.
- 1.1.2 BUSQUEDA HEURISTICA.
- 1.1.3 REPRESENTACION DEL CONOCIMIENTO.
- 1.1.4 LENGUAJES Y HERRAMIENTAS DE I. A.
- 1.1.5 LOGICA COMPUTACIONAL, INFERENCIA LOGICA Y RAZONAMIENTO POR SENTIDO COMUN.
- 1.1.6 APRENDIZAJE DE MAQUINAS.
- 1.1.7 AREAS DE APLICACION EN I. A.
- 1.1.8 FUTURO DE LA PROGRAMACION EN I. A.

### **1.2 SISTEMAS EXPERTOS.**

- 1.2.1 REPRESENTACION DEL CONOCIMIENTO EN UN SISTEMA EXPERTO.
- 1.2.2 ADQUISICION DEL CONOCIMIENTO.
- 1.2.3 EL DISPOSITIVO DE INFERENCIA.
- 1.2.4 APLICACIONES DE LOS SISTEMAS EXPERTOS.
- 1.2.5 EJEMPLOS DE SISTEMAS EXPERTOS DESARROLLADOS.
- 1.2.6 FUTURO DE LOS SISTEMAS EXPERTOS.

## **CAPITULO DOS: SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION PARA MEZCLAS MULTICOMPONENTES.**

### **2.1 CONCEPTOS GENERALES.**

### **2.2 INTERACCION ENTRE LA SINTESIS DE PROCESOS Y LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION.**

- 2.2.1 SINTESIS DE PROCESOS.
- 2.2.2 SOLUCION AL PROBLEMA DE SINTESIS DE PROCESOS.

## **2.3 METODOS PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION.**

- 2.3.1 METODOS HEURISTICOS.**
- 2.3.2 METODOS ALGORITMICOS.**
- 2.3.3 METODOS EVOLUTIVOS.**
- 2.3.4 METODO TERMODINAMICO.**
- 2.3.5 METODOS COMBINADOS.**

## **CAPITULO TRES: METODO DE NADGIR Y LIU PARA LA SINTESIS SISTEMATICA DE SECUENCIAS DE SEPARACION DE MEZCLAS MULTICOMPONENTES.**

- 3.1 METODO HEURISTICO.**
- 3.2 COMPARACION CON METODOS HEURISTICO-EVOLUTIVOS RECIENTES.**
- 3.3 EJEMPLOS ILUSTRATIVOS.**
- 3.4 COMENTARIOS AL METODO.**
- 3.5 CONSIDERACIONES ADICIONALES.**

## **CAPITULO CUATRO: SESS. PERSPECTIVA DEL INGENIERO QUIMICO.**

- 4.1 REPRESENTACION DEL PROBLEMA DE SINTESIS.**
  - 4.1.1 DIAGRAMA DE ASIGNACION DE COMPONENTES (DAC) Y MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES (MAC).**
  - 4.1.2 REPRESENTACION DEL COMPONENTE Y SEPARACIONES DEL PRODUCTO.**
- 4.2 ANALISIS DE FACTIBILIDAD DE LAS OPERACIONES DE SEPARACION.**
  - 4.2.1 SELECCION DE LOS COMPONENTES CLAVE LIGERO (LK) Y CLAVE PESADO (HK).**
  - 4.2.2 METODO DE ANALISIS DE FACTIBILIDAD.**
- 4.3 TABLA DE ESPECIFICACION DE SEPARACION (TES).**
- 4.4 ANALISIS DE BYPASS Y TRANSFORMACION DE PSEUDOPRODUCTOS.**
  - 4.4.1 UTILIZANDO BYPASS.**
  - 4.4.2 EFECTOS DE LA CORRIENTE DE BYPASS.**
  - 4.4.3 TRANSFORMACION DE PSEUDOPRODUCTOS.**
- 4.5 IMPLEMENTACION DE HEURISTICAS.**

## CAPITULO CINCO: SESS, PERSPECTIVA DEL USUARIO.

- 5.1 REQUERIMIENTOS PARA EL USO DE SESS.
- 5.2 INFORMACION TECNICA REQUERIDA.
- 5.3 EJEMPLOS DE APLICACION.
- 5.4 MANEJO DE ARCHIVOS PARA ENTRADA Y SALIDA DE DATOS.

## CAPITULO SEIS: SESS, PERSPECTIVA DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL.

- 6.1 REPRESENTACION DEL CONOCIMIENTO.
  - 6.1.1 ESTRUCTURA LOGICA.
  - 6.1.2 DESCOMPOSICION DE PROBLEMA.
  - 6.1.3 RESTRICCIONES.
- 6.2 BUSQUEDA.
  - 6.2.1 ESTRATEGIA Y CONTROL TOTAL.
  - 6.2.2 ASPECTOS DE BUSQUEDA Y CONTROL.
- 6.3 PROGRAMACION PROLOG.

CONCLUSIONES.

BIBLIOGRAFIA.

APENDICE.

**S I S T E M A   E X P E R T O**

**P A R A   L A**

**S I N T E S I S   D E   S E C U E N C I A S**

**D E**

**S E P A R A C I O N**

**( S E S S )**

## **I N T R O D U C C I O N .**

Dentro de la Ingeniería de Procesos existen diversas situaciones en las que el ingeniero químico se enfrenta a problemas concernientes al diseño de procesos de separación de mezclas multicomponentes, principalmente mediante operaciones como destilación. El análisis de los caminos más viables, desde un punto de vista técnico-económico, es un factor relevante en la realización del diseño de tales procesos, que presenta elementos de interés, tanto didácticos como prácticos, para el ingeniero de proceso.

Uno de los problemas de diseño de procesos más importante es la síntesis sistemática de secuencias de separación de mezclas multicomponentes, correspondiente a la selección apropiada del método y la secuencia para separar dichas mezclas en productos de composición definida. Las técnicas generales que se han desarrollado para resolver este tipo de problema, incluyen: procedimientos algorítmicos que involucran algunos principios de optimización; métodos heurísticos basados en reglas empíricas; estrategias evolutivas que logran mejoras sistemáticas a secuencias de separación previas; y métodos termodinámicos que aplican algunos principios de esta ciencia. En ocasiones se han usado combinaciones de dos o más de estas técnicas.

Otro aspecto importante es el gran desarrollo que ha tenido en los últimos años la Inteligencia Artificial, como una herramienta para la Ingeniería Química. Este crecimiento se ha manifestado principalmente en las áreas de Sistemas Expertos y Redes Neuronales, teniendo aquéllos un enorme auge en la actualidad, por sus grandes perspectivas en el corto y mediano plazo, por las oportunidades de realización que poseen, y por la existencia de eficientes herramientas de desarrollo, tal como lo es el lenguaje declarativo PROLOG.

Los Sistemas Expertos pueden emplearse en la resolución de problemas de síntesis de procesos, presentando mejores resultados cuando se aplican técnicas de búsqueda heurística, pues este tipo de procedimientos tiene la ventaja con respecto a otros, de no necesitar un respaldo matemático riguroso y de ser compatible con las características de los Sistemas Expertos basados en el conocimiento, siendo relativamente fácil su implementación.

De lo anterior, puede establecerse un objetivo terminal, que es el desarrollo de un Sistema Experto para la Síntesis de Secuencias de Separación, como una herramienta de apoyo didáctico y técnico para la Ingeniería de Procesos y la Inteligencia Artificial aplicada, conjuntando estos dos campos de conocimiento.

El cumplimiento de este objetivo, requiere el desarrollo de las siguientes actividades:

- La definición de los elementos básicos de Inteligencia Artificial en materia de Sistemas Expertos, para el establecimiento de una base introductoria a la elaboración e implementación de los mismos.

- La revisión y el análisis de diferentes métodos de síntesis de secuencias de separación, así como la selección de la técnica más adecuada para la estructuración del sistema experto.

- La aplicación del conocimiento heurístico en la síntesis de secuencias de separación, con la finalidad de resolver problemas de diseño de este tipo de procesos.

- La interrelación de las características estructurales y funcionales de un Sistema Experto basado en conocimiento, con el método heurístico ordenado para la síntesis de secuencias de separación.

- El uso de las herramientas computacionales disponibles para el desarrollo del Sistema Experto para la Síntesis de Secuencias de Separación (SESS), con una interfase de comunicación al usuario acorde a las características del "software" actual.

Las actividades anteriores se conjuntan en un trabajo que comprende seis capítulos, los cuales incluyen el siguiente material:

- En el capítulo uno se presentan los elementos básicos de la Inteligencia Artificial, orientados al desarrollo de sistemas expertos dentro de la Ingeniería Química.

- El capítulo dos contiene una recopilación de los diferentes métodos de síntesis de secuencias de separación (heurísticos, algorítmicos, evolutivos, termodinámicos y combinados) y un perfil descriptivo de los más representativos.

- El capítulo tres presenta una descripción detallada del método heurístico propuesto por Nadgir y Liu, como la opción más factible para ser acoplada a un sistema experto con base en conocimiento.

- En el capítulo cuatro se introducen los conceptos teóricos que complementan la técnica heurística, cuya acción conjunta permite la implementación de SESS.

- El capítulo cinco contiene las directrices necesarias para la ejecución de SESS, enfocadas a la resolución de problemas prácticos.

- El capítulo seis formula un procedimiento de búsqueda estratégica para la estructura lógica del programa, observando las técnicas de programación más comunes en Inteligencia Artificial.

**CAPITULO UNO**

**INTELIGENCIA ARTIFICIAL  
Y  
SISTEMAS EXPERTOS**

En este capítulo se presentan los conceptos generales dentro de la Inteligencia Artificial, importante y vanguardista rama de la ciencia computacional, así como de los sistemas expertos, una de las más populares y prometedoras áreas de aplicación de la Inteligencia Artificial.

De manera sencilla, pero intentando abarcar los aspectos más relevantes, se mencionan los elementos básicos de la Inteligencia Artificial, como son los procesos de búsqueda heurística, representación del conocimiento, lógica computacional y aprendizaje de máquinas. Además, se incluye una breve discusión sobre los principales lenguajes "inteligentes" (LISP y PROLOG), importantes herramientas para el desarrollo de la Inteligencia Artificial. Con el propósito de remarcar las perspectivas futuras y las condiciones actuales de esta área de la ciencia computacional, se incluyen también comentarios con respecto a las áreas de aplicación que posee y el desarrollo que se estima para los próximos años.

Como una de las aplicaciones más interesantes de la Inteligencia Artificial y objetivo fundamental de este trabajo, se consideran también los conceptos relevantes en materia de sistemas expertos, tales como representación del conocimiento (sistemas basados en reglas), adquisición del conocimiento y mecanismos de inferencia. Finalmente, de forma similar a la Inteligencia Artificial, se discuten las aplicaciones de los sistemas expertos, incluyendo ejemplos de sistemas ya desarrollados, así como su futuro próximo, especialmente dentro de las diversas ramas de la Ingeniería Química.

## **11 INTELIGENCIA ARTIFICIAL**

La Inteligencia Artificial (IA), también conocida como inteligencia de máquinas o programación heurística, es el estudio del comportamiento inteligente a través de maquinaria computacional. Sirve como base para la ingeniería de conocimiento, una área relacionada a la aplicación de las técnicas de IA a fines prácticos. Esta característica es lo que ha ganado considerable atención en los últimos años. Muchas aplicaciones están actualmente bajo desarrollo y otras tantas ya han sido implementadas en diversos campos.

De manera simple, IA se refiere al diseño de programas de cómputo para aprovechar al máximo las capacidades del elemento máquina. Por ello, la investigación en IA se enfoca al desarrollo de sistemas computacionales con comportamiento inteligente. Los programas en IA involucran primariamente procesos simbólicos, con altos matices de complejidad y ambigüedad. Estos procesos generalmente no cuentan con algoritmos de solución, por lo que se requiere investigación al respecto. Dentro de este contexto, IA se enfrenta con la resolución de problemas y la toma de decisiones en el ámbito humano cotidiano.

La resolución de problemas en IA difiere notoriamente de los cálculos científicos e ingenieriles, los cuales son principalmente numéricos por naturaleza y proporcionan una solución satisfactoria. En contraste, los programas en IA muchas veces incluyen palabras y conceptos, y no garantizan una solución correcta, de la misma forma que un humano resuelve problemas con un cierto intervalo de tolerancia en su respuesta.

Para enfatizar la diferencia entre los programas de IA y los programas de cómputo convencionales, se enumeran algunas características típicas de ambos rubros en la TABLA 1.1.

**TABLA 11 PROGRAMACION EN I.A. vs. PROGRAMACION CONVENCIONAL.**

Programación en I. A.	Programación convencional
<p>Procesos predominantemente simbólicos.</p> <p>Búsqueda heurística (pasos implícitos encaminados hacia la solución).</p> <p>Estructura de control separada del dominio de conocimiento.</p> <p>Fácil de modificar, actualizar y expandir.</p> <p>Algunas respuestas incorrectas son tolerables a menudo.</p> <p>Respuestas aceptadas generalmente satisfactorias.</p> <p>Programas exploratorios.</p>	<p>Procesos predominantemente numéricos.</p> <p>Algorítmicos (pasos explícitos hacia la solución).</p> <p>Información y control integrados conjuntamente.</p> <p>Difícil de modificar.</p> <p>Requiere respuestas correctas.</p> <p>La mejor solución posible es perseguida.</p> <p>Programas estructurados.</p>

Una de las características principales de los programas de IA es la búsqueda heurística. En términos sencillos, la búsqueda heurística permite que la computadora presente una serie de soluciones alternativas cuando no es posible obtener una solución óptima a un problema dado. Estas alternativas se encuentran siguiendo la ruta marcada por reglas empíricas (heurísticas) que ayudan a compactar y limitar el campo de búsqueda.

Otro aspecto interesante de los programas de IA es el uso extensivo del dominio de conocimiento. Este conocimiento se encuentra disponible para ser usado cuando se necesite durante la búsqueda. Es común en los programas de IA separar este conocimiento del mecanismo que controla la búsqueda. De esta forma, cualquier cambio en el conjunto de conocimientos sólo requiere un cambio en la base de conocimientos del programa. En contraste, el dominio de conocimiento y el control en los programas de cómputo convencionales se integran conjuntamente en la mayoría de los casos. Como resultado, estos programas son difíciles de modificar, puesto que las implicaciones de los cambios hechos en una sección del programa deben ser examinadas cuidadosamente por el efecto que produzcan en otras secciones del programa.

## 1.11 ELEMENTOS BASICOS DE IA.

La Inteligencia Artificial posee cinco componentes básicos claramente diferenciados. Cada uno de estos componentes posee características distintivas que permiten el desarrollo de técnicas y programas eficientes en IA. De manera general, puede mencionarse para cada uno de ellos las siguientes características (en las siguientes secciones serán tratados con mayor detalle).

### a) Búsqueda heurística.

Gran parte de los trabajos en IA se han enfocado en la

derivación de programas que busquen soluciones a problemas dados. En IA, una manera común de representar la resolución de problemas es en términos de un árbol, iniciando en la cima con una condición original y ramificando cada vez que se tome una decisión. Al ir descendiendo en el árbol, se pueden presentar muchas posibilidades de decisiones diferentes, llegando a ser muy grande en ocasiones la ramificación de la parte inferior del árbol. Por ello, es necesario contar con estrategias de búsqueda eficiente en los árboles de decisión.

Inicialmente, se contaba con métodos "ciegos" de búsqueda en los árboles de decisión, los cuales eran procedimientos ordenados que aseguraban que una misma ruta de solución no se intentara más de una vez. Sin embargo, para problemas complejos, estos procedimientos se hicieron inadecuados. Por ello, las reglas empíricas (heurísticas), fueron necesarias para auxiliar en la elección de las ramificaciones más viables y así estrechar el campo de búsqueda. Aunque la búsqueda heurística pudiera no encontrar la trayectoria óptima, reduce grandemente la búsqueda global y encamina los esfuerzos hacia el objetivo principal.

#### b) Representación del conocimiento.

El comportamiento inteligente no es resultado exclusivo de los métodos de razonamiento, sino también del conjunto de conocimientos sobre el cual se aplica tal razonamiento. Como ejemplo, puede mencionarse el perfeccionamiento en los métodos de razonamiento del ser humano a lo largo de su existencia, aunado a la cada vez más grande reserva de conocimientos. Así, cuando un conjunto sustancial de conocimientos tiene que ser empleado en una situación dada, se necesitan métodos para modelar eficientemente este conocimiento y hacerlo fácilmente accesible. El resultado de este énfasis en el conocimiento es que su representación es una de las áreas de investigación más activas en IA. El conocimiento necesario no siempre es fácil de representar, o su mejor representación no es obvia para una tarea específica.

c) Lenguajes y herramientas.

A lo largo del desarrollo de la ciencia de computadoras se han creado lenguajes de alto nivel específicos para diferentes dominios de aplicación. Esto también ha sido el caso en IA, siendo LISP y PROLOG los principales lenguajes de programación en esta área, sirviendo ambos como base para la implementación de diversas herramientas de "software" en la expresión de conocimientos, formulación de sistemas expertos y ayudas de programación básicas.

d) Sentido común, razonamiento y lógica.

En íntima relación con la representación del conocimiento, se presentan dos elementos importantes en IA: representación de sentido común y lógica.

El primer tópico ha sido clave en las investigaciones en IA, al grado de merecer atención particular de diversas corporaciones e instituciones del ramo. Asociado a esta área se tiene el razonamiento bajo incertidumbre.

El segundo tópico reviste su importancia en la necesidad de contar con formas de deducir eventos a partir de un conjunto de hechos, y de probar la correcta derivación de un juego de conclusiones a partir de una serie de premisas. En este contexto, la lógica computacional fue una de las grandes esperanzas en IA para obtener un método de resolución de problemas universal. Aunque el interés en la lógica computacional decayó un poco debido a la pobre convergencia de solución en problemas complejos, en los últimos años se ha renovado gracias a nuevas formulaciones y al uso de heurísticas para guiar la búsqueda de soluciones.

e) Aprendizaje de máquinas.

Esta área (aun en etapa de investigación) se ha convertido en uno de los principales temas de IA, partiendo de la premisa que muchas personas establecen, diciendo que una máquina no es inteligente si no puede aprender. Cuando el aprendizaje de una

máquina se haya logrado, el ser humano se enfrentará a una nueva revolución. En la actualidad algunos sistemas de aprendizaje han producido resultados muy interesantes; algún día las máquinas serán capaces de aprender a lo largo de su periodo de vida, erigiendo la base de conocimiento necesaria para el razonamiento avanzado. Esto abrirá nuevas y espectaculares aplicaciones en oficinas, fábricas, escuelas e inclusive, en hogares.

Las máquinas pueden actualizar su cúmulo de conocimientos mediante la lectura de material en lenguaje natural, así como mediante el aprendizaje por experiencia de la resolución de problemas a los que haya sido destinada tal máquina. Las computadoras también deben ser capaces de formular conclusiones a partir de la examinación de bases múltiples de datos, construyendo así conocimientos nuevos a partir de los ya existentes.

## 1.12 BUSQUEDA HEURISTICA.

La resolución de problemas en IA puede verse como una búsqueda entre varias alternativas. De esta forma es posible representar el espacio de búsqueda resultante como una estructura jerárquica llamada árbol, en la que se interconectan diversos estados o nodos mediante un cierto número de ramificaciones o trayectorias. La solución corre desde un nodo inicial a lo largo de las ramas del árbol y culmina en nodos terminales, es decir, metas u objetivos.

Para un problema complejo y grande, es evidentemente oneroso trazar de manera explícita tales árboles para todas las posibilidades y examinarlas directamente para hallar la mejor solución. Como resultado, generalmente el árbol es implícito y la computadora genera las ramas y los nodos al tiempo que busca una solución. En este proceso de búsqueda se puede seguir un razonamiento progresivo (desde el nodo raíz hasta el nodo

objetivo) o regresivo (desde un nodo objetivo en particular hasta el nodo raíz). Para problemas típicos simples se emplea la llamada búsqueda ciega, que es un enfoque progresivo, pero consume demasiado tiempo. En esta búsqueda se elige algún esquema de ordenación y se aplica hasta que la respuesta es encontrada. Hay dos procedimientos comunes de búsqueda ciega: búsqueda de primera amplitud y búsqueda de primera profundidad. En la búsqueda de primera amplitud, los nodos del árbol de búsqueda se generan y examinan nivel por nivel empezando con el nodo raíz. En la búsqueda de primera profundidad, se genera un nodo nuevo (en el siguiente nivel) a partir del que se está examinando; así la búsqueda continúa más profundamente cada vez hasta que es forzada a dar marcha atrás.

La búsqueda ciega no emplea conocimiento con respecto al problema de guiar la búsqueda. En problemas complejos, este tipo de búsqueda falla, cayendo ante la explosión combinatorial de las posibles trayectorias. Esto es, si en promedio hay  $n$  operadores posibles que pueden ser aplicados a un nodo y el espacio de búsqueda se extiende a una profundidad  $d$ , el tamaño del espacio de búsqueda tiende a crecer en la relación  $n^d$ . En este punto, diversos métodos heurísticos se han diseñado para limitar el espacio de búsqueda, usando información acerca de la naturaleza y la estructura del dominio del problema. Las heurísticas son reglas de dedo, técnicas o conocimiento que pueden ser usados para guiar la búsqueda. La búsqueda heurística es una de las principales contribuciones de IA para la resolución eficiente de problemas. A menudo opera generando y probando estados intermedios a lo largo de la trayectoria de solución potencial.

Un método directo y progresivo para elegir trayectorias mediante este enfoque consiste en aplicar una función de evaluación a cada nodo generado y entonces seguir las trayectorias que tengan el menor costo estimado. Típicamente, la función de evaluación calcula el costo desde el nodo raíz hasta el nodo

particular que se examina y, usando reglas heurísticas, estima el costo desde ese nodo hasta la meta u objetivo. Sumando las dos cantidades se obtiene el costo total estimado a lo largo de la trayectoria, sirviendo como guía, sea para seguir por esa trayectoria, o sea para continuar por otra trayectoria más atractiva, que se examine de la misma forma. Sin embargo, esto puede no ser un enfoque eficiente para minimizar el esfuerzo de búsqueda en problemas complejos.

### 1.13 REPRESENTACION DEL CONOCIMIENTO.

El propósito de la representación del conocimiento es organizar la información requerida en una forma tal que el programa de IA tenga fácil acceso a ella para la toma de decisiones, la planeación, el reconocimiento de objetos y situaciones, el análisis de escenas, trazado de conclusiones, y otras formas cognoscitivas. Por ello, la representación del conocimiento es especialmente importante para los sistemas expertos, la visión por computadora y la comprensión del lenguaje natural.

Los esquemas de representación usualmente se clasifican en declarativos y de procedimiento. Los declarativos se refieren a la representación de hechos y afirmaciones, mientras que los esquemas de procedimiento se refieren a acciones. Los esquemas declarativos incluyen esquemas relacionales (redes semánticas) y esquemas lógicos. Los esquemas de procedimiento se refieren a las llamadas reglas de producción. Otros enfoques son la representación analógica o directa, las listas de propiedades y las estructuras y guiones. Las principales características de cada uno de estos esquemas se enlistan a continuación:

#### a) Esquemas de representación lógica.

El principal método para representar una base de

conocimiento de manera lógica es el empleo de la Lógica de Predicados de Primer Orden. En este enfoque, una base de conocimiento puede verse como una colección de fórmulas lógicas que proveen una descripción parcial del dominio. Las modificaciones a la base de conocimiento resultan de incorporación o eliminación de estas fórmulas lógicas.

Las representaciones lógicas son fáciles de comprender y cuentan con conjuntos de reglas inferenciales, necesarias para su operación. Una desventaja de la representación lógica es su tendencia a consumir grandes cantidades de memoria.

b) Redes semánticas.

Una red semántica es un medio para describir las propiedades y relaciones de objetos, eventos, conceptos, situaciones o acciones, a través de una gráfica directa, consistente de nodos y ramas etiquetadas (arcos de conexión entre nodos). Debido a su naturalidad, las redes semánticas son muy populares en IA.

c) Representaciones de procedimiento y sistemas de producción.

En las representaciones de procedimiento, el conocimiento del dominio está contenido en procedimientos (programas pequeños que saben cómo hacer cosas específicas, tomando ciertas acciones en situaciones dadas). Los enfoques de clasificación de representación de procedimiento están basados en la elección de los mecanismos de activación para los procedimientos y las formas usadas para las estructuras de control.

Los dos enfoques comunes consisten de procedimientos de representación de las secciones principales del conocimiento (subrutinas) y procedimientos más modulares, tales como las populares "reglas de producción". El mecanismo de activación común para los procedimientos es el establecer una correspondencia entre el estado del sistema y las condiciones previas necesarias para invocar el procedimiento.

Las reglas de producción están caracterizadas por un formato del tipo PATRON-ACCION, SI-ENTONCES, ANTECEDENTE-CONSECUENCIA, SITUACION-PROCEDIMIENTO, etc. Debido a su representación modular del conocimiento y a su facilidad de expansión y modificación, las reglas de producción tal vez sean la forma de representación del conocimiento más popular en IA, aplicada en la mayoría de los sistemas expertos desarrollados.

d) Representaciones analógicas o directas.

En muchos casos es apropiado usar representaciones naturales, tales como un arreglo de valores de brillantez para una imagen, o una reducción de los límites de escena en un sistema de visión por computadora. Estas representaciones naturales son útiles en la visión computacional, la planeación espacial, el razonamiento geométrico y la navegación.

Esta forma de representación tiene las ventajas de ser fácil de entender, simple para actualizar y generalmente permite que propiedades importantes sean observadas directamente, de manera que no tengan que inferirse.

e) Listas de propiedades.

Un enfoque para describir el estado de un dominio dado es asociar a cada objeto una lista de propiedades que incluyan todas aquellas propiedades (atributos y valores asociados) del objeto pertinente a la descripción del estado. Este, y por tanto las propiedades del objeto, pueden ser actualizadas cuando una situación sea cambiada.

f) Estructuras y guiones.

Una gran parte de las actividades diarias del ser humano están relacionadas con situaciones estereotipadas, tales como ir al trabajo, comer, ir de compras, etc. Para representar estos eventos, objetos o situaciones estereotipados se han concebido las llamadas "estructuras". Una estructura es un conjunto de datos

complejo que contiene celdas para los objetos y las relaciones que serían apropiados para la situación. Conjuntamente, en cada estructura se tiene la siguiente información: cómo usar la estructura, qué hacer si algo inesperado ocurre y valores asignados previamente para las celdas o ranuras.

Las estructuras pueden incluir información tanto de procedimiento como declarativa; facilitan los procesos de razonamiento de naturaleza expectativa, basados en la confirmación de expectativas rellenando las celdas; también, organizan el conocimiento en una forma que direcciona la atención y facilita su acceso e inferencia.

Un ejemplo de estructura es:

#### ESTRUCTURA DE AVION.

TIPO: rango (caza, transporte, entrenamiento, bombardeo, planeo, observación)

MANUFACTURADOR: rango (McDonnell-Douglas, Boeing, AirBus Ind., etc.)

PESO NETO: rango (500 a 250,000 libras)

PESO BRUTO: rango (500 a 500,000 libras)

si es necesario, 1.6 veces el peso neto

RANGO MAXIMO DE CRUCERO:

si es necesario, buscar en tablas el rango apropiado para el tipo y el peso bruto

NUMERO DE TRIPULANTES: rango (1 a 3)

previamente asignado: 2

Por otra parte, los guiones son elementos parecidos a las estructuras, diseñados para representar secuencias estereotipadas de eventos, tales como comer en un restaurante o redactar un reporte de periódico acerca de un incendio en un departamento.

## 1.1.4 LENGUAJES Y HERRAMIENTAS DE I.A.

La investigación en IA ha sido una ciencia experimental con el fin de desarrollar programas de computadora que tengan un comportamiento inteligente. Esto llegó a ser una difícil tentativa que requería las mejores herramientas de programación. Los programas en IA tienden a desarrollarse de manera iterativa y creciente (programación exploratoria). Con esta evolución, el crear programas en IA requiere un ambiente interactivo con elementos de auxilio interconstruidos, tales como asignación dinámica de memoria durante la ejecución del programa.

Otro aspecto no común de la programación en IA es la expresión recursiva de las funciones (definidas en términos de ellas mismas), mecanismo que permite una gran simplificación en la escritura de programas. De esta forma, los lenguajes de programación en IA tienden a apoyar el procesamiento recursivo. Finalmente, los programas en IA se refieren primordialmente a la manipulación de símbolos, en contraste con los programas convencionales, que manipulan números. Por esta razón, todos los lenguajes de IA también incluyen esta característica. De lo anterior se deriva que los lenguajes de IA poseen requerimientos diferentes a los lenguajes de programación convencionales. Algunas de estas diferencias se muestran en la TABLA 1.2.

Además, los lenguajes tradicionales como FORTRAN o PASCAL, no facilitan la programación en IA debido a la complejidad del "software" necesario para incorporar el control que requiere la programación en IA, aunado a su incapacidad de especificar tareas paralelas, con el fin de acelerar la búsqueda de soluciones mediante un procesamiento en paralelo.

Como respuesta a estos requerimientos se han generado y desarrollado dos lenguajes básicos generales en IA: LISP y PROLOG. LISP fue el primer lenguaje de programación en IA y es el de mayor

**TABLA 12 REQUERIMIENTOS DE LENGUAJES DE PROGRAMACION CONVENCIONALES Y DE I.A.**

Programas convencionales	Programas en I.A.
Análisis de algoritmos numéricos (con límites fijos en la ejecución).	Algoritmos no determinísticos (no es posible planear los procedimientos a ejecutar y terminar).
Operaciones numéricas.	Operaciones simbólicas: comparación, selección, acomodamiento, correspondencia, operadores lógicos, recuperación y reconocimiento de patrones, etc.
Estructuras de datos conocidas para asignación de memoria.	Las estructuras de datos pueden crearse mientras se busca la solución al problema (asignación dinámica).
Procesamiento secuencial para tareas independientes.	Procesamiento en paralelo para tareas sin puntos de decisión determinísticos.
Búsqueda relativamente no expandible.	La representación y el manejo del conocimiento necesitan reducir la búsqueda cuando éste es muy grande.
Sistemas cerrados.	Sistemas abiertos que permiten una depuración continua y adquisición de nuevos elementos de conocimiento.

uso en Estados Unidos. PROLOG, un lenguaje de base lógica, apareció más recientemente y es muy popular en Europa y Japón.

LISP (LIST Processing) surgió en 1960 como un lenguaje de procesamiento de listas con funciones recursivas para la descripción de procesos y problemas. Los programas y datos en este lenguaje están expresados simbólicamente y se almacenan como estructuras de listas. LISP emplea dos tipos de objetos: átomos y listas. Los átomos son símbolos (constantes o variables) usados como identificadores para objetos numéricos o no numéricos. Una lista es una secuencia de cero o más elementos, siendo éstos átomos o listas. LISP es un sistema de evaluación de funciones en donde el usuario introduce la función y sus argumentos y el sistema regresa la evaluación de la misma. Los aspectos más notables de LISP son:

- \* Formulación de predicados para manipulación lógica.
- \* Ramificación condicional.
- \* Funciones recursivas.
- \* Asignación automática de memoria.
- \* Expresiones simples y comunes.
- \* Control normalmente aplicativo en funciones y argumentos.
- \* Para operación en tiempo real se recirculan celdas de memoria que ya no serán utilizadas.
- \* Paquete muy grande; todo su potencial requiere que sea implementado en computadoras grandes.

LISP tiene dos dialectos principales: MACLISP e INTERLISP. Para estos dos tipos se han desarrollado máquinas especiales que se emplean comúnmente en investigación de IA. En la actualidad se han diseñado versiones portátiles de LISP para hacerlo más fácil, común y rápido en su ejecución.

Por su parte, PROLOG (PROgramming in LOGic) es un lenguaje orientado a la lógica desarrollado en Francia en 1973. Su

desarrollo ha sido constante y en la actualidad se tienen versiones documentadas que pueden implementarse prácticamente en cualquier computadora. PROLOG es un sistema de prueba de teoremas; sus programas consisten de axiomas en Lógica de Predicados de Primer Orden junto con un objetivo (teorema a ser probado). Los axiomas están restringidos a ciertas implicaciones unidas por conjunción lógica en una cláusula de dos miembros, una premisa y una conclusión (cláusula Horn). Aunque la implementación de las cláusulas es declarativa, puede leerse como procedimiento; por ello, PROLOG permite escribir programas que constan de un grupo de procedimientos en los que el lado izquierdo de una cláusula se debe probar para satisfacer los objetivos del lado derecho.

PROLOG resuelve problemas mediante una confrontación de patrones, lo cual puede verse como una unificación (asignación de una instancia que satisface una meta u objetivo). Si esta confrontación falla mientras PROLOG busca en sus procedimientos, automáticamente da marcha atrás al punto de elección previo, resultando una búsqueda del tipo primero-profundidad. El proceso de solución comienza con la búsqueda del primer procedimiento cuyo lado derecho se combina (se unifica) con el objetivo. Así, el proceso de búsqueda puede ser guiado por el programador, escogiendo el orden de los procedimientos, los datos y los objetivos en las cláusulas.

PROLOG puede considerarse como una extensión de LISP acoplada con una base de datos para lenguaje interrogatorio que utiliza relaciones virtuales (relaciones implícitas definidas por reglas). Como LISP, PROLOG es interactivo y usa asignamiento dinámico de memoria, pero es mucho más pequeño y puede implementarse en diversas computadoras (incluyendo microcomputadoras). La ejecución de PROLOG es muy eficiente y su compilación es mucho más rápida que la de LISP. Así mismo, PROLOG ha sido muy popular en Europa y se ha destinado para ser el lenguaje básico del Proyecto de Computadoras de Quinta Generación

en Japón. El diseño de PROLOG (con su poderoso mecanismo de unificación) es muy apropiado para la búsqueda en paralelo y, por ello, un candidato excelente para las computadoras futuras que incorporen el procesamiento en paralelo.

## 115 LOGICA COMPUTACIONAL, INFERENCIA LOGICA Y RAZONAMIENTO POR SENTIDO COMUN.

La lógica computacional (razonamiento lógico por computadora) se basa en la lógica simbólica, también conocida como lógica matemática. A su vez, esta área se divide en dos secciones principales: la lógica de proposición (simple) y la lógica de predicado (algo más compleja).

### a) Lógica de proposición.

En lógica, una proposición es un enunciado que puede ser verdadero o falso. Las reglas usadas para deducir la veracidad o falsedad de nuevas proposiciones a partir de proposiciones ya conocidas, se conocen como "formas de argumento". Para tener mayor alcance e interés, es posible usar conjuntamente a las proposiciones, diferentes conectores lógicos (conjunción, negación, implicación, etc.).

La forma de argumento más simple es la conjunción, que utiliza el conector lógico "Y". Establece que si una proposición  $p$  es verdadera y una proposición  $q$  es verdadera, la conjunción " $p$  y  $q$ " es verdadera. En otras palabras, una conclusión es verdadera si sus premisas son verdaderas.

La deducción involucra una derivación de respuestas a un problema, basándose en un conjunto de premisas dado. En lógica matemática, los procedimientos deductivos son conocidos como "inferencia formal". Una de las formas de deducción más simples es el conocido silogismo, que puede ser representado matemáticamente.

b) Lógica de predicado.

La lógica proposicional está limitada, en el sentido de que sólo trabaja con los valores de verdad o falsedad de enunciados completos. La lógica de predicado remedia esta situación permitiendo el uso de afirmaciones en torno a elementos en los enunciados, así como de variables y funciones de variables.

En las proposiciones se hacen afirmaciones acerca de los elementos individuales. Un predicado es la parte de la proposición que hace una afirmación acerca de los ítems individuales. A este tipo de proposición también puede aplicarse cualquiera de los operadores lógicos.

Al incluir variables para los ítems individuales, la lógica de predicado permite hacer enunciados que serían imposibles en la lógica de proposición. Esto se acentúa más por el uso de funciones de variables. Finalmente, al emplear los cuantificadores universal (para todo elemento) y existencial (existe el elemento), se llega a la lógica de predicado de primer orden (utilizada por PROLOG). Esta forma de lógica permite hacer enunciados generales. Adicionalmente, existen diversas reglas de inferencia para la manipulación de los cuantificadores, la sustitución de conectores y otras operaciones sintácticas de apoyo en el razonamiento lógico.

Por otra parte, la inferencia lógica (obtención de conclusiones usando lógica) se basa normalmente en la "prueba de teoremas". Un método para la prueba automática de teoremas es el procedimiento de resolución, el cual es un método general para determinar si un teorema surge de un conjunto dado de premisas. Primero, usando identidades estándares, las premisas originales y la conclusión a probar se colocan en forma de cláusula. La conclusión es entonces negada y se derivan automáticamente nuevas cláusulas, usando resolución u otros procedimientos. Si se llega a una contradicción, el teorema es comprobado.

Básicamente, la resolución es la cancelación entre las cláusulas de una proposición en una cláusula, con la negación de la misma proposición en otra cláusula. Desafortunadamente, la resolución no es adecuada para manejar problemas complejos en los que el espacio de búsqueda generado por el método de resolución crece exponencialmente con el número de fórmulas usadas para describir el problema. Por esto, la resolución deriva demasiadas cláusulas no significativas para alcanzar la contradicción final, lo cual tiende a consumir mucho tiempo o mucha memoria antes de obtener tal conclusión. En este punto se han utilizado algunas heurísticas independientes del dominio para reducir la búsqueda, pero sus resultados son inciertos.

Como contraparte, se tienen sistemas de prueba de teoremas naturales (sin resolución). En un sistema de este tipo, se deriva una prueba en una forma dirigida al objetivo, natural para el ser humano en la comprobación de teoremas. Estos sistemas representan pruebas en una manera que mantiene una diferencia entre los objetivos y los antecedentes, usando reglas de inferencia que imitan el razonamiento humano. También usan heurísticas de dominio específico que ayudan como guías en la búsqueda, y muchas reglas de prueba para reducir los objetivos a subobjetivos. El resultado es mucho más complejo que el procedimiento de resolución, pero es más eficiente.

Algunos lenguajes especiales de alto orden, tal como PROLOG, que estructura el problema de deducción y posee diversos auxiliares interconstruidos, están acoplados con formulaciones de dominio específico y reglas heurísticas de guía, con lo cual dirigen el procesamiento lógico computacional para manejar problemas complejos reales.

Por último, se tiene el razonamiento por sentido común, que es un razonamiento de bajo nivel basado en el conocimiento empírico. Un ejemplo es razonar con respecto a la caída de objetos

basándose en la experiencia y no en las leyes de Newton. La misma clase de razonamiento dicta qué hacer en las situaciones sociales cotidianas. Sin embargo, mientras que es un tema simple para el ser humano, es muy difícil de lograr en los sistemas actuales de IA.

## 116 APRENDIZAJE DE MAQUINAS.

El aprendizaje de máquinas incluye adquisición rutinaria de nuevo conocimiento, desarrollo de habilidades cognitivas a través de instrucción o práctica, organización del nuevo conocimiento en una representación efectiva generalizada, y descubrimiento de nuevos hechos y teorías a través de la observación y la experimentación. Con la excepción del aprendizaje inductivo a partir de ejemplos, el aprendizaje de máquinas aún se encuentra en la etapa de investigación.

El aprendizaje de máquinas puede categorizarse básicamente por los mecanismos de aprendizaje involucrados:

- a) Aprendizaje por programación (estilo convencional de insertar conocimiento en una computadora).
- b) Aprendizaje de rutina (memorización directa de hechos y datos de entrada).
- c) Aprendizaje por analogía (transformación y aumento del conocimiento existente que tenga gran similitud con el nuevo concepto deseado).
- d) Aprendizaje de conceptos a partir de ejemplos.

En este enfoque (un caso especial de aprendizaje inductivo), el sistema induce un concepto, dado un conjunto de ejemplos y contraejemplos del concepto. De los ejemplos positivos, el sistema

generaliza la información en éstos para que el concepto resultante los cubra todos. De los contraejemplos, el sistema particulariza el concepto general para excluir todos éstos. En la idealidad, la fuente de los ejemplos es un maestro que ha escogido un buen conjunto de ejemplos pertinentes al concepto que se va a aprender. Si no hay maestro disponible, el sistema puede generar y probar ejemplos para ver si cumplen con ciertos criterios deseados. Este esquema de "generar y probar" es un procedimiento típico usado por científicos investigadores para descubrir conceptos generales. Algunas veces la fuente de ejemplos es el ambiente externo, de manera que los ejemplos vengan de observaciones no controladas. Un ejemplo es el aprendizaje humano sobre ciertos animales mediante observaciones en su habitat natural.

e) Aprendizaje por reglas de decisión a partir de ejemplos.

Existen diversas herramientas comerciales para la construcción de sistemas expertos que generan automáticamente árboles de decisión a partir de ejemplos. Estos sistemas son apropiados cuando los ejemplos pueden expresarse en forma de una conclusión asociada a un conjunto sencillo de valores de atributo. La inferencia inductiva procede usualmente comenzando con uno de los parámetros de entrada y buscando un árbol que presente el número mínimo de decisiones necesarias para alcanzar una conclusión. Este árbol de profundidad mínima se encuentra circulando todos los parámetros como posibles nodos iniciales y usando un enfoque de "información teórica" para escoger el orden de los parámetros a ser usados para el resto de los nodos y determinar cuáles parámetros son superfluos. La profundidad del árbol es relativamente pequeña (generalmente menos de cinco niveles de decisión), resultando muchos ejemplos en árboles enanos y muy anchos.

f) Aprendizaje por descubrimiento.

En este enfoque se inicia con un conjunto de ideas teóricas elementales, después se busca un espacio de conjeturas posibles

que puede ser generado a partir de estas ideas elementales usando heurísticas para modificar o combinar estas ideas. Después de estas conjeturas generadas, se aplican heurísticas para elegir los conceptos más interesantes y seguir las líneas de razonamiento asociadas con ellos.

g) Aprendizaje basado en explicación.

Este mecanismo hace posible el aprendizaje de una generalización de un ejemplo simple. Aplica el conocimiento del dominio en el sistema y el concepto que se investiga para formular una explicación de alto nivel o interpretación de un hecho o evento dado. Esta explicación se generaliza utilizando las características del ejemplo como base para formular el concepto general.

h) Aprendizaje por experiencia.

Al resolver problemas, los seres humanos compilamos subconscientemente los procedimientos efectivos para la resolución (segmentos de conocimiento), de manera que puedan ser llamados para uso futuro en situaciones similares.

i) Captura de patrones en redes neuronales.

Los primeros trabajos en captura de conocimiento en redes neuronales simuladas se detuvieron hace unos 25 años, cuando las limitaciones fundamentales de tales sistemas se hicieron evidentes. Sin embargo, los avances prácticos en el "hardware" computacional y algunos avances recientes en teoría han renovado el interés en estos sistemas de aprendizaje autoadaptables. Estos sistemas son capaces de capturar patrones en el tiempo (tales como el habla) y el espacio (tales como datos visuales). El concepto clave es que las memorias se almacenan en el modelo de conectores sinópticos (pesos) entre las neuronas. Estos pesos pueden ser optimizados globalmente con un gran número de cálculos locales asíncronos.

El aprendizaje de máquinas es una área de investigación activa y de gran interés. Al desarrollarse, puede llegar a ser un gran avance en la adquisición de conocimiento, asunto clave en la elaboración de sistemas expertos grandes.

## 11.7 AREAS DE APLICACION EN I.A.

Con el apoyo de los elementos básicos mencionados, se establecen cuatro áreas principales de aplicación en IA. Estas áreas y sus aspectos relevantes son:

### a) Procesamiento de lenguaje natural.

Esta área se refiere a la aplicación de términos de lenguaje natural en programas de cómputo, la comprensión del habla basada en la computadora, entendimiento y generación de textos, y aplicaciones afines.

### b) Visión por computadora.

Se refiere a la posibilidad de que la computadora vea, es decir, que identifique o comprenda lo que ve, localice lo que busca, verifique la perfecta manufacturación de algún producto, etc. Esta área es por sí misma uno de los mayores campos de investigación en IA actualmente.

### c) Sistemas expertos.

Los sistemas expertos representan el tópico más interesante de IA en la actualidad. Todavía en la década de los 70's los investigadores enfocaban su actividad a la resolución de problemas mediante técnicas de búsqueda no basada en el conocimiento o la lógica computacional. Estas técnicas se emplearon con ruidoso éxito para resolver problemas elementales o muy bien estructurados. Sin embargo, los problemas reales están lejos de poseer tales características, puesto que su espacio de búsqueda se expande exponencialmente con el número de parámetros involucrados.

Para este tipo de problemas, aquellas técnicas resultaron inadecuadas y se hizo necesario el desarrollo de un nuevo enfoque. Este nuevo enfoque enfatizó el conocimiento más que la búsqueda, y ha llevado al surgimiento de un nuevo campo: la ingeniería de conocimiento y los sistemas expertos. La tecnología de estos sistemas expertos resultante se limitó a trabajos de laboratorio en los 70's, pero actualmente se convierte en una fuente potencial de aplicaciones comerciales de costo eficiente.

En la segunda parte de este capítulo se tratará con mucho mayor detalle esta importante área de aplicación de IA.

#### d) Resolución de problemas y planeación.

Hay muchos problemas para los cuales no hay expertos, por lo que se necesitan programas de computadora para alcanzar sus soluciones. También, hay algunos sistemas básicos de planeación que están más relacionados con técnicas de solución que con el conocimiento mismo. Estas situaciones representan atractivas áreas de aplicación en IA.

### 1.18 FUTURO DE LA PROGRAMACION EN IA.

El mejoramiento del "hardware" computacional y la reducción de costos han llegado al punto en que las máquinas personales con implementaciones de LISP y las estaciones de trabajo (redes de programación LISP o PROLOG) son funcionalmente las mismas, es decir, ya no hay muchas diferencias entre uno y otro tipo. Se espera asimismo que el precio de las mejores estaciones de IA descienda sensiblemente.

En la actualidad se desarrollan arquitecturas en paralelo para las futuras máquinas de IA. Esto es especialmente atractivo para PROLOG, pues su estructura facilita la búsqueda en paralelo. En la década de los 90's, el Proyecto de Computadoras de Quinta

Generación de Japón incluye máquinas con poderosos mecanismos de procesamiento en paralelo que emplean diversas versiones de PROLOG a una velocidad de un billón de inferencias lógicas por segundo. En Estados Unidos también se empiezan a introducir computadoras de procesamiento en paralelo.

La versión común de LISP parece que será el lenguaje estándar de desarrollo de IA, con lo cual se mejorará sustancialmente la portabilidad del "software". PROLOG y sus derivados, ahora predominantes en Europa y Japón, empiezan a ser incorporados con LISP en los Estados Unidos. Para el desarrollo de programas se introducirán sistemas personales de IA a precio relativamente razonable. A largo plazo, las poderosas computadoras con procesamiento en paralelo, motivadas en parte por el mencionado proyecto nipón, se harán comunes, creciendo así el número de practicantes de IA e incluyendo problemas más difíciles en los sistemas de resolución.

Otro aspecto importante es el notorio desarrollo de microprocesadores que permitirán que el potencial de cómputo de IA para desarrollo de aplicaciones salga del laboratorio y entre en los campos donde sea necesario.

Finalmente, una tendencia naciente es el uso extendido de la programación orientada a objetos para facilitar la creación de grandes programas de exploración. El uso de objetos también es una buena manera de programar simulaciones dinámicas simbólicas, las cuales serán muy importantes cuando la creación de sistemas con uso más profundo del conocimiento se acelere, así como la demanda de sistemas basados en conocimiento. La programación orientada a objetos también es apropiada para el procesamiento distribuido, en donde cada objeto puede ser implementado en un procesador separado, ligado a una red de procesadores. Los sistemas de IA son utilizados con interfases del "software" convencional y se convierten en parte sobresaliente del amplio mundo de las

computadoras. Se anticipa que el desarrollo del "software" exploratorio en IA llegará a infundir ciertas características nuevas a la práctica del "software" convencional.

## **1.2 SISTEMAS EXPERTOS.**

Un sistema experto (SE) es un programa inteligente de computadora que usa conocimiento y procedimientos de inferencia para resolver problemas que son suficientemente difíciles para requerir la asistencia de expertos humanos en su resolución. El conocimiento dentro de un sistema experto consiste de hechos y heurísticas. Los hechos constituyen un cuerpo de información abierto y totalmente conocido por los expertos de un cierto campo. Las heurísticas son algo más privadas, reglas de buen juicio (razonamiento correcto o buenas suposiciones) que caracterizan la toma de decisiones a nivel de expertos en el campo. El grado de ejecución de un sistema experto es primariamente una función del tamaño y la calidad de la base de conocimiento que posea.

Es común en la actualidad caracterizar cualquier sistema de IA que use un dominio sustancial de conocimiento como un sistema experto. De esta forma, casi todas las aplicaciones a los problemas reales pueden ser consideradas dentro de esta categoría, aunque la designación de "sistemas basados en conocimiento" es más apropiada.

La FIGURA 1.1 muestra una posible representación de un sistema experto. Los componentes encima de la línea punteada corresponden todos al sistema de cómputo. Debajo de esta línea se indican las capacidades de acceso para dos tipos de usuarios humanos. El primero es el ingeniero de conocimiento, quien es la persona responsable de colocar el conocimiento dentro de la base de conocimientos del sistema experto, a través de la interfase y el ajustador de reglas.

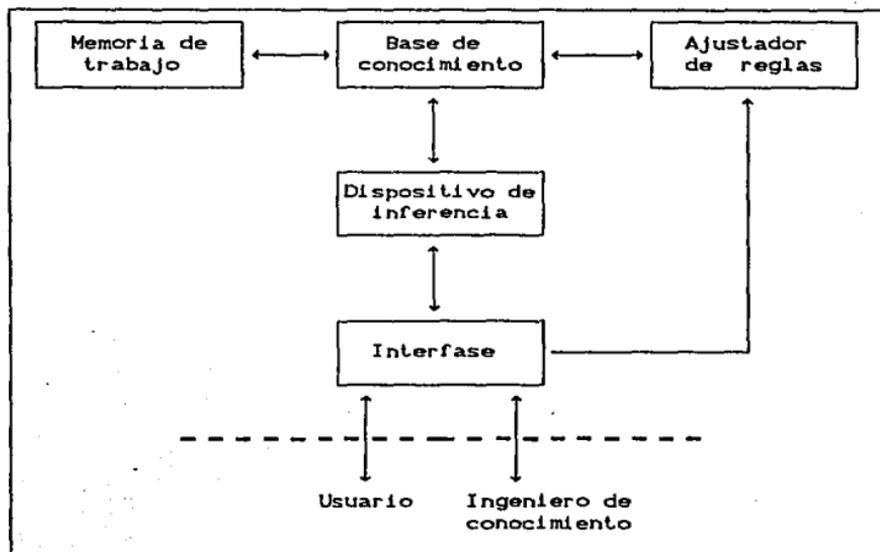


FIGURA 1.1 SISTEMA EXPERTO GENERICO.

El ingeniero de conocimiento también es el eslabón entre el experto humano (si lo hay) y el sistema experto; esto es, el ingeniero de conocimiento captura la experiencia del experto humano y luego expresa esta experiencia en un formato que pueda ser almacenado en la base de conocimiento y ser usado por el sistema experto. En el sistema experto ideal, no sería necesario el ingeniero de conocimiento; el experto en el dominio interactuaría directamente con el sistema experto, reemplazando al ingeniero de conocimiento en la figura.

El segundo tipo de individuo con acceso al sistema experto es el usuario, propiamente dicho, quien es cualquier persona que emplea el sistema experto como una herramienta en la toma de decisiones (como un consultor). El ingeniero de conocimiento capaz debe tener siempre en mente que la finalidad real del sistema experto es el beneficio del usuario y no del experto o del ingeniero de conocimiento mismo.

La interfase maneja toda la entrada de datos e instrucciones a la computadora, controlando y dando formato a todas las salidas. Una interfase bien diseñada debe exhibir facilidad de uso (por ejemplo, las llamadas "interfases amigables"), aún para el usuario inexperto. La interfase también maneja toda la comunicación con el ingeniero de conocimiento (o el experto en el tema) durante el desarrollo de la base de conocimiento del sistema experto. Otra propiedad que se exhibe algunas veces en los sistemas expertos es la explicación, esto es, algunos sistemas tienen una capacidad limitada para explicar las razones a cualquier pregunta del usuario, así como el razonamiento seguido para llegar a una conclusión. Una vez más, esta función es responsabilidad de la interfase.

El dispositivo de inferencia se emplea durante una sesión de consulta. Durante este proceso, ejecuta dos tareas primarias. Primero, examina el estado de la base de conocimiento y la memoria

de trabajo para determinar qué hechos se conocen en un momento dado, y para añadir nuevos hechos que se encuentren disponibles. Segundo, procura el control de la sesión, determinando el orden en el que se hacen las inferencias. Una designación alternativa para el dispositivo de inferencia, y quizá más apropiada, es la de "procesador de conocimiento". Como elemento de procesamiento del conocimiento en un sistema experto, el dispositivo de inferencia sirve para unir hechos y reglas a desarrollar, o inferir nuevos hechos.

La base de conocimiento es el corazón del sistema experto. Una base de conocimiento típica contiene dos tipos de conocimiento: hechos y reglas. Los hechos representan varios aspectos de un dominio específico que se conocen a priori durante la sesión de consulta del sistema experto. Las reglas son simplemente heurísticas (ya comentadas previamente). Si la base de conocimiento ha sido construida con la interacción de un experto humano, estas reglas representan la percepción del ingeniero de conocimiento sobre las heurísticas empleadas por el experto en la toma de decisiones.

La memoria de trabajo de un sistema experto cambia de acuerdo con el problema específico que se maneja. La memoria de trabajo contiene hechos. Sin embargo, a diferencia de los hechos en la base de conocimiento, estos hechos se determinan por el problema específico bajo consideración, durante (y al final de) la sesión de consulta. De manera más específica, los resultados del proceso de inferencia son nuevos hechos que se almacenan en la memoria de trabajo.

En lo que respecta al ajustador de reglas, en la mayoría de los sistemas expertos existentes sirve como un editor de reglas, esto es, introduce las reglas especificadas por el ingeniero de conocimiento en la base de conocimiento durante la fase de desarrollo del sistema experto. También se usa para verificar

estas reglas (consistencia, amplitud). En sistemas expertos más ambiciosos, el ajustador puede usarse en el intento de incorporar aprendizaje en el proceso. En estos casos, se le "enseña" al sistema experto dándole un conjunto de ejemplos para luego criticar su ejecución. Si ésta no es satisfactoria, el ajustador revisa automáticamente la base de conocimiento. Si es satisfactoria, el ajustador puede reforzar simplemente la base de conocimiento existente.

Un soporte de sistemas expertos, "shell", incluye todos los componentes de la FIGURA 1.1, excepto la base de conocimiento. Usando el soporte, le corresponde al ingeniero de conocimiento desarrollar la base de conocimiento e insertarla en la arquitectura para formar un sistema experto completo, en su dominio específico. El soporte evita que el ingeniero de conocimiento desarrolle todos los elementos del sistema experto que contempla, permitiéndole concentrarse en el desarrollo de la base de conocimiento.

La arquitectura del sistema experto genérico mostrada en la FIGURA 1.1, sirve para indicar algunas de las diferencias entre este tipo de enfoque y el de los procedimientos algorítmicos y programas netamente heurísticos. En particular, debe advertirse que la base de conocimiento está separada del dispositivo de inferencia. En otras palabras, a diferencia de los algoritmos y los programas heurísticos, un sistema experto separa las reglas heurísticas del procedimiento de resolución. La base de conocimiento contiene una descripción o modelo de "lo que se conoce" (derivación de la solución a un problema específico). El dispositivo de inferencia contiene una descripción de "lo que se hace" para desarrollar realmente la solución. Mientras que la base de conocimiento cambia de dominio a dominio, el dispositivo de inferencia es el mismo.

## 12.1 REPRESENTACION DEL CONOCIMIENTO EN UN SISTEMA EXPERTO.

En secciones anteriores se mencionaron los aspectos relevantes de la representación del conocimiento como elemento básico de IA, indicando algunos de los modos de representación alternativos. En particular para los sistemas expertos, los modos de representación del conocimiento más comunes incluyen las tripletas objeto-atributo-valor, las redes semánticas, las estructuras, las sentencias lógicas y las reglas de producción. Aunque puede manejarse cualquiera de ellos en el desarrollo de los sistemas expertos, la manera más común y utilizada hasta la actualidad es el uso de reglas de producción, de lo cual se deriva la denominación de "sistemas basados en reglas". Como se mencionó anteriormente, el patrón general de las reglas de producción es la famosa condicional SI-ENTONCES.

La representación del conocimiento basada en reglas tiene las siguientes ventajas con respecto a los otros modos de representación:

- a) La mayoría de los paquetes de desarrollo de sistemas expertos (en especial los soportes) emplean bases de reglas.
- b) Los paquetes de desarrollo de sistemas expertos basados en reglas son normalmente más baratos (en términos del costo inicial) que aquellos que emplean otros modos de representación. Además, requieren "hardware" convencional y no necesitan exhaustivas sesiones de entrenamiento para sus usuarios.
- c) Los diversos soportes de sistemas expertos basados en reglas permiten que el ingeniero de conocimiento se concentre en el desarrollo de la base de conocimiento, la parte más crítica del proceso.

d) Las reglas son un modo natural de representación del conocimiento, por lo que se minimiza el tiempo requerido para su desarrollo.

e) Es mucho más fácil y rápido aprender a usar e implementar un sistema basado en reglas, que un sistema con cualquier otro tipo de representación.

f) Las reglas son más transparentes que sus principales competidores: las estructuras y las redes neuronales. Esta transparencia permite que se les tenga mayor confianza a las soluciones obtenidas con los sistemas basados en reglas.

g) Las bases de reglas son relativamente fáciles de modificar. Los procesos de incorporación, eliminación y revisión de reglas son directos.

h) La validación del contenido de los sistemas basados en reglas (determinación de la amplitud y consistencia de la representación) es un proceso relativamente simple. Para las representaciones basadas en estructuras y redes neuronales, un proceso de validación similar es virtualmente imposible.

Las reglas empleadas en la representación del conocimiento poseen algunas propiedades típicas:

- \* Nombre.
- \* Premisa (la porción SI de la regla).
- \* Conclusión (la porción ENTONCES de la regla).
- \* Notas y referencias.
- \* Factores de confianza (medida de la confiabilidad en la conclusión de la regla).
- \* Prioridad y costo.
- \* Preferencia de encadenamiento.
- \* Estado.

Los aspectos más importantes de cada una de estas propiedades son:

**NOMBRE.** Cada regla debe tener un nombre distinto, que además sea descriptivo con respecto al contenido y/o el propósito de la regla.

**PREMISA.** Cada regla posee una o más cláusulas de premisa. El total de cláusulas de premisa constituye la premisa de la regla. Una premisa de regla puede contener cláusulas conjuntivas o disyuntivas.

**CONCLUSION.** Cada regla consiste de una o más cláusulas de conclusión. En el caso de cláusulas de conclusión múltiples, deben ser todas conjuntivas. Existen dos tipos de conclusiones de regla: conclusiones intermedias y conclusiones finales. Las primeras son cláusulas de conclusión de una regla que sirven como cláusulas de premisa para otra regla. Una cláusula de conclusión final ya no aparece como premisa en otra regla. Considérese, por ejemplo, una base de reglas para clasificar animales. Algunas reglas pueden tener conclusiones finales, como "Entonces la especie es un león". Otras pueden tener conclusiones intermedias, usadas para conocer varias posibilidades, por ejemplo "Entonces el género de la especie es mamífero". Dos reglas representativas para esta situación son:

Regla mamífero. Si el animal nace vía placenta.  
Entonces su género es mamífero.

Regla león. Si el género del animal es mamífero  
y su color es pardo rojizo  
y es carnívoro  
Entonces es un león.

Nótese que la conclusión de la regla mamífero es intermedia, puesto que sirve como premisa para la regla león. La conclusión a

esta última regla, por su parte, es terminal para todo su conjunto.

**NOTAS Y REFERENCIAS.** Es importante que una base de reglas esté documentada. Quizá la persona que desarrolle la base conozca la razón y el origen de las reglas, pero otras personas no. Inclusive al pasar el tiempo el desarrollador tendrá dificultades para recordar el origen y las especificaciones de cada regla. Muchos paquetes de desarrollo permiten la inclusión de notas y referencias, característica que debe ser aprovechada.

**FACTORES DE CONFIANZA.** Cuando las reglas sean inciertas, se pueden asociar a ellas factores de confianza. El factor de confianza de una conclusión de regla es una función de los factores de confianza de la regla y su premisa.

**PRIORIDAD Y COSTO.** En algunos paquetes de desarrollo es posible asignar una prioridad y/o un costo a cada regla. Tales propiedades se emplean normalmente para decidir, durante el procedimiento de inferencia, la regla específica que se relacionará a un caso particular. Comúnmente, el procedimiento inferencial elegirá la regla con la prioridad más alta o el costo más bajo.

**PREFERENCIAS DE ENCADENAMIENTO.** El proceso de inferencia implica un procedimiento de búsqueda. En algunos casos la búsqueda se mueve hacia "adelante" (de las premisas o hechos a las conclusiones). En otros casos la búsqueda se mueve hacia "atrás" (de una conclusión hipotética a las premisas necesarias para inferir tal conclusión). Sin embargo, adicionalmente a estos modos normales de búsqueda (encadenamiento), algunos paquetes de desarrollo permiten el uso de una mezcla de métodos de búsqueda. En tales casos, pueden etiquetarse las reglas de acuerdo a su método de encadenamiento preferido o previamente establecido.

**ESTADO.** Durante la consulta, el estado de cada cláusula y regla está sujeto a cambios. El seguimiento de estos cambios es una parte importante del proceso de inferencia. Un resumen de lo que esto implica es:

- \* La premisa de una regla es cierta cuando se aplica una prueba y se determina que la premisa fue satisfecha.
- \* La premisa de una regla es falsa cuando se aplica una prueba y se determina que la premisa no fue satisfecha.
- \* Si la premisa de una regla es cierta, entonces esta regla está activada.
- \* Si la premisa de la regla es falsa, entonces esta regla puede ser eliminada o desactivada.
- \* Si una regla está encendida, significa que la acción tomada por la conclusión va a procesarse y los valores asociados a cada conclusión serán asignados.
- \* Una regla que ha estado encendida ya no es activa. Se elimina o, en algunos casos, se desactiva.
- \* Si una regla se va a encender, debe estar activada antes.
- \* Si una regla no se ha encendido o descartado, entonces es una regla activa.

En el desarrollo de una base de reglas, deben tomarse en cuenta los siguientes aspectos:

#### **AGRUPAMIENTO DE REGLAS.**

Las bases de conocimiento evolucionan con el tiempo. Como resultado, pueden convertirse fácilmente en una especie de colección aleatoria de reglas no relacionadas, con una desorganización tal que sea difícil comprender y mantener esta colección. Por ello, se debe establecer algún grado de organización de reglas, con el propósito de entender, mantener, validar y documentar fácilmente éstas. Es aconsejable agrupar reglas de acuerdo a atributos semejantes en las cláusulas de conclusión. Así, cada regla en el grupo tendrá un atributo

particular en común. Esto facilita el apreciar las diferentes premisas que llevan a un mismo atributo de conclusión, así como la detección de errores en la formulación o modificaciones de las reglas.

#### ORDENAMIENTO DE LOS GRUPOS DE REGLAS.

Una vez que las reglas se han agrupado, debe ordenarse cada grupo. Típicamente, esta ordenación se determina de acuerdo a los atributos de conclusión. Esto es, el grupo más importante es aquel que llega a la conclusión del objetivo de la base de conocimiento. El siguiente nivel más alto se asigna al grupo de reglas que sirven para concluir las premisas del grupo mayor. El proceso de ordenamiento continúa de esta manera.

#### EVITAR EL USO DE CLAUSULAS DE CONCLUSION CONJUNTIVAS.

Las conclusiones con múltiples atributos pueden ocasionar un traslape en la ordenación de los grupos de reglas, así como una ramificación evidente en la base de conocimiento. Por ello, es aconsejable, aunque no coercitivo, evitar el uso de este tipo de cláusulas de conclusión.

#### SUBGRUPOS DE REGLAS.

Como se estableció anteriormente, las reglas pueden agruparse de acuerdo a la similitud en sus atributos de cláusulas de conclusión. También es posible formar subgrupos de reglas en cada grupo. Considérese, por ejemplo, una base de reglas para el diagnóstico de infecciones de la piel. Obviamente, el objetivo de esta base de reglas es la determinación de la enfermedad encontrada. Consecuentemente, pueden agruparse todas las reglas que tengan el atributo "enfermedad" en sus cláusulas de conclusión. Sin embargo, habrá diversas enfermedades identificadas. Así, una subagrupación natural es clasificar cada una de éstas de acuerdo a la enfermedad específica identificada. De esta forma, dicho subgrupo de "enfermedades" podría llevar a la conclusión de que la enfermedad es la "psoriasis".

## **ORDENAMIENTO DE REGLAS DENTRO DE LOS GRUPOS DE REGLAS.**

Es preferible, generalmente, enlistar primero las reglas más probables, es decir, las más viables de ser encendidas. Puesto que muchos procedimientos de inferencia se mueven de arriba a abajo en una lista de reglas, colocar las reglas más probables arriba resulta en ahorro de tiempo y reducción del número de interrogantes que se presenten al usuario.

Otras dos formas de imponer este ordenamiento de reglas son el uso de las propiedades de prioridad y costo. Esto es, puede asignarse una prioridad a cada regla y ordenarse dentro de su grupo. Alternativamente, puede asociarse un costo a cada regla y llegar también a un orden específico. Algunos paquetes de "software" incluyen las provisiones para una o ambas propiedades.

## **EVITAR FALSAS ECONOMIAS.**

En el desarrollo de ciertos modelos (matemáticos, de redes, etc.) es común "limpiar" estos modelos reduciendo detalles innecesarios y redundantes. El empleo de estas prácticas parece eminentemente lógico y pudiera pensarse que es apropiado aplicarlas en los sistemas expertos. Desafortunadamente, estos hábitos pueden llevar a falsas economías en el desarrollo de bases de reglas.

## **EVITAR CONTENIDOS DE PROCEDIMIENTO.**

Las reglas tienen la finalidad de capturar "lo que se conoce" y no incluir "lo que se hace". Sin embargo, seguir esta guía particular puede ser difícil para las personas acostumbradas a los métodos algorítmicos, en los que las relaciones y los procedimientos van juntos. Los algoritmos se dejan como parte del dispositivo de inferencia o como rutinas externas, llamadas cuando se necesiten en el sistema experto. La clave para evitar este tipo de anomalía es que nunca debe construirse una base de reglas de forma que la solución correcta sólo pueda alcanzarse cuando las reglas estén en un orden determinado.

## USAR SIMBOLOS DONDE SEA POSIBLE.

Los sistemas expertos, como se verá más adelante, son más apropiados para problemas donde los valores de los atributos son símbolos. Esto no significa que no puedan usarse en casos donde los valores de los atributos sean números; es posible, pero son menos eficientes. Existe otra razón para emplear símbolos y no números: los seres humanos tienden a relacionar más naturalmente los símbolos.

## 12.2 ADQUISICION DEL CONOCIMIENTO.

La adquisición del conocimiento, una de las fases más difíciles en el desarrollo de sistemas expertos, puede efectuarse mediante dos diferentes formas: adquirir el conocimiento directamente del experto (o expertos) en el dominio, o adquirirlo a través del uso de registros históricos (inducción de reglas). Ambas formas se emplean extensamente, y algunas veces se combinan en los sistemas basados en reglas.

Con respecto al primer enfoque, parecería ser el más adecuado. Sin embargo, se tienen al menos cuatro razones por las cuales esto no puede funcionar bien:

- \* Para algunos problemas, simple y sencillamente puede no haber ningún experto. Un ejemplo de esto es la inversión en la bolsa de valores. Algunos inversionistas consideran que no hay expertos, pues en ese caso no existirían las inversiones con resultados tan mediocres que se dan en ocasiones. Por otro lado, en caso de existir tales expertos, no serían tan tontos como para revelar sus conocimientos.
- \* Los supuestos expertos pueden ser "expertos" pobres o mediocres. Muchas veces, se le dice experto a alguien que simplemente "deja hecho el trabajo". Evidentemente, no es una medida eficaz

construir una base de conocimiento con reglas heurísticas exclusivas de este tipo de expertos.

- \* Los expertos pueden no querer revelar sus conocimientos propios, sólo los generales y del dominio público. En algunos casos, los expertos simplemente se niegan a cooperar. En otros casos se produce algo peor: el experto aparenta cooperar pero proporciona información intencionalmente falsa.
- \* Finalmente, hay algunos expertos que no son capaces de articular el método que usan. Muchos expertos, de hecho, no comprenden realmente cómo toman sus decisiones. En este caso, cuando se les pide una explicación de cómo resuelven un problema, responden con una descripción de su percepción más reciente del proceso, que puede tener o no relación con el procedimiento realmente empleado.

Con las dificultades ya enlistadas, puede resumirse una breve guía para el desarrollo de la fase de adquisición del conocimiento, si no para su cumplimiento cabal punto a punto, si como una secuencia de recomendaciones para ayudar en la planeación de los esfuerzos realizados con respecto a esta tarea. Sus principales planteamientos son:

#### SELECCION DEL DOMINIO.

- \* El dominio debe ser tal que la aplicación del sistema experto sobre él sea realmente apropiada, proporcionando alguna ventaja distintiva con respecto a cualquier método alternativo.
- \* La toma de decisiones en el dominio debe ser suficientemente importante para las personas u organismos que tienen a bien proporcionar los recursos necesarios para el desarrollo y la implementación del sistema experto.
- \* El dominio debe ser relativamente estable; en particular, cambios drásticos durante el periodo de desarrollo no deben ser previstos.

#### SELECCION DE LOS INGENIEROS DE CONOCIMIENTO.

- \* Idealmente, se requieren dos ingenieros de conocimiento y por lo menos uno de ellos debe tener experiencia en el desarrollo e implementación de sistemas expertos exitosos.
- \* Los ingenieros de conocimiento no deben encerrarse en un solo enfoque, sino que deben estar al tanto de los esquemas alternativos para el análisis de decisiones.
- \* Las actividades primarias de los ingenieros de conocimiento se centran en las áreas de obtención del conocimiento y formación de la base de reglas (modelo del conocimiento).

#### SELECCION DEL EXPERTO.

- \* Investigar los nombres de los candidatos a experto en el dominio, esto es, aquellas personas que sean consideradas con la suficiente experiencia en el dominio de interés.
- \* Elegir un experto en el dominio cuyo nivel de ejecución sea generalmente reconocido como superior al de otros que realicen la misma tarea.
- \* Elegir un experto con una trayectoria exitosa durante cierto periodo de tiempo.
- \* Elegir un experto con disposición y capacidad para comunicar su conocimiento personal y que esté relativamente articulado en esto.
- \* Elegir un experto con disposición y capacidad de destinar el tiempo necesario para apoyar los trabajos de desarrollo.
- \* Si no puede identificarse o disponerse de algún experto, considerar el desarrollo de la base de reglas a través de medios alternativos.

#### ENTREVISTA INICIAL CON EL EXPERTO.

- \* Antes de la entrevista, los ingenieros de conocimiento deben familiarizarse con el problema, el dominio y la terminología empleada.
- \* Realizar la entrevista en un ambiente apropiado. Limitar su duración.

- \* Conducir la entrevista de manera informal y relajada.
- \* Decir al experto cuáles son las planes y objetivos del trabajo y explicarle los alcances, las limitaciones y la organización del sistema experto.
- \* Explicarle la evolución del sistema experto, en particular las decisiones iniciales desarrolladas para prototipos anteriores.
- \* Reforzar la discusión sobre sistemas expertos demostrando el uso de algún sistema existente. Sin embargo, debe evitarse la demostración del uso de un sistema experto demasiado simple.
- \* Si se desea un registro audiovisual, pedir permiso al experto, explicándole que estos materiales son para uso privado del equipo de ingenieros de conocimiento.

#### ANTECEDENTES.

- \* Donde sea apropiado, efectuar una visita de sitio (lo más pronto posible).
- \* Determinar si existen manuales, reportes u otros materiales escritos que describan el dominio, el problema y la terminología empleada.
- \* Pedir al experto que presente una sesión informativa y tutorial sobre el tema. En esta sesión no se hacen preguntas, sólo se escucha y se aprende.

#### ENTREVISTAS SECUENCIALES.

- \* Minimizar la posibilidad de interrupciones.
- \* Establecer una agenda formal para cada encuentro.
- \* Establecer metas y objetivos para cada encuentro.
- \* Una vez que se haya desarrollado un sistema experto prototipo, dar acceso al "software" y al "hardware" de apoyo para demostraciones del prototipo y su crítica.

#### CONDUCCION DE LAS ENTREVISTAS SECUENCIALES.

- \* Obtener las reglas mediante discusión y demostración.
- \* Intentar la identificación de todas las fuentes externas de datos e información usadas por el experto.

- \* Evitar críticas; buscar, en cambio, claridad.
- \* Recordar siempre que se construye un modelo de la base de reglas del experto, no de la base de reglas del ingeniero de conocimiento.
- \* Si no se comprende algún punto hecho por el experto, pedir explicación, pero sin interrumpir.
- \* Usar casos de prueba para demostrar el proceso de toma de decisiones e identificar los límites de validez de la base de reglas.
- \* Familiarizar al experto en el dominio con las reglas de producción; esto puede animarlo a establecer sus reglas en este formato.

#### DOCUMENTACION.

- \* Documentar los resultados de la entrevista inmediatamente después de ésta.
- \* Incluir en la documentación de cada encuentro los siguientes aspectos:
  - Fecha, hora y lugar del encuentro.
  - Nombre del experto.
  - Lista y descripción de las reglas identificadas.
  - Lista de cualquier objeto, atributo y/o valor encontrado.
  - Identificación de fuentes externas y referencias nuevas.
  - Lista de nueva terminología y definiciones asociadas.
  - Lista y discusión de las discrepancias encontradas.
  - Puntos para aclarar en las siguientes reuniones.
- \* La documentación de apoyo a todas las reglas de producción desarrolladas debe incluir:
  - Lista y descripción de todas las reglas.
  - Lista y descripción de todos los objetos, atributos y valores.

Lista de fuentes y referencias.

Glosario de terminología del dominio.

Lista y discusión de los casos de prueba usados para evaluar el prototipo.

También, dentro de la adquisición de conocimiento directamente del experto en el dominio, existen dos variantes para intentar suprimir las desventajas inherentes a este mecanismo. Estas variantes son: que el ingeniero de conocimiento sea también el experto en el dominio, o el caso inverso, que el experto en el dominio sea también el ingeniero de conocimiento.

Para el primer enfoque, la más importante ventaja es que el procedimiento de adquisición de conocimiento se simplifica, pues el ingeniero de conocimiento (ahora también experto en el dominio) puede proceder directamente a verter sus conocimientos en el formato indicado de reglas de producción. Sin embargo, este mecanismo tiene una desventaja sensible: para que el ingeniero de conocimiento se convierta en un experto en algún dominio específico, se requiere un largo periodo de aprendizaje y desarrollo.

El segundo enfoque parece estar menos obstaculizado, si se parte de que el verdadero objetivo de los sistemas expertos es generar un paquete de desarrollo que interactúe directamente con el experto en el dominio, eliminando la necesidad de contar con el ingeniero de conocimiento. Muchos detractores de esta alternativa establecen tres desventajas principales: 1) se requiere tiempo y fondos para el entrenamiento de los expertos, 2) los expertos entrenados tratarán de resolver todos sus problemas vía sistemas expertos, aun cuando éstos no representen la forma más apropiada y eficiente, y 3) el desarrollo de sistemas expertos bajo este mecanismo se limitaría a diseños pequeños y modestos, implementados básicamente en paquetes de soporte técnico. Como contraparte, puede decirse que estas limitantes pueden aliviarse

en buena medida con sesiones de entrenamiento eficientes, contando además con la relativa y mayor facilidad para que el experto se capacite como ingeniero de conocimiento, y no el proceso inverso.

En la segunda forma general de adquisición del conocimiento (vía inducción de reglas), se convierte una base de datos existente en un conjunto de reglas de producción. Esta base de datos apropiada, a su vez, debe contener datos que abarquen ejemplos pertenecientes al tipo de problema bajo consideración (ejemplos que reflejen la aplicación del buen juicio y razonamiento eficiente). Más específicamente, se necesitan ejemplos de una buena toma de decisiones. En algunos casos esto produciría resultados adecuados, mientras que en otros, al menos podría guiar el desarrollo de un sistema prototipo confiable. De hecho, algunos soportes de sistemas expertos comerciales incorporan medios (programas de apoyo) para la realización de tal proceso.

Uno de los soportes para sistemas expertos más populares en el mercado es el paquete VP-Expert (Paperback Software). Otro paquete, ligeramente menos conocido, es XiPlus (Expertech Ltd.). Ambos paquetes emplean un procedimiento inductivo similar, cuyas etapas básicas son: 1) identificación de objetos atributos y valores, 2) establecimiento de un árbol de decisión, y 3) generación de reglas a partir de los árboles. En particular, el soporte XiPlus emplea un algoritmo que ha probado ser eficiente en la inducción de reglas: el algoritmo ID3 de Quinlan (Ignizio J. P., 1991). Este algoritmo es apropiado para problemas relativamente sencillos, pues en problemas de tamaño y complejidad reales, desarrolla árboles muy grandes, lo cual no necesariamente produce mejores sistemas expertos, ya que la efectividad de éstos (esquema de clasificación) se impacta negativamente con árboles grandes.

En resumen, el uso de datos para generar sistemas expertos basados en reglas es apropiado cuando se enfrenta con un problema de diagnóstico, esto es, un problema en el cual dados ciertos síntomas (datos), se desea encontrar un diagnóstico apropiado (clasificación). Este problema también se conoce como análisis de clasificación, análisis de discriminantes o reconocimiento de patrones.

### 1.2.3 EL DISPOSITIVO DE INFERENCIA.

El dispositivo de inferencia sirve como el mecanismo de inferencia y control para el sistema experto, y como tal, es una parte esencial del sistema, así como uno de los principales factores en la determinación de la efectividad y la eficiencia de estos sistemas. La inferencia, a su vez, es el proceso de trazar una conclusión (intermedia o final) por medio de un conjunto de reglas, para un conjunto específico de hechos en una situación dada. La inferencia es por tanto el elemento que procesa el conocimiento dentro de un sistema experto.

La estrategia de inferencia más comúnmente empleada en sistemas expertos se conoce como *modus ponens*. Esto significa que si la premisa de una regla es verdadera, entonces su conclusión también es verdadera. Así, si A infiere a B y A es verdadera, entonces B es verdadera ( $A \rightarrow B$ ). Nótese, sin embargo, que si B es verdadera, no puede decirse que A también lo sea.

Las responsabilidades de control del dispositivo de inferencia son las que se emplean para determinar situaciones tales como:

- \* Cómo iniciar el proceso de inferencia.
- \* Cuál regla encender si hay más de una activada.
- \* La manera en la que se conduce la búsqueda para una solución.

Como la base de conocimiento, el dispositivo de inferencia contiene reglas y hechos. Sin embargo, las reglas y hechos de la base de conocimiento pertenecen al dominio específico del sistema, mientras que las reglas y hechos del dispositivo de inferencia pertenecen al control general y la estrategia de búsqueda empleados por el sistema experto en el desarrollo de una solución. Estos dos conjuntos de reglas y hechos se mantienen separados premeditadamente en el sistema experto típico, lo cual, como ya se mencionó, es una de las características más importantes de dichos sistemas.

Esta separación produce diversas ventajas. Primero, permite hacer cambios en la base de conocimiento con impacto mínimo en el dispositivo de inferencia, y viceversa. Segundo, propicia el desarrollo y uso de los soportes para sistemas expertos. Estos, como ya se comentó, contienen todos los componentes necesarios de un sistema experto, con la excepción de la base de conocimiento. Siendo compatibles la estrategia de inferencia del soporte con la requerida por una base de conocimiento dada, el soporte puede usarse para acomodar esa base de conocimiento. De esta forma, se genera una arquitectura de "conexión", donde pueden insertarse varias bases de conocimiento y correrías mediante un sistema anfitrión. Este esquema permite evitar gran parte del esfuerzo consumidor de tiempo requerido en la construcción de un sistema experto desde su principio.

Para entender el funcionamiento del dispositivo de inferencia, es necesario tener presente que el propósito de un sistema experto es desarrollar y recomendar una solución propuesta (o un conjunto de soluciones alternativas) a un problema dado. Para realizar esta tarea, el sistema experto debe efectuar una búsqueda de soluciones, y es responsabilidad particular del dispositivo de inferencia llevar a cabo esta búsqueda de manera eficiente. En el proceso de búsqueda, se enfrentan diversas alternativas (soluciones potenciales) y, típicamente, una variedad

de restricciones. Por ejemplo, cuando se tiene el problema de determinar qué automóvil conviene comprar, las alternativas incluyen, en teoría, todos los automóviles diferentes en existencia. Sin embargo, pueden manejarse algunas restricciones, tales como limitaciones presupuestarias, disponibilidad regional del vehículo, estilo, tiempo de compra, etc. Tales restricciones sirven para delimitar el número de automóviles potenciales sobre los cuales se hará la elección. Otros factores típicos usados para reducir el número de alternativas a un nivel razonable, incluyen la edad del auto, el kilometraje recorrido, el fabricante y el distribuidor preferidos, el color, y otros. Al final, se pondrá atención solamente en unos cuantos automóviles, de los cuales se derivará la elección final.

La estrategia de búsqueda implícita en la selección de un automóvil puede describirse, en términos más técnicos, como un encadenamiento hacia adelante con reducción, esto es, el proceso se inicia con ciertos datos referentes al tipo de automóvil deseado (estilo, costo, edad, kilometraje, etc.); estos datos, junto con las restricciones, sirven para reducir el número de alternativas potenciales y así llegar finalmente a unos cuantos autos para tomar una decisión. Desde el punto de vista de un sistema experto, el proceso de reducción disminuye el tamaño de la red de inferencia asociada, disminuyendo también los requerimientos de búsqueda. Tal proceso reductivo permite el desarrollo de soluciones a problemas que en otras circunstancias serían prácticamente imposibles de resolver.

El mismo problema de selección de un automóvil puede abordarse desde una dirección totalmente distinta, especificando primero un automóvil en particular para su compra, y luego determinando si cumple o no las necesidades del comprador. Este procedimiento se conoce como encadenamiento hacia atrás. Por ejemplo, puede considerarse primero la compra de un Porsche 944. Habiendo establecido esto como una decisión tentativa, se

determina entonces si es o no factible (satisfacción de las cláusulas de premisa asociadas en la base de conocimiento). Si se tiene una familia grande y se requiere un auto amplio y de cuatro puertas, el Porsche no califica obviamente. Sin embargo, si se desea un auto deportivo y rápido que sirva para inflar la imagen personal, el Porsche puede ser el candidato más atractivo.

En este contexto, las dos estrategias de búsqueda fundamentales que emplea un sistema experto son el encadenamiento hacia adelante y el encadenamiento hacia atrás. El primero se conduce desde las premisas (datos) a las conclusiones y se dice que es "orientado hacia datos". El segundo procede de una conclusión tentativa hacia las premisas (hacia atrás) para determinar si los datos confirman dicha conclusión. El encadenamiento hacia atrás es conocido como un procedimiento "orientado hacia objetivos". Ambos procesos llegan a una conclusión, pero su eficiencia de búsqueda depende de la naturaleza del problema que se enfrenta, es decir, de la naturaleza de la red de inferencia asociada al problema.

Específicamente, si se tienen pocas premisas y muchas conclusiones, el encadenamiento hacia adelante es generalmente la mejor estrategia de búsqueda. Por el contrario, con muchas premisas y relativamente pocas conclusiones, normalmente se aplica el encadenamiento hacia atrás.

No obstante, no siempre se emplean las estrategias descritas de manera individual y aislada para un problema específico; existen casos en los cuales se emplean ambos enfoques. Como ejemplo, considérese el problema de tratar de localizar a un fugitivo. El fugitivo en cuestión, el Sr. Pésimo, ha huido con el dinero que le encargaron algunos ingenuos inversionistas. La última vez que fue visto, el Sr. Pésimo estaba abordando un avión con destino a Buenos Aires. Las víctimas contrataron un detective que ha descubierto lo siguiente sobre el Sr. Pésimo:

- \* Habla solamente inglés y alemán, preferentemente este último.
- \* Su padre fue un conocido criminal de guerra nazi.
- \* Padece una seria enfermedad que requiere atención médica periódica.
- \* Desdén las ciudades grandes, con tráfico y muchedumbres.
- \* Es un apostador empedernido, particularmente en carreras de caballos.

Utilizando estos datos, el detective deduce que el Sr. Pésimo no permanecerá en Buenos Aires y, de hecho, no se quedará en Argentina. El detective piensa que el Sr. Pésimo, por sus costumbres e idioma, se dirigirá a una comunidad que tenga una gran población de origen alemán. Además, dado que al Sr. Pésimo no le gustan las grandes ciudades, probablemente se instalará en una pequeña villa en Paraguay, donde viven muchos alemanes, que inclusive tienen inclinaciones neo-nazis. Nólese hasta este momento, que el detective ha usado el encadenamiento hacia adelante para concentrarse en un conjunto limitado de posibles lugares de escondite del fugitivo buscado.

En este punto, el detective cambia al encadenamiento hacia atrás. En particular, deduce que el lugar indicado es una pequeña comunidad. Basado en esta creencia, determina qué información necesita reunir para corroborar su suposición. Esto es, ¿tiene el pueblo acceso a servicios médicos integrales?, ¿está razonablemente cerca de un hipódromo? Si estas condiciones son en efecto verdaderas, el detective empezará su búsqueda en este poblado.

Como puede observarse, una combinación de encadenamientos hacia adelante y hacia atrás puede llegar a ser más apropiada para un problema, que un solo modo de encadenamiento. Afortunadamente, algunos paquetes de "software" comerciales permiten el uso de tales combinaciones

## 12.4 APLICACIONES DE LOS SISTEMAS EXPERTOS.

Los sistemas expertos pueden emplearse en la resolución de problemas de diversos géneros, cuyas características generales pueden resumirse como sigue:

- \* Problemas que presentan una significativa diferencia entre las conclusiones obtenidas por un experto y las obtenidas por un no experto, aunado a la negativa de aceptar las decisiones de este último.
- \* Problemas que involucran una falta de experiencias necesarias para su resolución, acoplado al alto costo de contratar o entrenar a un nuevo experto.
- \* Problemas cuyos dominios son conocidos por expertos humanos o están documentados con ejemplos de toma de decisiones eficiente.
- \* Problemas con dominios de conocimiento relativamente estrechos y estables.
- \* Problemas en cuyos dominios prevalecen procedimientos heurísticos, opuestos a los procedimientos algorítmicos.
- \* Problemas con preponderancia de valores de atributo simbólicos, opuestos a valores de atributo numéricos.
- \* Problemas que requieren una base de conocimiento transparente, compatible con un idioma en particular.
- \* Problemas que requieran tomar decisiones en ausencia de información (valores de atributo desconocidos).
- \* Problemas con explosión combinatorial, consumidores de tiempo cuando se atacan con procedimientos algorítmicos.

En este punto, la mayoría de los problemas que han involucrado la aplicación de un sistema experto, descansan en las siguientes áreas generales:

- \* Interpretación (inferencia descriptiva de una situación a partir de registros de datos).
- \* Predicción (inferencia de consecuencias viables a partir de situaciones dadas).
- \* Diagnóstico (inferencia de la causa de un malfuncionamiento o desviación a partir de información disponible).
- \* Diseño (configuración de componentes bajo restricciones para cumplir las especificaciones globales del sistema).
- \* Planeación (desarrollo de secuencias de actividades y su cronometración para lograr un resultado deseado en un tiempo específico).
- \* Seguimiento (comparación de observaciones para planear vulnerabilidades).
- \* Prescripción (recomendación de remedios para el malfuncionamiento de un sistema o su desviación con respecto a lo deseado).
- \* Control (combinación de algunas áreas anteriores, incluyendo monitoreo y prescripción).
- \* Instrucción (desarrollo de habilidades, experiencia o conocimiento para el usuario).

Al incluir las áreas generales mencionadas, los sistemas expertos han encontrado gran aplicación en administración

financiera, planeación, mercadotecnia, ingeniería, ciencia aplicada, medicina, etc. De interés particular son las aplicaciones que se han desarrollado en ingeniería química; las cuales incluyen:

- \* Diseño de procesos.
- \* Simulación de procesos y optimización.
- \* Desarrollo de "Lay-Out" de plantas de proceso (apoyo en la toma de decisiones).
- \* Entrenamiento o capacitación.
- \* Diagnóstico de fallas de un proceso.
- \* Control de procesos.
- \* Diseño mecánico y estructural.
- \* Planeación de proyectos.
- \* Análisis de operaciones de paro y arranque de plantas industriales.
- \* Revisión crítica de diseños para flexibilidad, eficiencia y seguridad.
- \* Seguimiento y evaluación de corrientes de proceso.
- \* Programación automática.

La utilización de los sistemas expertos en los rubros mencionados dentro de la ingeniería química es un proceso real, que de ninguna manera implica una visión futurista ideal, sino que encuentra diversos ejemplos de apoyo en muchas partes del mundo. No obstante, esta visión futurista abandona los matices idealistas para indicar la enorme utilidad de los sistemas expertos en los próximos años.

## 12.5 EJEMPLOS DE SISTEMAS EXPERTOS DESARROLLADOS.

Para conocer superficialmente la amplia gama de aplicación de los sistemas expertos, mostrar al mismo tiempo las pruebas que demuestran su versatilidad e indicar las posibles áreas donde el

desarrollo futuro de sistemas expertos puede ser atractivo, se describen brevemente algunos de los sistemas expertos más conocidos que se han desarrollado.

**DENDRAL:** Un experto en identificación química.

Este sistema, considerado como el primer sistema experto propiamente dicho, se empezó a desarrollar en 1964 en la Universidad de Stanford, aunque no fue operacionalmente activo hasta 1970. Su propósito es la identificación de la estructura molecular de compuestos desconocidos a partir de datos de espectroscopia de masa y resonancia magnética nuclear. DENDRAL utiliza reglas de producción y fue implementado en LISP.

**HEARSAY:** Reconocimiento del habla.

Este sistema, desarrollado en la Universidad Carnegie-Mellon en 1969 (parte uno) y 1971 (parte dos), es un intento para demostrar la posibilidad de un sistema de reconocimiento del habla. Específicamente, su objetivo era tener una computadora que comprendiera una entrada hablada, identificada con un código de ondas al que se asignaba un conjunto de suposiciones de lo que se había dicho, eligiendo la mejor de ellas como salida. HEARSAY desarrolló un innovador concepto en su tiempo, el uso de bases de conocimiento múltiples conectadas a una pizarra de comunicación. Cuando el proyecto se completó en 1975, HEARSAY tenía un vocabulario de 1000 palabras y podía hacer buenas interpretaciones el 75% de las veces.

**INTERNIST/CADUCEUS:** Un experto en medicina interna.

El proyecto INTERNIST inició en los primeros años 70's y continúa en la actualidad bajo el nombre CADUCEUS. Fue desarrollado en la Universidad de Pittsburgh, con el propósito de diagnosticar la mayoría de las enfermedades asociadas al campo de la medicina interna. En sí mismo, es un esfuerzo ambicioso, pues existen cientos de enfermedades de este tipo, añadiendo su capacidad para considerar todas las posibles combinaciones de

estas enfermedades que pudieran estar presentes en un paciente. Se estima que el número de estas combinaciones asciende al orden de  $10^{40}$ .

**MYCIN:** Un experto en infecciones de la sangre.

MYCIN es tal vez el más conocido de todos los sistemas expertos desarrollados, a pesar de que nunca se ha puesto en práctica real. Ha servido como base y referencia para muchos trabajos posteriores sobre sistemas expertos. MYCIN fue desarrollado en la Universidad de Stanford a mediados de la década de los 70's. Se diseñó exclusivamente como una herramienta en la investigación para demostrar los alcances de los sistemas expertos. Su función principal era asistir a los médicos en el diagnóstico y tratamiento de meningitis e infecciones bacterianas en la sangre. MYCIN es un sistema similar a INTERNIST/CADUCEUS, con la excepción de que su base de conocimiento es menor (menor número de enfermedades). Esta base contiene reglas heurísticas usadas por los médicos en la identificación de ciertas infecciones. MYCIN puede considerarse también como uno de los primeros soportes para sistemas expertos, pues tenía la capacidad de aceptar una base de conocimiento ajena a su dominio específico. Esta situación dio origen al sistema PUFF.

**PUFF:** Un experto en trastornos pulmonares.

PUFF fue desarrollado en 1979, usando el soporte disponible en MYCIN. Su propósito es interpretar mediciones relacionadas a pruebas respiratorias e identificar afecciones pulmonares. PUFF posee una interfase directa con el instrumental de prueba usado en tales mediciones. Al final de la prueba, PUFF presenta su interpretación de las mediciones, un diagnóstico del mal y un esquema de tratamiento propuesto. La primera versión de PUFF tenía 64 reglas de producción, mientras que una de sus versiones más recientes (codificada en BASIC), contiene cerca de 400 reglas. PUFF, eficiente en más del 90% de los casos, es una herramienta de laboratorio de gran valor para la profesión médica.

**XCON (R1):** Un experto en configuración de computadoras.

XCON (titulado originalmente R1) fue desarrollado para la configuración de computadoras VAX, como un esfuerzo conjunto de Digital Equipment Co. y la Universidad Carnegie-Mellon. El problema de la configuración computacional es de complejidad combinatorial, por lo que el enfoque heurístico es muy apropiado para su resolución. Basta mencionar que al momento de ser escrito XCON contenía más de 8000 reglas de producción, corriendo en LISP. Actualmente refleja problemas de planeación.

**DELTA/CATS:** Un experto en el mantenimiento de locomotoras diesel-eléctricas.

Este sistema fue desarrollado por General Electric Co., en 1983. Su propósito es asistir al personal de ferrocarriles en el mantenimiento de las locomotoras diesel-eléctricas de la compañía. Consiste de una base de reglas desarrollada con asistencia de un empleado de G.E. con más de 40 años en el mantenimiento de estas locomotoras. El sistema, con 1200 reglas, se desarrolló en LISP con encadenamientos hacia adelante y hacia atrás. Una característica interesante de DELTA/CATS es su interfase con sistemas visuales. Sin embargo, al igual que XCON, este sistema presenta problemas de planeación.

**GATES:** Un sistema experto para la asignación de puertas y pistas en una línea aérea.

Este sistema, desarrollado en 1988, se usa en el Aeropuerto Internacional J.F.K. de Nueva York (como prototipo). El sistema es empleado por TWA para asistir a los controladores de tierra en el asignamiento de pistas y puertas para los vuelos de salida y llegada. Dado que muchos enfoques aplicados a este problema (incluyendo programación lineal) fracasaron, GATES llegó con amplias expectativas, pues ya permitía manejar la complejidad del caso (tomando en cuenta vuelos retrasados, mal clima, fallas mecánicas, etc.). GATES, desarrollado en PROLOG para PC, maneja 100 o más vuelos diarios y puede crear asignamientos de puertas en

30 segundos (los expertos humanos tardaban de 10 a 15 horas preparando el asignamiento, y cerca de una hora para modificarlo diariamente).

**QMR:** Sistema experto en el diagnóstico médico.

Usando la base de conocimiento masiva desarrollada para INTERNIST, QMR asiste a los médicos en el diagnóstico de una enfermedad, basado en los síntomas del paciente, resultados de exámenes y pruebas de laboratorio. QMR, residente en la Universidad de Pittsburgh, incorpora alrededor de 4000 manifestaciones posibles de enfermedades, a un nivel comparable al de los médicos practicantes.

**FXAA:** Asistente en la revisión de cuentas extranjeras.

El Chemical Bank maneja 750 billones de dólares anuales en transacciones exteriores. Esto implica cientos de operaciones diarias con el resultante papeleo excesivo y la sobrecarga de trabajo de los revisores de cuentas, principalmente en las transacciones irregulares. FXAA se desarrolló para proporcionar la asistencia necesaria a este respecto. FXAA es un sistema basado en reglas que ha causado un gran impacto en el Chemical Bank.

**HESS:** Un programador experto para la industria petroquímica.

HESS fue desarrollado en la Universidad de Houston como apoyo a la programación de productos en una refinería petroquímica. La base de conocimiento de HESS se desarrolló mediante la adquisición de reglas heurísticas de dos programadores de productos de refinería. Su función es determinar qué producto o productos deben manufacturarse, en qué tiempo y en cuáles unidades de proceso. HESS se desarrolló en un famoso soporte de sistemas expertos (EXSYS), con características híbridas y consta de cerca de 400 reglas de producción. A pesar de sus ventajas, su falta de información (acceso a datos de empresas de refinación de petróleo) es una limitante sensible.

DustPro: Un experto en seguridad de minas.

Con ayuda de un soporte de sistemas expertos como vehículo de desarrollo, la Oficina de Minas de Estados Unidos desarrolló DustPro, un experto en la evaluación de la calidad del aire en operaciones de minería, principalmente en cuanto a polvos de carbón pulverizado y sílice. DustPro tiene interfase con sistemas de seguimiento (gas metano y polvo). Corre en una PC convencional y le toma 15 minutos llegar a una conclusión. Su base de reglas contiene cerca de 200 reglas.

## 12.6 FUTURO DE LOS SISTEMAS EXPERTOS.

Como área de aplicación general (una de las más atractivas) de la Inteligencia Artificial, los sistemas expertos tienen un campo de perspectivas futuras bastante promeedor. Al igual que las técnicas generales de IA, el gran desarrollo que tienen las estaciones de trabajo (arquitecturas computacionales de tipo interconectable) es un factor que influye grandemente en los sistemas expertos. Por ejemplo, la mayoría de los sistemas expertos que se han desarrollado (incluyendo los que se analizaron brevemente) son esencialmente sistemas auto-estables, es decir, pueden ejecutarse por sí mismos sin ninguna interrelación con otros sistemas. Sin embargo, es muy probable que en el futuro próximo, una gran parte (si no la mayoría) de los sistemas expertos que sean desarrollados serán sistemas "empotrados", esto es, sistemas que forman parte del "software" global en la estación de trabajo.

Otra forma del sistema experto empotrado es la correspondiente a la famosa interfase inteligente. Esta es una mejor versión de la "interfase amiga" en "software", pues será capaz de determinar inmediatamente si el usuario es novato o experto, para ajustar apropiadamente sus acciones. Esto es, el usuario principiante requerirá más ayuda, soporte y guía, mientras

que el usuario más experimentado necesitará menor asistencia.

Una tendencia que puede crecer enormemente en los siguientes años es el desarrollo de sistemas expertos relativamente pequeños (con 200 reglas o menos). Muchas empresas (entre las que destaca DuPont) están preparando sistemas expertos como medios para sanear sus finanzas, pues son altamente eficientes en lo que se refiere a la relación productividad-costos.

Dentro de la Ingeniería Química y de manera especial en ingeniería de procesos, los sistemas expertos tendrán una gran utilidad en el desarrollo de herramientas que permitan la resolución de problemas y tareas diversas. Estas herramientas se concentran principalmente en los siguientes aspectos:

- \* Asistencia en el desarrollo de procesos.
- \* Consulta para el diseño preliminar de procesos.
- \* Asesoría en el diseño de sistemas de control.
- \* Sistemas consultores para las secuencias de separación.
- \* Consulta en el diseño de sistemas de manejo de energía.
- \* Consulta para el diseño de procedimientos operativos en áreas de arranque y paro de plantas, optimización de procesos y seguridad.
- \* Asesoría en campo para analizar el estado del proceso, fallas potenciales y acciones recomendadas para su corrección, manteniendo a salvo a los operadores de planta.

Estas clases de sistemas representan aplicaciones potenciales de ingeniería de procesos por computadora, en primera instancia. En un futuro más distante, con el desarrollo de la tecnología de sistemas expertos, estas herramientas podrán hacer más que lo actual, incluyendo el desarrollo de moléculas con propiedades definidas y la selección entre diversas tecnologías de procesamiento alternativas, tomando en cuenta inclusive las trayectorias de síntesis bioquímica.

En el futuro se podrá hablar del fin del "mundo de FORTRAN", pues los sistemas expertos dejarán la esfera del interés meramente académico, para entrar de lleno en la resolución práctica de problemas reales en ingeniería. Sin embargo, junto al creciente desarrollo de estos sistemas, también deberían reconocerse las deficiencias que hasta la fecha presentan algunos aspectos muy importantes:

- \* El uso de conocimiento, pues sólo se emplea el conocimiento que puede ser representado por relaciones cuantitativas o reglas heurísticas.
- \* La interacción entre ingenieros practicantes y los investigadores de universidades debe ser más fuerte, para poder disponer de todo el conocimiento en los sistemas desarrollados.
- \* La necesidad de programas educativos que incluyan temas de ciencia computacional e inteligencia artificial, para propiciar el diseño de sistemas basados en conocimiento eficientes y avanzados.
- \* La modificación de actitudes condescendientes hacia la programación de computadoras, pues el diseño de sistemas de "software" con base en conocimiento es una actividad de alto contenido intelectual.

El panorama dentro de la ingeniería de procesos es atractivo, puesto que existen áreas específicas de particular interés, que poseen gran cantidad de información teórica y, al mismo tiempo, permiten la implementación de los sistemas expertos. Tal es el caso de la síntesis de procesos, concretamente para las secuencias de separación, cuyos procedimientos y características generales se presentan en el siguiente capítulo.

## **CAPITULO DOS**

# **SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION PARA MEZCLAS MULTICOMPONENTES**

Este capítulo pretende mostrar la gran diversidad de métodos sistemáticos y racionales que produzcan secuencias factibles de separación para mezclas multicomponentes. Inicia con algunos conceptos generales, que son importantes para la comprensión de tales métodos; continúa con la interacción entre la síntesis de procesos y uno de sus tópicos principales, la síntesis de secuencias de separación; finalmente, se describen los principales métodos para la síntesis de secuencias de separación con el objetivo de tener un perfil general de sus características, así como su clasificación de acuerdo a los medios o la técnica utilizada, sus reglas y la estrategia a seguir para producir los esquemas de separación en un proceso determinado. De esta manera, puede llegarse a la selección de la técnica más idónea y adecuada para la implementación y estructuración lógica del sistema experto (SESS).

La separación de mezclas multicomponentes en productos deseados es de gran importancia en la industria química. Las separaciones son usadas en procesos y purificación de materias primas, intermediarios, y productos terminados. Ejemplos comunes son: fraccionamiento de petróleo, recuperación de efluentes de un reactor, eliminación de materiales perjudiciales al medio ambiente y purificación de productos terminados.

La destilación ordinaria es el método de separación más común en la industria de procesos químicos hoy en día, utiliza calor, el cual es un agente energético de separación; el contacto líquido-vapor ocurre, y los componentes más volátiles se dirigen hacia la fase vapor. Dicho vapor va a lo alto de la columna de destilación, obteniéndose así un aumento en los componentes más volátiles.

El diseño para un costo efectivo y una columna de destilación termodinámicamente factible es un proceso bien desarrollado. Con la ventaja del diseño computacional, los ingenieros tienen acceso a los cálculos de diseño riguroso permitiendo con ello optimizar la solución del problema.

Una área muy compleja y poco comprendida es la SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION, cuyo objetivo es identificar las secuencias de proceso razonables, que son:

- a) Técnicamente factibles y capaces de llevar a cabo la separación.
- b) Seguridad, rentabilidad y económicamente atractivas.

La Ingeniería Química se ha enfocado en la síntesis sistemática de esquemas de proceso de separación, particularmente aquellos que incluyen destilación, principalmente porque una planta química típica utiliza más energía para destilación que para algunos otros procesos.

## **2.1 CONCEPTOS GENERALES.**

La secuencia de separación multicomponente, o la selección del mejor método y secuencia para la separación, es un problema de diseño importante en la Síntesis de Sistemas de Separación.

La configuración del sistema óptimo de separaciones dependerá enormemente del grado de recuperación, pureza y propiedades de los productos deseados, de la capacidad de la planta, de la disponibilidad y costo de los equipos, materiales de construcción y servicios, etc., que pueden diferir de acuerdo al caso.

Para resolver el problema, primeramente se ordenan los componentes a ser separados de acuerdo a algunas propiedades físicas y/o químicas tales como la volatilidad relativa o la solubilidad en agua. Esta lista ordenada está formada por el nombre del componente y su propiedad, ordenándose en relación al resto de los componentes en la mezcla.

Una técnica efectiva y factible para secuencias de separación multicomponente debe tomar en cuenta los tres tipos de esquemas de separación: Totalmente de alta recuperación, totalmente húmedas, y secuencias combinadas (combinación de los dos primeros tipos de separación).

La generación de una secuencia de separación involucra la selección de una lista de propiedades adecuada y escoger los componentes separables dentro de aquella lista.

**SEPARACION DE ALTA RECUPERACION.** En este tipo de separación, también llamada "corte fino", cada componente aparece en una y sola una corriente de producto, es decir, en los productos obtenidos los componentes no se traslapan unos con otros.

**SEPARACION HUMEDA.** En este tipo de separación los componentes pueden aparecer en dos o más corrientes de productos, por lo que da como resultado productos con componentes traslapados.

Al considerar la necesidad de algunos métodos simples y prácticos para la síntesis de secuencias de separación multicomponente, se toma en cuenta el número de secuencias teóricamente posibles para la separación de una mezcla en corrientes de productos con componentes puros.

1. El número de secuencias teóricamente posibles,  $S_N$ , para la separación de N-componentes de la mezcla en N-productos con componentes puros mediante un solo método de separación es:

$$S_N = [ 2 (N-1) ]! / N! (N-1)! \quad (\text{ec.2.1})$$

2. El número de secuencias teóricamente posibles, S, para la separación N-componentes de la mezcla en N-componentes puros en los productos para T métodos de separación es:

$$S = ( T^{N-1} ) S_N \quad (\text{ec.2.2})$$

Cada separador debe dividir la mezcla de alimentación en dos corrientes de productos y cada componente en la alimentación debe salir en sólo una de estas corrientes. La ecuación S está restringida para secuencias donde existe algún agente másico de separación, como el usado en destilación extrativa que es recuperado reciclándose en el siguiente separador al cual había sido introducido.

Muchos investigadores han desarrollado algunas técnicas para la Síntesis Sistemática de Secuencias de Separación Multicomponente. Las técnicas se pueden dividir en cinco categorías:

(1) Algorítmica o aproximación mediante optimización. Trata el modelo matemáticamente y optimiza el sistema.

(2) Aproximación Heurística. Utiliza reglas generales de dedo (heurísticas) para sintetizar la secuencia. Las heurísticas enfocan características del proceso, propiedades de los materiales, termodinámica, etc.

(3) Aproximación Evolutiva. Desarrolla primero una secuencia inicial, y entonces hace implementaciones basadas en reglas evolutivas.

(4) Aproximación Termodinámica. Sintetiza procesos desde un punto de vista termodinámico, utiliza principios conocidos de termodinámica para sintetizar la secuencia en una manera eficiente de energía.

(5) Método Combinado. Combina dos o más de las anteriores aproximaciones.

Algunos conceptos que se necesitan para el mejor entendimiento del tema son:

**FACTOR DE SEPARACION.** Relación de los coeficientes de distribución entre dos componentes.

**COEFICIENTE O FACTOR DE DISTRIBUCION.** Es la relación de la fracción mol del componente en la fase más ligera y la fase más pesada en el equilibrio, o en fase disolvente para la etapa de alimentación.

**AGENTE MASICO DE SEPARACION (AMS).** Es un componente que se añade a un separador para influir en la separación deseada.

**LISTA ORDENADA.** Es el ordenamiento de componentes en la alimentación en orden decreciente de coeficientes de distribución.

**SECUENCIA, ARREGLO, ESTRUCTURA, PROCESO, ESQUEMA O CONFIGURACION.** Se utilizan para referirse a un arreglo de unidades de separación.

**COLUMNA, UNIDAD DE SEPARACION O SEPARADOR.** Son usados para referirse al equipo de destilación ordinaria o extractiva.

**GRUPO DE PRODUCTOS.** Es una formación de componentes en numerosos productos.

**SECUENCIA DIRECTA.** Separa los productos sucesivamente en el destilado o corriente de domos de cada columna en la secuencia.

**COMPONENTE CLAVE LIGERO (LKV).** Es aquel componente del cual se cuenta con suficiente información para especificar su recuperación en el producto destilado.

**COMPONENTE CLAVE PESADO (HKV).** Es aquel componente del cual se cuenta con suficiente información para especificar su recuperación en el producto de fondos.

En la mayoría de los casos, el componente clave ligero será el componente más ligero que aparecerá en la corriente del fondo, en cualquier cantidad apreciable, y el componente clave pesado será el más pesado que este presente en cualquier cantidad significativa en la corriente de destilado.

Generalmente, los componentes claves ligeros y claves pesados tienen puntos de ebullición adyacentes. En algunos casos la selección de los componentes claves no son necesariamente con puntos de ebullición adyacentes y tienen un componente con punto de ebullición intermedio, entonces estos componentes son

designados como clave ligero, clave intermedio o distribuido y clave pesado.

La selección apropiada de los componentes claves es importante si se desea especificar en forma adecuada una separación multicomponente, por el contrario una selección inadecuada de estos componentes puede conducir a una columna diseñada incorrectamente.

## **2.2 INTERACCION ENTRE LA SINTESIS DE PROCESOS Y LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION.**

La Ingeniería de Procesos es una rama de la Ingeniería Química que proporciona las herramientas necesarias para concebir y diseñar, en forma integral, un proceso capaz de producir a un costo mínimo los productos deseados, conociendo únicamente los datos que se refieren a materia primas y servicios disponibles.

Cuando un ingeniero químico se enfrenta al problema de desarrollar un nuevo proceso, a menudo debe jerarquizar las distintas fases del diseño, es decir, que ciertos aspectos del proceso deben ser diseñados antes que otros.

EL DISEÑO DE PROCESOS está formado por tres etapas fundamentales: SINTESIS DE PROCESOS, ANALISIS DE PROCESOS Y OPTIMIZACION DE PROCESOS.

Cabe mencionar que en este trabajo únicamente se explicará la primer etapa del Diseño de Procesos (Síntesis), y por consiguiente de las Secuencias de Separación.

## 2.2.1 SINTESIS DE PROCESOS.

Es la etapa en el Diseño de procesos donde el ingeniero químico selecciona los componentes y su interacción y/o interconexión para crear una estructura o esquema de proceso (operación unitaria). También se puede definir como un acto de determinación de la interconexión óptima de unidades de procesamiento así como el tipo y diseño óptimo de las unidades dentro de un sistema de proceso. La interconexión de unidades de procesamiento es llamada ESTRUCTURA DE PROCESO.

Los tópicos principales que estudia la Síntesis de Procesos son: Rutas de Reacción Química, Secuencias de Separación, Redes de Intercambio de Calor, Complementación de Esquemas de Proceso y Sistemas de Control.

La síntesis de Procesos consta de los siguientes pasos:

1. Definir los objetivos del Sistema.
2. Definir los criterios para la evaluación del sistema.
3. Seleccionar la tecnología para alcanzar los objetivos propuestos.
4. Descomponer el problema en un conjunto de tareas interconectadas.
5. Desarrollar las tareas dentro de la tecnología seleccionada.

Los tres primeros pasos se denominan "PLANIFICACION DEL PROCESO" y los últimos dos "DISEÑO DEL PROCESO".

## 2.2.2 SOLUCION AL PROBLEMA DE SINTESIS DE PROCESOS.

Tres importantes problemas existen en la Síntesis de Procesos:

a) Representación del problema. Incluye todas las alternativas, excluyendo automáticamente las opciones absurdas.

b) Evaluación del problema. Permite un balance entre rapidez y exactitud.

c) Estrategia del problema. Desarrolla la rápida localización de las mejores alternativas sin totalmente enumerar todas las opciones.

En la Síntesis de Procesos existen dos tipos de aproximaciones:

(1) Iniciación con un mejoramiento factible al esquema de proceso.

(2) Si no existe esquema de proceso, entonces se busca un buen candidato.

Para la primera aproximación hay dos métodos básicos:

MÉTODOS EVOLUTIVOS. Tienen como meta la adquisición sistemática de la experiencia que permita proponer modificaciones al diseño base de un proceso tendientes a mejorar la economía o confiabilidad del mismo, sin pasar por la etapa de implementación a escala comercial de cada una de las etapas intermedias. Estos métodos consisten en generar empíricamente o mediante otros métodos sistemáticos de diseño, una configuración base, de preferencia la más simple que sea posible, que satisfaga las restricciones impuestas al proceso y las especificaciones deseadas de los productos.

Esta configuración es evaluada, técnica y económicamente, para determinar cuáles son los elementos que contribuyen más al costo del proceso o que pueden ser fuente de problemas serios. Una vez identificados dichos elementos se procede a seleccionar una

modificación al proceso base que tienda a reducir la función objetivo seleccionada (costo global, confiabilidad, etc.) y se evalúa esta nueva configuración. Si la configuración no tuvo éxito y la función objetivo no mejora, se rechaza la modificación introducida y se selecciona otra incorporándola al mismo proceso base. En cambio, si la modificación tuvo éxito, la nueva configuración se convierte en parte del proceso y se repite el mismo procedimiento en forma iterativa hasta que no sea posible encontrar una nueva modificación a la última configuración propuesta que logre mejorar la función objetivo seleccionada.

**MÉTODOS ESTRUCTURALES PARAMÉTRICOS.** Involucran todas las posibles alternativas en una "superestructura" integrada, en la cual son incluidas todas las posibles interconexiones entre las unidades de proceso. Los parámetros son esencialmente fracciones separadas con valores entre cero y uno, indicando con ello la fracción de flujo en una unidad. La superestructura es optimizada utilizando técnicas de optimización no lineal. El valor de cero para un parámetro estructural indica que la correspondiente interconexión no existe en la solución óptima.

Para la segunda aproximación hay varios métodos:

**MÉTODOS DE HOLGURA Y PRIMERA PENETRACION.** Son simplemente métodos de formación de árboles, representados gráficamente por una colección de nodos interconectados por un conjunto de líneas, las cuales establecen una y sólo una ruta de un nodo a otro. Cada nodo representa un nodo particular para el problema. Al trazar completamente el árbol se puede tener la solución al problema.

**MÉTODOS CON LÍMITES.** En cada nivel se determina un límite en la mejor solución correspondiente para cada nodo que sale de dicho nivel. Lo atractivo de este método es la habilidad para eliminar implícitamente grandes grupos de soluciones potenciales para un problema, eliminando explícitamente su evaluación.

**METODOS HEURISTICOS.** Son en realidad los métodos más antiguos, se basan en la experiencia del ingeniero de proceso en sistemas de diseño similar y en su comprensión a los fenómenos físicos y químicos relacionados a varias operaciones unitarias. Dichos métodos no garantizan la optimización.

**METODOS DE DESCOMPOSICION.** Basados en la descomposición secuencial del problema de diseño en subproblemas que son más simples para resolver y eventualmente logran un nivel de tecnología apropiado.

Cada uno de estos métodos tienen ventajas y desventajas. Para desarrollar métodos efectivos en la Síntesis de Procesos es necesario encontrar un método que combine lo mejor de cada una de estas aproximaciones, haciendo que la técnica desarrollada sea más sofisticada.

## **2.3 METODOS PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION.**

Debido a que los procesos de separación cubren una parte importante del total del capital invertido y costo anual de operación para una planta, una gran cantidad de intereses han sido generados para el desarrollo de métodos sistemáticos y racionales que produzcan esquemas de separación "óptimos".

### **2.3.1 METODOS HEURISTICOS.**

Estos métodos utilizan reglas de dedo resultantes de la experiencia ingenieril y el conocimiento en los aspectos físicos y químicos de las técnicas de separación.

Dentro de esta categoría se pueden distinguir dos subclases:

Los correspondientes con la Síntesis de secuencias de Destilación y la Síntesis de Secuencias de Separación General (destilación extractiva, extracción, cristalización, absorción).

#### HEURISTICAS PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE DESTILACION.

LOCKART (1947). Examinó los tres productos de las secuencias de destilación encontradas en el proceso de gasolina natural. El requerimiento total de calor fue considerado por Harbert (1957) como el único factor más importante en la determinación de la óptima distribución de las columnas de destilación.

ROD Y MAREK (1959). Identificaron el flujo de vapor total en la secuencia de destilación como el factor más dominante.

FRESHWATER Y HENRY (1975). Analizaron la validez y las regiones de aplicación de las reglas heurísticas de Haven, con ello estudiaron los efectos de:

- a) Composición de la alimentación.
- b) Volatilidad de los componentes.
- c) Grado de recuperación de los componentes de la alimentación en el costo total anual de cada posible secuencia para la separación de tres, cuatro y cinco componentes alimentados.

De su experiencia computacional hicieron las siguientes observaciones:

(1) Variación considerable en el costo entre las diferencias de todas las posibles secuencias para un problema de separación dado.

(2) Variaciones más pequeñas (costo de diferentes secuencias alternativas) en muchos casos restringidos para alimentaciones en

las cuales las volatilidades mínimas de los componentes son predominantes.

(3) El valor absoluto del costo de todas las secuencias para una separación dada exhibe considerable variación con la composición de la alimentación.

(4) Si no hay separaciones difíciles, los componentes pueden ser separados en orden decreciente de volatilidad uno por uno como productos, excepto en el caso donde un componente es predominante, por lo que deberá ser separado primero.

DOUKAS Y LUYBEN (1978). Se encargaron de un estudio computacional de las diversas alternativas configuracionales de destilación. Estudiaron cuatro diferentes configuraciones para la separación de una mezcla ternaria en tres productos; incluyeron secuencias clásicas directas e indirectas, y también las siguientes dos configuraciones: una sola columna con corriente de producto lateral y una columna de prefraccionamiento seguida por una columna de corriente lateral (columna con tres corrientes de productos). Los aspectos que tomaron en consideración fueron:

\* Una sola corriente lateral en la columna es la más económica cuando la concentración del componente más volátil es muy baja (menor del 10 %), conforme la concentración aumente arriba del 10 %, rápidamente llega a ser no económica.

\* El efecto de los cambios en volatilidades relativas muy pronunciadas.

\* Los costos de calentamiento y enfriamiento parecen dominar la estructura de decisión.

KING (1980). Propuso diversas reglas heurísticas para una síntesis de secuencias de separación:

a) Para una separación dada se debe seleccionar un método que produzca un factor de separación elevado, puesto que así se reducirán tanto el número de etapas requeridas como la cantidad de energía o el disolvente empleado en la separación.

b) Se deben evitar las condiciones extremas de operación, ya que un proceso bajo estas condiciones usualmente lleva asociado un costo elevado.

c) Deberán obtenerse directamente los productos constituidos por los componentes deseados, minimizando así el número de separaciones requeridas.

d) En un proceso continuo se deberán evitar las fases sólidas, pero si éstas se requieren, deberán preferirse las operaciones en lecho fijo. Esto se debe a que el manejo de sólidos en un proceso continuo es difícil y costoso.

e) En los casos en que se requiera más de una etapa deberán preferirse los procesos de separación basados en el acercamiento al equilibrio termodinámico entre dos fases sobre aquellos que se fundan en diferentes velocidades de transporte a través de una barrera. El segundo grupo de procesos requiere el consumo directo de energía en cada etapa, mientras que los primeros permiten que la energía proporcionada en una etapa sea parcialmente recuperada y utilizada en la siguiente.

f) Deberán preferirse los procesos que proporcionen la energía de separación requerida en forma directa y no a través de un disolvente, ya que en este caso se necesitaría un segundo proceso de separación para recuperar el disolvente.

g) Deberán evitarse el uso de agentes de separación caros, ya sea en términos de energía o de masa, puesto que éstos implicarán costos fijos y de operación elevados.

h) Las separaciones más difíciles, ya sea porque se cuenta con un factor de separación muy pequeño entre los componentes claves o porque se desean recuperaciones muy elevadas, se deben dejar para el final. Si se trata del segundo caso, requerirá un gran número de etapas, mientras que el primero además de esto exigirá elevadas relaciones de reflujo. En ambos casos, la presencia de componentes no claves aumentaría los gastos volumétricos internos y, por tanto, los diámetros de las columnas y las dimensiones del rehervidor y del condensador, además de aumentar el consumo de los servicios requeridos y hacer más extremas las condiciones de temperatura.

i) Deberán elegirse las separaciones que produzcan una división equimolar de la corriente de alimentación, puesto que, en equipos de varias etapas, esto implica una mayor reversibilidad termodinámica.

#### HEURISTICAS PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION GENERAL.

En estos métodos se utilizan más de una técnica de separación. Es un problema general que se encuentra durante el diseño de una planta química y requiere dar respuesta a dos preguntas: ¿Qué método de separación deberá ser usado? (problema de selección) y ¿Cuál es la secuencia de separación que se debe realizar? (problema de secuencias).

Los métodos más sencillos para darle respuesta a los dos problemas anteriores son:

RUDD Y SUS COLABORADORES (1971, 1972 y 1973). Desarrollaron una aproximación heurística para la síntesis de secuencias de separación multicomponente. Este programa conocido como el sistema AIDES, utiliza heurísticas en dos distintos niveles; en el primero selecciona el método de separación y en el segundo decide la mejor secuencia.

THOMPSON Y KING (1972). Desarrollaron una estrategia heurística para la síntesis de secuencias de separación general. Lo más sobresaliente de su trabajo es que los valores de los parámetros heurísticos son independientes de la presión o ausencia de componentes no claves en el separador.

MAHALEC Y MOTARD (1974). Propusieron el procedimiento denominado BALTAZAR para la síntesis de procesos químicos completos; en dicho procedimiento las alternativas de secuencias son desarrolladas en un esfuerzo para ayudar en las diferencias entre las corrientes multicomponentes encontradas en algunas partes de los esquemas de proceso que han sido desarrollados y las corrientes de productos requeridas para las especificaciones de diseño.

HARTMANN Y SUS COLABORADORES (1979). Han trabajado en una estrategia heurística para la síntesis de secuencias de separación como una parte del esquema total de proceso.

Dividieron las heurísticas en dos grupos: El primer grupo incluye reglas que determinan la estructura, la selección y las secuencias de separación, mientras que el segundo involucra heurísticas que determinan las condiciones de operación en los separadores.

El grupo de las reglas paramétricas incluye:

- a) Escoger las condiciones de operación cercanas a la ambiente.
- b) Usar como reflujo 1.2 veces el reflujo mínimo.
- c) Escoger el reflujo tal que el número máximo de platos sea requerido.

Esta aproximación ha sido usada eficientemente en una mezcla de 18 componentes con 10 corrientes de productos deseados.

El desarrollo de un rango adecuado de heurísticas han disminuido las ventajas de estos métodos, por consiguiente con dicho rango ordenado, las heurísticas se aplican una por una en el orden establecido por el método; si una heurística no es importante o no aplica para un problema de síntesis determinado, se deja ésta y se continúa con la siguiente heurística.

Quizá el método heurístico más adecuado en un rango ordenado de reglas es el propuesto por NADGIR Y LIU (1983), descrito con mayor detalle en el capítulo tres.

### 2.3.2 METODOS ALGORITMICOS.

Estos métodos emplean algoritmos matemáticos, así como de técnicas de optimización. Permiten generar en forma exhaustiva todas las posibles alternativas y evaluarlas, explícita o implícitamente, para determinar cuál es la más económica de acuerdo con la función objetivo previamente establecida. Tienen la ventaja de poder garantizar que la configuración de proceso seleccionada será la óptima, pero están limitados a la resolución de un número reducido de problemas cuyas posibles alternativas de configuración están perfectamente definidas y, por lo tanto, no se prestan fácilmente para el estudio de problemas abiertos. En principio todos los métodos algorítmicos son rigurosos e infalibles, algunos de ellos utilizan heurísticas generales o bien aceptadas para restringir las posibles alternativas de un problema abierto. Las herramientas matemáticas que se emplean más frecuentemente son: La programación dinámica, técnicas de ramificación y acotamiento, programación no lineal, la descomposición de grandes problemas y la teoría de redes.

## METODOS PARAMETRICOS PARA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION.

PETLYUK Y COLABORADORES. Es el trabajo más sencillo que abarcó un estudio termodinámico extensivo en secuencias de destilación multicomponente con el objetivo de minimizar la termodinámica irreversible mediante la propia selección de las secuencias.

NISHIMURA Y HIRAIZUMI (1971). Propusieron una función de evaluación que toma en cuenta la capacidad de la columna de destilación y la razón de consumo de calor en el rehedidor. Formularon el problema de la síntesis de configuraciones de destilación como un problema de optimización con variables del sistema y sus parámetros (dimensiones y condiciones de operación). Sus conclusiones fueron soportadas en dos reglas heurísticas muy sencillas: seleccionar la secuencia directa y retirar primero el componente dominante.

TEDDER Y RUDD (1978). Empezaron un estudio extensivo de ocho configuraciones de secuencias de destilación siendo alimentaciones ternarias de hidrocarburos ligeros. Identificaron dos parámetros como los más críticos de decisión en una secuencia óptima de destilación, la composición de la alimentación y el Coeficiente de Facilidad de Separación (CFS). Dos diagramas triangulares fueron elaborados con las regiones esperadas de optimización para  $CFS < 1.6$  y  $CFS \geq 1.6$ . El valor de su trabajo es que proporciona al diseñador una simple herramienta, definiendo los candidatos óptimos para la configuración de destilación.

Los métodos paramétricos anteriores son muy utilizados para analizar sistemas de diseño donde varios parámetros toman valores extremos: un componente domina en la alimentación, una separación es mucho más difícil que el resto, un producto es requerido con demasiada pureza, la mezcla es ideal, todos los componentes son de composición equimolar o todas las separaciones presentan parecida

volatilidad relativa.

## METODOS ALGORITMICOS PARA LA SINTESIS DE SECUENCIAS DE SEPARACION GENERAL.

El método más antiguo netamente algorítmico es el de HENDRY Y HUGHES (1972). Su aproximación usa la programación dinámica intentando identificar rigurosamente la secuencia óptima; el número de separadores se incrementa más lentamente que el número de esquemas de proceso, por consiguiente, si  $N$  es el número de componente en una mezcla y  $R(N)$  y  $Q(N)$  son el número de secuencias de separación resultantes y separadores, respectivamente, puede ser mostrado (Stephanopoulos, 1974) que:

$$R(N+1) / R(N) \longrightarrow 4 \quad Q(N+1) / Q(N) \longrightarrow 1$$

Este método requiere el examen y evaluación de todos los posibles separadores.

WESTERBERG Y STEPHANOPOULOS (1975). Proponen una estrategia que es capaz de encontrar las secuencias óptimas de operación, sin tener que buscar en todo el espacio de posibles separadores. En resumen esta estrategia contiene:

1) Utilizar las listas ordenadas de componentes de las mezclas desarrollando el árbol con todos los posibles separadores y secuencias.

2) Para una secuencia factible computarizar un límite superior e inferior para el costo óptimo (denominada secuencia básica).

3) Alguna otra secuencia completa o parcialmente desarrollada que tenga un límite inferior y que sea más grande que el límite superior de la secuencia básica no puede ser óptimo y entonces debe ser eliminada. El límite inferior del costo de la secuencia óptima es encontrar la función dual correspondiente a la

función de Lagrange. Los límites principal y dual son usados en conexión con un esquema de ramificación y límite, restringiendo con ello el espacio de búsqueda de los distintos separadores.

La fundamentación teórica está basada en el método de dos niveles de optimización, que considera:

- (P1) Función de minimización con algunas restricciones establecidas.
- (P2) Función de correspondencia entre la función de minimización y la de maximización.
- (P3) Función de maximización o para determinar el valor dual.

La característica que constituye la base de esta estrategia es que el costo mínimo para un esquema dado está entre los límites principal y dual.

La diferencia entre utilizar cálculos con límite dual y una programación dinámica es la siguiente:

Para la programación dinámica, algunos rangos permisibles para la entrada de variables en una columna deben ser considerados como la formación de una red de valores para dichas variables. De lo anterior la presión de entrada puede ser variada, formando un grupo de tres puntos de presión (alto, intermedio y bajo) y encontrar la columna óptima para cada una de estas alternativas.

Para los cálculos con límite dual, se deben considerar los rangos permitidos en la entrada de variables, llegando a ser variables de decisión sobre cuales optimizar, por consiguiente se encuentra una solución al final para cada columna considerada.

RODRIGO Y SEADER (1975). Realizaron un método algorítmico eficiente que involucra una lista de procesamiento de los

subproblemas de separación posibles, seguida por una ramificación de búsqueda ordenada para encontrar la secuencia óptima con respecto a la estructura del sistema. Esta técnica es convenientemente representada mediante una gráfica orientada. La distribución de costos de secuencia para un problema de separación es considerado cuando existe una amplia distribución, sólo un mínimo de separadores necesitan ser analizados para encontrar la secuencia óptima.

Dos tipos de opciones son necesarias. Una involucra la selección del tipo de separador y la dirección de una lista ordenada, la segunda opción involucra la selección del punto de separación sin la lista ordenada. Ambas alternativas son requeridas para determinar una ruta para el siguiente subproblema de separación.

Las variables de decisión del subproblema de separación son numerosas, dependen del tipo de separador, pudiendo ser restringida en una manera compleja por las especificaciones del proceso. Si se trata de una destilación ordinaria, las variables de decisión incluyen: presión en el separador, relación de reflujo, temperatura, grado de precalentamiento o preenfriamiento de la alimentación, distribución entre destilado y fondos de los componentes claves, localización de la etapa de alimentación, selección del equipo, selección de servicios, tipo de condensador operacional, grado de acumulación de líquido, y acercamiento de temperaturas en condensadores y otros tipos de cambiadores de calor.

Para destilación extractiva, las variables de decisión adicionales incluyen el flujo de disolvente en la entrada, grado de precalentamiento o preenfriamiento del disolvente y localización de la etapa de entrada del disolvente.

Después de lo anterior, un grupo de valores correspondiente a las variables de decisión es seleccionado para el subproblema de separación; muchos valores deben ser tomados con respecto a los grupos de ecuaciones de diseño utilizadas para análisis de subproblemas: propiedades físicas, dimensionamiento de equipo, estimación de costos, y criterio de costo o lucrativo.

#### SINTESIS MEDIANTE UNA RAMIFICACION DE BUSQUEDA ORDENADA.

Las siguientes heurísticas son consideradas:

(1) Generar o seleccionar el subproblema donde la primera especie en la lista ordenada es separada del resto.

(2) Generar o seleccionar el subproblema donde la separación de especies entre el destilado y fondos es mucho más cercana a la equimolar.

(3) Cada subgrupo es repetido en la ruta, expandiendo a subproblemas alternativos.

El procedimiento de ramificación ordenada se puede utilizar para encontrar las secuencias óptimas o casi óptimas, generalmente sin examinar todas las secuencias ni diseñar todos los separadores. El procedimiento resulta muy eficaz para grandes problemas combinatoriales, en donde están prohibidas las separaciones no prácticas, y si se puede hacer la suposición de que la presencia de pequeñas cantidades de componentes no claves solamente ejercen una mínima influencia sobre los costos.

La técnica ordenada consta de dos etapas. La investigación comienza a partir de la alimentación del proceso mediante ramificación y evaluación de costos de todas las separaciones alternativas. Se utiliza el método heurístico de Thompson y King, que selecciona la separación del menor costo, con la finalidad de determinar que rama tomar. Se realiza la correspondiente separación para producir los dos subgrupos a partir de los cuales

se continúa el proceso de ramificación y selección hasta que aparezcan los subgrupos correspondientes a todos los productos. Sin embargo, en el caso de productos multicomponentes, está permitido formarlos por mezclado. El costo total de la secuencia inicial desarrollada de esta forma se denomina límite inicial superior y se obtiene acumulando los costos de las separaciones tal como han sido seleccionadas. Esta secuencia de "primeramente el más económico" con frecuencia es la óptima o uno de los esquemas de separación casi óptimo.

La segunda etapa consiste en volver atrás para ramificar de nuevo con el fin de encontrar las secuencias de menor costo. Cuando se encuentra una de éstas se toma como el nuevo límite superior. En esta fase la ramificación no tiene por qué continuarse necesariamente hasta completar una secuencia. La ramificación se interrumpe y se reanuda la vuelta atrás hasta que el costo de una secuencia parcialmente terminada sobrepasa el límite superior. Por tanto, no es necesario desarrollar todas las secuencias ni diseñar y evaluar el costo de todos los separadores únicos.

El procedimiento de vuelta atrás comienza en el último separador de una secuencia parcialmente terminada mediante un retroceso al subgrupo anterior. Si a partir de este subgrupo se generan separadores alternativos, estos forman parte de las secuencias alternativas y se tienen en cuenta para la ramificación. Cuando todas estas secuencias alternativas han sido total o parcialmente completadas por comparación de sus costos con el último límite superior, la vuelta atrás se extiende a otra etapa. El procedimiento de vuelta atrás y ramificación se repite hasta que ya no quedan más secuencias para desarrollar.

## COMPARACION ENTRE EL METODO DE THOMPSON Y KING (T-K) CON EL METODO DE RAMIFICACION DE BUSQUEDA ORDENADA (RBO).

1) En caso donde los productos multicomponentes son especificados, el método T-K resuelve el problema de separación para un producto factible en una computadora determinada. Para cada producto, los subproblemas de separación son determinados para una matriz de producto separable, indicando todos los productos y los AMS. En RBO todos los productos son considerados secuencialmente, y los subproblemas son generados por lista de procesamiento.

2) Ambos métodos empiezan expandiendo el nodo de alimentación y ordenan los nodos descendientemente por la primer heurística más económica. A menos que los factores  $\beta$  del método T-K no sean adaptados, el costo de un subproblema de separación en dicho método puede ser un costo estimado basado en el número de etapas de equilibrio. En este trabajo, el costo es siempre el costo actual.

3) El método T-K lleva adelante el balance actual del material durante el desarrollo de una secuencia y, por consiguiente no reconoce subproblemas de separación multiplicados.

4) El método T-K desarrolla sólo una secuencia de cada nodo que sea descendente del nodo de alimentación excepto cuando los factores de peso  $\beta$  sean usados para adaptar los costos, entonces la síntesis puede ser repetida desde el inicio. En tal caso, cada subproblema seleccionado es nuevamente analizado. El procedimiento de localización hacia atrás no es utilizado en el método T-K. Por consiguiente el T-K no puede garantizar la determinación de la secuencia óptima.

5) El método de ramificación de búsqueda ordenada puede generar realmente secuencias cercanas a la óptima.

GOMEZ Y SEADER (1976). Su método considera la reducción en el espacio de búsqueda y la cercanía a la secuencia óptima. Estima y utiliza un costo mínimo absoluto para que la parte del espacio de búsqueda aún no sea diseñada. De esta manera los límites inferiores para un costo total de la secuencia son generados directamente desarrollando la secuencia óptima.

Los límites inferiores son considerados como la suma del costo actual de la secuencia desarrollada parcialmente y una predicción del costo mínimo para que la parte restante de la secuencia sea desarrollada. Esta predicción emplea una función heurística de costo para separadores.

Este nuevo procedimiento es considerablemente más eficiente que el proceso de programación dinámica, de cualquier modo después el método puede optimizarse de acuerdo a las condiciones de operación; es más eficiente que el método de ramificación de búsqueda ordenada, principalmente donde las distribuciones del costo de secuencia son relativamente limitadas.

### 2.3.3 METODOS EVOLUTIVOS.

Incluyen las tres siguientes subareas (Stephanopoulos, 1974): generar una secuencia inicial de separación, identificar las reglas evolutivas y determinar la estrategia evolutiva a seguir.

### DESARROLLO DE UNA SECUENCIA INICIAL DE SEPARACION PARA LOS OBJETIVOS DE DISEÑO.

STEPHANOPOULOS Y WESTERBERG (1976). Esta aproximación evolutiva para la síntesis de diagramas de flujo de procesos, intenta organizar y sistematizar la lógica usada en la síntesis

evolutiva: primero, desarrolla un diagrama de flujo inicial, a partir del cual comienza la evolución; segundo, define las reglas que gobiernan los pasos evolutivos, y tercero, decide qué método emplear para comparar las evoluciones de las estructuras utilizadas y las modificadas.

En la síntesis evolutiva, el diagrama de flujo inicial es el punto de partida. El desarrollo de un buen diagrama de flujo inicial no es un problema trivial.

Existen dos aproximaciones generales, las cuales pueden usarse para determinar un buen diagrama de flujo inicial: el algorítmico y el heurístico. El primero es rigurosamente matemático para las condiciones establecidas del problema y garantiza la producción de alternativas más confiables, requiere tiempos de cómputo largos. La segunda, la aproximación heurística, no garantiza resultados de una manera rigurosamente matemática, pero tiende a producir rápidamente muy buenos diagramas de flujo iniciales; basada en resultados de experiencias pasadas, ingenio e intuición por parte del diseñador, estas reglas son efectivas y probablemente representan el método más eficiente para desarrollar buenos diagramas de flujo iniciales.

Una vez que el diagrama de flujo inicial es factible, empieza la evolución a mejores diagramas de flujo. En este punto, se necesitan reglas para orientar la evolución en dos caminos diferentes: primero, para desarrollar los posibles cambios estructurales que son permitidos en el diagrama de flujo en turno, y segundo, para guiar la evolución a la dirección más eficiente.

En lo que respecta a las reglas evolutivas, la noción básica en su desarrollo radica en el "diagrama de flujo vecino". Un diagrama de flujo B puede ser llamado diagrama de flujo vecino a un diagrama de flujo A, si B ha sido generado a partir de A. Entonces, alrededor del diagrama de flujo A existe una familia de

diagramas de flujo con el menor número de diferencias estructurales de A, son éstos entonces los diagramas de flujo vecinos de A.

Las reglas evolutivas son necesarias para desarrollar todos los diagramas de flujo vecinos del diagrama de flujo en curso. En este contexto, las reglas evolutivas deben tener las siguientes propiedades:

- 1) Eficiencia. Las reglas deben generar únicamente candidatos legítimos a diagramas de flujo y no diagramas indeseables o no factibles por diversas razones.
- 2) Complementar. Después de repetidas aplicaciones de las reglas, debe ser posible el desarrollo de alguna estructura inicial a otra estructura, entre las estructuras candidatas.
- 3) Reversibilidad. Las reglas deben satisfacer el requerimiento de que si el diagrama de flujo A es un vecino del diagrama de flujo B, entonces el diagrama de flujo B es un vecino del diagrama de flujo A.
- 4) Razonamientos intuitivos. Las reglas deben conectar diagramas de flujo en los cuales un ingeniero diseñador considere a los vecinos actuales.

Este método establece tres reglas evolutivas usadas en la generación de procesos de separación:

Regla 1. Intercambia las posiciones relativas de dos separadores  $a_i$  y  $a_{i+1}$  en relaciones "hacia abajo" con respecto a  $a_i$ . Por ejemplo, si el orden inicial fue  $a_i, a_{i+1}$ , el nuevo orden es  $a_{i+1}, a_i$ .

Regla 2. Intercambia las posiciones relativas de dos separadores  $a_{i-1}$ ,  $a_i$  en una relación "hacia arriba" con respecto a  $a_i$ . Por ejemplo, si el orden inicial fue  $a_{i-1}$ ,  $a_i$ , el nuevo orden es  $a_i$ ,  $a_{i-1}$ .

Regla 3. Sustituye al separador  $a_i$  usando la separación por el método  $b$  y retiene el mismo "contador operador hacia arriba" y "contador operador hacia abajo" como antes de la sustitución para el nuevo orden de componentes para la separación por el método  $b$ .

Las reglas evolutivas para una secuencia de separación satisfacen las tres primeras propiedades básicas : propiedad 1, todas las reglas crean físicamente diagramas de flujo consistentes y factibles a partir de algún árbol binario resultante de la aplicación de las reglas correspondientes a la secuencia de separación; propiedad 2, por aplicaciones repetidas de las reglas evolutivas, todos los posibles diagramas de flujo pueden ser generados; propiedad 3, si un diagrama de flujo  $B$  es un vecino hacia arriba de  $A$ , entonces  $A$  es un vecino hacia abajo de  $B$ .

Finalmente, en la estrategia evolutiva, repetir la aplicación de las reglas 1, 2 y 3 pueden generar todas las posibles secuencias de separación. Si cada diagrama de flujo es dimensionado y costado óptimamente, el diagrama de flujo óptimo es fácilmente identificable. En principio, esta enumeración estratégica provee la solución óptima al problema de separación. Sin embargo, como el número de componentes en la mezcla inicial y/o el número de métodos de separación considerados aumentan, el número de posibles alternativas crece tanto que una enumeración exhaustiva tiende a ser prohibitiva. Por lo tanto, se requieren guías certeras para definir la dirección más promisoriosa y obtener la solución óptima, reduciendo significativamente el espacio de búsqueda. Estas guías son de naturaleza heurística. Para la síntesis de separación, la más promisoriosa dirección es aquella en

la que el diagrama de flujo vecino tiene el más bajo costo. Por consiguiente, se considera el diagrama de flujo inicial y el diagrama de flujo vecino, derivado por el uso único de las reglas 1 y 2. Estos diagramas de flujo son óptimamente dimensionados y costeados, el que tenga el más bajo costo es retenido, mientras que el resto son eliminados. Los diagramas de flujo vecinos para esta nueva base de diagrama de flujo son desarrollados y evaluados. Siempre moviéndose con respecto al vecino de más bajo costo, si éste tiene un costo más bajo que el mejor diagrama de flujo en turno. Este procedimiento finaliza cuando ya no existen vecinos arriba y abajo del mejor diagrama de flujo en turno; entonces la regla 3 es aplicada para generar una nueva clase de diagramas de flujo vecinos. Se procede de la misma manera, hasta que los diagramas de flujo no puedan ser generados con costos más bajos, obteniéndose así un óptimo local. Esta aproximación puede ser mejorada por la generación de un segundo nivel de diagramas de flujo vecinos.

A partir de todos los diagramas de flujo, el de menor costo es retenido. Tal variación requiere más tiempo de cómputo, pero también mejora la habilidad de la estrategia para localizar el mejor diagrama de flujo.

Otra variación de la estrategia evolutiva, emplea heurísticas, y de este modo, potencialmente requiere menos tiempo de cómputo. Las estructuras para los diagramas de flujo vecinos a partir del diagrama de flujo analizado son derivadas; la más promisoria es elegida y sólo ésta es dimensionada y costada. Si este vecino representa un mejoramiento, es inmediatamente tomada como el nuevo diagrama de flujo base. La selección del vecino más promisorio es heurística y lo sucesivo del método depende de la experiencia del diseñador en el área particular de la síntesis del problema.

SEADER Y WESTERBERG (1977). Han sugerido seis heurísticas para guiar la generación de la secuencia inicial y la evolución para mejorar algunas etapas posteriores (método combinado Heurístico-Evolutivo).

NATH Y MOTARD (1981). Desarrollaron una aproximación heurística similar para la creación de una secuencia inicial de separación considerando únicamente destilación ordinaria y extractiva (método combinado Heurístico-Evolutivo).

#### IDENTIFICACION DE LAS REGLAS EVOLUTIVAS.

Una vez que se ha generado una secuencia de separación inicial, las reglas evolutivas pueden empezar a desarrollarse, éstas son necesarias para generar todos los cambios de una estructura permisible en una secuencia de separación.

Dominan las siguientes propiedades:

- \* Eficiencia, con las secuencias de separación factibles.
- \* Calidad, garantizada por la aplicación repetida de la generación de todas las posibles secuencias.
- \* Razonamiento intuitivo, para generar las secuencias de separación que no difieren significativamente de las que son sometidas a evolución.

La separación se completa con una unidad de separación identificando el método utilizado. Regla 1: Mover una tarea de separación a una posición más fácil en la secuencia. Regla 2: Cambiar el método de separación utilizado por alguna otra operación.

En cada caso, la nueva operación creará productos alterados, y corrientes para la separación de estos productos, empleando la misma tarea secuencial como la estructura original.

## DETERMINACION DE LA ESTRATEGIA EVOLUTIVA A SEGUIR.

Stephanopoulos (1974) ha sugerido varias alternativas para determinar como el sistema puede desarrollar mejores diseños, y son los cuatro siguientes:

1) Usar las reglas evolutivas generando todas las secuencias de separación factibles resultantes de las secuencias que han sufrido alguna modificación. El número y costo total de las alternativas rigurosas y seleccionar la secuencia más económica es el siguiente paso a seguir.

2) Una simple variación en la anterior estrategia permite desarrollar heurísticas para la selección del siguiente esquema de proceso entre todas las alternativas generadas de las reglas evolutivas.

3) Aplicar las reglas evolutivas seleccionadas.

4) La primer alternativa puede ser utilizada en dos etapas sucesivas seleccionando la siguiente secuencia entre todas las alternativas que son generadas a través de las dos sucesivas modificaciones.

En la TABLA 2.1 se observan algunas ventajas y desventajas de los métodos heurísticos, evolutivos y algorítmicos.

### 2.3.4 METODO TERMODINAMICO.

GOMEZ-MUÑOZ Y SEADER (1985). La síntesis de separación de mezclas multicomponentes en dos o más productos se puede desarrollar mediante diversos enfoques, en los que predomina el uso de reglas heurísticas, que en la mayoría de los casos se basan en criterios económicos. Sin embargo, la aplicación de algunos

TABLA 2.1 VENTAJAS Y DESVENTAJAS DE TRES DIFERENTES METODOS.

VENTAJAS	DESVENTAJAS
<b>Métodos heurísticos</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>* Buenos para aplicarse a mano.</li> <li>* No requieren antecedentes matemáticos o habilidad computacional.</li> <li>* Pueden generar fácilmente una secuencia inicial para otros métodos.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>* Las heurísticas frecuentemente se contradicen o sobrepone una de otra.</li> <li>* Requieren una estrategia para implementar (¿qué heurísticas son usadas primero?).</li> </ul>
<b>Métodos evolutivos</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>* Tienen la opción de eliminar nuevas secuencias a través de evoluciones.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>* Necesitan una secuencia inicial generada por otros métodos.</li> <li>* Requieren una estrategia para implementar (¿qué reglas evolutivas son usadas primero?).</li> <li>* Necesitan un criterio de ejecución cuantitativo (pueden incluir cálculos de diseño y costos de equipo).</li> <li>* Limitados para medir problemas (muchas secuencias necesitan ser comparadas).</li> </ul>
<b>Métodos algorítmicos o de optimización</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>* Pueden ser computarizados.</li> <li>* Pueden encontrar fácilmente secuencias sub-óptimas.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>* Ignoran información cualitativa (propiedades de alimentación: componentes corrosivos, peligrosos y/o criogénicos).</li> <li>* Dependen de una ecuación de costo.</li> <li>* Limitados para medir problemas.</li> </ul>

principios termodinámicos, como son el trabajo mínimo reversible de separación y el análisis de la segunda ley para sistemas irreversibles, también permite desarrollar secuencias de separación que sean óptimas o casi óptimas. Así mismo, los principios termodinámicos llevan a concluir la validez de muchas de las heurísticas que se han utilizado, pues desde un punto de vista formal y metodológico, se corrobora dicha validez.

En el caso concreto del método desarrollado por Gómez y Seader, el problema de síntesis es atacado mediante funciones termodinámicas objetivo, las cuales proporcionan información a partir del trabajo mínimo de separación, el equivalente de ciclo al ciclo de Carnot del trabajo y el trabajo perdido en la separación. Conociendo las condiciones de alimentación y productos, la selección de la estructura de separación óptima se basa en tres factores: la composición de la alimentación, factores inherentes de separación y el patrón de flujo. En especial, es importante el efecto de la composición de la alimentación de productos en el desarrollo de la secuencia de separación, inclusive encima de la volatilidad relativa entre las especies presentes.

Este método ha mostrado ser muy eficiente en la síntesis de las estructuras para trenes de destilación acíclicos, así como para estructuras complejas previamente establecidas, similarmente a los métodos evolutivos de síntesis.

De manera simple, las funciones termodinámicas objetivo propuestas contemplan los siguientes principios :

a) Trabajo mínimo isotérmico para separaciones reversibles.

Este es el trabajo mínimo necesario para separar una mezcla alimentada a un estado inicial, obteniéndose dos o más productos de estados finales especificados. La determinación de éste parámetro (generalmente de manera adimensional) se deriva de la

suposición de un hipotético proceso de separación reversible con soluciones ideales.

b) Equivalente de Carnot del trabajo.

Cuando se emplea un agente energético de separación, se introduce este concepto, que significa simplemente la conversión de calor en trabajo en una máquina de Carnot de ciclo reversible. El resultado más importante de este concepto es la escasa o nula influencia de las volatilidades relativas en el proceso de conversión mecánico-calorífico.

c) Trabajo perdido (separaciones irreversibles).

Este último factor toma en cuenta la eficiencia termodinámica de las columnas de separación, parámetro sobre el cual la volatilidad relativa juega un importante papel, pues cuando su valor tiende a uno, la separación se dificulta y la eficiencia disminuye sensiblemente. Además, considera la resultante pérdida de energía en la columna, puesta en evidencia con el suministro de calor en el condensador.

La aplicación de los tres principios mencionados permite el desarrollo de esquemas de separación, mediante la derivación de reglas heurísticas de base netamente termodinámicas, que son análogas a las tradicionales heurísticas de base técnico-económica.

### 2.3.5 METODOS COMBINADOS.

Dentro de estos métodos se encuentran principalmente: Thompson y King (1972), Seader y Westerberg (1977), y Nath y Molard (1981).

## METODO COMBINADO HEURISTICO-ALGORITMICO. THOMPSON Y KING (1972).

Es un método de programación heurístico y algorítmico que es utilizado para seleccionar la secuencia y tipos de procesos en la conversión de mezclas complejas. En este método después de la entrada de las condiciones de alimentación, algunas propiedades físicas (Pc, Tc, Peso Molecular, P<sub>eb</sub> normal), los tipos de separadores y las especificaciones de los productos finales son consideradas. Los componentes claves, el tipo de separador, el orden de separación y el AMS son seleccionados de una manera sistemática, empezando con la alimentación inicial.

La programación utilizada en este método incorpora varios niveles de rutinas ejecutables, cada una de las cuales ascienden jerárquicamente y aprovechan únicamente la información que es esencial para su función. Las rutinas más importantes se analizan a continuación:

PROD. Identifica un factible grupo de productos para la planta de proceso; si es posible obtiene el grupo de productos deseados, si no lo es, entonces obtiene aquellos productos especificados posibles, generando pocos productos extras. En general una rutina de manipulación simbólica algorítmica, mientras no hace juicios propios, narra profundamente la complejidad del problema, así como el número de alternativas necesarias a ser consideradas. Tiene seis puntos efectivos de entrada:

1. Creación inicial de un grupo de productos factible.
2. Eliminación de un grupo de productos potencial.
3. Activación de un nuevo grupo de productos.
4. Activación de separaciones de producto potencial.
5. Separación de producto multicomponente.
6. Eliminación de un grupo de producto creado por (5).

Una matriz de producto separable es creada para identificar las separaciones propuestas y eliminarlas si es necesario como sea posible en la selección del proceso. Esta matriz envía información a todas las rutinas ejecutables en los siguientes puntos:

- \* Factibilidad de separación entre dos productos dando la unidad de separación.
- \* Presencia de productos en la corriente a ser separada.
- \* Separación adyacente de alguno de los dos productos (pueden ser productos claves en una separación).
- \* Nombres de los componentes que pueden ser claves ligero y pesado en una separación.
- \* Cuál de los dos productos que pueden ser separados tiene el coeficiente de distribución mayor.

SYNT. Esta rutina sintetiza un esquema de flujo de proceso.

PICK. Selecciona el siguiente separador en el tren con la base de un segundo nivel de una o más heurísticas. Decide cuáles son los productos claves y cuál separador está siendo utilizado.

DETAIL. Crea el esquema de flujo tomando dimensiones y costos del proceso. Llama alguna de las unidades de simulación necesarias; además añade el AMS a las unidades que lo requieren. Si la alimentación para una unidad específica no se encuentra en el estado de agregación requerido, un condensador total o vaporizador es insertado. La refrigeración en varios niveles es utilizada donde es requerida; además en esta rutina las unidades de simulación aprovechables son destilación ordinaria, destilación extractiva, extracción líquido-líquido y absorción.

El costo detallado de la unidad es enviado a SYNT para ser usado en la reevaluación de sus costos que proceden de los diferentes tipos de separadores, de esta forma un esquema es producido, dimensionado y costado. Este procedimiento es repetido

hasta encontrar un mejor proceso a bajo costo. Las unidades de separación que tienen agente de energía de separación son examinadas para analizar si su presencia es necesaria debido al requerimiento de un producto multicomponente; si es así, PROD separa el producto para efectuar lo anterior.

SUBROUTINA SEPFAC. Estima los coeficientes de distribución necesarios para un problema específico.

CHECK. Es una rutina opcional activada después de PROD, alterando la matriz de producto separable, usa la misma prueba como la simulación detallada para condiciones de fase y una restricción escasa en relaciones de flujo interno.

El factor de peso ( $\beta$ ) se entiende mejor en la ecuación donde es empleado:

$$\text{COSTO ESTIMADO DEL SEPARADOR} = (\beta_{ijk}) (N_{ijk}) \quad (\text{ec. 2.3})$$

donde N es el estimado proporcional para el número de etapas requeridas para separar el producto i del producto j mediante el separador k, bajo las fracciones especificadas en el problema.

Para separadores que tienen flujos en contracorriente como la destilación, N es el número mínimo de etapas en el reflujo total, y para los procesos con AMS, N es el número actual de etapas con factores estimados de absorción.

El factor de peso  $\beta$  es adaptado después de cada simulación detallada dando para ello el separador y los componentes claves; el costo real de la unidad incluye el costo de recuperación del AMS para la siguiente unidad, el costo del cambio de estado de agregación de la corriente de alimentación, y/o el costo del bombeo a una presión mayor para unidades sucesivas.

## RESTRICCIONES.

Varias condiciones pueden evitar la terminación de una simulación. Los dos niveles de restricciones que han sido establecidos son:

- a) Restricciones que eliminan la separación permanente:
  - \* Relaciones de flujo extremas de corrientes internas en contracorriente.
  - \* Fase impropia de miscibilidad para el tipo de separador.
  
- b) Restricciones que discuten el uso de un separador por la asignación de un alto valor de  $\beta$ :
  - \* Falsa estimación de ordenamiento de coeficientes de distribución de los componentes por unidad.
  - \* La unidad de operación requiera temperaturas extremas.

La FIGURA 2.1 muestra la estrategia general del método de Thompson y King.

## METODO COMBINADO HERISTICO-EVOLUTIVO. SEADER Y WESTERBERG (1977).

Stephanopoulos y Westerberg (1976) delinearon un punto de vista con respecto a la síntesis evolutiva, resumido en cuatro ideas básicas requeridas: un esquema de flujo inicial, reglas sistemáticas y pequeños cambios para el esquema de flujo próximo, una estrategia efectiva que aplique estas reglas, y los medios para comparar el esquema de flujo original con respecto a sus vecinos.

A continuación se examina el uso del siguiente grupo de seis reglas heurísticas que se añaden a la primera y tercera ideas arriba mencionadas:

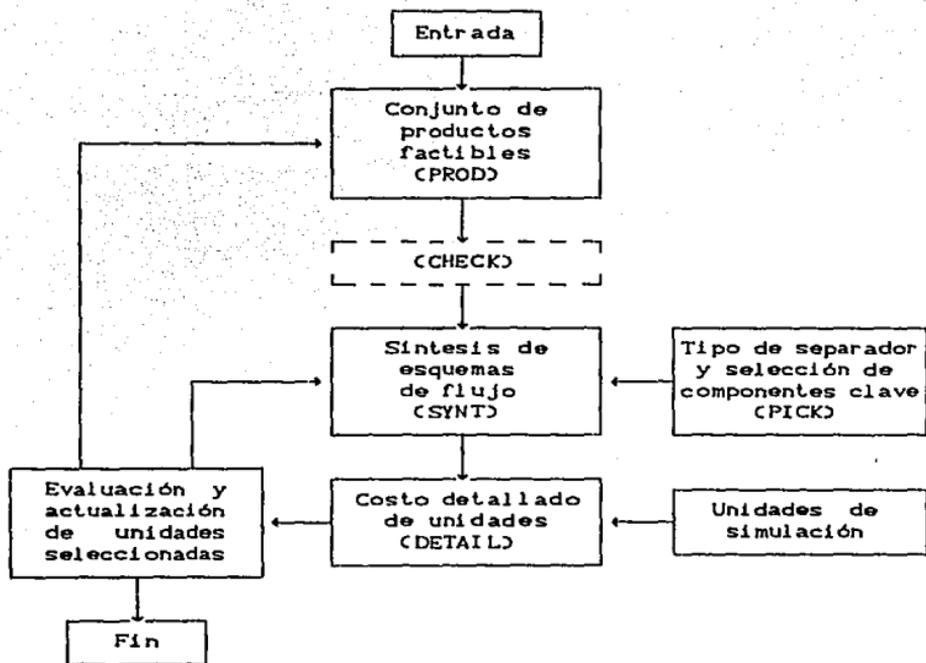


FIGURA 2.1 ESTRATEGIA GENERAL

**HEURÍSTICA 1.** Separaciones no permitidas. Con la finalidad de reducir la magnitud del problema combinatorial, primeramente se deben seleccionar los métodos de separación basados en un examen de varios factores; para ello, se empieza con un examen de la técnica factible de destilación ordinaria, que en principio es aplicable en toda la región donde coexisten las fases líquido-vapor. Esta región se extiende desde la temperatura de cristalización a la presión de convergencia, siempre que las especies sean termodinámicamente estables a las condiciones establecidas. Si al emplear destilación ordinaria se requiere refrigeración en el condensador, la alternativa de absorción debe ser considerada. Por otro lado, si se indican niveles bajos de presión para la destilación ordinaria, la extracción líquido-líquido con varios disolventes se debe considerar.

En una amplia región intermedia, la destilación ordinaria es a menudo no factible económicamente cuando la volatilidad relativa entre los componentes claves es menor a 1.05, aproximadamente. En estos casos, la destilación extractiva y la extracción líquido-líquido pueden ser otras alternativas. Debe tomarse en cuenta que la destilación extractiva, en general, no necesita ser considerada cuando la volatilidad relativa para la destilación ordinaria es mayor a dos.

**HEURÍSTICA 2.** Para cada método se desarrolla una lista ordenada de componentes de acuerdo a su volatilidad u otro índice de separación. Para cada par adyacente de componentes  $i$  y  $j$ , estimar su volatilidad relativa  $\alpha_{ij} = (k_i / k_j) > 1$ ; cuando las volatilidades de los componentes adyacentes ordenados en la alimentación varían grandemente, las secuencias de separación se realizan en el orden decreciente de volatilidad relativa.

**HEURÍSTICA 3.** La secuencia de separación de componentes se establece en el orden del porcentaje molar decreciente de la alimentación, cuando dicho porcentaje varía mucho, siempre que la

variación de la volatilidad relativa sea pequeña.

HEURISTICA 4. Cuando ni la volatilidad relativa ni el porcentaje molar en la alimentación varían mucho, deben separarse los componentes uno a uno como productos de domos. La estructura resultante es llamada secuencia directa; en dicha estructura cuando la destilación ordinaria es el método de separación, la presión tiende a ser más alta en el primer separador y es reducida en cada subsecuente separador.

HEURISTICA 5. Cuando se utiliza un AMS, debe separarse éste en el separador siguiente a aquél en el que se ha introducido.

HEURISTICA 6. Al especificar productos multicomponentes, son favorables las secuencias que conducen a estos productos directamente o con un mínimo de mezclas, excepto que las volatilidades relativas adyacentes sean notablemente menores que para una secuencia que requiere separadores adicionales y mezclado.

Las reglas evolutivas para generar los esquemas de flujo siguientes son las desarrolladas por Stephanopoulos y Westerberg (1976).

Finalmente, la técnica para ejecutar las cuatro ideas básicas está contenida en los siguientes cuatro pasos:

1. Usar las seis reglas heurísticas antes mencionadas en el orden establecido para generar un esquema de flujo inicial. Sólo si una heurística no aplica, entonces se aplica la siguiente.

2. Considerar el esquema de flujo general.

- A. Generar cada esquema próximo posible.

B. Mantener el esquema próximo como un candidato sólo si:

- i) Este pudo haber sido generado por una heurística.
- ii) Es casi un equivalente la alternativa utilizando la misma heurística.

C. Registrar cada esquema de flujo retenido en un orden reflexionando qué heurística fue responsable para dicha retención.

3. Evaluar en orden los esquemas de flujo próximos generados en el paso 2, sólo si:

A. Un mejor esquema de flujo es encontrado.

B. No es encontrado un mejor esquema de flujo.

C. Si un mejor esquema es encontrado, repetir desde el paso 2; de lo contrario, ir al paso 4.

4. Antes de aceptar el aparente mejor esquema de flujo, examinar todos los esquemas próximos restantes que pueden ser un poco menos adecuados, pero posibles, y los cuales fueron excluidos en el paso 2B.

#### **METODO COMBINADO HEURISTICO-EVOLUTIVO. NATH Y MOTARD (1981).**

Este método sistematiza la síntesis de secuencias de separación creando un arreglo de unidades de separación que dividen los productos deseados de una corriente de alimentación específica con un mínimo costo anual. Combina ocho reglas heurísticas que permiten una estructura inicial y cinco reglas evolutivas, además de una estrategia para detallar la

configuración de las secuencias. El grupo de productos, los componentes claves, el tipo de separador, el agente másico de separación. Si son requeridos se escogen en un camino sistemático con la ayuda de una evaluación heurística.

El problema de síntesis se desarrolla en dos fases: en la primera, una estructura inicial es creada utilizando reglas heurísticas; en la segunda fase, la estructura final se obtiene aplicando sucesivamente reglas evolutivas.

**DEFINICION DEL PROBLEMA.** Dada una corriente de alimentación con condiciones conocidas (composición, razón de flujo, temperatura, presión), sistemáticamente se sintetiza un proceso que puede separar los productos especificados de la alimentación a un costo mínimo. Los tipos de destilación son restringidos a la destilación convencional y a la destilación extractiva. Un segundo objetivo es llegar a una configuración final con un mínimo esfuerzo computacional.

**CREACION DE UNA ESTRUCTURA INICIAL.** La estructura inicial es la principal estructura cuyos cambios son realizados sucesivamente por evolución. Si la estructura principal es demasiado diferente a la óptima, entonces requerirá muchas más iteraciones para converger, ya que las reglas evolutivas no garantizan, en un sentido riguroso matemático, que una estructura demasiado distinta a la óptima pueda tal vez ser dirigida a una optimización local en lugar de una global.

#### **REGLAS HEURISTICAS.**

**REGLA HEURISTICA 1.** Favorecer al producto presente en menor cantidad. Si los productos deseados incluyen uno o más productos multicomponentes, durante la creación de la estructura inicial es entonces cuando se prefiere obtener el producto en menor cantidad,

intuitivamente esto sugiere una estructura con menos unidades de separación y potencialmente con un menor costo total.

En los casos cuando la estructura inicial tampoco puede ser completada porque un producto multicomponente no puede ser separado directamente o porque el separador secciona productos multicomponentes violando la regla heurística 5, el producto multicomponente es separado para producir un nuevo producto, con el cual nuevamente se intenta la creación de la estructura inicial.

REGLA HEURISTICA 2. Favorecer la destilación. Los métodos que utilizan agentes de energía de separación son favorecidos porque minimizan el número de unidades de separación en la estructura. Para cada separador que utiliza AMS, se requiere un separador adicional para retirar dicho AMS; además las razones de flujo interno son generalmente mucho más altas para el separador que utiliza un AMS. Estas desventajas son balanceadas, si la separación utiliza un AMS que permita el mayor factor de separación o la factibilidad de ésta.

REGLA HEURISTICA 3. La separación más sencilla deberá realizarse primero. La separación más fácil es la que cumple cualitativamente con las siguientes cuatro heurísticas:

- a) Favorecer el mayor  $\alpha_{LK-HK}$ .
- b) Favorecer una columna balanceada.
- c) Favorecer las separaciones de los componentes claves.
- d) Favorecer menos al producto destilado.

Las heurísticas (a) y (c) son ampliamente aceptadas. Las separaciones difíciles se realizan mejor si son llevadas a cabo

cuando la razón de flujo de corriente es baja (requiriendo un diámetro más pequeño para el separador) y cuando muchos de los componentes no claves están ausentes. El costo de columnas grandes con razones de reflujo altas es más sensible a la presencia de componentes no claves.

La heurística (b) es favorecida cuando las cantidades de productos en domos y fondos pueden estar cerca del mismo valor; esta heurística, que posee la ventaja de separar 50-50, justifica las bases de mínimos requerimientos de calor.

La heurística (d) surge a partir de que los costos de operación para una columna varían directamente con la cantidad del destilado. Se propone una función denominada Coeficiente de Dificultad de Separación (CDS), cuyo valor numérico representa las cuatro heurísticas anteriores en una expresión cuantitativa. Esta función se trata con detalle en el capítulo tres.

REGLA HEURISTICA 4. Un método de separación que utiliza un agente másico de separación (AMS), no puede ser usado para separar otro AMS. Esta regla se complementa con la heurística 2, favoreciendo la destilación. Por esta heurística se elimina la posibilidad de secuencias absurdas que tienen un infinito número de columnas en las cuales un AMS es separado usando otro AMS, el cual es separado utilizando otro AMS, y así sucesivamente.

REGLA HEURISTICA 5. Una separación con  $\alpha_{k-HK} < \alpha_{min}$  no es aceptable. Se hace dicha consideración ya que mientras más bajos sean los valores de  $\alpha$ , las columnas resultan extremadamente costosas. En este método se ha escogido arbitrariamente el valor de 1.1 para  $\alpha_{min}$ .

REGLA HEURISTICA 6. La presión de operación deberá ser cercana a la ambiental.

REGLA HEURISTICA 7. El conjunto de fracciones de los componentes claves será especificado de acuerdo a su uso (el diseño de la columna es considerado preespecificando valores de recuperación para cada componente clave).

REGLA HEURISTICA 8. La relación de reflujo en operación debe ser igual a 1.3 veces la relación de reflujo mínimo para cada columna.

La estructura inicial creada por las reglas heurísticas es sucesivamente modificada por las reglas evolutivas, las cuales cuestionan la validez de las primeras reglas. Las reglas evolutivas son aplicadas en un orden jerárquico, es decir, si una regla en particular no sugiere alguna modificación, la siguiente regla es entonces aplicada; la evolución termina cuando ya no son posibles más modificaciones.

#### REGLAS EVOLUTIVAS.

REGLA EVOLUTIVA 1. Desafiar la validez de la heurística 1. Para retener el producto en menor cantidad, algunas veces un separador utiliza un AMS; para tales casos, hay una posibilidad que puede derivar un esquema de proceso mayor. De esta forma el producto multicomponente obtenido puede ser separado en dos nuevos productos utilizando unidades de destilación, y para cada caso se tendría el mismo número de unidades, pudiendo ser éste mayor.

REGLA EVOLUTIVA 2. Examinar las estructuras vecinas, si:

a) El CDS está cerca del 10%

b) La refrigeración es requerida para condensar el reflujo.

REGLA EVOLUTIVA 3. Desafiar la validez de la heurística 2. Las unidades que utilizan un AMS pueden llegar a ser económicamente superiores a la unidad de destilación ordinaria, siempre y cuando la unidad tenga un factor de separación  $\alpha$  entre el componente clave ligero y el clave pesado suficientemente más grande que para una simple destilación.

Una aproximación para conocer el número real de etapas  $N$ , para una separación específica es:

$$N \propto (1/\ln \alpha) \quad (\text{ec. 2.4})$$

Para la separación que utiliza un AMS,  $\alpha$  tiene una magnitud igual al cuadrado de  $\alpha$  para destilación ordinaria, el número de etapas en la separación que utiliza un AMS puede ser la mitad del número de etapas para la unidad de destilación ordinaria; de esta forma el costo de las condiciones anteriores toman la misma relación. En este caso, el costo combinado de la unidad que utiliza un AMS y la unidad de separación del AMS puede ser menor que el costo de una unidad de destilación ordinaria.

Basado en el anterior razonamiento semicuantitativo, el siguiente criterio para considerar una separación que utiliza un AMS en lugar de destilación ordinaria es:

$$\alpha_{\text{MSA}} \geq \alpha^{1.25} \quad (\text{ec. 2.5})$$

donde:

$\alpha_{\text{MSA}}$  = factor de separación entre LK-HK para el método de separación que requiere AMS.

$\alpha$  = factor de separación entre LK-HK para destilación ordinaria.

Para una corriente de proceso, en general, varias separaciones son posibles; el criterio generalizado para tales corrientes es:

Máximo de todas (α MSA) ≥ Máximo de todas (α) <sup>1.05</sup>  
las separaciones las separaciones (ec. 2.6)

REGLA EVOLUTIVA 4. Examinar las estructuras vecinas para decidir si el AMS será eliminado posteriormente. Este, es generalmente un disolvente de alta polaridad con un bajo valor de coeficiente de distribución. Durante la creación de estructuras, se prefiere obtener separaciones fáciles de acuerdo a la heurística 3, y existe una fuerte tendencia a separar el AMS inmediatamente después de ser usado en una unidad de separación.

REGLA EVOLUTIVA 5. Omitir la heurística 3, si:

- a)  $R_{min}$  del sucesor inmediato es mayor que  $R_{min}$  de la unidad bajo consideración.
- b) El costo del sucesor inmediato es mayor que el costo de la unidad bajo consideración.

Para estructuras de multietapas, la separación más fácil en alguna etapa no será siempre la que guíe a la estructura óptima. Esta regla se basa en la lógica, es decir, en un esquema de proceso, la posibilidad de una fácil separación seguida por una muy difícil, únicamente es detectada y para tales casos, nuevos esquemas son creados aumentando la dificultad de la primera separación. Algunas heurísticas utilizadas en estrategias heurístico-evolutivas para la síntesis de secuencias de separación, aparecen en la TABLA 2.2.

Los métodos presentados en este capítulo proporcionan un amplio panorama descriptivo y analítico para la elaboración de secuencias de separación de un proceso. La finalidad de tener todos los métodos posibles es la obtención del conocimiento básico de las reglas, técnicas y estrategias, buscando siempre la mejor secuencia. De los métodos expuestos, los que se utilizarán en el siguiente capítulo serán los heurísticos, debido a sus reglas sencillas, la utilización mínima de procedimientos matemáticos y su facilidad para implementarse en un sistema experto.

**TABLA 2.2 HEURISTICAS EN ESTRATEGIAS HEURISTICO-EVOLUTIVAS.**

Referencia	Tipo de separadores aplicados	Heurísticas usadas'
-Lockhart (1947).	Destilación	1,6
-Harbert (1957).	Destilación	2,3
-Rod & Marck (1959).	Destilación	4
-Heaven (1969).	Destilación	1,2,3,5
-Rudd y colaboradores (1971-1973).	General	1,2,3,6,8,11,12
-King (1971) y Thompson & King (1972 a,b).	General	1,2,3,7,10
-Stephanopoulos (1974) y Stephanopoulos & Westerberg (1976).	General	7 y reglas evolutivas
-Freshwater & Henry (1975).	Destilación	1,2,3,5,6
-Mahalec (1976) y Mahalec & Motard (1977 a,b).	General	6,10 y reglas evolutivas
-Seader & Westerberg (1977).	General	1,2,3,10,11,12
-Nath & Motard (1978).	General	17 y reglas evol
-Doukas & Luyben (1978).	Destilación	9,10,13,14,16,18
-Hartmann (1979) y Hartmann & Hacker (1979).	General	y reglas evol.
		1
	Destilación	1
	General	1,2,3,6,8,15,18

Las heurísticas numeradas son:

1. Retirar los componentes uno a uno como producto de corriente de domos.
2. Hacer las separaciones más difíciles al final.
3. Favorecer las divisiones 50-50.
4. Secuencia con el flujo total de vapor mínimo.
5. Hacer las separaciones de alta recuperación al final.
6. Separar los componentes más abundantes primero.
7. Elegir como siguiente separador al más económico.
8. Eliminar pronto los materiales corrosivos e inestables.
9. Realizar primero las separaciones menos difíciles.
10. Favorecer secuencias con el menor conjunto de productos.
11. Evitar el uso de agente másico de separación (AMS).
12. Retirar el AMS de uno de los productos en otro proceso de separación subsecuente.
13. Un método de separación que use AMS no puede emplearse para aislar otro AMS.
14. Favorecer la destilación.
15. Separar primero los componentes que puedan sufrir reacciones químicas no deseadas.
16. Ajustar las divisiones de los componentes clave a valores preespecificados.
17. Evitar condiciones de procesamiento extremas.
18. Favorecer presiones de operación atmosféricas.

## CAPITULO TRES

METODO DE NADGIR Y LIU  
PARA  
LA SINTESIS SISTEMATICA  
DE  
SECUENCIAS DE SEPARACION  
DE  
MEZCLAS MULTICOMPONENTES

Los sistemas de separación multicomponente son empleados generalmente en las industrias químicas y del petróleo. Una cuestión importante en el diseño de procesos de separación multicomponente es la secuencia de separación, la cual involucra la selección del método y de la secuencia óptima. En algunas ocasiones este problema es resuelto por un primer arreglo de los componentes en la mezcla a separarse, mediante la elaboración de una lista ordenada de propiedades físicas y/o químicas como son la volatilidad relativa o la solubilidad en el agua. Esta lista es el resultado de cada propiedad, dado el nombre del componente y su propiedad relativa a otros componentes en la mezcla; permite también, una etapa de separación, que puede considerarse como un listado de operación divisoria, en la cual los componentes por encima de un determinado valor de la propiedad son separados de los demás componentes, con un valor de propiedad inferior.

La generación de una secuencia de separación involucra la selección de una lista adecuada de propiedades y la elección de separaciones claves dentro de la misma. Por ejemplo, las secuencias para separar una mezcla de tres componentes A, B y C, en componentes puros mediante dos columnas de destilación ordinaria, pueden ser desarrolladas a partir de un primer arreglo de los componentes en el listado, en base a la volatilidad relativa del más volátil (A) al menos volátil (C), y entonces se examinan los diferentes cortes en las dos columnas. Una posible secuencia consiste en realizar la división A/BC en la primera columna, seguida del corte B/C en la segunda columna. Otra posible secuencia realiza la separación de AB/C en la primera columna y la separación A/B en la segunda.

La elección de una u otra secuencia depende del análisis de costos de operación. Precisamente, los métodos para la síntesis de secuencias de separación tratados en el capítulo anterior, tienen

como principal objetivo encontrar una secuencia óptima que reduzca los costos de operación; sin embargo, no en todos los casos se logra desarrollar la mejor solución.

La técnica que se presenta en este capítulo es la propuesta por V. M. Nadgir y Y. A. Liu, elegida debido a que los métodos heurísticos, como se mencionó en el capítulo anterior, son de fácil implementación en sistemas expertos. Además, por las características de los diseños en cuanto a los costos de operación, demuestran ser de alta rentabilidad en la práctica, especialmente la técnica descrita en este capítulo.

El capítulo engloba las reglas heurísticas que se deben seguir en la obtención de una secuencia de separación. También, en este capítulo se comparan los costos de operación del arreglo, sintetizado por el seguimiento de las reglas, con las realizadas por otros métodos. Las reglas heurísticas presentadas son la base de la estructuración correspondiente a la técnica mencionada en un lenguaje de programación de naturaleza lógica declarativa.

### 3.1 METODO HEURISTICO.

En este capítulo se analiza el método de Nadgir y Liu, comparando su técnica con otros métodos que desarrollan también una síntesis sistemática de secuencias de separación. Este método se aplica con problemas reportados en donde se evalúa su eficiencia.

En el capítulo anterior se describieron las características de los métodos heurísticos, basados en reglas de este tipo, muchas de las cuales se encuentran reportadas en cuatro categorías:

1. Heurísticas de método (designadas como heurísticas M), las cuales favorecen el uso de métodos de separación seguros bajo las especificaciones del problema.

2. Heurística de diseño (designadas como heurísticas D), las cuales favorecen las secuencias de separación específicas a determinadas propiedades deseables.

3. Heurísticas de especies (designadas como heurísticas S), las cuales se basan sobre las diferencias de propiedades entre las especies a separarse.

4. Heurísticas de composición (designadas como heurísticas C), las cuales se relacionan para efectos de composición de la alimentación y de los productos sobre los costos de separación.

El método desarrollado por Nadgir y Liu involucra el uso sistemático de siete heurísticas, las cuales son aplicadas una a una en orden estricto. Si alguna heurística no es importante o no es aplicable al problema de síntesis, entonces la siguiente heurística del método es considerada. Estas reglas se describen a continuación:

1. Heurística M1 (favorece la destilación ordinaria y elimina primero el agente másico de separación).

a) Favorece métodos de separación usando únicamente agentes energéticos de separación (destilación ordinaria), y evita el uso de métodos como la destilación extractiva, que requiere el uso de especies normalmente no presentes en el proceso; por ejemplo, el agente másico de separación (AMS). Además, si el factor de separación o volatilidad relativa de los componentes claves ( $\alpha_{LK,HK}$ ) resulta menor que 1.10, el uso de la destilación ordinaria no es recomendable; entonces un AMS puede ser empleado, proporcionando una volatilidad relativa mayor entre los componentes claves.

b) Cuando un AMS es utilizado, se debe eliminar en el siguiente separador, inmediatamente después de emplearse.

2. Heurística M2 (evita la destilación a vacío y la refrigeración).

Evita condiciones de presión y temperatura bajas. Si la operación a vacío en una destilación ordinaria es requerida, la extracción líquido-líquido con varios disolventes puede ser una opción. Si la refrigeración es requerida (por ejemplo, para la separación de materiales de bajo punto de ebullición con altas volatilidades relativas como producto de destilado), otras alternativas como la absorción pueden ser tomadas en cuenta.

3. Heurística D1 (favorece el más pequeño arreglo de productos).

Favorece las secuencias en las cuales se produce el mínimo necesario de productos. De igual forma, evita secuencias que separan componentes que podrían estar incluidos al final en el mismo producto. En otras palabras, cuando los productos multicomponentes son especificados, se favorecen secuencias que producen esos componentes directamente o con un mínimo de mezcladores, a menos que las volatilidades relativas sean

apreciablemente más bajas que aquéllas con una secuencia en la cual se requieran separadores y mezcladores extras.

4. Heurística S1 (eliminar al inicio componentes corrosivos y/o peligrosos).

Retirar primero los materiales que por sus características sean corrosivos y/o peligrosos.

5. Heurística S2 (realizar las separaciones difíciles al final).

Realizar las separaciones difíciles al último. En particular, las separaciones donde las volatilidades relativas de los componentes claves sean cecanas a la unidad y que podrían ser realizadas en ausencia de los componentes no claves. En otras palabras, intenta seleccionar secuencias en las cuales no estén presentes los componentes no claves en las separaciones, donde los componentes claves sean ambos cercanos en volatilidad relativa.

6. Heurística C1 (eliminar primero al componente más abundante en la mezcla).

Un producto cuya composición posea un valor de fracción elevado en la alimentación puede ser separado primero, procurando que el valor de la volatilidad relativa sea razonable para la separación.

7. Heurística C2 (favorece la separación 50/50).

Si la composición del componente no varía mucho, las secuencias en las cuales hay una aproximación 50/50 o separación equimolar de la alimentación entre el destilado (D) y los fondos (B), los productos deben ser favorecidos, siendo que proporcionan una volatilidad relativa razonable para la separación. Si ésta es difícil de evaluar en una división cercana a 50/50 y se tiene una volatilidad relativa conveniente, primero se realiza la separación con el valor más alto de Coeficiente de Facilidad de Separación (CFS).

El Coeficiente de Facilidad de Separación (CFS), propuesto en la heurística 2 se define como

$$CFS = f \cdot \Delta$$

(ec.3.1)

donde  $f$  es la relación de flujo molar de productos (destilado y fondos),  $B/D$  ó  $D/B$ , dependiendo de cual de estas relaciones sea menor o igual a la unidad, y  $\Delta$  es la diferencia del punto de ebullición entre los dos componentes a ser separados, o definida como  $\Delta = (\alpha - 1.0) \times 100$ , siendo  $\alpha$  la volatilidad relativa entre los dos componentes a separarse.

En la aplicación del método de separación secuencial, las heurísticas M1 y M2 deciden primero las técnicas de separación a emplearse. Las heurísticas D1, S1 y S2 dan la guía para evitar cortes debidos a las especificaciones de producto, tanto en la primera como en la última separación. Finalmente, las secuencias iniciales son sintetizadas mediante el uso de las heurísticas C1 y C2 con la ayuda del Coeficiente de Facilidad de Separación (CFS). Por lo tanto CFS involucra la volatilidad relativa para los componentes a ser separados.

La aplicación del método heurístico depende indirectamente de la temperatura y presión de separación. Una buena correlación para la presión óptima de domos ( $P_D$ ), como una función del punto de burbuja normal de la alimentación ( $T_{BA}$ ) en una destilación ordinaria, es la siguiente:

$$\ln P_D = 1.751 / (T_{BA} + 273) - 6.777$$

(ec.3.2)

En (ec.3.2),  $P_D$  está en MPa y  $T_{BA}$  en °C. El rango donde puede ser aplicada esta expresión es  $0.007 < P_D < 9.89$  y  $-72^\circ\text{C} < T_{BA} < 699^\circ\text{C}$ . También, un procedimiento para especificar otras presiones en destilación ordinaria es presentado por Henley y Seader (1981).

### 3.2 COMPARACION CON METODOS HEURISTICO-EVOLUTIVOS RECIENTES.

La TABLA 3.1 compara al método heurístico con dos recientes métodos heurístico-evolutivos presentados por Seader y Westerberg (1977), y por Nath y Motard (1981).

Las siguientes heurísticas adicionales han sido incluidas en los dos métodos heurístico-evolutivos, resumidos en la TABLA 3.1 para el desarrollo de secuencias iniciales de separación:

#### 8. Heurística M1.

c) Eliminar el agente másico de separación debidamente.

Un método de separación que usa un AMS no puede ser empleado para separar otro AMS.

#### 9. Heurística D2.

Regla de la secuencia directa.

Durante la destilación, cuando la volatilidad relativa o el porcentaje molar en la alimentación no varían mucho, se eliminan los componentes, uno a uno, como productos del destilado. La secuencia resultante es conocida comúnmente como la secuencia directa, en la cual la presión de operación óptima es más alta en el primer separador, reduciéndose subsecuentemente en cada separador.

#### 10. Heurística S3

Realizar primero las separaciones fáciles.

a) Arregla los componentes a ser separados de acuerdo a sus volatilidades relativas ordenadas en una lista. Cuando las volatilidades relativas adyacentes de los componentes ordenados en la alimentación varían demasiado, la secuencia de separación se realiza en orden decreciente de volatilidad relativa adyacente.

b) Arregla las separaciones para dividir la alimentación en productos de domos y fondos en orden creciente del Coeficiente de Dificultad de Separación (CDS), definido como:

TABLA 3.1 COMPARACION DE LOS TRES METODOS DE SINTESIS PARA SECUENCIAS DE SEPARACION.

Método heurístico ordenado (Nadgir y Liu, 1983)	Método heurístico-evolutivo (Seader y Westerberg, 1977)	Método heurístico-evolutivo (Nath y Motard, 1981)
<p>1) Paso 1: Decide los métodos de separación a emplearse.</p> <p>a) Heurísticas M1a y M1b (favorecen la destilación ordinaria y eliminan al agente másico de separación primero).</p> <p>b) Heurística M2 (evita la destilación a vacío y refrigeración).</p> <p>2) Paso 2: Da la guía para evitar divisiones debido a las especificaciones del producto.</p> <p>a) Heurística D1 (favorece el menor arreglo de productos).</p> <p>3) Paso 3: Da la guía para las primeras separaciones.</p> <p>a) Heurística S1 (elimina los componentes corrosivos y peligrosos primero).</p> <p>4) Paso 4: Da la guía para las últimas separaciones.</p> <p>a) Heurística S2 (realiza las separaciones difíciles primero).</p> <p>5) Paso 5: Sintetiza la secuencia de separación inicial.</p> <p>a) Heurística C1 (elimina primero el componente más abundante).</p> <p>b) Heurística C2 (favorece la división 50/50).</p> <p>c) Parámetro secuencial: CFS (Coeficiente de Facilidad de Separación) definido en la ecuación 3.1.</p>	<p>1) Paso 1: Decide los métodos de separación a emplearse.</p> <p>a) Heurística M1a (favorece la destilación ordinaria).</p> <p>b) Heurística M2a (evita la destilación a vacío y refrigeración).</p> <p>2) Paso 2: Sintetiza la secuencia de separación inicial.</p> <p>a) Heurística S3a (realiza las separaciones fáciles primero)</p> <p>b) Heurística C1 (elimina el componente más abundante primero).</p> <p>c) Heurística D2 (regla de la secuencia directa).</p> <p>d) Parámetros auxiliares secuenciales: volatilidad relativa y el mayor porcentaje en la alimentación.</p> <p>3) Paso 1a y 2a: ambos aplican con los pasos 1 y 2 cuando las separaciones con agentes másicos son consideradas.</p> <p>a) Heurística M1b (elimina el agente másico de separación primero).</p> <p>b) Heurística D1 (favorece el menor arreglo de productos).</p> <p>4) Paso 3: Mejoramiento local evolutivo de la secuencia de separación inicial.</p>	<p>1) Paso 1: Da la guía para evitar divisiones debido a las especificaciones del producto.</p> <p>a) Heurística D1 (favorece el menor arreglo de productos).</p> <p>2) Paso 2: Decide los métodos de separación a emplear.</p> <p>a) Heurística M1a (favorece la destilación ordinaria).</p> <p>b) Heurística M1c (elimina el agente másico de separación apropiadamente).</p> <p>c) Heurística M2a (evita la destilación a vacío).</p> <p>d) Heurísticas auxiliares de diseño: ajusta las fracciones divididas de los componentes claves a los valores preespecificados; ajusta el reflujo de operación (1.3 veces la relación mínima) para cada columna de separación.</p> <p>3) Paso 3: Sintetiza la secuencia de separación inicial.</p> <p>a) Heurística S3b (realiza separaciones fáciles primero).</p> <p>b) Parámetro auxiliar secuencial CDS (Coeficiente de Dificultad de Separación) definido por la ecuación 3.3.</p> <p>4) Paso 4: Mejoramiento global evolutivo de la secuencia de separación inicial.</p>

$$CDS = \frac{\text{Log} \left[ \frac{SPLK}{1-SPLK} * \frac{SPHK}{1-SPHK} \right]}{\text{LOG}(\alpha_{LK}, HK)} * \frac{D}{D+B} * \left[ 1 + \left| \frac{D-B}{D+B} \right| \right] \quad (\text{ec. 3.3})$$

Donde SPLK y SPHK son, respectivamente, las fracciones de separación de los componentes clave ligero y clave pesado en productos de domos y fondos, D y B son sus razones de flujo molar;  $\alpha_{LK}, HK$  es la volatilidad relativa de los componentes claves.

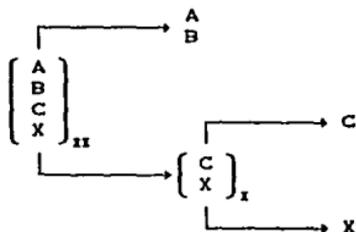
El número de diferencias entre los tres métodos enlistados en la TABLA 3.1 para la síntesis de la secuencia inicial de separación pueden ser descritas como sigue:

1. En los pasos 1 y 2 del método heurístico ordenado de Nath y Motard, la heurística D1 (favorece el menor arreglo de productos) no toma en cuenta la heurística M1a (favorece la destilación ordinaria). Una consecuencia de la retención del menor arreglo de productos es que algunas veces el método de separación emplea un AMS en lugar de la destilación ordinaria. Por ejemplo, si consideramos la separación de una mezcla de tres componentes A, B y C en dos productos (A,B) y C por destilación (método I) y destilación extractiva con un disolvente X (método II), el rango de la lista (RL) de volatilidades adyacentes y decrecientes que corresponden a estos métodos de separación están dados por:

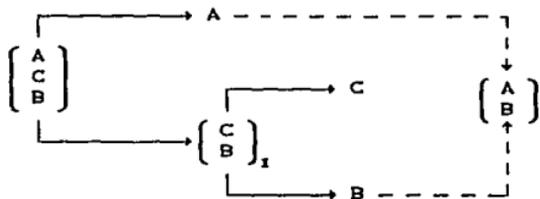
RL(I): ACB

RL(II): ABCX

La secuencia inicial de separación resultante aplicando los pasos 1 y 2 es:



En contraste, la secuencia inicial obtenida por la aplicación de los pasos 1 y 2 del método en este capítulo y el presentado por Seader y Westerberg es:



Esta mejor secuencia favorece el uso de la destilación ordinaria (heurística D1). También, en el paso 2 del método de Nath y Motard, la heurística que evita la refrigeración no ha sido incluida.

2. La incorporación de los pasos 3 y 4 al método presentado en este capítulo representa una diferencia importante del método, con respecto al de Seader y Westerberg y al de Nath y Motard. Dichos pasos identifican la primera y última separaciones mediante el uso de la heurísticas S1 y S2, previo a la síntesis de la secuencia de separación inicial. También, las heurísticas específicas y los parámetros auxiliares de la secuencia usados por cada método para esta síntesis inicial, no son idénticos, como lo muestra la TABLA 3.1.

3. La última diferencia entre los tres métodos está relacionada con el paso evolutivo. El método presentado en este capítulo es un procedimiento netamente heurístico y no incluye pasos evolutivos. Los dos métodos que se comparan incluyen un paso evolutivo, pero con una estrategia diferente. En el método de Seader y Westerberg, se adopta una evolución local de la secuencia inicial de separación; mientras que el método de Nath y Motard, utiliza una estrategia evolutiva global. Esta diferencia entre las estrategias evolutivas puede ser ilustrada, considerando el cambio realizado para reemplazar el método de separación por una operación específica en una secuencia inicial. El método de Seader y Westerberg no cambia la estructura inicial, mientras que el método de Nath y Motard elimina completamente la estructura inicial y sintetiza una nueva secuencia por heurísticas.

### 3.3 EJEMPLOS ILUSTRATIVOS.

**EJEMPLO 1.** Separación de parafinas ligeras por destilación ordinaria.

Considérese la separación de una mezcla de cinco hidrocarburos ligeros en componentes puros, mediante destilación ordinaria. La mezcla de alimentación es:

ESPECIES	FRACCION	VOLATILIDAD RELATIVA	
		$\alpha$	CFS
A: Propano	0.05	2.00	5.26
B: i-Butano	0.15	1.33	8.25
C: n-Butano	0.25	2.40	114.55
D: i-Pentano	0.25	1.25	13.46
E: n-Pentano	0.35		

*Nota: Las volatilidades relativas se dan a 37.8°C y 1.72MPa.*

El Coeficiente de Facilidad de Separación (CFS) se calcula con la expresión (ec.3.1). La relación  $f$  se calcula como sigue:

$$f = D/B \text{ si } D/B < 1.0 \text{ ó } f = B/D \text{ si } B/D < 1.0$$

Como base de cálculo se toma en cuenta la composición de los componentes de la mezcla en la alimentación. De este modo, al separar el componente A (propano) del resto de la mezcla, se tiene:

$$f = D/B = 0.05/0.95 = 0.05263 < 1.0$$

La cantidad proporcional al destilado (D) es 0.05 y la correspondiente a los fondos (B) es el resto, entendiéndose que la suma de las fracciones de todos los componentes en una mezcla es igual a 1.0 (100 %). Por lo anterior,  $B = 1.0 - 0.05 = 0.95$ .

La variable  $\Delta$  se calcula, cuando se tienen los valores de las volatilidades relativas adyacentes como sigue:

$$\Delta = (\alpha - 1.0) * 100 = (2.0 - 1.0) * 100 = 100$$

En seguida se calcula el Coeficiente de Facilidad de Separación (CFS) para el corte A/BCDE :

$$CFS = f * \Delta = 0.05263 * 100 = 5.263$$

Para la división AB/CDE :

$$f = D/B = 0.2/0.8 = 0.25 < 1.0$$
$$\Delta = (\alpha - 1.0) * 100 = (1.33 - 1.0) * 100 = 33$$

por lo tanto,

$$CFS = f * \Delta = 0.25 * 33 = 8.25$$

Para la división ABC/DE :

$$f = D/B = 0.45/0.55 = 0.82 < 1.0$$
$$\Delta = (\alpha - 1.0) * 100 = (2.40 - 1.0) * 100 = 140$$

por lo tanto,

$$CFS = f * \Delta = 0.82 * 140 = 114.55$$

Para el corte ABCD/E :

$$f = D/B = 0.65/0.35 = 1.86 > 1.0$$

como no se cumple que  $f < 1.0$ , se elige,

$$f = B/D = 0.35/0.65 = 0.54 < 1.0$$
$$\Delta = (\alpha - 1.0) * 100 = (1.25 - 1.0) * 100 = 25$$

por lo tanto,

$$CFS = f * \Delta = 0.54 * 25 = 13.46$$

La secuencia de separación por el método heurístico es realizada como sigue:

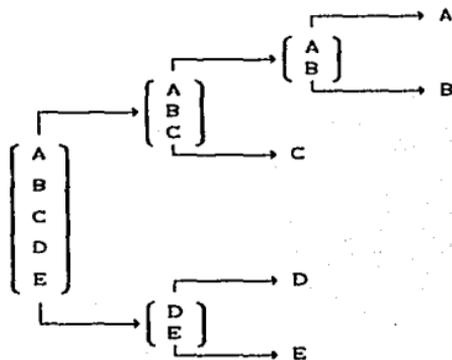
1. Heurística M1 y M2: Usar destilación a vacío con refrigeración a alta presión.
2. Heurística D1 y S1: No aplican.
3. Heurística S2: El corte D/E tiene la menor volatilidad relativa  $\alpha = 1.25$ . Por lo tanto, esta división debe realizarse al final en ausencia de A, B y C.

4. Heurística C1: Aunque E es el componente con mayor fracción en la alimentación, no se debe separar primero. Esto se debe a que el método tiene un orden, y las heurísticas precedentes, en particular S2, no pueden ser alteradas.

5. Heurística C2: Para separar ABCDE, la división ABC/DE se realiza primero, ya que tiene el mayor CFS (114.5). Para dividir ABC, los cortes posibles son A/BC y AB/C. Comparando el CFS en las divisiones:

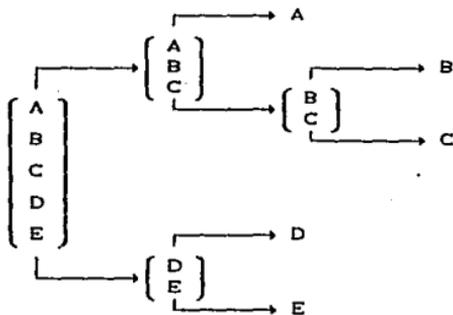
	A/BC	AB/C
f	0.05/0.40	0.20/0.25
$(\alpha-1.0) \times 100$	100.0	3.3
CFS	12.5	26.4

se puede observar que AB/C es preferible sobre A/BC. De este modo, la secuencia resultante, que hace la división D/E al último es:



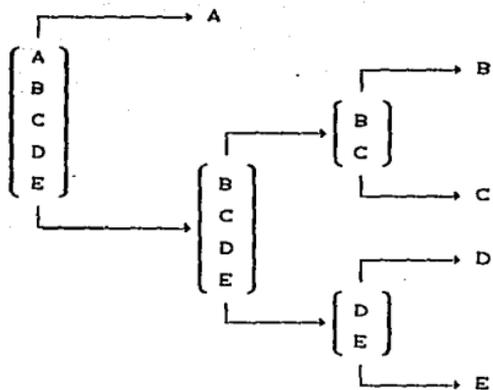
(secuencia 1a)

La segunda secuencia puede ser encontrada sistemáticamente considerando las divisiones alternativas en la separación de ABC, mientras se conserva la mejor división inicial (de acuerdo al CFS) ABC/DE y también realizando el corte difícil D/E al final. Específicamente, si la división A/BC con el segundo valor más alto de CFS (12.5) para la separación ABC, se efectúa primero, en lugar de AB/C como en la secuencia 1a, la segunda secuencia encontrada es la siguiente:



(secuencia 1b)

Puesto que no hay otras secuencias con una división inicial ABC/DE, que satisfagan las restricciones impuestas por las heurísticas M1 y C1, la tercera secuencia es encontrada examinando las divisiones alternativas iniciales para la separación de ABCDE. Si bien las divisiones iniciales ABCD/E y AB/CDE tienen el segundo y tercero más altos valores de CFS, 13.46 y 8.25 respectivamente, estas divisiones no son recomendadas, debido a las restricciones que presentan los cortes D/E y B/C, que deben realizarse al último, de acuerdo a la heurística S2. Sin embargo, la tercera secuencia es encontrada eligiendo la división A/BCDE primero. La secuencia resultante, con los cortes B/C y D/E al final, es:



(secuencia 1c)

La TABLA 3.2 compara las diferentes secuencias sintetizadas por los tres métodos enlistados en la TABLA 3.1. Es evidente que los resultados obtenidos con el método heurístico son tan buenos o mejores que los generados por las otras técnicas.

**EJEMPLO 2.** Separación de productos a partir de la desintegración térmica de hidrocarburos.

Diversas separaciones multicomponentes se involucran en el "cracking" térmico de hidrocarburos a gran escala, para la producción de etileno y propileno. Tal es el caso de la siguiente mezcla, la cual se desea separar en los productos: hidrógeno-metano, etileno, etano, propileno, propano y pesados.

TABLA 3.2 COMPARACION DE LAS SECUENCIAS REPORTADAS PARA EL EJEMPLO 1

SECUENCIA	COSTO \$/AÑO(a)	METODO HEURISTICO NADGIR Y LIU	METODOS HEURISTICOS EVOLUTIVOS	
			SEADER Y WESTERBERG	NATH Y MOTARD (c)
1a	858,780	secuencia inicial	secuencia final	
1b	863,580(b)	segunda secuencia	secuencia inicial	
1c	871,460	tercera secuencia		secuencia inicial y final

(a) Como fue reportada por Heaven (1989).

(b) El costo de \$863,580/año es 0.56% más alto que el costo mínimo de \$ 858,780/año.

(c) Como es reportado por Nath (1977).

TABLA 3.3 COMPARACION DE SECUENCIAS REPORTADAS PARA EL EJEMPLO 3A

SECUENCIA	METODO HEURISTICO NADGIR Y LIU	METODOS HEURISTICO-EVOLUTIVOS	
		SEADER Y WESTERBERG	NATH Y MOTARD (b)
3a	secuencia inicial	secuencia final (a) \$1,153,000/año	segunda secuencia \$685,189/año
3b	segunda secuencia	segunda secuencia \$1,213,000/año	secuencia inicial \$748,178/año
3c			secuencia final \$630,454/año
3d			tercera secuencia \$805,105/año
3e		secuencia inicial \$1,234,000/año	

(a) El costo de \$1,213,000/año es un 5.2% más costoso que el de \$858,780/año.

(b) Como es reportado por Nath (1977).

ESPECIES	FLUJO MOL/HR	PUNTO NORMAL DE EBULLICIÓN (°C)	$\Delta T$	CFS
A:	18	-253	92	23.0
B:	5	-161	57	19.6
C:	24	-104	16	14.6
D:	15	-88	40	18.1
E:	14	-48	6	1.1
F:	6	-42	41	4.0
G:	8	-1		

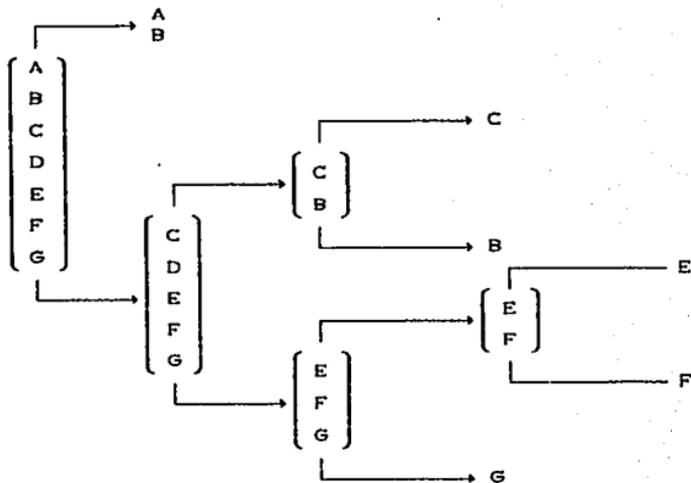
La secuencia de separación por el método heurístico se realiza como sigue:

1. Heurística M1 y M2: Utilizar destilación ordinaria con refrigeración a presión alta.
2. Heurística D1: Evita la división AB, considerándolo como un solo producto.
3. Heurística S1: No aplica.
4. Heurística S2: Realizar los cortes C/D y E/F al final, debido a la baja diferencia de temperaturas ( $\Delta T$ ), de 6 y 16 °C respectivamente.
5. Heurística C1: No aplica.
6. Heurística C2: Para la separación de ABCDEFG, la mejor división es AB/CDEFG, la cual tiene el valor de 19.6 de CFS (el más alto), y también mantiene a AB como un solo producto.

Para la separación CDEFG, las divisiones C/D y E/F son realizadas al último, así que las divisiones restantes a elegir son CD/EFG y CDEF/G. El corte CD/EFG se hace primero debido a su alto valor de CFS (28.7).

	CD/EFG	CDEF/G
r	28/39	8/59
$\Delta T$	40.0	41
CFS	28.7	5.6

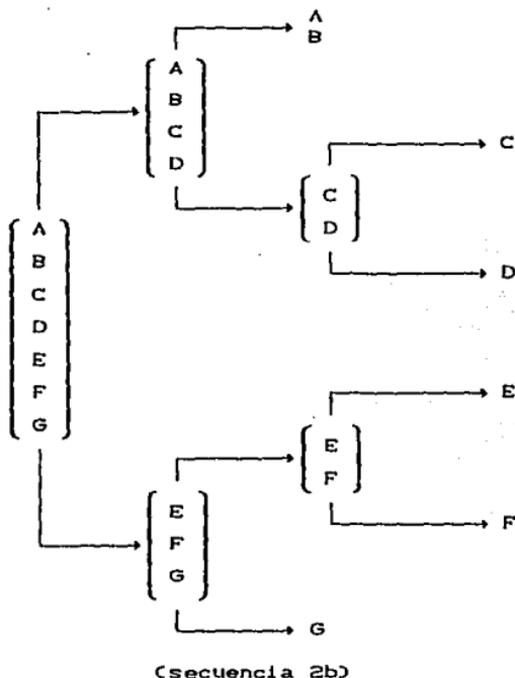
La secuencia resultante, la cual realiza las divisiones C/D y E/F al último es:



(secuencia 2a)

Esta secuencia es la misma que se usa actualmente en la industria.

La segunda secuencia se obtiene realizando primero la división ABCD/EFG (la cual tiene el segundo valor de CFS más alto, 18.1, en la división de ABCDEFG en dos productos) y efectuando las separaciones difíciles C/D y E/F al final, como en la secuencia anterior. Esta segunda secuencia es:



La secuencia anterior es utilizada por la industria de craqueo térmico de naftas.

**EJEMPLO 3A.** Separación de olefinas y parafinas ligeras por destilación ordinaria.

Se desea obtener una secuencia para separar la alimentación en componentes puros, es decir: A, B, C, D, E y F. Las características de esta mezcla, a las condiciones de 37.8°C y 0.1 MPa, son las siguientes:

ESPECIES	FRACCION	VOLATILIDAD RELATIVA $\alpha$	CFS
A: Etano	0.20	3.50	62.5
B: Propileno	0.15	1.20	10.7
C: Propano	0.20	2.70	139.1
D: 1-Buteno	0.15	1.21	9.0
E: n-Butano	0.15	3.00	35.3
F: n-Pentano	0.15		

La secuencia de separación se desarrolla como sigue:

1. Heurísticas M1 y M2: Usar destilación ordinaria con refrigeración a alta presión.

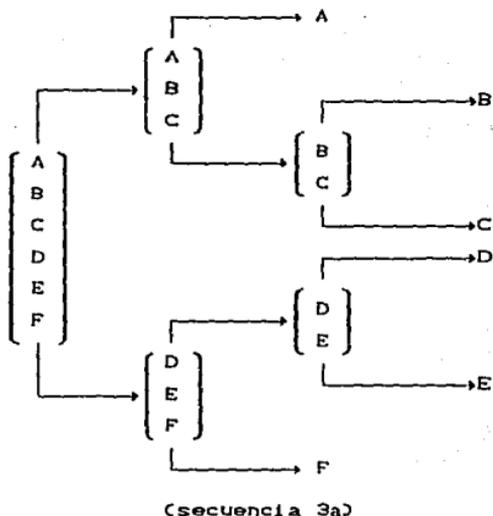
2. Heurísticas D1 y S1: No aplican.

3. Heurística S2: Las divisiones B/C y D/E son separaciones difíciles debido a sus valores pequeños de volatilidad relativa,  $\alpha = 1.20$  y  $1.21$  respectivamente. De este modo, tales divisiones deben ser realizadas al último.

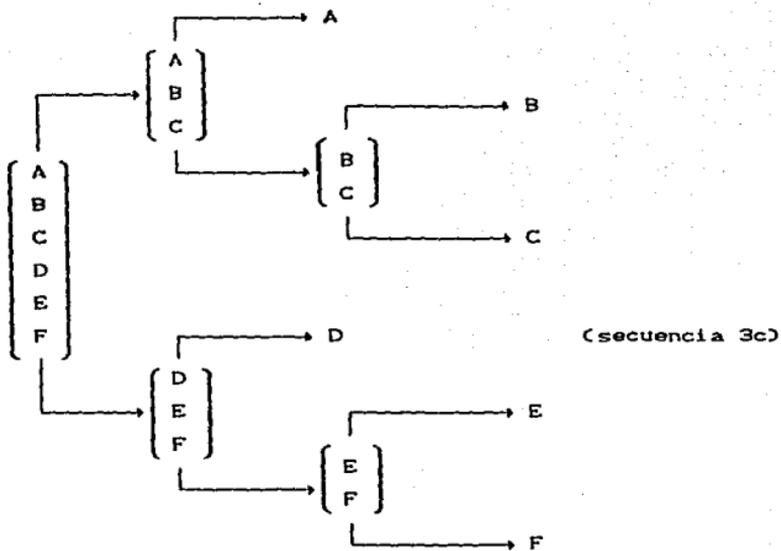
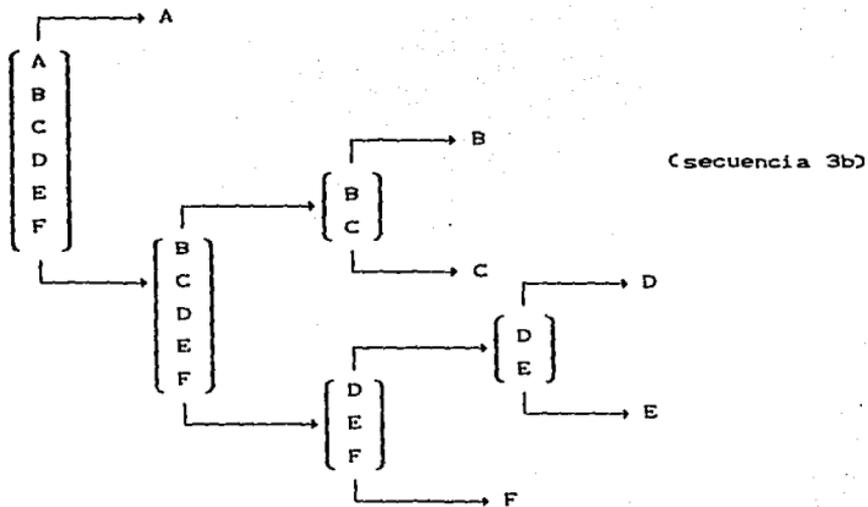
4. Heurística C1: No aplica porque ninguno de los componentes representa una fracción mayor en la alimentación.

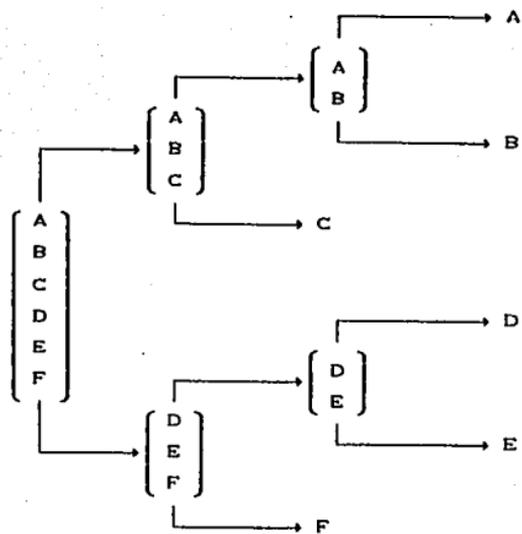
5. Heurística C2: ABC/DEF representa una división de 55/45 entre el destilado y los fondos, y tiene un valor razonable de  $\alpha = 2.70$ ; teniendo además el valor más alto de CFS (139.1). Por lo tanto, esta división es realizada primero.

La secuencia resultante, con las divisiones B/C y D/E al final, de acuerdo a la heurística S2, es:

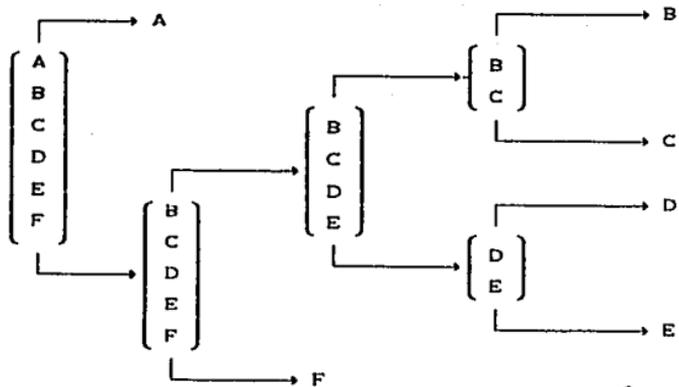


La segunda secuencia se obtiene haciendo primero la división A/BCDEF (la cual tiene el segundo valor de CFS más alto, 62.5, en la división de ABCDEF en dos productos) y realizando los cortes difíciles B/C y D/E al último como en la secuencia anterior. La TABLA 3.3 compara las secuencias analizadas por los tres métodos resumidos en la TABLA 3.1. Las secuencias adicionales (3b a 3e) enlistadas en la TABLA 3.3 son las siguientes.





(secuencia 3d)



(secuencia 3e)

Los costos tabulados en la TABLA 3.3 y en los ejemplos subsecuentes se comparan sobre bases relativas, como son los diferentes costos anuales reportados para las mismas secuencias por diferentes investigadores.

La TABLA 3.3 muestra que la secuencia 3a es de menor costo que las obtenidas por métodos como el de Seader y Westerberg, y el de Nath y Motard, mostradas en las secuencias 3e y 3b respectivamente. Las secuencias 3a y 3b también corresponden a la mejor y a la segunda mejor secuencias, respectivamente, obtenidas por el método de Seader y Westerberg. Para aplicar una estrategia global evolutiva y modificar la secuencia inicial (secuencia 3b), Nath ha reportado una secuencia final de más bajo costo (secuencia 3c), la cual no fue obtenida por el método heurístico, ni por el método de Seader y Westerberg. Los anteriores autores, así como Gómez y Seader (1976), establecieron que de la secuencia 3c no se obtuvo debido al reducido, pero importante efecto del n-pentano (especie en fase líquida) y de la volatilidad relativa entre 1-buteno y n-butano.

Finalmente, la TABLA 3.3 muestra que no existe garantía de que la aplicación de la estrategia global evolutiva de Nath y Motard, mejore las secuencias inicial y subsecuentes. Esto es evidente, ya que la tercera secuencia (secuencia 3d) es más costosa que la segunda secuencia (secuencia 3a), durante la síntesis evolutiva por el método de Nath y Motard.

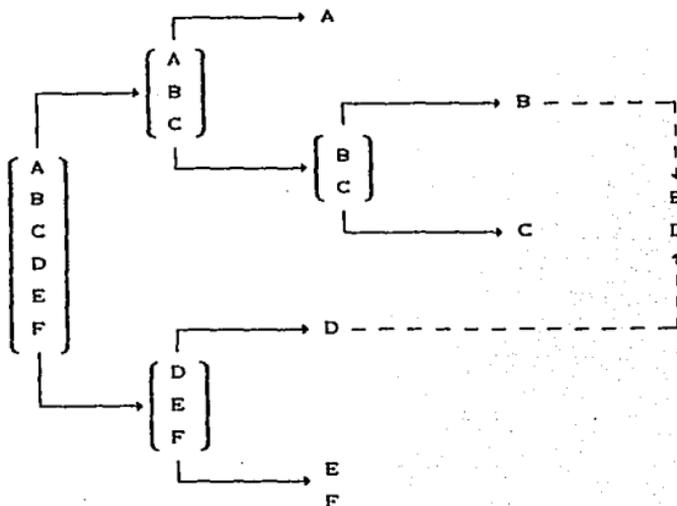
#### EJEMPLO 3B. Separación de olefinas y parafinas ligeras por destilación ordinaria.

Este ejemplo tiene los mismos seis componentes de la mezcla de alimentación del ejemplo 3A y se desea encontrar la secuencia para separarla en los productos: A, BD, C y EF. La secuencia puede ser realizada aplicando la heurística D1 y haciendo cambios mínimos en el paso (4) de la solución del ejemplo 3A.

4. Heurística C2: Como en la secuencia del ejemplo 3A, el corte ABC/DEF es efectuado primero, los productos resultantes ABC y DEF, son separados como a continuación se explica:

Para separar ABC, el corte difícil B/C es realizado al final, como en el ejemplo 3A. Para separar DEF, la división recomendada de acuerdo a la heurística D1 es D/EF, considerando a EF como un solo producto. El otro producto deseado (BD) puede ser obtenido por el mezclado de B y D a partir de sus separaciones previas.

La secuencia resultante es:

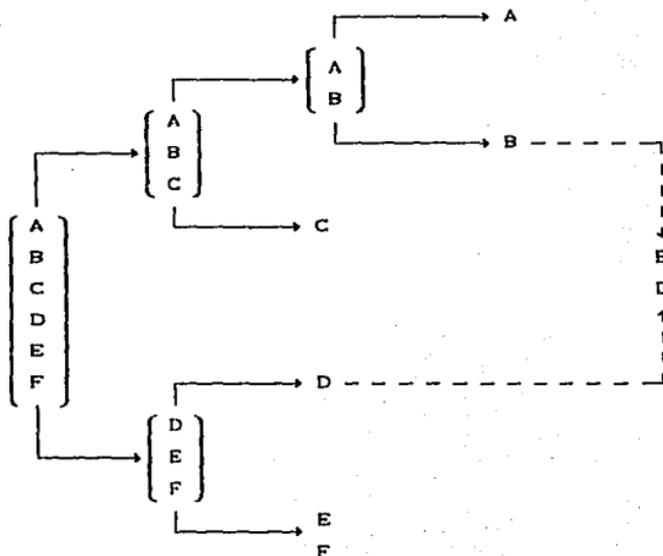


(secuencia 3a')

La segunda secuencia puede ser desarrollada sistemáticamente examinando los cortes alternativos en la separación ABC, mientras se conserva la mejor división inicial (de acuerdo al CFS), ABC/DEF para la separación ABCDEF y también la división D/EF la cual permite obtener EF como un solo producto. De este modo, si el segundo mejor corte de acuerdo al CFS en la separación de ABC, es decir, AB/C, es aceptado en lugar de A/BC, se tiene:

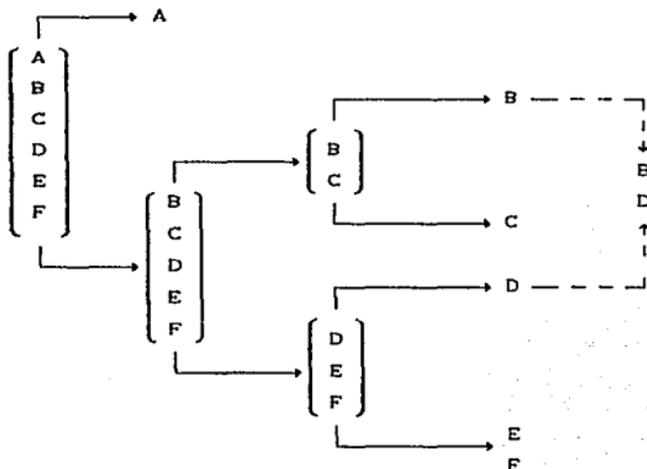
	A/BC	AB/C
f	20/35	20/35
$(\alpha-1.0) \times 100$	250.0	20.0
CFS	142.8	11.4

La secuencia resultante es:



(secuencia 3b')

Considerando que no existen secuencias con una división inicial ABC/DEF, que satisfagan las restricciones impuestas por las heurísticas M1 a C1, la tercera secuencia se encuentra considerando una alternativa de la división inicial para la separación ABCDEF. Específicamente, si la segunda mejor división (de acuerdo al CFS) para esta separación, como lo es A/BCDEF, es elegida en lugar de ABC/DEF, la secuencia resultante es:



(secuencia 3c')

La TABLA 3.4 compara las secuencias sintetizadas con cuatro métodos. Es significativo notar que las secuencias 3a', 3b' y 3c' corresponden exactamente a las tres mejores secuencias, en ese orden, obtenidas por el método algorítmico. La secuencia 3a' es idéntica a la mejor secuencia obtenida por el método de Nath y Motard, y el de Thompson y King (1972). También, la secuencia 3a' tiene menor costo que la secuencia inicial obtenida por Nath y Motard.

TABLA 3.4 COMPARACION DE SECUENCIAS REPORTADAS PARA EL EJEMPLO 3B

SECUENCIA	METODO HEURISTICO NADGIR Y LIU	HEURISTICO-EVOLUTIVO NATH Y MOTARD	HEURISTICO ALGORITMICO THOMPSON Y KING	ALGORITMICO . STEPHANOPOULOUS
3a'	secuencia inicial	secuencia final \$600,395/año	secuencia final \$694,000/año	1a. mejor secuencia \$602,760/año
3b'	segunda secuencia			2a. mejor secuencia \$642,068/año
3c'	tercera secuencia	secuencia final \$663,365/año	segunda secuencia \$760,000/año	3a. mejor secuencia \$685,632/año

TABLA 3.5 COMPARACION DE SECUENCIAS REPORTADAS PARA EL EJEMPLO 4

SECUENCIA	METODO HEURISTICO NADGIR Y LIU	ALGORITMICO HENDRY Y HUGHESCa)	HEURISTICO-EVOLUTIVOS SEADER Y WESTERBERG	NATH Y MOTARD
4a	secuencia inicial	2a. mejor secuencia \$667,400/año		
4b	segunda secuencia	5a. mejor secuencia \$878,200/año		
4c	tercera secuencia	1a. mejor secuencia \$860,400/año	secuencia final \$860,400/año	secuencia final \$658,737/año
4d	cuarta secuencia	4a. mejor secuencia \$878,00/año	secuencia inicial \$878,000/año	
4e	quinta secuencia	3a. mejor secuencia \$872,400/año	segunda secuencia \$872,400/año	segunda secuencia \$669,844/año
4f		6a. mejor secuencia \$1,095,800/año		secuencia inicial \$1,171,322/año

**EJEMPLO 4.** Purificación del n-butileno por destilación ordinaria y extractiva.

Considérese la separación multicomponente en la industria de purificación del n-butileno. La mezcla en la alimentación es:

ESPECIES	% MOL	VOLATILIDAD RELATIVA			
		( $\alpha$ ) I	( $\alpha$ ) II	(CFS) I	(CFS) II
A: Propano	1.47				
B: 1-Buteno	14.75	2.45		2.163	
C: n-Butano	50.30	1.18	1.17	3.485	3.29
D: t-2-Buteno	15.62	1.03	1.70	1.510	35.25
E: c-2-Buteno	11.96				
F: n-Pentano	5.90	2.5		9.406	

La volatilidad relativa adyacente ( $\alpha$ )<sub>I</sub> se reporta a 65.6°C y 1.03 MPa, para el método de separación I (destilación ordinaria); la volatilidad relativa adyacente ( $\alpha$ )<sub>II</sub>, reportada a las mismas condiciones, para la separación por el método II (destilación extractiva).

El rango de la lista (RL) de volatilidad adyacente en forma decreciente para los métodos I y II está dada por :

RL(I) : ABCDEF

RL(II) : ACBDEF

Los productos deseados para la separación son los siguientes: A, C, BDE y F. La secuencia de separación puede realizarse como sigue:

1. Heurística M1: Utilizar destilación extractiva para separar C/DE y destilación ordinaria para las divisiones restantes.

2. Huerística M2: Utilizar temperaturas y presiones moderadas.

3. Heurística D1: Evitar la división DE ya que D y E están en el mismo producto, y mezclar B y DE para obtener el producto multicomponente BDE.

4. Heurística S1: No aplica.

5. Heurística S2: Como el corte C/DE es difícil de realizar y requiere destilación extractiva, debe realizarse al último en ausencia de A, B y F.

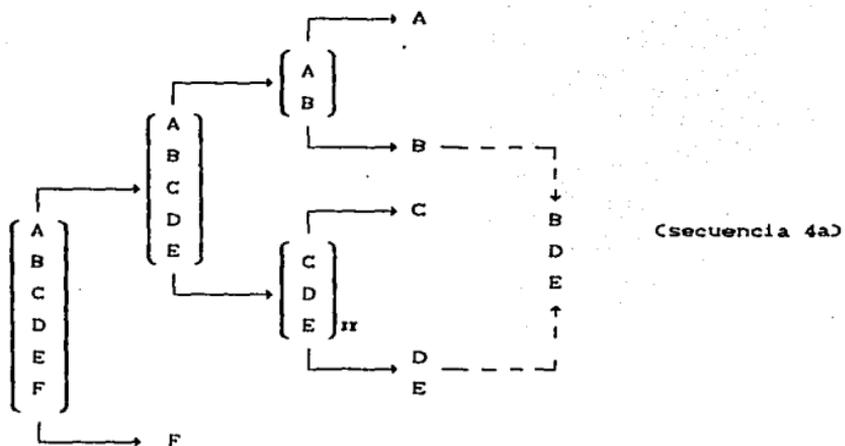
6. Heurística C1: Si bien C es el componente más abundante en la alimentación, no debe ser separado al inicio debido a la heurística anterior. Además, es preferible obtenerlo con destilación extractiva por la división C/DE al final de la secuencia. Esto evitará tener al AMS como un posible contaminante en las separaciones intermedias de la secuencia.

7. Heurística C2: Para la separación ABCDEF, el corte ABC/DEF es realizado al último, así que los restantes a ser elegidas son A/BCDEF, AB/CDEF y ABCDE/F. La última división es seleccionada por tener el más alto valor de (CFS)r.

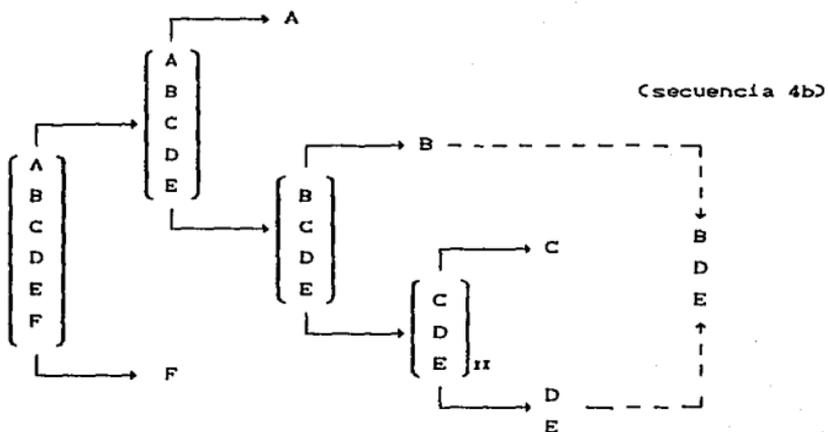
Para separar ABCDE, las posibles divisiones son A/BCDE y AB/CDE:

	A/BCDE	AB/CDE
f	1.47/92.67	16.22/77.88
$(\alpha-1.0)*100$	145.000	18.000
CFS	2.301	3.749

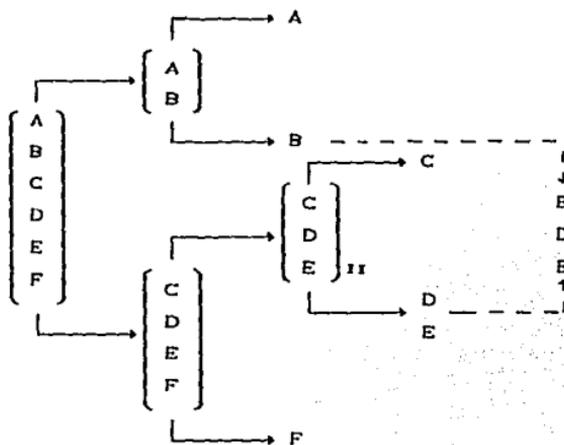
La división AB/CDE es preferida sobre A/BCDE. La secuencia resultante, que divide a A/B y C/DE al final, es la siguiente:



Una segunda secuencia es obtenida por la división A/BCDE primero, en lugar de AB/CDE :

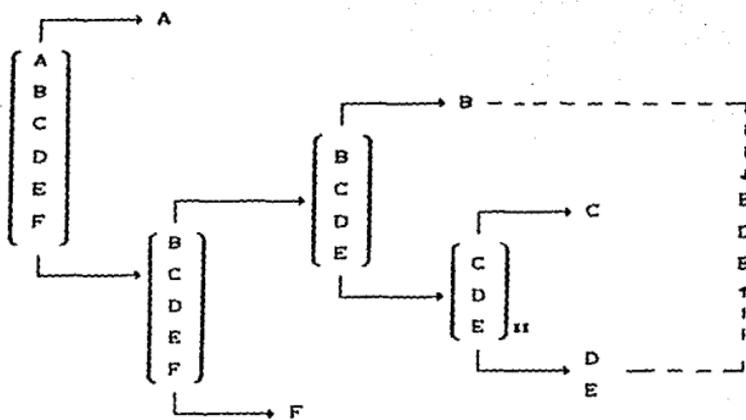


Ya no existen otras secuencias con una división inicial ABCDE/F, que cumplan las restricciones impuestas por las heurísticas M1 a C1; la tercera secuencia es desarrollada examinando las divisiones iniciales alternativas para separar ABCDEF. De este modo, si la segunda mejor división para separar ABCDEF por destilación ordinaria (AB/CDEF), con el segundo más alto (CFS): de 3.385, realizada al inicio, la secuencia resultante, que divide a A/B y C/DE al final, es:

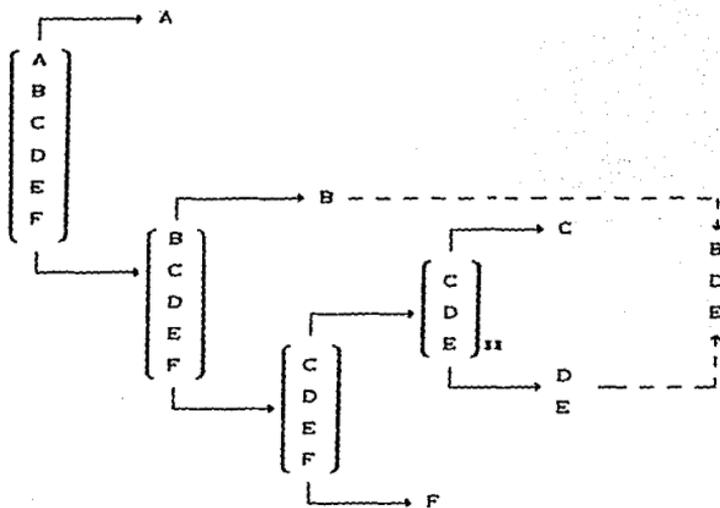


(secuencia 4c)

Alternativamente, si el tercer mejor corte para separar ABCDEF por destilación ordinaria, es decir, la división A/BCDEF con el tercer valor más alto de (CFS): de 2.163, se realiza primero, otras dos secuencias, las cuales dividen a C/DE al último, pueden desarrollarse como sigue:



(secuencia 4d)

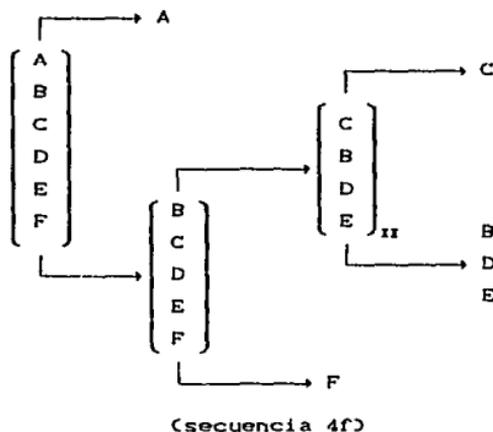


(secuencia 4e)

Cabe mencionar que la secuencia 4d es mejor que la secuencia 4e, de acuerdo a los valores de CFS para la separación BCDEF:

	BCDE/F	B/CDEF
f	5.90/92.62	14.75/83.77
$(\alpha-1.0) \times 100$	84.060	24.850
CFS	5.355	4.375

La TABLA 3.5 compara las secuencias desarrolladas por diferentes métodos para el problema en cuestión. La secuencia adicional (4f), implica el reemplazo de la división B/C en la secuencia 4e por destilación extractiva, como sigue :



La TABLA 3.5 muestra que la secuencia 4a es de menor costo que las secuencias iniciales obtenidas por el método de Seader y Westerberg, así como el de Nath y Motard, mencionados como las secuencias 4d y 4f, respectivamente. La secuencia 4a tiene un costo apenas de 0.8% mayor que la mejor secuencia (4c) sintetizada por los dos métodos anteriores. El método de Nadgir y Liu, de

manera similar al de Seader y Westerberg, tienen generadas un gran número de las secuencias de menor costo (4a y 4d), que la elaborada por Nath y Motard (4f).

### **3.4 COMENTARIOS AL METODO.**

El objetivo de este capítulo es mostrar un método heurístico simple, para la síntesis sistemática de secuencias de separación multicomponente.

Este método involucra la aplicación secuencial de las siete heurísticas mencionadas en la sección 3.1. Las dos primeras heurísticas deciden los métodos de separación que van a ser utilizados. Las siguientes tres heurísticas dan los principios acerca de las divisiones "prohibidas", debido a las especificaciones del producto, así como las realizadas al inicio y al final. Las últimas dos heurísticas son usadas para sintetizar la secuencia de separación inicial, con la ayuda de un parámetro auxiliar, el Coeficiente de Facilidad de Separación (CFS).

El método ha sido aplicado a diversos problemas de síntesis, los cuales se resolvieron previamente utilizando otros métodos. Con base en reportes de costos para los ejemplos ilustrativos presentados, se muestra que las secuencias iniciales creadas por el método heurístico son de más bajo costo que las obtenidas por otros métodos heurísticos ordenados. Así mismo, son también idénticas o difieren en un mínimo porcentaje de costo que las obtenidas por métodos algorítmicos, evolutivos y combinados.

El método heurístico ofrece la ventaja de ser simple y efectivo, si se aplica correctamente. Además, puede implementarse con relativa facilidad en ambientes computacionales de búsqueda heurística, como lo son los sistemas expertos.

### 3.5 CONSIDERACIONES ADICIONALES.

Es importante hacer notar que, si bien la heurística SI (eliminar a los componentes corrosivos y peligrosos primero) no ha sido explícitamente aplicada en los ejemplos de este capítulo, su uso ha mostrado importancia en el momento de decidir qué corte realizar al inicio en gran cantidad de problemas, en donde la corriente de alimentación contiene componentes corrosivos y/o peligrosos. Los ejemplos típicos de esta clase de problemas incluyen secuencias de separación en la manufactura de detergentes a partir del petróleo (Rudd, et al.1973). En estos problemas, es esencial eliminar el cloruro de hidrógeno de la mezcla de productos clorados y especies sin reaccionar (decano, monoclorodecano, diclorodecano, cloro y cloruro de hidrógeno), debido a su alta corrosividad. Por esta razón, la heurística SI ha sido incluida en el método de Nadgir y Liu.

El método heurístico, tal como se presenta en este capítulo, representa un medio simple y efectivo para la síntesis sistemática de excelentes secuencias iniciales de separación, como las desarrolladas por diseños multi-objetivos de optimización.

En el siguiente capítulo se tratará el problema de sintetizar secuencias de separación con un número mínimo de separadores, utilizando arreglos con cortes de alta recuperación, cortes totalmente húmedos, una combinación de ambos y utilizando "bypass". Todo lo anterior complementa el conocimiento técnico presentado en este capítulo.

**CAPITULO CUATRO**

**SESS  
PERSPECTIVA  
DEL  
INGENIERO QUIMICO**

Este capítulo describe en forma resumida la perspectiva del Sistema Experto para la Síntesis de Secuencias de Separación (SESS) en la Ingeniería Química. El objetivo principal de SESS es sintetizar esquemas alternativos para la separación de una mezcla multicomponente en varias corrientes de producto, en las cuales algunos componentes de la alimentación aparezcan en dos o más corrientes (separaciones húmedas).

El problema de secuencias de separación multicomponente es la síntesis de esquemas de separación con un mínimo número de separadores utilizando esquemas del tipo de alta recuperación, totalmente húmedas y la combinación de las dos anteriores que ejecutarán las especificaciones de los productos en una técnica factible y en una ruta económicamente atractiva. La combinación de la técnica factible y el atractivo económico es un reto para el diseño en la Ingeniería Química.

#### SINTESIS CONTRA EL PROBLEMA DE DESCOMPOSICION.

Un reto al utilizar sistemas expertos para el diseño ingenieril es la Síntesis de Procesos. De esta forma, los problemas de síntesis son más demandantes, y tal vez representan el paso crítico en el diseño de un sistema experto, desarrollando herramientas simples y flexibles para representar dicho problema.

Los sistemas expertos son mejores en la solución de problemas de descomposición que de síntesis, pero el esquema desarrollado es inherentemente una forma de síntesis. El problema de síntesis es un desafío para los sistemas expertos, primordialmente porque éste no provee nada concreto para analizar sólo el trabajo realizado. Este capítulo introduce una representación del problema denominado Diagrama de Asignación de Componentes (DAC), completada con la Matriz de Asignación de Componentes (MAC), sintetizando convenientemente las secuencias de separación deseadas.

## FACTIBILIDAD TECNICA Y PRACTICA.

Otro reto del diseño ingenieril concierne a la factibilidad y a la práctica. Primero, un diseño debe ser técnicamente factible para ser llevado a cabo. En secuencias de separación, una operación específica debe ser termodinámicamente factible desde un punto de vista de equilibrio líquido-vapor. Para aplicar la factibilidad técnica, se introduce una Tabla de Especificación de Separación (TES) para facilitar el análisis de las operaciones de separación basadas en las especificaciones de producto.

Por otro lado, un diseño debe ser también práctico y económicamente atractivo. Una vez que todas las restricciones termodinámicas son satisfechas, el ingeniero debe capitalizar las opciones factibles para configurar un diseño económico. Para asegurar que una secuencia sea económicamente sintetizada, se usa un Rango de Heurísticas Ordenadas.

Específicamente, SESS toma en cuenta las siguientes consideraciones técnicas:

(1) La destilación ordinaria es apropiada. No forma azeótropos y las diferencias de volatilidades son suficientemente altas para hacer a la destilación ordinaria la separación de selección (SESS identifica las divisiones donde la destilación ordinaria no es apropiada).

(2) La volatilidad relativa es constante. No cambia con la composición.

(3) Solamente columnas convencionales serán consideradas. SESS utiliza columnas estándar, es decir, con una sola alimentación y dos productos (domos y fondos).

## 4.1 REPRESENTACION DEL PROBLEMA DE SINTESIS.

Para dar solución a este problema, a continuación se describen las herramientas básicas que son necesarias para la síntesis de secuencias de separación.

### 4.1.1 DIAGRAMA DE ASIGNACION DE COMPONENTES (DAC) Y MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES (MAC).

Para los ejemplos de este capítulo se toma como base la TABLA 4.1, con los datos de especificaciones de alimentación y productos de un problema de separación.

TABLA 4.1

CORRIENTES DE PRODUCTO DESEADO	FLUJO COMPONENTE (mol/hr)				FLUJO PRODUCTO (mol/hr)
	A	B	C	D	
P4	0	0	0	15	15
P3	0	0	20	10	30
P2	10	12.5	0	0	22.5
P1	15	12.5	5	0	32.5
FLUJO COMPONENTE (mol/hr)	25	25	25	25	100

DATOS TOMADOS DE NATH (1977). LOS COMPONENTES A, B, C Y D SON RESPECTIVAMENTE N-BUTANO, N-PENTANO, N-HEXANO Y N-HEPTANO CON PUNTOS DE EBULLICION NORMALES DE -0.5, 36.1, 68.7 Y 98.4 °C. PARA LA MEZCLA DE ALIMENTACION A 92.2°C Y 466 KPa, LAS RELACIONES DE EQUILIBRIO SON  $K_A = 2.46$ ,  $K_B = 1.00$ ,  $K_C = 0.47$ ,  $K_D = 0.21$ .

El Diagrama de Asignación de Componente fue introducido por Cheng y Liu (1988). Este diagrama es una representación esquemática del problema de separación, en el que se muestran todos los cortes posibles entre los componentes de la mezcla. Desafortunadamente, este diagrama tiene una gran desventaja: es prácticamente imposible implementarlo en algún sistema de cómputo.

Para facilitar la implementación computacional de esta aproximación, DAC se puede simplificar utilizando una matriz (MAC). La siguiente representación muestra una MAC para el problema introducido en la TABLA 4.1:

$$\begin{array}{c}
 \text{(MAC1)} \\
 \\
 \begin{array}{cccc}
 & \text{A} & \text{B} & \text{C} & \text{D} \\
 \text{P4} & \left[ \begin{array}{cccc}
 0 & 0 & 0 & 15 \\
 0 & 0 & 20 & 10 \\
 10 & 12.5 & 0 & 0 \\
 15 & 12.5 & 5 & 0
 \end{array} \right. & \begin{array}{l} \leftarrow \text{H3(P123/P4)} \\ \leftarrow \text{H2(P12/P34)} \\ \leftarrow \text{H1(P1/P234)} \end{array} \\
 \text{P3} \\
 \text{P2} \\
 \text{P1}
 \end{array}
 \end{array}$$

$\begin{array}{ccc}
 \uparrow & \uparrow & \uparrow \\
 \text{V}_1 & \text{V}_2 & \text{V}_3 \\
 \text{(A/BCD)} & \text{(AB/CD)} & \text{(ABC/D)}
 \end{array}$

MAC1 es una matriz  $P \times C$ . Formalmente MAC se define como  $\{f_{ij}\}$  donde:

$$\begin{array}{l}
 f_{ij} = \text{razón de flujo del componente } j \text{ en el producto } i \\
 (i = 1, 2, 3, \dots, P. \quad j = 1, 2, 3, \dots, C).
 \end{array}$$

P es el número de productos y C el número de componentes. Cada columna representa un componente y éstos aparecen de izquierda a derecha en orden decreciente de volatilidad. De esta forma el componente A es el más volátil y el D es el menos volátil. Cada renglón de la matriz representa un producto. Los renglones están ordenados en decreciente volatilidad de productos, es decir el renglón inferior es el producto más volátil (P1), y el renglón superior es el menos volátil (P4).

#### 4.12 REPRESENTACION DEL COMPONENTE Y SEPARACIONES DEL PRODUCTO.

Las separaciones de los componentes representadas por las líneas verticales, tales como V1, V2 y V3 en MAC1, son separaciones de alta recuperación. Dichas separaciones no pueden producir las corrientes de producto distribuidas. Para algunos problemas de síntesis, se necesitan mezclar 2 o más productos de diferentes separaciones verticales, Vm (m=1,2.. a C-1), para obtener los productos multicomponentes deseados.

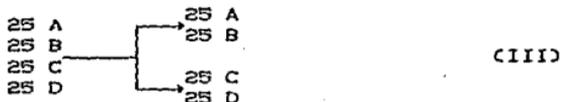
Observando nuevamente MAC1 y considerando la separación vertical V2, se crean dos submatrices. Se denotan domos y fondos resultantes de la separación vertical como MACCVm,domos) y MACCVm,fondos), respectivamente. Utilizando esta notación, y refiriéndose a MAC1, los productos de V2 son:

$$\text{CAM}(V2, \text{domos}) = \begin{matrix} & A & B \\ P4 & \begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix} \\ P3 & \begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix} \\ P2 & \begin{bmatrix} 10 & 12.5 \end{bmatrix} \\ P1 & \begin{bmatrix} 15 & 12.5 \end{bmatrix} \end{matrix} = \begin{matrix} & A & B \\ P2 & \begin{bmatrix} 10 & 12.5 \end{bmatrix} \\ P1 & \begin{bmatrix} 15 & 12.5 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (I)$$

$$\text{CAM}(V2, \text{fondos}) = \begin{matrix} & C & D \\ P4 & \begin{bmatrix} 0 & 15 \end{bmatrix} \\ P3 & \begin{bmatrix} 20 & 10 \end{bmatrix} \\ P2 & \begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix} \\ P1 & \begin{bmatrix} 5 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix} = \begin{matrix} & C & D \\ P4 & \begin{bmatrix} 0 & 15 \end{bmatrix} \\ P3 & \begin{bmatrix} 20 & 10 \end{bmatrix} \\ P1 & \begin{bmatrix} 5 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (II)$$

En (I) y (II) se observa que a cada renglón le corresponde su producto identificado (P1, P2, P3 y P4), así como cada columna y su correspondiente componente (A, B, C y D).

Otro camino, quizá más fácil para representar la separación esquemática, es:



De lo anterior  $V2(CA/B/CD)$  es una separación de alta recuperación entre B y C. Las separaciones verticales son siempre de alta recuperación.

Las separaciones de producto representadas por las líneas horizontales (H1-H3) en MAC1 corresponden a alguna separación húmeda o de alta recuperación, dependiendo de las especificaciones de la recuperación de componentes. Las submatrices se representan para domos y fondos en la separación horizontal  $H_n(n=1,2,\dots,a P-1)$  como  $MAC(H_n, domos)$  y  $MAC(H_n, fondos)$ , respectivamente.

La separación horizontal  $H2(P12/P34)$  da como resultado:

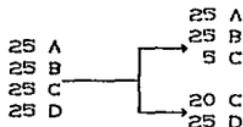
$$\begin{array}{c}
 P2 \\
 P1
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 A \\
 B \\
 C \\
 D
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 10 & 12.5 & 0 & 0 \\
 15 & 12.5 & 5 & 0
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{array}{c}
 P2 \\
 P1
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 A \\
 B \\
 C
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 10 & 12.5 & 0 \\
 15 & 12.5 & 5
 \end{bmatrix}
 \quad (IV)$$

$CAM(H2, domos)$

$$\begin{array}{c}
 P4 \\
 P3
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 A \\
 B \\
 C \\
 D
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 0 & 0 & 0 & 15 \\
 0 & 0 & 20 & 10
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{array}{c}
 P4 \\
 P3
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 C \\
 D
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 0 & 15 \\
 20 & 10
 \end{bmatrix}
 \quad (V)$$

CAMCH2, fondos)

También la separación H2(P12/P34) se puede representar como sigue:



Como el componente C aparece simultáneamente en domos y fondos, la separación H2(P12/P34) es húmeda o distribuida.

## 4.2 ANALISIS DE FACTIBILIDAD DE LAS OPERACIONES DE SEPARACION.

Una diferencia entre las separaciones verticales ( $V_m$ ) y horizontales ( $H_n$ ) es que cada  $V_m$  es factible, pero no todos los  $H_n$  son técnica y/o prácticamente factibles, considerando que la destilación ordinaria es el método apropiado de separación. En esta parte se introducen herramientas básicas para analizar sistemáticamente la factibilidad de las separaciones horizontales. Dicha factibilidad depende de:

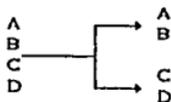
- (1) Las especificaciones de las fracciones recuperadas de componente en domos y fondos, respectivamente.

(2) La selección de los componentes clave ligero (LK) y el clave pesado (HK).

(3) La posibilidad de tener distribuciones inconvenientes de componentes no claves en domos o en fondos.

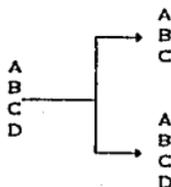
#### 4.2.1 SELECCION DE LOS COMPONENTES CLAVE LIGERO (LK) Y CLAVE PESADO (HK).

En las separaciones de alta recuperación, la determinación de los componentes claves es normalmente obvia. Los componentes claves típicamente son adyacentes y la separación ocurre entre ellos. por lo que para la separación de alta recuperación:



B es el LK y C es el HK. El LK es el componente menos volátil en domos, el HK es el componente más volátil en fondos.

Con una separación húmeda tal como:



la selección de LK y HK es menos obvia, porque A, B y C aparecen tanto en domos como en fondos.

Cheng y Liu sugieren tres reglas para especificar los componentes claves en separaciones distribuidas. Estas reglas son bastante generales y han sido muy efectivas en la selección de los componentes LK y HK apropiados en un gran número de problemas de separación húmeda.

**REGLA 1.** Muchas separaciones tienen una discontinuidad distintiva en la relación destilado/residuo para cada componente (d/b). Seleccionar como LK y HK los componentes adyacentes alrededor de esta discontinuidad.

Considerando las siguientes relaciones de separación resultantes del corte húmedo H2C/P12/P34 de MAC1:

COMPONENTE	A	B	C	D
d/b	25/0	25/0	5/20	0/25
	0.98/0.02	0.98/0.02	0.2/0.8	0.02/0.98

(VI)

Se usa la relación limitante de 0.98/0.02 para aproximar el corte de alta recuperación representado por la relación calculada de 25/0 para los componentes ligeros A y B. De la misma forma, con la relación anterior puede aproximarse el corte de alta recuperación representado por la relación 0/25 para el componente clave D. Se utilizan estas relaciones para separaciones de alta recuperación, sean horizontales o verticales.

Se observa una discontinuidad en d/b entre los componentes B y C, ya que  $d_B > d_C$  y  $d_C < d_B$ , por lo que se traza una línea vertical punteada entre los componentes B y C; como éstos son inmediatamente adyacentes a esta línea, se les trata como LK y HK, respectivamente.

**REGLA 2.** Para separaciones con sólo un componente distribuido el cual corresponde al más volátil o al menos volátil, seleccionarlo junto con su vecino como claves.

Considerando el siguiente ejemplo para una separación horizontal H(P1/P2) con el componente A más volátil, tanto en domos y fondos se tiene:

	A	B	C	D		
P2	5	15	25	12.5	← H(P1/P2)	(VII)
P1	25	0	0	0		

La Regla 2 sugiere que los claves son A(LK) y B(HK). Considerando la siguiente separación se tiene:

	A	B	C	D		
P2	5	15	25	12.5	← H(P1/P2)	(VIII)
P1	25	0	0	5		

La Regla 2 no aplica aquí, ya que hay varios candidatos para componentes claves, esto es, A/B o C/D pueden ser respectivamente LK/HK. Para resolver este problema, se emplea la Regla 3.

**REGLA 3.** Para otros tipos de separaciones húmedas con varios candidatos LK/HK, se puede estimar la distribución de los componentes resultantes para cada grupo de LK/HK, utilizando un método de análisis de factibilidad. El grupo que evita distribuciones inconvenientes para separaciones de componentes no claves en domos y fondos es la mejor selección de LK/HK.

Las separaciones no deseables ocurren porque en el diseño de una columna de destilación se tienen limitados grados de libertad.

Cuando se escogen los componentes LK y HK, típicamente la columna se diseña (número de etapas de equilibrio, temperatura y presión de operación, relación de reflujo, etc.) para igualar las fracciones recuperadas de especificación de componentes no claves.

De lo anterior, el sistema puede fallar debido al equilibrio termodinámico. Una vez analizados los parámetros, tales como la presión y temperatura de operación, para encontrar los componentes LK y HK, se tiene un pequeño control sobre la distribución de los no claves en domos y fondos. Como resultado, si las distribuciones de los componentes no claves no satisfacen la recuperación de productos no deseados, la separación no es factible.

Existen algunos "artificios" para evitar las distribuciones de componentes no claves. Se puede ajustar la altura de la columna y/o la localización de la etapa de alimentación; de cualquier modo, si las dos distribuciones de los componentes no claves difieren significativamente de las especificaciones (mayor o igual del 10-20 % de los valores), llegan a ser costosamente prohibitivos; para este caso, la separación es prácticamente inconveniente. Tales razones determinan la factibilidad de la separación distribuida antes de incorporarse a la secuencia.

#### 4.2.2. METODO DE ANALISIS DE FACTIBILIDAD.

Para asegurar la factibilidad de una separación húmeda o distribuida, se pueden realizar cálculos de diseño rigurosos para la selección de los componentes LK y HK. Son requeridos cálculos de equilibrio multicomponente líquido-vapor, pero esta aproximación puede ser muy tediosa y con un alto consumo de tiempo. En resumen, tales cálculos no son apropiados para la implementación de un sistema experto. SESS utiliza un método de análisis de factibilidad introducido por Cheng y Liu (1988), dicho análisis consiste en dos partes fundamentales:

(1) Prueba de recuperación de componentes.

(2) Prueba de distribución de componentes no claves.

Ambas pruebas son bien conocidas en la ecuación de Fenske, utilizada para calcular el mínimo número de etapas de equilibrio ( $N_{\min}$ ) para una separación, dando como datos los componentes LK y HK:

$$N_{\min} = \frac{\log [(d/b)^{LK} (b/d)^{HK}]}{\log \alpha_{LK, HK}} \quad (IX)$$

donde:

$N_{\min}$  = número mínimo de etapas de equilibrio.

$\alpha_{LK, HK}$  = volatilidad relativa entre los componentes LK y HK.

$d, b$  = fracciones molares recuperadas de destilado y fondos respectivamente.

En (IX),  $N_{\min}$  es una función de las relaciones de recuperación y de la volatilidad relativa de LK y HK; los componentes no claves no afectan directamente la ecuación, pero pueden afectar indirectamente  $N_{\min}$ , esto es si su presencia cambia la volatilidad relativa entre LK y HK,  $N_{\min}$  por consiguiente cambia.

#### PRUEBA DE RECUPERACION DE COMPONENTES.

Considerando un mezcla multicomponente en orden decreciente de volatilidad:

...LLK3, LLK2, LLK1, LK, HK, HHK1, HHK2, HHK3,...

donde LK y HK son los componentes clave ligero y clave pesado respectivamente, el resto son no claves. por ejemplo LLK1 es el componente adyacente en volatilidad más ligero que LK, mientras que HHK1 es el componente adyacente en volatilidad más pesado que HK.

La prueba de recuperación de componentes establece que para llevar a cabo una separación húmeda y ésta sea factible, las especificaciones de los componentes deben satisfacer las siguientes relaciones:

$$\dots dLLK_2 \geq dLLK_1 \geq dLK \geq dHK \geq dHKK_1 \geq dHKK_2 \geq dHKK_3 \dots$$

(X)

$$\dots bLLK_1 \leq bLLK_2 \leq bLK \leq bHK \leq bHKK_1 \leq bHKK_2 \leq bHKK_3 \dots$$

(XI)

Esencialmente las ecuaciones dicen que, desde un punto de vista termodinámico, la distribución de componentes con altas volatilidades favorecerán domos, mientras que las más bajas favorecerán fondos. Si las especificaciones de recuperación de los componentes violan estas dos ecuaciones, la separación no es conveniente.

A manera de ejemplo, considerando las relaciones de separación resultantes del corte húmedo H2(P12/P34) de la ec. (VI), se tiene:

$$\begin{aligned} (d/b)_{LLK} &= (d/b)_A \approx 0.98/0.02 & (d/b)_{LK} &= (d/b)_B \approx 0.98/0.02 \\ (d/b)_{HK} &= (d/b)_C \approx 0.20/0.80 & (d/b)_{HKK} &= (d/b)_D \approx 0.02/0.98 \end{aligned}$$

Escribiendo lo anterior en la forma de las ecuaciones (X) y (XI) se obtiene:

$$\begin{aligned} \text{Destilado: } dLLK_1 &\geq dLK \geq dHK \geq dHKK_1 \longrightarrow 0.98 = 0.98 > 0.2 > 0.02 \\ \text{Fondos: } bLLK_1 &\leq bLK \leq bHK \leq bHKK_1 \longrightarrow 0.02 = 0.02 < 0.8 < 0.98 \end{aligned}$$

De esta forma los resultados satisfacen las ecs. (X) y (XI), por lo tanto, la separación húmeda H2(P12/P34), con B/C como LK/HK, es factible de acuerdo a la prueba de recuperación de componentes.

Como otro ejemplo, considerando la siguiente submatriz de MAC1 para representar la separación húmeda HCP1/P2):

	A	B	C	
P2	10	12.5	0	← HCP1/P2)
P1	15	12.5	5	

Seleccionando A/B como LK/HK para HCP1/P2) se obtiene:

$$(d/b)_{LK} = (d/b)_A = 15/10 = 0.6/0.4$$

$$(d/b)_{HK} = (d/b)_B = 12.5/12.5 = 0.5/0.5$$

$$(d/b)_{HK1} = (d/b)_C = 5/0 = 0.98/0.02$$

Aplicando las ecuaciones (X) y (XI) se obtiene:

$$\text{Damos: } 0.6 > 0.5 \neq 0.98$$

$$\text{Fondos: } 0.4 < 0.5 \neq 0.02$$

La especificación de recuperación de disolventes falla para satisfacer las condiciones de factibilidad, de esta forma HCP1/P2), con A/B como LK/HK, técnicamente no es factible. Por sentido común, también se puede indicar que esta separación no es conveniente, ya que el componente B es más volátil que el C, y obviamente no es posible recuperar el 50% de B, pero el 100% de C como producto de damos.

**PRUEBA DE DISTRIBUCION DE COMPONENTES NO CLAVES.**

Para demostrar esta prueba se considera nuevamente MACI. HICP1/P234) tiene las siguientes relaciones de separación de componentes:

COMPONENTE	A	B	C	D	
d/b	15/10	12.5/12.5	5/20	0/25	(XII)
	0.6/0.4	0.5/0.5	0.2/0.8	0.02/0.98	

De acuerdo a la Prueba de Recuperación de Componentes:

Domas:  $0.6 > 0.5 > 0.2 > 0.02$

Fondos:  $0.4 < 0.5 < 0.8 < 0.98$

Ahora, considerando los siguientes pasos de esta prueba para H1 se tiene:

PASO 1. Determinar los componentes potenciales LK y HK. De la separación H1 se ve que A/B, B/C y C/D son todos los posibles candidatos LK/HK.

PASO 2. Determinar Nmin utilizando la ecuación de Fenske para cada candidato LK/HK. La TABLA 4.2 resume estos cálculos.

**TABLA 4.2**

CANDIDATO LK/HK	VALOR DE K		VOLATILIDAD RELATIVA ( $\alpha_{LK, HK}$ )	RELACIONES RECUPERADAS		Nmin
	LK	HK		(d/b)LK	(d/b)HK	
A/B	2.46	1.00	2.46	0.6/0.4	0.5/0.5	0.45
B/C	1.00	0.47	2.18	0.5/0.5	0.2/0.8	1.89
C/D	0.47	0.21	2.24	0.2/0.8	0.02/0.98	9.10

Hay que notar que la separación C/D.  $(d/b)_{HK}$  es realmente 0.0/1.0, por lo que el componente D no está distribuido. Para un componente pesado no distribuido se usa la relación limitante de 0.02/0.98; de la misma forma, para un componente ligero no distribuido se usa la relación limitante de 0.98/0.02. Estas relaciones facilitan el uso de la ecuación de Fenske para eliminar la división por cero.

PASO 3. Calcular las distribuciones de los componentes no claves. También se utiliza la ecuación de Fenske, de esta forma para los LLKs dicha ecuación se escribe como sigue:

$$N_{\min} = \frac{\log [(d/b)_{LLK} (b/d)_{HK}]}{\log (\alpha_{LLK, HK})} \quad (XIII)$$

Esta ecuación tiene dos incógnitas:  $d_{LLK}$  y  $b_{LLK}$ . El  $N_{\min}$  fue calculado en el Paso 2. Además se conoce que para algún componente i:

$$d_i + b_i = 1 \quad (XIV)$$

Por lo anterior, las ecs. (XIII) y (XIV) se resuelven simultáneamente para la relación recuperada  $(d/b)_{LLK}$ . Se puede aplicar también el mismo principio para los HHKs:

$$N_{\min} = \frac{\log [(d/b)_{LK} (b/d)_{HK}]}{\log (\alpha_{LK, HK})} \quad (XV)$$

Por ejemplo, calculando  $(d/b)_{HK}$  o  $(d/b)_c$  para la separación  $H_1(P1/P234)$ , con A/B como LK/HK, se tiene que de la TABLA 4.2  $N_{\min} = 0.45$ , y de la TABLA 4.1  $K_A = 2.46$ ,  $K_c = 0.47$  y  $\alpha_{AC} = 5.23$ . Sustituyendo los valores en las ecs. (XIV) y (XV), simultáneamente se obtiene:  $(d/b)_c = 0.42/0.58$ .

De acuerdo a los resultados de (XII), el valor de  $(d/b)c$  es igual a 0.2/0.8, con esto se ve que el seleccionar A/B como LK/HK produce una distribución no deseable del componente no clave C. Esta separación hace fallar la prueba de distribución de componentes no claves. Debe notarse que la separación puede hacerse factible, añadiendo más etapas de equilibrio en la columna, pero tales modificaciones pueden ser altamente costosas.

**PASO 4.** Identificar todas las separaciones con distribuciones de componentes claves no deseados y no factibles.

Basado en los cálculos cortos de la ecuación de Fenske, se puede decir que si  $(d/b)$  calculado está dentro de  $\pm 20\%$  del valor  $(d/b)$  deseado, la separación es factible. En la separación húmeda H1(P1/P234) con A/B como LK/HK, el  $(d/b)c$  calculado deberá estar en el siguiente rango para ser considerado factible:

$$0.23/0.77 \leq (d/b)c \leq 0.17/0.83$$

Si el valor calculado  $(d/b)$  sale de este rango, el separador será probablemente un diseño altamente costoso.

### **4.3 TABLA DE ESPECIFICACION DE SEPARACION (TES).**

Para facilitar el análisis de la técnica factible de operaciones de separación, Cheng y Liu propusieron una Tabla de Especificación de Separación (TES).

Una TES contiene la siguiente información:

- \* El tipo de separador, Hn o Vm.
- \* Los productos de domos (D) y fondos (B).
- \* La selección de componentes LK y HK.

- \* El factor de separación entre los componentes LK y HK (volatilidad relativa o diferencia de puntos de ebullición).
- \* Relaciones calculadas y estimadas de fracciones recuperadas de componentes en domos y fondos.
- \* Para separaciones factibles, el Coeficiente de Facilidad de Separación (CFS) definido por la ecuación:

$$CFS = f \Delta \frac{1}{\log [(d/b)^{Lk} (b/d)^{HK}]} \quad (XIV)$$

donde:

f = valor mínimo de D/B o B/D (relación de flujo molar total en domos y fondos).

Δ = diferencia de puntos de ebullición entre componentes claves o Δ = 100 (α<sub>LK,HK</sub> - 1).

La TABLA 4.3 es una TES para las primeras separaciones mostradas en MAC1. El análisis de factibilidad visto en la sección 4.2.2 está resumido en esta tabla, pero no considera separaciones como la de LK/HK de A/C; sólo son considerados componentes de volatilidad adyacente. La razón por la cual no se consideran las separaciones como la anterior, es que los componentes "claves intermedios" (en este caso B) casi invariablemente tienen distribuciones de componentes no claves inconvenientes y de esta forma no son factibles.

Para estimar las relaciones de separación de componentes no claves, se toma la ventaja de que la ecuación de Fenske es aplicable a diferentes combinaciones de componentes ligeros y claves, tales como (LLK2,HK), (LLK1,HK), (LK,HHK1), (LK,HHK2), etc.

TABLA 4.3

SEPARACION	DOMOS/FONDOS	LK/HK	$\Delta^{\circ}\text{C}$
V1	A/BCD→25/75	A/B	36.6
V2	AB/CD→50/50	B/C	32.6
V3	ABC/D→75/25	C/D	29.7
H1 <sup>b</sup>	P1/P234→32.5/67.5	A/B	36.6
H1	P1/P234→32.5/67.5	B/C	32.7
H2 <sup>b</sup>	P12/P34→55/45	B/C	32.6
H2	P12/P34→55/45	C/D	29.7
H3	P123/P4→85/15	C/D	29.7

SEPARACION	(d/b) <sub>A</sub>	(d/b) <sub>B</sub>	(d/b) <sub>C</sub>	(d/b) <sub>D</sub>	CFS
V1	0.98/0.02	0.02/0.98	0.02/0.98	0.02/0.98	3.61
V2	0.98/0.02	0.98/0.02	0.02/0.98	0.02/0.98	9.67
V3	0.98/0.02	0.98/0.02	0.98/0.02	0.02/0.98	2.93
H1 <sup>b</sup>	0.60/0.40	0.50/0.50	<u>0.42/0.58</u>	<u>0.02/0.98</u>	A
H1	<u>0.95/0.05</u>	0.50/0.50	0.20/0.80	<u>0.02/0.98</u>	A
H2 <sup>b</sup>	<u>0.98/0.02</u>	0.98/0.02	0.20/0.80	<u>0.02/0.98</u>	11.7
H2	<u>0.98/0.02</u>	<u>0.73/0.27</u>	0.20/0.80	0.02/0.98	A
H3	<u>0.98/0.02</u>	<u>0.98/0.02</u>	0.98/0.02	0.40/0.60	2.81

"A" separación no factible debido a las distribuciones de los componentes no claves.

"b" separaciones con cortes claves, esto es, H1(P12/P34) con A/C como LK/HK y H2(P12/P34) con B/D como LK/HK no son incluidas debido a las distribuciones de los componentes no claves.

NOTA: Las relaciones de recuperación subrayadas son calculadas por la ec. de Fenske.

Cabe hacer notar que las separaciones de alta recuperación son siempre factibles (V1, V2 y V3).

La TES es una herramienta útil para definir y especificar los componentes claves y no claves, la rápida identificación de la factibilidad de las operaciones de separación, y comparar sistemáticamente la sencillez relativa de todas las separaciones factibles.

#### 4.4 ANALISIS DE "BYPASS" Y TRANSFORMACION DE PSEUDOPRODUCTOS.

En esta parte se describen por una parte, la corriente de "bypass" y su efecto en el sistema y por otro lado, la transformación de pseudoproductos.

##### 4.4.1 UTILIZANDO "BYPASS".

De acuerdo al comportamiento de los sistemas multicomponentes, algunas veces debe tenerse la capacidad para auxiliar alguna alimentación o una corriente de producto intermedio, directamente a una corriente de producto final. En general, esta herramienta de "bypass" minimiza costos, porque reduce la carga másica que se envía a los separadores. Teniendo menos material para el proceso, se reducen tanto capital como costos de operación.

En esencia, una corriente de "bypass" puede derivarse si tiene todos los componentes incluidos en dicha corriente. Por ejemplo de MAC1 para la separación H2(P12/P34) se tiene:

$$\text{CAMCH}_2(\text{domos}) = \begin{matrix} & & \text{A} & \text{B} & \text{C} \\ \text{P2} & \left[ \begin{array}{ccc} 10 & 12.5 & 0 \\ \text{P1} & \left[ \begin{array}{ccc} 15 & 12.5 & 5 \end{array} \right] \end{array} \right]$$

$$\text{CAMCH2, fondos)} = \begin{matrix} P4 \\ P3 \end{matrix} \begin{bmatrix} C & D \\ 0 & 15 \\ 20 & 10 \end{bmatrix}$$

De lo anterior, la corriente de domos consiste de 25A + 25B + 5C, y necesita ser separada para satisfacer las especificaciones de los productos P1 y P2. Esta corriente es alimentada al siguiente separador, y el producto P1 contiene todos los componentes (A, B y C) en esta alimentación, por lo que dicha corriente puede enviarse a "bypass". De la misma manera, la corriente de fondos consiste de 20C + 25D, y muestra que el producto P3 contiene todos los componentes (C y D) que aparecen en esta corriente, por lo que también está sujeta a "bypass".

Para examinar el mecanismo de "bypass" con más detalle, se utiliza MACCH2,domos). Para determinar la máxima cantidad que se puede someter a "bypass" en el siguiente separador y enviarla directamente al producto P1, se usa la comparación mostrada en la TABLA 4.4.

TABLA 4.4

COMPONENTES	A	B	C
Flujo del componente en P1 ( mol/hr )	15	12.5	5
Flujo del componente en la alimentación ( mol/hr )	25	25.0	5
Flujo del componente en el producto dividido entre el de la alimentación. ( % )	15/25 60%	12.5/25 50%	5/5 100%

De esta tabla se observa que B es el componente limitante, por lo que P1 requiere un menor porcentaje del total de B, comparado con el resto de los componentes de la corriente (50% de B); por lo tanto, se puede derivar a lo más 50% de la corriente de alimentación alrededor del siguiente separador para P1. Un 50% de "bypass" corresponde a 12.5 mol/hr. de A, 12.5 mol/hr. de B y 2.5 mol/hr. de C, con lo cual se obtiene:

	A	B	C		A	B	C	
P2	10	12.5	0	$\xrightarrow[\text{2.5C) para P1}]{-(12.5A, 12.5B)}$	P2	10	12.5	0.0
P1	15	12.5	5		P1	2.5	0.0	2.5
Alimentación=55mol/hr. al siguiente separador.					Alimentación=27.5mol/hr al siguiente separador.			

(CXVII)

Este "bypass" reduce la alimentación para el siguiente separador de 55 a 27.5 mol/hr.

#### 4.4.2 EFECTOS DE LA CORRIENTE DE "BYPASS".

El "bypass", además de reducir la carga másica de las separaciones subsecuentes y los costos, tiende a incrementar su recuperación. Considerando la siguiente MAC:

	A	B	C		A	B	C	
P2	0	0	15	$\xrightarrow[\text{15C) para P1}]{-(7.5A, 7.5B)}$	P2	0.0	0.0	15
P1	15	15	15		P1	7.5	7.5	0.0
								$\uparrow$ +H1' ↓ V2'

(CXVIII)

En este caso, el "bypass" realiza separaciones H1' y V2' equivalentes, y cambia H1 de una separación húmeda a una de alta recuperación. Considerando la MAC2 mostrada a continuación, donde A es propano, B es isobutano y C es n-butano:

	A	B	C	
P2	20	70	80	← H1
P1	15	15	15	
		↑ V1	↑ V2	(CAM2)

Las porciones de "bypass" de la alimentación son ambos productos P1 y P2. La TABLA 4.5A resume la TES para MAC2. Utilizando "bypass" directamente para ambos productos P1 y P2, la representación de MAC2 es:

	A	B	C		A	B	C	
P2	20	70	80	$\xrightarrow{\substack{\text{PARA P2} \\ \text{--(18A, 49.7B, 40.9C)} \\ \text{--(15.5A, 19.4B, 15C)} \\ \text{PARA P1}}}$	P2	2.0	26.3	31.1
P1	15	15	15		P1	9.5	1.6	0.0
		↑ V1	↑ V2			↑ V1'	↑ V2'	

(CXIX)

La TES para MAC2 con "bypass" es mostrada en la TABLA 4.5B. De acuerdo a ambas tablas y comparando la factibilidad de H1, con A/B como LK/HK, para MAC con y sin "bypass", se tiene que sin "bypass", H1 no es factible y con "bypass" si es factible. La conclusión de lo anterior, es que el "bypass" puede cambiar previamente una separación no factible en una factible.

#### 4.4.3 TRANSFORMACION DE PSEUDOPRODUCTOS.

La corriente de "bypass" de acuerdo al punto anterior y reafirmando sus efectos permite:

TABLA 4.5A

SEPARACION	DOMOS/FONDOS	LK/HK	$\Delta^{\circ}\text{C}$
V1	A/BC→35/180	A/B	30.4
V2	AB/C→120/95	B/C	11.2
H1	P1/P2→45/170	A/B	30.4
H1	P1/P2→45/170	B/C	11.2

SEPARACION	(d/b) <sub>A</sub>	(d/b) <sub>B</sub>	(d/b) <sub>C</sub>	CFS
V1	0.98/0.02	0.02/0.98	0.02/0.98	1.75
V2	0.98/0.02	0.98/0.02	0.02/0.98	2.62
H1	0.43/0.57	0.18/0.82	<u>0.12/0.82</u>	A
H1	<u>0.23/0.77</u>	0.18/0.82	0.16/0.84	A

"A" separación no factible debido a las distribuciones de los componentes no claves.

NOTA: Las relaciones de recuperación subrayadas son calculadas por la ec. de Fenske.

TABLA 4.5B

SEPARACION	DOMOS/FONDOS	LK/HK	$\Delta^{\circ}\text{C}$
V1	A/BC→11.5/59	A/B	30.4
V2	AB/C→39.4/31.1	B/C	11.2
H1	P1/P2→11.1/59.4	A/B	30.4
H1	P1/P2→11.1/59.4	B/C	11.2

SEPARACION	(d/b) <sub>A</sub>	(d/b) <sub>B</sub>	(d/b) <sub>C</sub>	CFS
V1	0.98/0.02	0.02/0.98	0.02/0.98	1.75
V2	0.98/0.02	0.98/0.02	0.02/0.98	2.62
H1	0.83/0.17	0.06/0.94	<u>0.02/0.98</u>	2.98
H1	<u>0.52/0.48</u>	0.06/0.94	0.02/0.98	A

"A" separación no factible debido a las distribuciones de los componentes no claves.

NOTA: Las relaciones de recuperación subrayadas son calculadas por la ec. de Fenske.

- (1) Reducir la carga másica y el costo total del sistema.
- (2) Hacer posibles separaciones inicialmente no factibles, en factibles.

También se pueden realizar separaciones horizontales factibles, si no es posible la corriente de bypass, utilizando para ello la transformación de pseudoproductos. Tomando en cuenta MAC1 y su TES de la TABLA 4.3 se observa que  $H1(P1/P234)$  no es factible debido a las distribuciones de los componentes no claves inconvenientes; esto puede hacerse factible separando el producto  $P1$  en dos pseudoproductos,  $P1^*$  y  $P1'$ .

La siguiente MAC ilustra esta transformación de pseudoproductos:

	A	B	C	D	
$P4$	0	0	0	15	
$P3$	0	0	20	10	← H4
$P1'$	0	12.5	5	0	← H3
$P2$	10	12.5	0	0	← H2
$P1^*$	15	0	0	0	← H1
		↑ $V1$	↑ $V2$	↑ $V3$	

Por tanto, todas las fracciones recuperadas de componentes corresponden a la razón de flujo en el grupo equivalente de productos ( $P1^*$ ,  $P2$ ,  $P1'$ ,  $P3$ ,  $P4$ ), satisfaciendo las ecs. (X) y (XI), las separaciones  $H1(P1^*/P2'34)$ ,  $H2(P1^*/P1'34)$ ,  $H3(P1^*2'/P34)$  y  $H4(P1^*2'3/P4)$  son técnicamente factibles. La TES se muestra en la TABLA 4.6. De esta manera se puede obtener el producto  $P1$  mezclando simultáneamente  $P1^*$  y  $P1'$ .

Una desventaja de esta aproximación es que cuando un pseudoproducto es formado, se requiere un separador adicional para realizar el objetivo inicial. Por consiguiente, este separador adicional implica un costo de capital mayor. Cuando es necesario

TABLA 4.6

SEPARACION	DOMOS/FONDOS	LK/HK	$\Delta^{\circ}\text{C}$
V1	A/BCD→25/75	A/B	36.6
V2	AB/CD→50/50	B/C	32.6
V3	ABC/D→75/25	C/D	29.7
H1	$P1^{*2}/P21^{*34}$ →15/85	A/B	36.6
H2	$P1^{*2}/P1^{*34}$ →38/62	A/B	36.6
H2	$P1^{*2}/P1^{*34}$ →38/62	B/C	32.6
H3	$P1^{*21^{*}}/P34$ →55/45	B/C	32.6
H3	$P1^{*21^{*}}/P34$ →55/45	C/D	29.7
H4	$P1^{*21^{*3}}/P4$ →85/15	C/D	29.7

SEPARACION	(d/b) <sub>A</sub>	(d/b) <sub>B</sub>	(d/b) <sub>C</sub>	(d/b) <sub>D</sub>	CFS
V1	0.98/0.02	0.02/0.98	0.02/0.98	0.02/0.98	3.61
V2	0.98/0.02	0.98/0.02	0.02/0.98	0.02/0.98	9.67
V3	0.98/0.02	0.98/0.02	0.98/0.02	0.02/0.98	2.93
H1	0.60/0.40	0.02/0.98	<u>0.02/0.98</u>	<u>0.02/0.98</u>	3.48
H2	0.98/0.02	0.50/0.50	<u>0.04/0.96</u>	<u>0.02/0.98</u>	13.0
H2	<u>0.98/0.02</u>	0.50/0.50	0.02/0.98	<u>0.02/0.98</u>	11.6
H3	<u>0.98/0.02</u>	0.98/0.02	0.20/0.80	<u>0.02/0.98</u>	11.7
H3	<u>0.98/0.02</u>	<u>0.75/0.25</u>	0.20/0.80	0.02/0.98	A
H4	<u>0.98/0.02</u>	<u>0.98/0.02</u>	0.98/0.02	0.40/0.60	2.81

"A" separación no factible debido a las distribuciones de los componentes no claves.

NOTA: Las relaciones de recuperación subrayadas son calculadas por la ec. de Fenske.

el cambio de las separaciones horizontales no factibles en factibles, es preferible utilizar una corriente de "bypass" en vez de una transformación de pseudoproducto.

#### 4.5 IMPLEMENTACION DE HEURISTICAS.

Una vez que se han desarrollado un buen número de conceptos básicos para analizar separaciones multicomponentes, como lo es la Matriz de Asignación de Componentes (MAC), el Método de Análisis de Factibilidad, la Tabla de Especificación de Separación (TES), el Análisis de "Bypass" y la Transformación de Pseudoproductos, se requiere seleccionar un rango ordenado de heurísticas, aplicadas una por una en el orden especificado, para orientar la selección de separaciones desarrollando eficientemente las secuencias.

La FIGURA 4.1 muestra, paso por paso, el procedimiento para implementar el rango de siete heurísticas ordenadas en SESS. Las siete heurísticas ordenadas, analizadas en detalle en el capítulo anterior, son:

- M1. Favorecer la destilación ordinaria y retirar primero los agentes másicos de separación.
- M2. Evitar la destilación al vacío y la refrigeración.
- D1. Favorecer el menor arreglo de productos.
- S1. Remover los componentes corrosivos y peligrosos.
- S2. Realizar las separaciones difíciles al final.
- C1. Remover el producto más abundante primero.
- C2. Favorecer las separaciones 50/50.

En SESS, la heurística D1 se aplica implícitamente, y el resto, explícitamente; en separaciones multicomponentes, la implementación de M1 y M2 es íntegra. Un análisis de volatilidad relativa determinará si la destilación ordinaria es aceptable; si no es así, la secuencia requiere un agente másico de separación

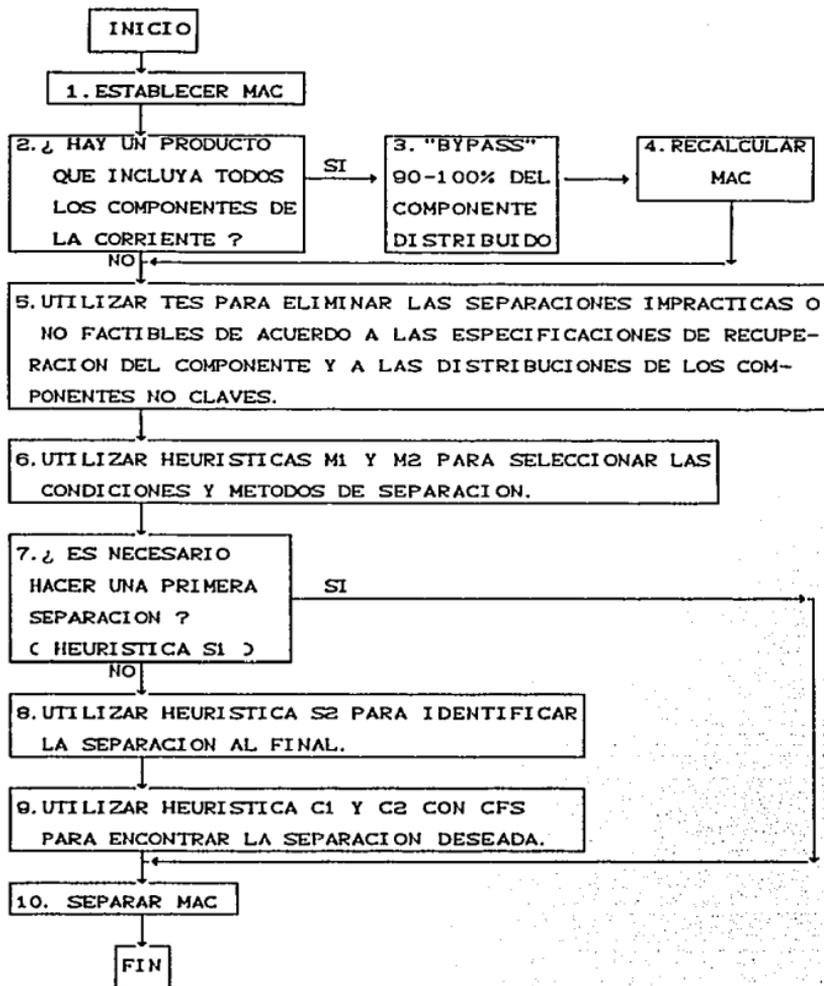


FIGURA 4.1

CAMS). Dicho AMS es siempre retirado tan pronto como sea posible. M2 puede utilizar cálculos con puntos de burbuja y rocío para determinar las condiciones de operación de la columna; dicha heurística no afecta el esquema de proceso desarrollado (considerando la destilación aceptable). Todas las separaciones potenciales ( $H_n$  o  $V_m$ ) son satisfechas por la heurística D1.

El centro de atención de SESS es la aplicación de las heurísticas S1, S2, C1 y C2, acopladas con la corriente de "bypass" y el análisis de factibilidad. Introduce datos termodinámicos, especificaciones de producto y propiedades de componentes; además permite analizar y recomendar una separación. El usuario puede entonces aceptar o rechazar esta recomendación. Si el usuario acepta la separación, SESS la ejecuta y analiza las corrientes de domos y fondos, continuando con las siguientes separaciones; si el usuario rechaza la separación, SESS regresa y genera opciones alternativas.

En el siguiente capítulo se propondrán ejemplos de aplicación, utilizando los conceptos teóricos vistos en esta parte, además de manejar aquellos conceptos ya analizados en los primeros tres capítulos. Con esto, se pretende un aplicación sistemática y racional del método heurístico y del conocimiento para la estructuración final de SESS, permitiendo de esta manera sintetizar los posibles esquemas alternativos que tengan el mayor atractivo económico, en los procesos de separación de mezclas multicomponentes.

## **CAPITULO CINCO**

### **SESS PERSPECTIVA DEL USUARIO**

En este capítulo se presentan los lineamientos bajo los cuales puede ejecutarse el sistema experto creado, en lo que respecta a los requerimientos informáticos necesarios ("hardware" y "software") y la información técnica que debe ser especificada para poder correr el programa.

Así mismo, se incluyen seis ejemplos de aplicación, orientados a la demostración de las capacidades de SESS, explorando las separaciones con cortes finos, cortes húmedos, manejo de pseudoproductos y componentes corrosivos, además de presentar la posibilidad de sintetizar secuencias alternativas a un problema específico. Los ejemplos introducidos también pueden considerarse como material de guía y apoyo al usuario en el manejo del sistema experto.

Por último, se presenta una explicación referente al manejo de bases de datos en el sistema experto, característica de gran utilidad para agilizar las sesiones de entrada y salida de datos, así como realizar modificaciones rápidas en la información, cuando sea requerido.

## **5.1 REQUERIMIENTOS PARA EL USO DE SESS.**

SESS, programa desarrollado en Turbo Prolog, posee las ventajas que este poderoso ambiente de programación le confiere a los sistemas en él diseñados. La principal de estas ventajas es la optimización de memoria que se puede alcanzar con un lenguaje compilado, como lo es Turbo Prolog, que genera programas ejecutables aptos para ser utilizados en computadoras personales. Para enfatizar más esta característica, basta recordar algunas versiones del lenguaje LISP escasamente portátiles, las cuales necesitan un ambiente de desarrollo con grandes cantidades de memoria disponibles, generando así mismo programas muy grandes y relativamente lentos. En este contexto, SESS puede ser usado en cualquier sistema de "hardware" que permita el uso de Turbo Prolog, concretamente computadoras personales IBM o compatibles que incluyan el sistema operativo MS-DOS, en su versión 3.0 como condición mínima.

En lo que respecta a dispositivos gráficos, SESS es totalmente compatible con monitores CGA, por lo que este tipo es el más recomendable para su aplicación. Con monitores y tarjetas EGA y VGA, SESS también funciona aceptablemente, no así con monitores monocromáticos, pues el diseño de la interfase al usuario no se emplea al máximo.

Como se verá posteriormente, SESS permite enviar a impresión información generada durante la corrida. Para este propósito, los dispositivos EPSON e IBM son los más adecuados, aunque puede usarse cualquier impresora que soporte el código ASCII.

Una ventaja adicional importante es la rapidez de ejecución de SESS, debida en gran parte al ambiente en el que fue desarrollado. Aún en procesadores 80286, corriendo a 10 MHz, SESS puede presentar resultados en un tiempo significativamente bajo, de tal forma que justifica plenamente su aplicación.

## 5.2 INFORMACION TECNICA REQUERIDA.

Para aplicar SESS a un problema dado, es necesario tener a la mano la siguiente información:

- \* Componentes y productos del sistema (número y nombres).
- \* Flujo especificado para cada componente en los diversos productos.
- \* Temperatura normal de ebullición de cada componente (en grados centígrados).
- \* Coeficiente de reparto en el equilibrio termodinámico (valor  $K$ ) para cada componente a las condiciones de la corriente de alimentación.
- \* Especificación de cualquier componente corrosivo y/o peligroso.
- \* Especificación de pseudoproductos (si los hay).

De los elementos mencionados, destaca la disponibilidad de los valores  $K$  de los componentes. En muchas ocasiones, estos valores se pueden determinar fácilmente, haciendo uso de gráficas, correlaciones, etc., sobre todo cuando se manejan mezclas de hidrocarburos. No obstante, también pueden presentarse situaciones en las que sea necesario efectuar cálculos matemáticos para determinar estos valores, empleando ecuaciones de estado en las condiciones de equilibrio. Con el fin de apoyar al usuario de SESS en casos de esta naturaleza, se proporciona un programa auxiliar para determinar los valores  $K$  de los componentes de la mezcla a ser analizada por SESS (véase apéndice).

Una vez reunida toda la información, ya es posible usar el sistema experto, ejecutándolo con el archivo tesis del disco

anexo, alimentando los datos directamente desde el teclado, o bien, mediante un archivo de datos. El uso de estos archivos, los cuales permiten agilizar notablemente el acceso de la información, se explicará más adelante en este capítulo, en la sección 5.4.

### **5.3 EJEMPLOS DE APLICACION.**

SESS es un programa de fácil empleo, pues su interfase al usuario dirige paso a paso la síntesis de la secuencia de separación a un problema dado. Aunque este sistema fue creado considerando que el usuario común será el ingeniero químico practicante, la interfase permite que usuarios "inexpertos" puedan emplearlo sin demasiados problemas. Sin embargo, para comprender y seguir de mejor manera la ejecución del programa, es recomendable tener claros los conceptos introducidos en los capítulos tres y cuatro, mismos que representan el fundamento teórico del programa.

En las siguientes secciones se presentan diversos ejemplos de aplicación encaminados a guiar al usuario en el manejo del sistema experto y mostrarle sus capacidades.

**EJEMPLO 1:** Separación de hidrocarburos ligeros en componentes puros.

El objetivo de este primer ejemplo es mostrar el uso de SESS en la síntesis de una secuencia de separación que emplee únicamente cortes finos. La información requerida para este ejemplo se reúne en la TABLA 5.1.

Después de cargar SESS, el usuario introduce la información al sistema experto mediante el teclado. Nótese que no existen elementos corrosivos o peligrosos, ni se especifican pseudoproductos. La lectura de datos en PROLOG es estricta, con la finalidad de reducir al mínimo posibles errores que se generen

TABLA 5.1 ESPECIFICACIONES PARA EL EJEMPLO 1.

Componente	Nombre	Flujo en Productos					Temp. Eb. °C	Valor K
		A	B	C	D	E		
Propano	C3	5	0	0	0	0	-42.2	4.0424
i-Butano	IC4	0	15	0	0	0	-10.0	1.7095
n-Butano	C4	0	0	25	0	0	-0.6	1.2296
i-Pentano	IC5	0	0	0	20	0	29.9	0.5000
n-Pentano	C5	0	0	0	0	35	36.3	0.3834

Valores K a 2.264 atm y 303.15 K.

TABLA 5.2 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 1.

Productos	Flujo Total	Componentes				
		C3	IC4	C4	IC5	C5
*****	*****	*****	*****	*****	*****	*****
E	35.0	0.0	0.0	0.0	0.0	35.0
D	20.0	0.0	0.0	0.0	20.0	0.0
C	25.0	0.0	0.0	25.0	0.0	0.0
B	15.0	0.0	15.0	0.0	0.0	0.0
A	5.0	5.0	0.0	0.0	0.0	0.0

durante la ejecución del programa; por ello, debe introducirse la información de manera correcta. Es importante mencionar que la introducción de componentes y productos debe observar un orden ascendente en las volatilidades relativas.

Una vez terminada la lectura de datos, SESS pregunta si se desea conservar la información en un archivo. Si este es el caso, el usuario debe especificar un nombre de archivo para su base de datos, la cual podrá ser consultada en otras sesiones.

El siguiente paso en la ejecución del programa es el desarrollo de la Matriz de Asignación de Componentes (MAC) para el sistema. SESS pregunta si el usuario desea desplegar esta matriz en pantalla, enviarla a impresora o continuar la ejecución. Si se despliega en pantalla, SESS muestra una MAC como la que se presenta en la TABLA 5.2. En esta tabla se observa que los componentes se enlistan de izquierda a derecha en orden decreciente de volatilidad, mientras que los productos se enlistan de arriba a abajo en orden creciente de volatilidad.

Después de la MAC del sistema, SESS activa el análisis de "bypass", reportando que para esta matriz en especial no es posible aplicar "bypass" (recuérdese del capítulo anterior que el "bypass" solamente puede aplicarse cuando un producto contiene todos los componentes). De esta forma, SESS enlista el flujo de entrada de todos y cada uno de los componentes al primer separador de la secuencia.

Tras el análisis de "bypass", SESS determina la Tabla de Especificación de Separación (TES) para el primer separador. En esta tabla se reportan todos los cortes posibles para el problema en cuestión, indicando los componentes claves, la distribución de componentes en domos y fondos, la diferencia de temperaturas de ebullición entre los componentes claves, el Coeficiente de Facilidad de Separación (CFS), la volatilidad relativa entre los

componentes claves y la condición de factibilidad termodinámica del corte. Para el ejemplo 1, la TES se muestra en la TABLA 5.3. Obsérvese que, para este ejemplo, se reportan únicamente separaciones finas (cortes horizontales en la MAC), mientras que en problemas que incluyen distribución de componentes en más de un producto, también se reportan las separaciones húmedas correspondientes (cortes verticales en la MAC).

En este punto, SESS ha determinado todos los cortes posibles, de los cuales sólo toma los etiquetados como factibles para aplicar el análisis heurístico. Este análisis comienza con las heurísticas de método. Si el sistema favorece la destilación ordinaria (heurística M1), SESS reporta esta situación, de lo contrario, recomienda un método de separación alternativo. El ejemplo 1 favorece la destilación ordinaria, por lo que SESS continúa con el análisis heurístico, aplicando ahora las heurísticas de especies. Primero, verifica si existen componentes corrosivos y/o peligrosos, indicando las medidas a seguir en caso de existir tales componentes. Como en este ejemplo no existen dichos componentes, SESS aplica la heurística siguiente. En ésta, se determinan los cortes difíciles, mismos que deben realizarse al final. Un corte es difícil cuando la diferencia de temperaturas de los componentes claves es menor a los 10°C. Para el ejemplo analizado, SESS reporta que los cortes [{"C3"}, {"IC4"}] / [{"C4"}, {"IC5"}, {"C5"}] y [{"C3"}, {"IC4"}, {"C4"}, {"IC5"}] / [{"C5"}], con diferencias de temperaturas de ebullición de 9.4 y 6.35°C, respectivamente, son difíciles y los destina al final de la síntesis.

El análisis heurístico concluye con la aplicación de las heurísticas de composición. En este problema, la heurística C1 (retirar el producto más abundante primero) no aplica, no así la heurística C2 (favorecer cortes 50/50). Aquí, SESS encuentra dos cortes posibles: [{"C3"}] / [{"IC4"}, {"C4"}, {"IC5"}, {"C5"}] con una razón molar de flujos de 95/5 y un CFS de 0.50, y [{"C3"}, {"IC4"}, {"C4"}] / [{"IC5"}, {"C5"}] con una razón molar de 55/45 y un CFS de 7.39. De los

TABLA 5.3 TABLA DE ESPECIFICACION DE SEPARACION EJEMPLO 1.

Corte: ["C3"]/["IC4", "C4", "IC5", "C5"]	LK/HK: C3/IC4
(d/b) C3 0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) IC4 0.02/0.98	
(d/b) C4 0.02/0.98	
(d/b) IC5 0.02/0.98	
(d/b) C5 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C): 32.20	CFS: 0.50 Alfa(LK/HK): 2.36
*****	*****
Corte: ["C3", "IC4"]/["C4", "IC5", "C5"]	LK/HK: IC4/IC4
(d/b) C3 0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) IC4 0.98/0.02	
(d/b) C4 0.02/0.98	
(d/b) IC5 0.02/0.98	
(d/b) C5 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C): 9.40	CFS: 0.70 Alfa(LK/HK): 1.39
*****	*****
Corte: ["C3", "IC4", "C4"]/["IC5", "C5"]	LK/HK: C4/IC5
(d/b) C3 0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) IC4 0.98/0.02	
(d/b) C4 0.98/0.02	
(d/b) IC5 0.02/0.98	
(d/b) C5 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C): 30.55	CFS: 7.39 Alfa(LK/HK): 2.46
*****	*****
Corte: ["C3", "IC4", "C4", "IC5"]/["C5"]	LK/HK: IC5/C5
(d/b) C3 0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) IC4 0.98/0.02	
(d/b) C4 0.98/0.02	
(d/b) IC5 0.98/0.02	
(d/b) C5 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C): 6.35	CFS: 1.01 Alfa(LK/HK): 1.30

dos cortes. SESS recomienda el segundo de ellos, por favorecer en mayor medida la división 50/50 y por tener un CFS más grande. La recomendación de SESS es acatada y el procedimiento se reanuda para los cortes restantes.

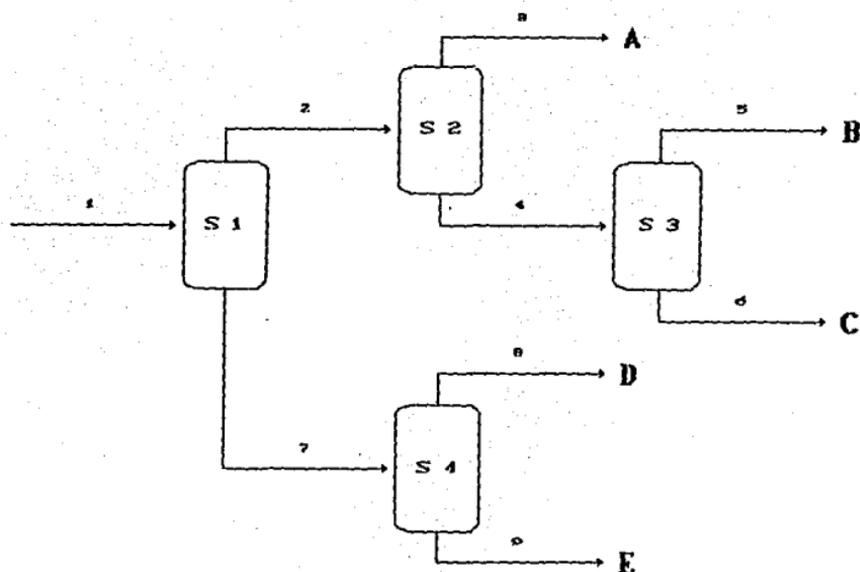
Una vez más, SESS presenta la MAC, correspondiente en esta ocasión a la corriente de domos del primer separador, con componentes C3, IC4 y C4. Enseguida, el análisis de "bypass" reporta que no es posible derivar una corriente de "bypass" para esta matriz, por lo que el flujo de entrada al segundo separador es de 5.0 moles de C3, 15.0 de IC4 y 25.0 de C4. Para esta corriente, SESS determina nuevamente la TES, en la cual se reportan los dos únicos cortes posibles, ["C3"/["IC4","C4"]] y ["C3","IC4"/["C4"]], siendo factibles ambos. Sin embargo, el análisis heurístico determina que el segundo de los cortes es difícil, debido a la baja diferencia de temperaturas de ebullición. Así, solamente queda un corte para esta corriente, propano por domos y butanos por fondos, mismo que es efectuado.

La síntesis se reanuda con la MAC para la corriente de fondos del separador dos. Para esta MAC tampoco es posible aplicar "bypass", por lo que los flujos de entrada al separador tres son 15.0 moles de IC4 y 25.0 de C4. Después de generar una TES de un solo corte, se efectúa el análisis heurístico, del cual se reporta que el único corte posible, ["IC4"/["C4"]], es difícil, por lo que se da paso al modo manual de corte, donde se acepta la realización de dicho corte, en efecto, al final de la secuencia para la corriente de domos del primer separador.

SESS regresa hasta el separador uno para realizar la secuencia de separación en los fondos de dicho separador, que es la última a considerar. Después de generar la MAC para esta corriente, SESS reporta que no es posible aplicar "bypass", determina la TES y realiza el análisis heurístico. Así, el corte ["IC5"/["C5"]], catalogado como difícil, se efectúa manualmente.

TABLA 5.4 SECUENCIA DE SEPARACION FINAL EJEMPLO 1.

Separador *****	Bypass *****	Alimentación *****	Domos *****	Fondos *****
S1	nninguno	5.0 C3 15.0 IC4 25.0 C4 20.0 IC5 35.0 C5	5.0 C3 15.0 IC4 25.0 C4	20.0 IC5 35.0 C5
S2	nninguno	5.0 C3 15.0 IC4 25.0 C4	5.0 C3	15.0 IC4 25.0 C4
S3	nninguno	15.0 IC4 25.0 C4	15.0 IC4	25.0 C4
S4	nninguno	20.0 IC5 35.0 C5	20.0 IC5	35.0 C5



BALANCE DE MATERIA

COMPONENTE	CORRIENTES								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
PROPANO	5.0	5.0	5.0	--	--	--	--	--	--
I-BUTANO	15.0	15.0	--	15.0	15.0	--	--	--	--
N-BUTANO	25.0	25.0	--	25.0	--	25.0	--	--	--
I-PENTANO	20.0	--	--	--	--	--	20.0	20.0	--
N-PENTANO	35.0	--	--	--	--	--	35.0	--	35.0

FIGURA 5.1 DIAGRAMA DE FLUJO EJEMPLO 1.

De esta forma, se obtiene la secuencia de separación para el ejemplo 1, misma que se ilustra en la TABLA 5.4 y se esquematiza en la FIGURA 5.1. Obsérvese que este es el reporte final que genera SESS, en el que se indican los separadores utilizados, el flujo de "bypass" (en caso de aplicarse), los flujos de alimentación para cada componente, y los flujos de domos y fondos.

**EJEMPLO 2:** Separación de una corriente de hidrocarburos clorados.

Este segundo problema se presenta con la finalidad de apreciar la ejecución de SESS cuando, en la corriente a separar, aparece algún componente corrosivo. Los datos necesarios para resolver este problema se muestran en la TABLA 5.5. Obsérvese que la corriente incluye cloruro de hidrógeno gaseoso, componente electrolítico del ácido clorhídrico, cuya corrosividad es muy significativa.

Después de introducir la información del problema, SESS determina la Matriz de Asignación de Componentes (TABLA 5.6) y enseguida reporta que no es posible aplicar "bypass", por lo que el flujo de entrada al primer separador es: 58.0 moles de metano, 52.0 de cloruro de hidrógeno, 30.0 de clorometano, 14.0 de diclorometano y 16.0 de triclorometano. En este momento, SESS determina la Tabla de Especificación de Separación para esta mezcla (TABLA 5.7). En esta tabla se observan los cuatro cortes finos posibles, siendo factibles todos ellos. Aquí, el análisis heurístico inicia, reportando que el cloruro de hidrógeno es un componente corrosivo, pero que no puede ser aislado por su volatilidad intermedia. Por ello, de los cuatro cortes posibles se elige el corte ["MET"]/["HCL","CM","DCM","CF"], por tener el mayor Coeficiente de Facilidad de Separación.

Como se aprecia en el corte realizado, la corriente de domos del separador uno no necesita tratamiento adicional, pues contiene metano puro; en cambio, la corriente de fondos incluye al resto de

TABLA 5.5 ESPECIFICACIONES PARA EL EJEMPLO 2.

Componente	Nombre	Flujo en Productos					Temp. Eb. °C	Valor K
		A	B	C	D	E		
Metano	MET	58	0	0	0	0	-161.5	169.0016
Cloruro de Hidrógeno	HCL	0	52	0	0	0	-85.0	18.5817
Clorometano	CM	0	0	30	0	0	-24.2	2.73548
Cloruro de metileno	DCM	0	0	0	14	0	39.9	0.31799
Cloroformo	CF	0	0	0	0	16	61.2	0.14299

Valores K a 2.0 atm y 298.77 K.

TABLA 5.6 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 2.

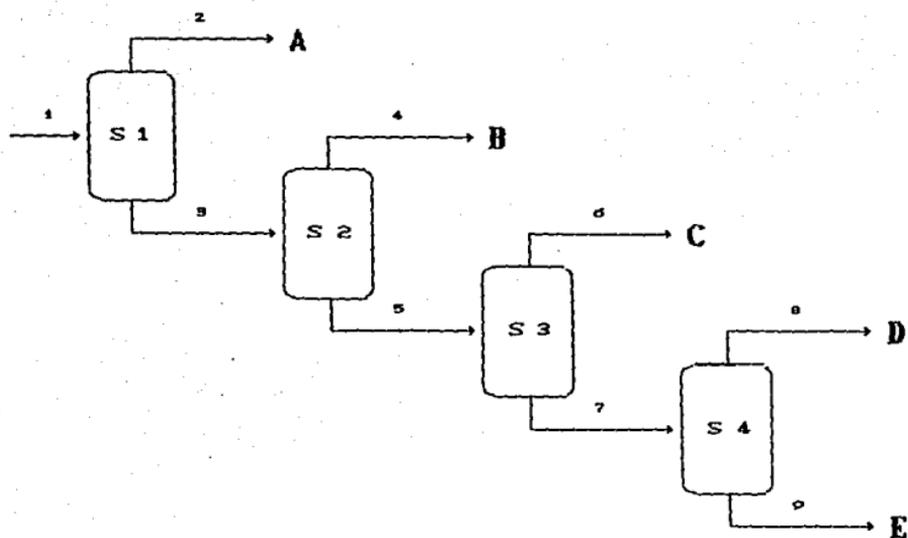
Productos	Flujo Total	Componentes				
		MET	HCL	CM	DCM	CF
***** E	16.0	0.0	0.0	0.0	0.0	16.0
D	14.0	0.0	0.0	0.0	14.0	0.0
C	30.0	0.0	0.0	30.0	0.0	0.0
B	52.0	0.0	52.0	0.0	0.0	0.0
A	58.0	58.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLA 5.7 TABLA DE ESPECIFICACION DE SEPARACION EJEMPLO 2.

Corte: ["MET"]/["HCL", "CM", "DCM", "CF"]		LK/HK: MET/HCL
(d/b) MET	0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) HCL	0.02/0.98	
(d/b) CM	0.02/0.98	
(d/b) DCM	0.02/0.98	
(d/b) CF	0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):76.50		CFS:11.72 Alfa(LK/HK):9.10
*****		
Corte: ["MET", "HCL"]/["CM", "DCM", "CF"]		LK/HK: HCL/CM
(d/b) MET	0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) HCL	0.98/0.02	
(d/b) CM	0.02/0.98	
(d/b) DCM	0.02/0.98	
(d/b) CF	0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):60.80		CFS:9.81 Alfa(LK/HK):6.79
*****		
Corte: ["MET", "HCL", "CM"]/["DCM", "CF"]		LK/HK: CM/DCM
(d/b) MET	0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) HCL	0.98/0.02	
(d/b) CM	0.98/0.02	
(d/b) DCM	0.02/0.98	
(d/b) CF	0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):64.10		CFS:4.06 Alfa(LK/HK):8.60
*****		
Corte: ["MET", "HCL", "CM", "DCM"]/["CF"]		LK/HK: DCM/CF
(d/b) MET	0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) HCL	0.98/0.02	
(d/b) CM	0.98/0.02	
(d/b) DCM	0.98/0.02	
(d/b) CF	0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):21.30		CFS:0.65 Alfa(LK/HK):2.22

TABLA 5.8 SECUENCIA DE SEPARACION FINAL EJEMPLO 2.

Separador *****	Bypass *****	Alimentación *****	Domos *****	Fondos *****
S1	ninguno	58.0 MET 52.0 HCL 30.0 CM 14.0 DCM 16.0 CF	58.0 MET	52.0 HCL 30.0 CM 14.0 DCM 16.0 CF
S2	ninguno	52.0 HCL 30.0 CM 14.0 DCM 16.0 CF	52.0 HCL	30.0 CM 14.0 DCM 16.0 CF
S3	ninguno	30.0 CM 14.0 DCM 16.0 CF	30.0 CM	14.0 DCM 16.0 CF
S4	ninguno	14.0 DCM 16.0 CF	14.0 DCM	16.0 CF



BALANCE DE MATERIA

COMPONENTE	CORRIENTES								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
METANO	58.0	58.0	--	--	--	--	--	--	--
CL. HIDROGENO	52.0	--	52.0	52.0	--	--	--	--	--
CLOROMETANO	30.0	--	30.0	--	30.0	30.0	--	--	--
CL. METILENO	14.0	--	14.0	--	14.0	--	14.0	14.0	--
CLOROFORMO	16.0	--	16.0	--	16.0	--	16.0	--	16.0

FIGURA 5.2 DIAGRAMA DE FLUJO EJEMPLO 2.

los componentes. Para esta corriente, SESS especifica la MAC y reporta que no es posible aplicar "bypass". Enseguida, calcula la TES, indicando los tres cortes finos restantes. En el análisis heurístico se señala inmediatamente que el cloruro de hidrógeno debe ser retirado, realizando para ello el corte ["HCL"]/["CM", "DCM", "CF"].

Nuevamente, la corriente de domos del separador dos es un componente puro, por lo que no necesita tratamiento extra. Para la corriente de fondos se realiza todo el procedimiento, efectuándose en un separador tres el corte ["CM"]/["DCM", "CF"] y en un separador cuatro el corte ["DCM"]/["CF"].

La secuencia final se muestra en la TABLA 5.8. El diagrama de flujo correspondiente se presenta en la FIGURA 5.2. Las características particulares de este ejemplo, propician una separación directa con cortes finos exclusivamente. Sin embargo, la aplicación de las heurísticas se aprecia de manera clara en el caso del componente corrosivo.

### **EJEMPLO 3: Separación de una mezcla de hidrocarburos aromáticos.**

Una de las características más especiales de SESS es su capacidad de manejar corrientes de "bypass" y cortes húmedos durante la síntesis de secuencias de separación. En este ejemplo se muestran precisamente estas dos variantes, sobresaliendo las ventajas que pueden lograrse mediante la aplicación de "bypass" a una fracción del flujo de entrada en un separador determinado, reduciendo la carga másica total de alimentación a dicha columna. Además, este ejemplo permite observar las medidas tomadas por SESS cuando se presenta un corte en el que la volatilidad relativa entre los componentes claves es tan baja que la destilación ordinaria resulta ser un método de separación ineficiente. Los datos de especificaciones de componentes y productos para este ejemplo se muestran en la TABLA 5.9.

TABLA 5.9 ESPECIFICACIONES PARA EL EJEMPLO 3.

Componente	Nombre	Flujo en Productos				Temp. Eb. °C	Valor K
		A	B	C	D		
Benceno	BE	10	0	0	0	80.1	3.0022
Tolueno	TO	0	10	0	0	110.8	1.4982
p-Xileno	PX	0	0	20	0	138.5	0.7460
m-Xileno	MX	0	0	20	0	139.3	0.7281
o-Xileno	OX	0	0	20	20	144.0	0.6381

Valores K a 1.5 atm y 415.4 K.

TABLA 5.10 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 3.

Productos	Flujo Total	Componentes				
		BE	TO	PX	MX	OX
*****	*****	*****				
D	20.0	0.0	0.0	0.0	0.0	20.0
C	80.0	0.0	0.0	20.0	20.0	20.0
B	10.0	0.0	10.0	0.0	0.0	0.0
A	10.0	10.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Como en todos los casos, SESS inicia la síntesis presentando la Matriz de Asignación de Componentes inicial para la mezcla. En esta matriz, ilustrada en la TABLA 5.10, se observa una diferencia con respecto a las matrices de los ejemplos anteriores: existe un componente, en este caso el o-xileno, que se distribuye en más de un producto, surgiendo así la opción de realizar cortes húmedos en la MAC.

Al continuar la ejecución, SESS reporta que no es posible aplicar "bypass" en esta matriz, siendo el flujo de alimentación al separador uno de la secuencia 10.0 moles de benceno, 10.0 de tolueno, 20.0 de p-xileno, 20.0 de m-xileno y 40.0 de o-xileno. Después de este reporte, SESS determina la Tabla de Especificación de Separación para este primer separador, ilustrada en la TABLA 5.11. En esta TES destacan dos factores: primero, se etiqueta el corte ["BE", "TO", "PX"] / ["MX", "OX"] para destilación extractiva; segundo, además de los acostumbrados cortes finos entre componentes, se incluye un corte húmedo ["A", "B", "C"] / ["D"]. En la TES, el hecho de que un corte se etiquete para destilación extractiva significa que la volatilidad relativa entre los componentes claves del corte es tan baja (menor que 1.10) que la destilación ordinaria no es costeable, siendo recomendable en cambio procesos alternativos, tales como la destilación extractiva. En el ejemplo analizado, esta situación no tiene mayor importancia, puesto que no se desean separar los isómeros para-xileno y meta-xileno. Cuando este no sea el caso, SESS simplemente recomendará que el corte no puede analizarse y lo excluirá de consideración. En lo que respecta a los cortes húmedos, éstos son posibles cuando se tiene distribución de algún componente en más de un producto, como es el caso del orto-xileno en este ejemplo. Retornando al análisis de SESS, todos los cortes de la TES, con excepción del corte etiquetado para destilación extractiva, son factibles termodinámicamente.

TABLA 5.11 TABLA DE ESPECIFICACION DE SEPARACION EJEMPLO 3.

Corte: ["BE"]/["TO", "PX", "MX", "OX"]		LK/HK: BE/TO
(d/b) BE	0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) TO	0.02/0.98	
(d/b) PX	0.02/0.98	
(d/b) MX	0.02/0.98	
(d/b) OX	0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C): 30.70		CFS: 1.01 Alfa(LK/HK): 2.00
*****		
Corte: ["BE", "TO"]/["PX", "MX", "OX"]		LK/HK: TO/PX
(d/b) BE	0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) TO	0.98/0.02	
(d/b) PX	0.02/0.98	
(d/b) MX	0.02/0.98	
(d/b) OX	0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C): 27.70		CFS: 2.05 Alfa(LK/HK): 2.01
*****		
Corte: ["BE", "TO", "PX"]/["MX", "OX"]		LK/HK: PX/MX
(d/b) BE	0.98/0.02	Estado: destilación
(d/b) TO	0.98/0.02	extraíctiva
(d/b) PX	0.98/0.02	
(d/b) MX	0.02/0.98	
(d/b) OX	0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C): 0.80		CFS: 0.00 Alfa(LK/HK): 1.02
*****		
Corte: ["BE", "TO", "PX", "MX"]/["OX"]		LK/HK: MX/OX
(d/b) BE	0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) TO	0.98/0.02	
(d/b) PX	0.98/0.02	
(d/b) MX	0.98/0.02	
(d/b) OX	0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C): 4.70		CFS: 0.93 Alfa(LK/HK): 1.14
*****		
Corte: ["A", "B", "C"]/["D"]		LK/HK: MX/OX
(d/b) BE	1.00/0.00	Estado: factible
(d/b) TO	1.00/0.00	
(d/b) PX	0.99/0.01	
(d/b) MX	0.98/0.02	
(d/b) OX	0.50/0.50	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C): 4.70		CFS: 0.70 Alfa(LK/HK): 1.14

El análisis heurístico en este problema es muy amplio. Primero, la heurística M1 reporta que el corte ["BE", "TO", "PX"] / ["MX", "OX"] debe efectuarse con algún proceso de separación alternativo. La heurística S2 señala, a su vez, que el corte fino ["BE", "TO", "PX", "MX"] / ["OX"] y el corte húmedo ["A", "B", "C"] / ["D"] son difíciles, pues tienen una diferencia de temperaturas de ebullición entre los componentes claves de 4.7, destinándolos al final de la secuencia. Enseguida, la heurística C1 indica que el producto más abundante es C, y que los cortes ["BE", "TO", "PX"] / ["MX", "OX"] y ["BE", "TO", "PX", "MX"] / ["OX"] violan tal heurística, por lo que SESS pregunta si se desean eliminar o mantenerlos en consideración. Siguiendo las recomendaciones heurísticas, se eliminan ambos cortes para respetar C1. Finalmente, de los cinco cortes de la TES, la heurística C2 solamente analiza los cortes ["BE"] / ["TO", "PX", "MX", "OX"] y ["BE", "TO"] / ["PX", "MX", "OX"], escogándose este último, por tener un mayor CFS.

La síntesis continúa con la MAC para la corriente de domos del separador uno, conteniendo benceno y tolueno. SESS indica que no es posible el "bypass" en esta MAC y muestra el flujo de entrada al separador dos (10.0 moles de benceno y 10.0 de tolueno). Después, SESS genera la TES para este separador, la cual incluye solamente el corte fino ["BE"] / ["TO"]. Como es evidente, el análisis heurístico concluye con la realización de este corte.

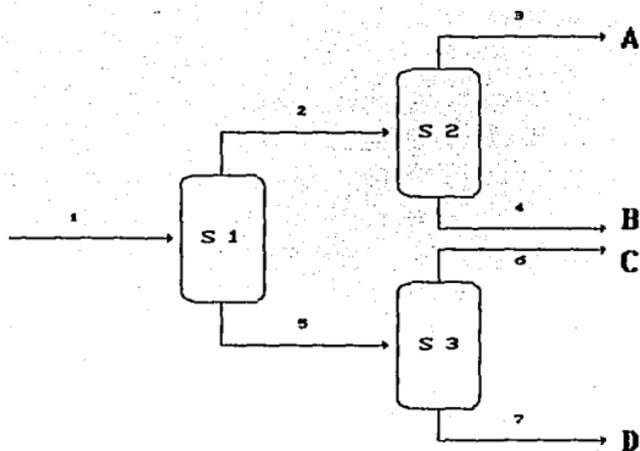
La ejecución retorna entonces a la corriente de fondos del separador uno. SESS desarrolla la MAC para esta corriente (TABLA 5.12) y reporta que el producto C incluye todos los componentes, por lo que puede ser sometido a "bypass". Como primera opción, se omite el "bypass" para esta MAC. SESS genera entonces la TES para este separador, la cual incluye los cortes ["PX"] / ["MX", "OX"] (destilación extractiva), ["PX", "MX"] / ["OX"] y ["C"] / ["D"]. El análisis heurístico elimina el primer corte y etiqueta los dos últimos como difíciles. De manera particular, la heurística C1 reporta que el producto C es el más abundante, pero como incluye

TABLA 5.12 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 3.  
ENTRADA AL SEPARADOR TRES SIN "BYPASS".

Productos	Flujo Total	PX	MX	OX
*****	*****	*****		
D	20.0	0.0	0.0	20.0
C	60.0	20.0	20.0	20.0

TABLA 5.13 SECUENCIA DE SEPARACION FINAL EJEMPLO 3.  
SIN "BYPASS" EN EL SEPARADOR TRES.

Separador	Bypass	Alimentación	Domas	Fondos
*****	*****	*****	*****	*****
S1	ninguno	10.0 BE 10.0 TO 20.0 PX 20.0 MX 40.0 OX	10.0 BE 10.0 TO	20.0 PX 20.0 MX 40.0 OX
S2	ninguno	10.0 BE 10.0 TO	10.0 BE	10.0 TO
S3	ninguno	20.0 PX 20.0 MX 40.0 OX	20.0 PX 20.0 MX 20.0 OX	20.0 OX



BALANCE DE MATERIA

COMPONENTE	CORRIENTES						
	1	2	3	4	5	6	7
BENCENO	10.0	10.0	10.0	--	--	--	--
TOLUENO	10.0	10.0	--	10.0	--	--	--
p-XILENO	20.0	--	--	--	20.0	20.0	--
m-XILENO	20.0	--	--	--	20.0	20.0	--
o-XILENO	40.0	--	--	--	40.0	20.0	20.0

FIGURA 5.3 DIAGRAMA DE FLUJO EJEMPLO 3.  
SIN BYPASS EN EL SEPARADOR TRES

todos los componentes, la heurística no aplica. Finalmente, la búsqueda heurística termina y SESS da la opción de búsqueda manual. En esta forma, se realiza el corte ["C"]/["D"], con lo cual termina la síntesis. Nótese que si se elige el corte ["PX", "MX"]/["OX"], se separa todo el orto-xileno para luego mezclar la mitad del total con los otros dos isómeros, resultando un corte innecesario. La secuencia final para este problema se presenta en la TABLA 5.13 y en la FIGURA 5.3.

Retornando a la corriente de fondos del separador uno, SESS indicó que el "bypass" era posible en este caso. El "bypass" está sujeto al balance de materia. Para esta corriente, el flujo de entrada al separador tres es de 20.0 moles de para-xileno, 20.0 de meta-xileno y 40.0 de orto-xileno. De acuerdo a la MAC mostrada en la TABLA 5.12, se puede someter a "bypass" el total de para-xileno y de meta-xileno, pero solamente la mitad de orto-xileno, esto para poder cumplir con el balance de materia en los productos C y D. Debido a esta condición, el componente limitante en el "bypass" es el orto-xileno. Si se especifica un "bypass" de 100% al producto C, esto significa que solamente entrarán al separador tres 10.0 moles de para-xileno, 10.0 de meta-xileno y 20.0 de orto-xileno, mientras que el resto del flujo se mandará en "bypass" directamente al producto C. Después de especificar el 100% de "bypass" para el producto C, SESS genera una nueva MAC (TABLA 5.14), en la que se muestran los flujos que no fueron enviados a "bypass". Al final del análisis heurístico para este caso, se realiza manualmente el corte ["PX", "MX"]/["OX"], terminando así la síntesis. La secuencia final para este segundo enfoque se muestra en la TABLA 5.15 y en la FIGURA 5.4.

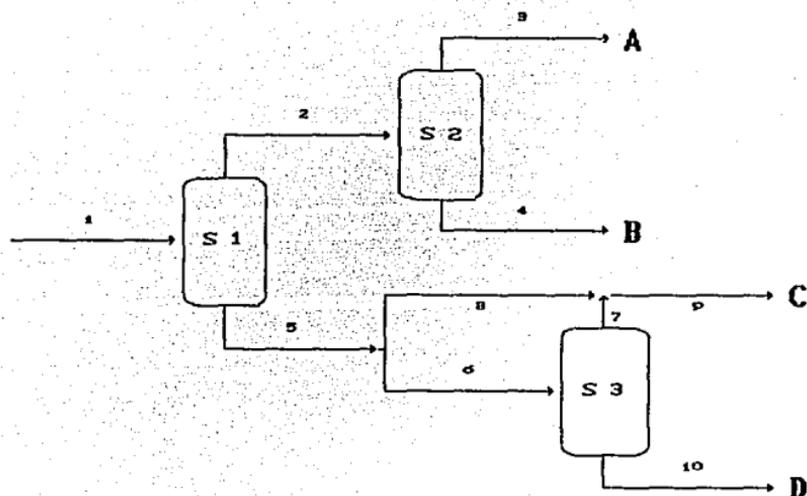
Comparando las secuencias de las FIGURAS 5.3 y 5.4, se advierte que esencialmente son las mismas, pero en la secuencia de la FIGURA 5.4, en donde se aplica "bypass" a la corriente de alimentación al separador tres, se reduce un 50% la carga másica de alimentación, lo cual resulta en un diseño más económico.

TABLA 5.14 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 3.  
ENTRADA AL SEPARADOR TRES CON "BYPASS".

Productos	Flujo Total	PX	MX	OX
D	20.0	0.0	0.0	20.0
C	20.0	10.0	10.0	0.0

TABLA 5.15 SECUENCIA DE SEPARACION FINAL EJEMPLO 3.  
CON "BYPASS" EN EL SEPARADOR TRES.

Separador	Bypass	Alimentación	Domos	Fondos
S1	ninguno	10.0 BE 10.0 TO 20.0 PX 20.0 MX 40.0 OX	10.0 BE 10.0 TO	20.0 PX 20.0 MX 40.0 OX
S2	ninguno	10.0 BE 10.0 TO	10.0 BE	10.0 TO
S3	C: 10.0 PX 10.0 MX 20.0 OX	10.0 PX 10.0 MX 20.0 OX	10.0 PX 10.0 MX	20.0 OX



BALANCE DE MATERIA

COMPONENTE	CORRIENTES									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
BENCENO	10.0	10.0	10.0	--	--	--	--	--	--	--
TOLUENO	10.0	10.0	--	10.0	--	--	--	--	--	--
p-XILENO	20.0	--	--	--	20.0	10.0	10.0	10.0	20.0	--
m-XILENO	20.0	--	--	--	20.0	10.0	10.0	10.0	20.0	--
o-XILENO	40.0	--	--	--	40.0	20.0	--	20.0	20.0	20.0

FIGURA 5.4 DIAGRAMA DE FLUJO EJEMPLO 3.  
CON BYPASS EN EL SEPARADOR TRES

**EJEMPLO 4:** Separación de hidrocarburos ligeros en productos combinados.

Con este ejemplo se pretende detallar más las separaciones con cortes húmedos, así como plantear una base de referencia para los dos ejemplos siguientes con manejo de pseudoproductos y desarrollo de secuencias alternativas. La información técnica requerida para este problema se presenta en la TABLA 5.16.

Una vez introducida la información, SESS crea la Matriz de Asignación de Componentes, la cual se muestra en la TABLA 5.17. En esta matriz se observa que todos los componentes se distribuyen en más de un producto, de forma que se presentan diversas separaciones húmedas. En el análisis de "bypass", se reporta que no es posible el "bypass" para esta MAC. SESS continúa entonces con la Tabla de Especificación de Separación (TABLA 5.18), en la que se indican los tres cortes finos posibles y seis cortes húmedos. Mientras que todos los cortes finos son factibles, solamente dos cortes húmedos lo son, pues los otros cuatro presentan distribución de componentes no claves. Para los cinco cortes factibles, SESS aplica el análisis heurístico, al final del cual se efectúa el corte húmedo ["A","B"/["C","D"]], por tener el mayor CFS y favorecer la división 50/50.

SESS ahora se dirige a analizar la corriente de domos del primer separador, la cual contiene 25.0 moles de butano, 25.0 de pentano y 5.0 de hexano. Para esta corriente es posible aplicar "bypass", puesto que el producto A incluye todos los componentes. Al especificar un 100% de "bypass", SESS reporta que el flujo de entrada al separador dos es de 12.5 moles de butano, 12.5 de pentano y 2.5 de hexano, mientras que el resto de la corriente se envía directamente al producto A. Después de esto, SESS crea la TES correspondiente, en la que se incluyen dos cortes finos (ambos factibles) y un corte húmedo (no factible). Nuevamente, para los cortes factibles SESS aplica el análisis heurístico. En este caso, el corte fino ["C4"/["C5","C6"]] viola la heurística C1, pues el

TABLA 5.16 ESPECIFICACIONES PARA EL EJEMPLO 4.

Componente	Nombre	Flujo en Productos				Temp. Eb. °C	Valor K
		A	B	C	D		
Butano	C4	15	10	0	0	-0.49	1.3
Pentano	C5	12.5	12.5	0	0	36.08	0.39
Hexano	C6	5	0	20	0	68.75	0.14
Heptano	C7	0	0	10	15	98.44	0.05

Valores K a 4.6 atm y 365.35 K.

TABLA 5.17 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 4.

Productos	Flujo Total	Componentes			
		C4	C5	C6	C7
*****	*****	*****	*****	*****	*****
D	15.0	0.0	0.0	0.0	15.0
C	30.0	0.0	0.0	20.0	10.0
B	22.5	10.0	12.5	0.0	0.0
A	32.5	15.0	12.5	5.0	0.0

TABLA 5.18 TABLA DE ESPECIFICACION DE SEPARACION EJEMPLO 4.

Corte: ["C4"/["C5", "C6", "C7"]	LK/HK: C4/C5
Cd/b) C4 0.98/0.02	Estado: factible
Cd/b) C5 0.02/0.98	
Cd/b) C6 0.02/0.98	
Cd/b) C7 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):36.57 CFS:3.61 Alfa(LK/HK):3.33	*****
Corte: ["C4", "C5"/["C6", "C7"]	LK/HK: C5/C6
Cd/b) C4 0.98/0.02	Estado: factible
Cd/b) C5 0.98/0.02	
Cd/b) C6 0.02/0.98	
Cd/b) C7 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):32.67 CFS:9.66 Alfa(LK/HK):2.79	*****
Corte: ["C4", "C5", "C6"/["C7"]	LK/HK: C6/C7
Cd/b) C4 0.98/0.02	Estado: factible
Cd/b) C5 0.98/0.02	
Cd/b) C6 0.98/0.02	
Cd/b) C7 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):29.69 CFS:2.93 Alfa(LK/HK):2.80	*****
Corte: ["A"/["B", "C", "D"]	LK/HK: C4/C5
Cd/b) C4 0.60/0.40	Estado: no factible
Cd/b) C5 0.50/0.50	
Cd/b) C6 0.41/0.59	
Cd/b) C7 0.33/0.67	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):36.57 CFS:0.00 Alfa(LK/HK):3.33	*****
Corte: ["A"/["B", "C", "D"]	LK/HK: C6/C6
Cd/b) C4 0.84/0.16	Estado: no factible
Cd/b) C5 0.50/0.50	
Cd/b) C6 0.20/0.80	
Cd/b) C7 0.06/0.94	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):32.67 CFS:0.00 Alfa(LK/HK):2.79	*****
Corte: ["A"/["B", "C", "D"]	LK/HK: C6/C7
Cd/b) C4 0.98/0.02	Estado: no factible
Cd/b) C5 0.75/0.25	
Cd/b) C6 0.20/0.80	
Cd/b) C7 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):29.69 CFS:0.00 Alfa(LK/HK):2.80	

TABLA 5.18 TABLA DE ESPECIFICACION DE SEPARACION EJEMPLO 4.  
(CONTINUACION)

Corte: ["A", "B"]/["C", "D"]	LK/HK: C5/C6
Cd/b) C4 1.00/0.00	Estado: factible
Cd/b) C5 0.98/0.02	
Cd/b) C6 0.20/0.80	
Cd/b) C7 0.00/1.00	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):32.67	CFS:11.66 Alfa(LK/HK):2.79
*****	*****
Corte: ["A", "B"]/["C", "D"]	LK/HK: C6/C7
Cd/b) C4 0.98/0.02	Estado: no factible
Cd/b) C5 0.75/0.25	
Cd/b) C6 0.20/0.80	
Cd/b) C7 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):29.69	CFS:0.00 Alfa(LK/HK):2.80
*****	*****
Corte: ["A", "B", "C"]/["D"]	LK/HK: C6/C7
Cd/b) C4 1.00/0.00	Estado: factible
Cd/b) C5 1.00/0.00	
Cd/b) C6 0.98/0.02	
Cd/b) C7 0.40/1.60	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):29.69	CFS:2.81 Alfa(LK/HK):2.80

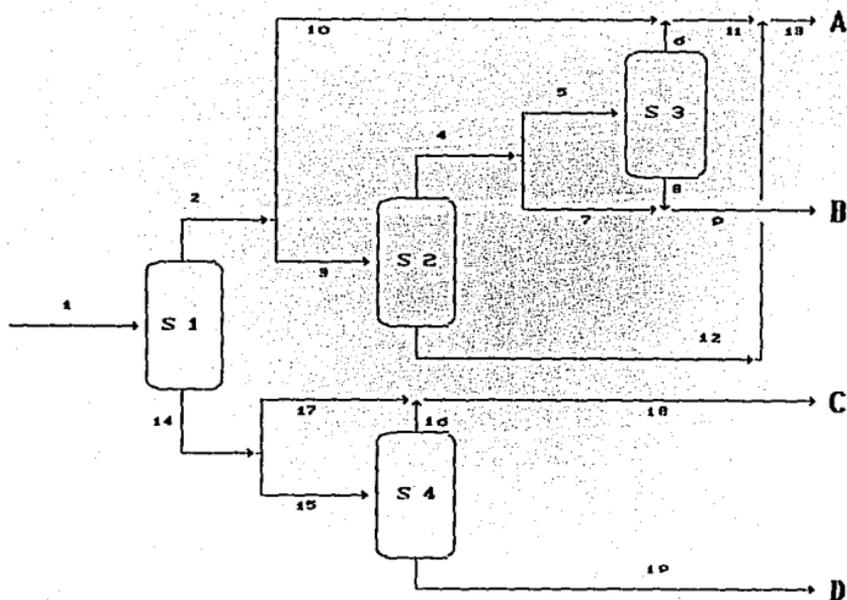
TABLA 5.19 SECUENCIA DE SEPARACION FINAL EJEMPLO 4.

Separador	Bypass	Alimentación	Domos	Fondos
*****	*****	*****	*****	*****
S1	ninguno	25.0 C4 25.0 C5 25.0 C6 25.0 C7	25.0 C4 25.0 C5 5.0 C6	20.0 C6 25.0 C7
S2	A:12.5 C4 12.5 C5 2.5 C6	12.5 C4 12.5 C5 2.5 C6	12.5 C4 12.5 C5	2.5 C6
S3	B:10.0 C4 10.0 C5	2.5 C4 2.5 C5	2.5 C4	2.5 C5
S4	C: 8.0 C6 10.0 C7	12.0 C6 15.0 C7	12.0 C6	15.0 C7

producto B es el más abundante y este corte no lo favorece, de tal forma que debe ser eliminado del análisis. Al final, SESS recomienda el corte ["C4","C5"/["C6"]], que en realidad es el único posible en este separador.

Para seguir la síntesis, SESS se dirige a la corriente de fondos del separador dos, que contiene 12.5 moles de butano y 12.5 de pentano. Después de generar la MAC, SESS reporta que el producto B incluye todos los componentes, por lo que puede aplicarse "bypass" en esta matriz. Un 100% de "bypass" envía 10.0 moles de butano y 10.0 de pentano directamente al producto B, y 2.5 moles de butano y 2.5 de pentano al separador tres. Para esta última corriente se determina la TES, que contiene un solo corte fino, ["C4"/["C5"]], el cual se realiza al final del análisis heurístico.

En este punto, SESS regresa a la corriente de fondos del separador tres, incluyendo un componente puro, por lo que no necesita tratamiento adicional. Así, SESS regresa a la corriente de fondos del separador dos, misma que tampoco necesita tratamiento extra, pues contiene hexano puro. Finalmente, SESS se dirige a la corriente de fondos del separador uno, la cual contiene 20.0 moles de hexano y 25.0 moles de heptano. Para esta corriente, SESS determina la MAC y reporta que el producto C incluye todos los componentes, siendo posible el "bypass". Un "bypass" de 100% envía directamente al producto C, 8.0 moles de C6 y 10.0 moles de C7, alimentando al separador cuatro, 12.0 moles de C6 y 15.0 de C7. Tras el desarrollo de la TES y la aplicación del análisis heurístico, el único corte restante, ["C6"/["C7"]] es realizado, con lo que la síntesis termina y la secuencia queda completa. Esta secuencia final puede apreciarse en la TABLA 5.19 y en la FIGURA 5.5.



BALANCE DE MATERIA

COMPONENTE	CORRIENTES									
	1	2	9	4	5	6	7	8	10	10
BUTANO	25.0	25.0	12.5	12.5	2.5	2.5	10.0	--	10.0	12.5
PENTANO	25.0	25.0	12.5	12.5	2.5	--	10.0	2.5	12.5	12.5
HEXANO	25.0	5.0	2.5	--	--	--	--	--	--	2.5
HEPTANO	25.0	--	--	--	--	--	--	--	--	--

COMPONENTE	CORRIENTES								
	11	12	13	14	15	16	17	18	19
BUTANO	15.0	--	15.0	--	--	--	--	--	--
PENTANO	12.5	--	12.5	--	--	--	--	--	--
HEXANO	2.5	2.5	5.0	20.0	12.0	12.0	8.0	20.0	--
HEPTANO	--	--	--	25.0	15.0	--	10.0	10.0	15.0

FIGURA 5.5 DIAGRAMA DE FLUJO EJEMPLO 4.

**EJEMPLO 5:** Separación de hidrocarburos ligeros en productos combinados utilizando transformación a pseudoproductos.

El empleo de pseudoproductos hace posible que algunos cortes, no factibles bajo otras condiciones, se hagan factibles y sean considerados en el análisis heurístico. En este ejemplo se introduce esta característica, modificando el ejemplo anterior para este propósito. La información requerida se reúne en la TABLA 5.20. Obsérvese que los productos denominados  $A^*$  y  $A'$  son realmente pseudoproductos de A, es decir, una vez obtenidos en la separación de la mezcla, estos pseudoproductos se combinan para dar el producto final A.

SESS inicia el trabajo con el desarrollo de la Matriz de Asignación de Componentes (TABLA 5.21). Al comparar esta matriz con la del ejemplo anterior (TABLA 5.17), se advierte que la suma de los flujos para los productos  $A^*$  y  $A'$  en aquella, es equivalente a los flujos para el producto A en ésta. A continuación, SESS reporta que no es posible aplicar "bypass" en esta MAC, y sigue con la creación de la Tabla de Especificación de Separación, mostrada en la TABLA 5.22. En esta tabla se observan los tres cortes finos posibles y seis cortes húmedos, al igual que en el ejemplo anterior, pero esta vez cinco cortes húmedos son factibles, mientras que en el ejemplo anterior eran solamente dos. Esta diferencia se debe precisamente al uso de pseudoproductos. Después de completar la TES, el sistema experto efectúa el análisis heurístico. Aquí, se identifica el producto C como el más abundante, mencionando que los cortes [{"A\*"} / {"B", "A'", "C", "D"}] (con componentes claves C4/C5 y C5/C6), [{"A\*", "B"} / {"A'", "C", "D"}] (con componentes claves C4/C5) y [{"C4", "C5", "C6"} / {"C7"}], violan la heurística C1, por lo que se recomienda eliminarlos del análisis. De esta forma, quedan cuatro cortes, de los cuales SESS recomienda el corte húmedo [{"A\*", "B", "A'"} / {"C", "D"}], con componentes claves C5/C6, un CFS de 11.66 y una razón de flujos de 55/45. Este corte se acepta y se realiza en el primer separador.

TABLA 5.20 ESPECIFICACIONES PARA EL EJEMPLO 5.

Componente	Nombre	Flujo en Productos					Temp. Eb. °C	Valor K
		A*	B	A'	C	D		
Butano	C4	15	10	0	0	0	-0.49	1.3
Pentano	C5	0	12.5	12.5	0	0	36.08	0.39
Hexano	C6	0	0	5	20	0	68.75	0.14
Heptano	C7	0	0	0	10	15	98.44	0.05

Valores K a 4.6 atm y 365.35 K.

TABLA 5.21 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 5.

Productos	Flujo Total	Componentes			
		C4	C5	C6	C7
*****	*****	*****	*****	*****	*****
D	15.0	0.0	0.0	0.0	15.0
C	30.0	0.0	0.0	20.0	10.0
A'	17.5	0.0	12.5	5.0	0.0
B	22.5	10.0	12.5	0.0	0.0
A*	15.0	15.0	0.0	0.0	0.0

TABLA 5.22 TABLA DE ESPECIFICACION DE SEPARACION EJEMPLO 5.

Corte: ["C4"]/["C5", "C6", "C7"]	LK/HK: C4/C5
(d/b) C4 0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) C5 0.02/0.98	
(d/b) C6 0.02/0.98	
(d/b) C7 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):36.57 CFS:3.61 Alfa(LK/HK):3.33	*****
Corte: ["C4", "C5"]/["C6", "C7"]	LK/HK: C5/C6
(d/b) C4 0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) C5 0.98/0.02	
(d/b) C6 0.02/0.98	
(d/b) C7 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):32.67 CFS:9.66 Alfa(LK/HK):2.79	*****
Corte: ["C4", "C5", "C6"]/["C7"]	LK/HK: C6/C7
(d/b) C4 0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) C5 0.98/0.02	
(d/b) C6 0.98/0.02	
(d/b) C7 0.02/0.98	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):29.69 CFS:2.93 Alfa(LK/HK):2.80	*****
Corte: ["A", "B"]/["A'", "C", "D"]	LK/HK: C4/C5
(d/b) C4 0.60/0.40	Estado: factible
(d/b) C5 0.02/0.98	
(d/b) C6 0.00/1.00	
(d/b) C7 0.00/1.00	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):36.57 CFS:3.46 Alfa(LK/HK):3.33	*****
Corte: ["A", "B"]/["A'", "C", "D"]	LK/HK: C4/C5
(d/b) C4 0.98/0.02	Estado: factible
(d/b) C5 0.50/0.50	
(d/b) C6 0.04/0.96	
(d/b) C7 0.00/1.00	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):36.57 CFS:12.98 Alfa(LK/HK):3.33	*****
Corte: ["A", "B"]/["A'", "C", "D"]	LK/HK: C5/C6
(d/b) C4 0.99/0.01	Estado: factible
(d/b) C5 0.50/0.50	
(d/b) C6 0.02/0.98	
(d/b) C7 0.00/1.00	
LK/HK Dif.de Temperaturas (°C):32.67 CFS:11.60 Alfa(LK/HK):2.79	

TABLA 5.22 TABLA DE ESPECIFICACION DE SEPARACION EJEMPLO 5.  
(CONTINUACION)

Corte: ["A", "B", "A"] / ["C", "D"]		LK/HK: C5/C6
(d/b) C4	1.00/0.00	Estado: factible
(d/b) C5	0.98/0.02	
(d/b) C6	0.20/0.80	
(d/b) C7	0.00/1.00	
LK/HK Dif. de Temperaturas (°C): 32.67		CFS: 11.66 Alfa(LK/HK): 2.79
*****		
Corte: ["A", "B", "A"] / ["C", "D"]		LK/HK: C6/C7
(d/b) C4	0.98/0.02	Estado: no factible
(d/b) C5	0.75/0.25	
(d/b) C6	0.20/0.80	
(d/b) C7	0.02/0.98	
LK/HK Dif. de Temperaturas (°C): 29.69		CFS: 0.00 Alfa(LK/HK): 2.80
*****		
Corte: ["A", "B", "A", "C"] / ["D"]		LK/HK: C6/C7
(d/b) C4	1.00/0.00	Estado: factible
(d/b) C5	1.00/0.00	
(d/b) C6	0.98/0.02	
(d/b) C7	0.40/1.60	
LK/HK Dif. de Temperaturas (°C): 29.69		CFS: 2.81 Alfa(LK/HK): 2.80

TABLA 5.23 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 5.  
CORRIENTE DE DOMOS DEL SEPARADOR UNO ANTES DEL "BYPASS".

Productos	Flujo Total	Componentes		
		C4	C5	C6
*****	*****	*****	*****	*****
A'	17.5	0.0	12.5	5.0
B	22.5	10.0	12.5	0.0
AM	15.0	15.0	0.0	0.0

SESS trabaja ahora con la corriente de domos del separador uno, desarrollando la MAC que se muestra en la TABLA 5.23. A simple vista, en esta MAC no hay productos que incluyan todos los componentes; sin embargo, los productos A\* y A' son realmente pseudoproductos de A, y su combinación sí incluye todos los componentes. SESS descubre esto y reporta que el "bypass" es posible. Después de especificar un 100% de "bypass", SESS determina la nueva MAC (TABLA 5.24), desarrolla una TES con tres cortes factibles y aplica heurísticas. En este caso, se identifica el producto B como el más abundante, por lo que el corte ["C4"/["C5", "C6"]] debe ser eliminado del análisis. De esta forma, queda solamente el corte húmedo ["A\*"/["B", "A'"]], el cual es aceptado.

SESS revisa la corriente de domos del separador anterior y encuentra que no necesita tratamiento adicional. Se dirige entonces a la corriente de fondos de este segundo separador y desarrolla la nueva MAC, reporta que el "bypass" no es posible, genera una TES con dos cortes finos factibles y aplica heurísticas. Aquí, se identifica una vez más el producto B como el más abundante, por lo que el corte ["C4"/["C5", "C6"]] debe eliminarse para no violar la heurística C1. Así, queda solamente el corte ["C4", "C5"/["C6"]], el cual se realiza en el separador tres.

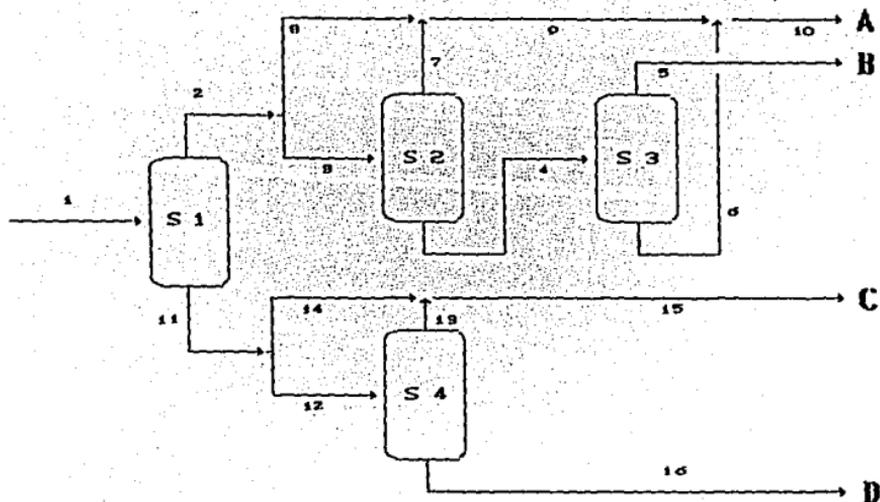
SESS encuentra que ninguna de las dos corrientes de salida del separador tres necesitan tratamiento adicional, regresando entonces a la corriente de fondos del separador uno. Para esta corriente, SESS crea la MAC y reporta que es posible aplicar "bypass", ya que el producto C incluye todos los componentes de la MAC. Se especifica un 100% de "bypass" y SESS continúa con la TES, en donde se reporta un solo corte fino factible, ["C6"/["C7"]]. Al final del análisis heurístico, este corte se acepta para realizarse en el separador cuatro, con el que la síntesis termina.

**TABLA 5.24 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 5. CORRIENTE DE DOMOS DEL SEPARADOR UNO DESPUES DEL "BYPASS".**

Productos	Flujo Total	Componentes		
		C4	C5	C6
*****	*****	*****	*****	*****
A'	2.5	0.0	0.0	2.5
B	22.5	10.0	12.5	0.0
AM	2.5	2.5	0.0	0.0

**TABLA 5.25 SECUENCIA DE SEPARACION FINAL EJEMPLO 5.**

Separador	Bypass	Alimentación	Domos	Fondos
*****	*****	*****	*****	*****
S1	ninguno	25.0 C4 25.0 C5 25.0 C6 25.0 C7	25.0 C4 25.0 C5 5.0 C6	20.0 C6 25.0 C7
S2	A: 12.5 C4 12.5 C5 2.5 C6	12.5 C4 12.5 C5 2.5 C6	2.5 C4	10.0 C4 12.5 C5 2.5 C6
S3	ninguno	10.0 C4 12.5 C5 2.5 C6	10.0 C4 12.5 C5	2.5 C6
S4	C: 8.0 C6 10.0 C7	12.0 C6 15.0 C7	12.0 C6	15.0 C7



BALANCE DE MATERIA

COMPONENTE	CORRIENTES									
	1	2	8	4	5	6	7	8	9	10
BUTANO	25.0	25.0	12.5	10.0	10.0	--	2.5	12.5	15.0	15.0
PENTANO	25.0	25.0	12.5	12.5	12.5	--	--	12.5	12.5	12.5
HEXANO	25.0	5.0	2.5	2.5	--	2.5	--	2.5	2.5	5.0
HEPTANO	25.0	--	--	--	--	--	--	--	--	--

COMPONENTE	CORRIENTES					
	11	12	13	14	15	16
BUTANO	--	--	--	--	--	--
PENTANO	--	--	--	--	--	--
HEXANO	20.0	12.0	12.0	8.0	20.0	--
HEPTANO	25.0	15.0	--	10.0	10.0	15.0

FIGURA 5.6 DIAGRAMA DE FLUJO EJEMPLO 5.

La secuencia final para este ejemplo se muestra en la TABLA 5.25 (diagrama de flujo en la FIGURA 5.6). En este caso, el manejo de pseudoproductos no implica adicionar un separador extra a la secuencia y, por tanto, no es contraproducente.

#### EJEMPLO 6: Generación de secuencias de separación alternativas.

SESS no está limitado a la síntesis heurística de secuencias de separación. Aunque la síntesis heurística genera usualmente diseños óptimos o muy cercanos al óptimo, muchas veces es conveniente desarrollar secuencias alternativas que también pueden producir diseños económicamente atractivos. Para esta tarea, SESS permite omitir el análisis heurístico, cuando así se desee, y efectuar separaciones manualmente. En este ejemplo, se retoma el problema introducido en el ejemplo 4, con la finalidad de sintetizar una secuencia de separación alternativa. Las especificaciones de componentes y productos son las mismas que se presentan en la TABLA 5.16.

Después de introducir la información, SESS genera la Matriz de Asignación de Componentes mostrada en la TABLA 5.17, reporta que el "bypass" no es posible en esta matriz y desarrolla la Tabla de Especificación de Separación. En este momento, SESS inicia el análisis heurístico. A diferencia del ejemplo 4, en donde se eligió un corte heurísticamente, en este ejemplo se elige manualmente el corte ["C4","C5","C6"]/"C7", para ser realizado en el separador uno.

Enseguida, SESS genera una nueva MAC, mostrada en la TABLA 5.26. El análisis de "bypass" reporta que el producto A incluye todos los componentes de la matriz y puede aplicarse "bypass". Con un 100% de "bypass", SESS desarrolla la MAC modificada (TABLA 5.27). Aquí, SESS determina la TES y aplica heurísticas, recomendando el corte ["C4"]/"C5","C6", el cual no se acepta. En cambio, se realiza manualmente el corte ["C4","C5"]/"C6",

**TABLA 5.26 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 6.  
CORRIENTE DE DOMOS DEL SEPARADOR UNO ANTES DEL "BYPASS".**

Productos	Flujo Total	Componentes		
		C4	C5	C6
*****	*****	*****	*****	*****
C	20.0	0.0	0.0	20.0
B	22.5	10.0	12.5	0.0
A	32.5	15.0	12.5	5.0

**TABLA 5.27 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 6.  
CORRIENTE DE DOMOS DEL SEPARADOR UNO DESPUES DEL "BYPASS".**

Productos	Flujo Total	Componentes		
		C4	C5	C6
*****	*****	*****	*****	*****
C	20.0	0.0	0.0	20.0
B	22.5	10.0	12.5	0.0
A	17.5	10.0	7.5	0.0

**TABLA 5.28 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 6.  
CORRIENTE DE DOMOS DEL SEPARADOR DOS ANTES DEL "BYPASS".**

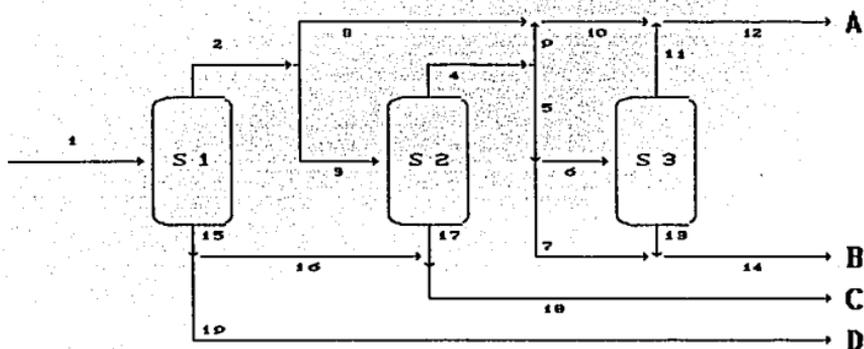
Productos	Flujo Total	Componentes	
		C4	C5
*****	*****	*****	*****
B	22.5	10.0	12.5
A	17.5	10.0	7.5

TABLA 5.29 MATRIZ DE ASIGNACION DE COMPONENTES EJEMPLO 6.  
CORRIENTE DE DOMOS DEL SEPARADOR DOS DESPUES DEL "BYPASS".

Productos	Flujo Total	Componentes	
		C4	C5
*****	*****	*****	*****
B	2.5	0.0	2.5
A	2.5	2.5	0.0

TABLA 5.30 SECUENCIA DE SEPARACION FINAL EJEMPLO 6.

Separador	Bypass	Alimentación	Domos	Fondos
*****	*****	*****	*****	*****
S1	ninguno	25.0 C4	25.0 C4	25.0 C7
		25.0 C5	25.0 C5	
		25.0 C6	25.0 C6	
		25.0 C7		
S2	A: 5.0 C4	20.0 C4	20.0 C4	20.0 C6
	5.0 C5	20.0 C5	20.0 C5	
	5.0 C6	20.0 C6		
S3	A: 7.5 C4	2.5 C4	2.5 C4	2.5 C5
	7.5 C5	2.5 C5		
	B: 10.0 C4			
	10.0 C5			



BALANCE DE MATERIA

COMPONENTE	CORRIENTES									
	1	2	8	4	5	6	7	9	11	10
BUTANO	25.0	25.0	20.0	20.0	12.5	2.5	10.0	5.0	7.5	12.5
PENTANO	25.0	25.0	20.0	20.0	12.5	2.5	10.0	5.0	7.5	12.5
HEXANO	25.0	25.0	20.0	--	--	--	--	5.0	--	5.0
HEPTANO	25.0	--	--	--	--	--	--	--	--	--

COMPONENTE	CORRIENTES								
	14	12	19	14	15	16	17	18	18
BUTANO	2.5	15.0	--	10.0	--	--	--	--	--
PENTANO	--	12.5	2.5	12.5	--	--	--	--	--
HEXANO	--	5.0	--	--	--	--	20.0	20.0	--
HEPTANO	--	--	--	--	25.0	10.0	--	10.0	15.0

FIGURA 5.7 DIAGRAMA DE FLUJO EJEMPLO 6.

resultando un separador dos con 20.0 moles de butano y 20.0 de pentano en la corriente de domos y 20.0 moles de hexano en la corriente de fondos.

Para la corriente de domos, SESS desarrolla la MAC que se muestra en la TABLA 5.28 y señala que los productos A y B incluyen todos los componentes, siendo posible el "bypass" para ambos. Después de especificar un "bypass" de 100% para cada uno de estos productos, SESS genera la MAC modificada (TABLA 5.29) y recomienda finalmente el corte ["C4"]/["C5"] para finalizar la síntesis. Esta vez se acepta la recomendación.

La secuencia final se presenta en la TABLA 5.30 y en la FIGURA 5.7. Comparando esta secuencia con la del ejemplo 4 (TABLA 5.19 y FIGURA 5.5), se observa que tiene solamente tres separadores, contra cuatro separadores del ejemplo 4. De esta forma, puede apreciarse la versatilidad de SESS para sintetizar secuencias alternativas.

#### **5.4 MANEJO DE ARCHIVOS PARA ENTRADA Y SALIDA DE DATOS.**

El uso de archivos de datos en PROLOG, como se mencionó previamente, representa una gran ventaja en el proceso de manipulación de información, agilizándola y permitiendo conservar datos para consultas posteriores.

SESS tiene la capacidad de manejar estos archivos, tanto en la entrada como en la salida de información. Para almacenar datos en un archivo, se ejecuta el sistema experto introduciendo la información directamente desde el teclado. Al final de la lectura de datos, SESS cuestiona si se desea almacenarlos. Si éste es el caso, el usuario debe especificar un nombre de archivo que cumpla con el formato del sistema operativo; en este archivo, la información sobre flujos de componentes en productos, temperaturas

normales de ebullición de componentes, valores K, arreglos de productos y presencia de componentes corrosivos, se almacena y puede ser usada en otras sesiones. Para leer datos desde un archivo, al inicio de la ejecución SESS pregunta si la información se va a introducir mediante teclado o archivo; escogiendo esta última opción, SESS pide que se especifique el nombre del archivo deseado para la lectura. Si por alguna razón el archivo especificado no corresponde al formato estándar de PROLOG, se genera un error de lectura, por lo que debe tenerse cuidado en este aspecto.

Los archivos de datos para SESS pueden crearse externamente, esto significa que puede emplearse cualquier programa de procesamiento de texto que genere documentos en formato ASCII, el cual corresponde al formato empleado por PROLOG en la edición de bases de datos, para desarrollar archivos que sean leídos por el sistema experto. Considérese, por ejemplo, el texto que resultaría de almacenar la información correspondiente al problema 1 de este capítulo:

```
comp_inicial(["C3","IC4","C4","IC5","C5"])
arreglo_inicial(["A","B","C","D","E"])
corrosivo("ninguno")
flujo("A","C3",5)
flujo("A","IC4",0)
flujo("A","C4",0)
flujo("A","IC5",0)
flujo("A","C5",0)
flujo("B","C3",0)
flujo("B","IC4",15)
flujo("B","C4",0)
flujo("B","IC5",0)
flujo("B","C5",0)
flujo("C","C3",0)
flujo("C","IC4",0)
```

```
flujo("C","C4",25)
flujo("C","IC5",0)
flujo("C","C5",0)
flujo("D","C3",0)
flujo("D","IC4",0)
flujo("D","C4",0)
flujo("D","IC5",20)
flujo("D","C5",0)
flujo("E","C3",0)
flujo("E","IC4",0)
flujo("E","C4",0)
flujo("E","IC5",0)
flujo("E","C5",35)
temp_ebull("C3",-42.2)
temp_ebull("IC4",-10)
temp_ebull("C4",-0.6)
temp_ebull("IC5",29.95)
temp_ebull("C5",36.3)
valor_k("C3",4.0424)
valor_k("IC4",1.7095)
valor_k("C4",1.2296)
valor_k("IC5",0.5)
valor_k("C5",0.3834)
```

Este texto, desarrollado en formato ASCII, es equivalente a la forma de cláusula en PROLOG, en la que se especifica un nombre de regla y sus argumentos relacionales. Con la ayuda del programa de procesamiento de texto, es posible crear archivos de este tipo, para luego ser empleados durante la ejecución del sistema experto. Es importante mencionar que la gran mayoría de los datos manejados por SESS son de carácter simbólico (nombres de componentes y productos, especificación de componentes corrosivos), por lo que se usan como cadenas de caracteres entrecomilladas en las cláusulas de la base de datos. En contraste, los datos de naturaleza numérica (flujos, temperaturas normales de ebullición,

valores de reparto en el equilibrio) tienen un tratamiento acorde a este tipo de información.

Las cláusulas usadas en la base de datos son simples y fáciles de usar. La cláusula `comp_inicial` tiene como argumentos relacionales los nombres de los componentes presentes en la corriente de alimentación, ubicados en orden decreciente de volatilidad relativa. Similarmente, la cláusula `arreglo_inicial` representa la lista de nombres de los productos que se desean obtener, también colocados en orden decreciente de volatilidad. La cláusula `corrosivo` contiene la lista de componentes peligrosos o corrosivos, en caso de que los hubiere, o bien, la indicación de que no existe ningún componente de este tipo. Los argumentos de la cláusula `flujo` son, de izquierda a derecha, el nombre del producto en cuestión, el nombre del componente incluido y el flujo molar de éste en dicho producto. La cláusula `temp_ebull` incluye el nombre de cada uno de los componentes y su correspondiente temperatura normal de ebullición en grados Celsius. Por último, la cláusula `valor_k` contiene el nombre de cada componente y su correspondiente valor de coeficiente de reparto en el equilibrio termodinámico (valor  $K$ ).

Hasta este punto, el usuario ya se encuentra en condiciones de utilizar `SESS` y aprovechar al máximo todas sus capacidades, todo esto dentro del campo del ingeniero químico, propiamente dicho. Sin embargo, los elementos correspondientes a la programación y las características generales de la estructura del programa, desde un punto de vista propio del ingeniero de conocimiento, también pueden ser de especial interés, por lo que serán considerados en el capítulo siguiente.

**CAPITULO SEIS**

**SESS  
PERSPECTIVA DE  
INTELIGENCIA ARTIFICIAL**

En este capítulo se presenta al Sistema Experto para la Síntesis de Secuencias de Separación, SESS, desde el punto de vista de la Inteligencia Artificial.

SESS genera esquemas de separación en Ingeniería de Procesos, dada una mezcla de alimentación de componentes volátiles y un arreglo de productos resultantes, desarrollando la secuencia para un sistema de separación y obteniendo tales productos, cumpliendo las especificaciones de éstos, con un diseño económicamente atractivo.

SESS, como sistema experto, requiere la representación apropiada del conocimiento basado en heurísticas, introducidas en los capítulos tres y cuatro. Además, necesita herramientas computacionales para alcanzar las metas establecidas con el conocimiento organizado y codificado en un lenguaje de programación en forma de modelos coordinados. En otras palabras, para el desarrollo de SESS es necesario implementar una búsqueda estratégica, formularla en una estructura lógica y especificar las técnicas de programación.

## 6.1 REPRESENTACION DEL CONOCIMIENTO.

La representación del conocimiento está formulada en un arreglo de tres elementos constitutivos fundamentales: una estructura lógica, la forma de descomposición del problema y el manejo de sus restricciones.

### 6.1.1 ESTRUCTURA LOGICA.

SESS está basado en reglas heurísticas y desarrollado en el lenguaje de programación PROLOG. La mayoría de los sistemas expertos para ciencias o ingeniería están basados, ya sea en reglas, estructuras u objetos informáticos. Si bien los sistemas expertos basados en estructuras u orientados hacia objetos pueden ser implementados en PROLOG, el lenguaje se usa más convenientemente para sistemas basados en reglas, empleando predicados lógicos. Además, los sistemas basados en estructuras requieren un entendimiento mayor y una caracterización detallada del conocimiento para trabajar correctamente, por lo que son significativamente más difíciles de desarrollar y manejar.

Los predicados en PROLOG utilizan declaraciones eminentemente lógicas (reglas y heurísticas), como se mencionó en el capítulo uno, para representar el conocimiento. Todo el conocimiento de SESS es representado por predicados lógicos.

### 6.1.2 DESCOMPOSICION DEL PROBLEMA.

Los sistemas expertos son mejores para resolver problemas por la vía de la descomposición (división en subproblemas), que por síntesis (construcción de respuestas), pero en el desarrollo de secuencias de separación es inherente una tarea de síntesis. El problema de síntesis es un desafío para los sistemas expertos.

porque no proveen nada en concreto para el análisis, hasta que el modelo esté terminado. Utilizando la aproximación por síntesis para crear secuencias de separación, se desarrollan pequeñas operaciones unitarias independientes, que necesitan estar especificadas al mismo tiempo para la solución final. Frecuentemente, las unidades no pueden ser conjuntadas correctamente, y los sistemas expertos necesitan resolver estos conflictos. Esta resolución puede llegar a ser muy compleja.

Un problema en la síntesis de una secuencia de separación, utilizando un sistema experto, es mantener la continuidad. Cuando las unidades independientes son conjuntadas después de formar el proceso, el diseño debe conservar el balance de materia y energía. Si los flujos, la composición y la temperatura que se tienen a la salida de un separador no son iguales a las condiciones para el segundo separador, se presenta este tipo de conflicto. Algunos de estos conflictos son resueltos con relativa facilidad. Por ejemplo, si la temperatura no es igual, se coloca un intercambiador de calor entre los dos separadores. Para otros conflictos, no obstante, resulta más difícil su resolución. Si los flujos y la composición no concuerdan, se debe empezar nuevamente, cambiando el diseño del separador. Estos problemas son resueltos con facilidad utilizando la aproximación por descomposición, existiendo un marco de referencia para el sistema a analizar.

Los sistemas expertos trabajan más eficientemente cuando se implementa su dispositivo de inferencia encadenado a la descomposición del problema, antes que a la síntesis del mismo. El reto para los sistemas expertos en ingeniería de diseño es el desarrollar la representación del conocimiento que facilite la descomposición del problema, mientras que el diseño mismo es una tarea de síntesis.

La representación del conocimiento en SESS está enfocada hacia el desarrollo de secuencias de separación vía descomposición del problema. La herramienta primaria de descomposición es la Matriz de Asignación de Componentes (MAC).

Como se observó en el capítulo cuatro, MAC se define como:

$$MAC = [ f_{ij} ]$$

donde  $f_{ij}$  es el flujo del  $j$ -ésimo componente en el  $i$ -ésimo producto. En un sistema de cuatro productos con cuatro componentes, la MAC es una matriz de  $4 \times 4$  :

$$MAC = \begin{bmatrix} f_{41} & f_{42} & f_{43} & f_{44} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} & f_{34} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} & f_{24} \\ f_{11} & f_{12} & f_{13} & f_{14} \end{bmatrix}$$

Para desarrollar una secuencia de separación vía descomposición del problema, SESS analiza y divide la MAC para generar dos pequeñas submatrices. Entonces, SESS divide estas submatrices y el proceso continúa hasta que la división produzca una matriz renglón o una matriz columna. En este punto no se requiere de nuevas divisiones porque se tiene un producto específico (matriz renglón) o un componente puro (matriz columna).

Para demostrar este principio con un matriz de  $4 \times 4$  , si SESS recomienda la separación del producto uno de la matriz, se obtiene:

$$\begin{bmatrix} f_{41} & f_{42} & f_{43} & f_{44} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} & f_{34} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} & f_{24} \\ f_{11} & f_{12} & f_{13} & f_{14} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} & f_{14} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_{41} & f_{42} & f_{43} & f_{44} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} & f_{34} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} & f_{24} \end{bmatrix} ,$$

La matriz renglón  $[f_{ij}]$  representa la corriente de domos y contiene las especificaciones para el producto uno. Además, dividir esta matriz renglón es innecesario.

La matriz  $3 \times 4$  representa la corriente de fondos, pero todavía no es una matriz columna o renglón, por lo que requiere más separaciones. Si SESS recomienda la separación del componente uno (la columna  $[f_{i1}]$ ), se encuentra:

$$\begin{bmatrix} f_{41} & f_{42} & f_{43} & f_{44} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} & f_{34} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} & f_{24} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} f_{41} \\ f_{31} \\ f_{21} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_{42} & f_{43} & f_{44} \\ f_{32} & f_{33} & f_{34} \\ f_{22} & f_{23} & f_{24} \end{bmatrix}$$

La matriz columna  $[f_{i1}]$  es una corriente del componente uno puro y no requiere de más separaciones. La corriente de fondos es una matriz  $3 \times 3$  y necesitan aún de más procesamientos. Si SESS recomienda la separación del producto cuatro, se tiene:

$$\begin{bmatrix} f_{42} & f_{43} & f_{44} \\ f_{32} & f_{33} & f_{34} \\ f_{22} & f_{23} & f_{24} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} f_{32} & f_{33} & f_{34} \\ f_{22} & f_{23} & f_{24} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_{42} & f_{43} & f_{44} \end{bmatrix}$$

La matriz renglón  $[f_{42} \ f_{43} \ f_{44}]$ , es la corriente de fondos y no requiere procesamiento adicional. Aunque no se encuentra más del producto cuatro, existen todavía los componentes dos, tres y cuatro en los flujos requeridos (la fracción del componente uno,  $f_{41}$ , fue separada previamente y necesita combinarse en cumplimiento de las especificaciones del producto cuatro).

La corriente de domos todavía requiere separación. Si SESS recomienda una división entre los productos dos y tres, se tiene:

$$\begin{bmatrix} f_{32} & f_{33} & f_{34} \\ f_{22} & f_{23} & f_{24} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} f_{22} & f_{23} & f_{24} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_{32} & f_{33} & f_{34} \end{bmatrix}$$

Esta división da como resultado dos matrices de un solo producto, [f22 f23 f24] en domos y [f92 f93 f94] en fondos. Ninguna requiere de procesamiento adicional. El problema de descomposición está terminado; la MAC ha sido repetitivamente dividida hasta que los productos y los componentes son aislados.

### 6.13 RESTRICCIONES.

Todo problema en ingeniería contiene restricciones. En los sistemas expertos, las restricciones son manejadas como globales o locales.

Manejando las restricciones localmente, el sistema experto tiene más flexibilidad y puede conducirse en situaciones muy complejas. Se puede violar temporalmente una restricción conocida, desarrollar una secuencia de separación y dirigirse al inicio, corrigiendo todas las violaciones. Esta habilidad permite el desarrollo de procesos que serían imposibles de obtener con sistemas expertos que utilizan estrictamente restricciones globales. Sin embargo, el uso de restricciones locales tiene sus problemas:

- \* Tiempo perdido. Cuando un problema es detectado, se necesita verificar los conflictos, los cuales consumen un tiempo de cómputo valioso.
- \* Resolución no garantizada. Cuando un conflicto ocurre, no se tiene la garantía de que pueda ser resuelto.
- \* La resolución apropiada puede ser arbitraria y difícil. Si los grados de libertad son viables para ajustarse, posiblemente, el sistema no sea capaz de determinar la mejor opción en la resolución del conflicto. La resolución puede ser arbitraria a menos que sea basada en conocimientos.

Para evitar los anteriores problemas, SESS maneja todas las restricciones globalmente a través de la Matriz de Asignación de Componentes. La MAC representa el reparto global de todos los flujos de los componentes para cada producto. Todos los separadores deben seguir este reparto. Por ejemplo, considerando un sistema con siete productos y diez componentes, se realiza repetidamente la división de MAC en pequeñas submatrices, hasta obtener una MAC con dos productos y cuatro componentes:

$$\begin{array}{c}
 \text{P2} \\
 \text{P1}
 \end{array}
 \begin{array}{cccc}
 \text{C3} & \text{C4} & \text{C5} & \text{C6} \\
 \left[ \begin{array}{cccc}
 0 & 7 & 8.5 & 9 \\
 12 & 10 & 8.5 & 0
 \end{array} \right]
 \end{array}$$

Se desea hacer la división húmeda P1/P2. Con C4 y C5 como los componentes claves ligero y pesado, respectivamente, se calcula la distribución de los no claves, obteniéndose así, los siguientes productos:

$$\begin{aligned}
 \text{Domos} &: 11.9\text{C3} + 10\text{C4} + 8.5\text{C5} + 3.6\text{C6} \\
 \text{Fondos} &: 0.1\text{C3} + 7\text{C4} + 8.5\text{C5} + 5.5\text{C6}
 \end{aligned}$$

El propano (C3) es un componente más ligero que el clave ligero y la especificación requiere una relación de recuperación de 1.0/0.0. Entonces,  $(d/b)_{cs} = 0.992/0.008$ , recuperando virtualmente todo el propano en domos, consiguiendo su separación. Por lo tanto, la división es factible con el componente clave ligero.

Ahora, el componente más pesado que el clave pesado, n-hexano (C6), se separa, con  $(b/d)_{cs} = 1.00/0.00$ . Sin embargo, de la prueba para la distribución de componentes no claves, se tiene que  $(b/d) = 0.61/0.39$ . Esta distribución no es deseable porque no obedece al balance de materia global.

En general, si una solución potencial viola una restricción global, SESS clasifica a ésta como no factible y la elimina de consideración. Por lo tanto, una vez que el programa especifica un separador, no necesita volver a considerarlo. Si SESS da una conclusión, nunca la contradice después.

Manejando restricciones globales, el sistema experto se ejecuta muy rápidamente. No consume memoria al retener a los separadores diseñados con anterioridad; tampoco gasta tiempo regresando a especificar nuevos diseños, y finalmente no requiere de estrategias arbitrarias de resolución de conflictos.

## **6.2 BUSQUEDA.**

Una regla general en el desarrollo de sistemas expertos implica que la mejor representación del conocimiento, la más fácil, es la búsqueda estratégica. Esta, es relativamente simple y sencilla, debido a la gran cantidad de conocimientos que se han desarrollado en el área, principalmente en materia de rutas de secuencias de separación para dar la solución más económica a un problema. En este contexto, SESS está basado en el esquema heurístico ordenado de Nadgir y Liu, discutido en el capítulo tres. De esta búsqueda extensiva, la representación del conocimiento en SESS es muy atractiva, haciendo la búsqueda bastante manejable.

La buena representación del conocimiento y un manejo adecuado de la investigación son muy importantes en la implementación de SESS en una PC. Si estos factores no son atendidos, el campo de búsqueda se expande, creciendo así el consumo de memoria, inclusive en forma exponencial.

La ejecución de un sistema experto con una búsqueda insuficiente no es factible en una PC; por ello, la búsqueda en

SESS es relativamente sencilla, pero eficiente, y puede correr con facilidad en una PC.

## 6.2.1 ESTRATEGIA DE CONTROL TOTAL.

La búsqueda estratégica para mantener el control total de SESS, consta de los siguientes tres bloques funcionales:

**PLANEACION.** Acorta el campo de búsqueda a un nivel manejable.

**GENERACION.** Identifica y crea cortes factibles para nuevas consideraciones.

**PRUEBA.** Evalúa y elige una división atractiva a partir de los cortes generados.

Para implementar esta estrategia, SESS utiliza las siguientes herramientas de ingeniería química:

\*Análisis de corriente de "bypass".

\*Heurística D1 a través de la Matriz de Asignación de Componentes (MAC).

\*Análisis de factibilidad con la Tabla de Especificación de Separación (TES).

\*Heurísticas de rangos ordenados (M1, S1, S2, C1, C2).

SESS utiliza las herramientas precedentes para buscar y determinar la mejor secuencia. El análisis de "bypass" y la construcción de MAC (implementación de la heurística D1) son parte del BLOQUE DE PLANEACION, que planea la búsqueda acortando el

espacio de conocimientos. El análisis de factibilidad es parte del BLOQUE DE GENERACION, el cual produce las divisiones factibles de las existentes en el espacio, y las conserva para un análisis adicional. Finalmente, el BLOQUE DE PRUEBA, utiliza las heurísticas de rangos ordenados, para determinar qué tan atractivas son las diferentes divisiones y elegir la mejor.

## 6.2.2 ASPECTOS DE BUSQUEDA Y CONTROL.

### a) Diseño Heurístico D1.

Este favorece al menor arreglo de productos. MAC introduce D1 implícitamente, reduciendo de manera significativa la búsqueda espacial.

En secuencias de separación, se intenta controlar las concentraciones de los componentes en cada corriente de proceso. La concentración es una variable continua, ya que tiene un número infinito de posibles configuraciones.

La heurística D1, reduce inmediatamente el número de posibilidades y la búsqueda espacial se torna manejable.

Si MAC es creada por la heurística D1, y tiene P productos y C componentes, entonces el número de opciones de separación  $\Omega$ , para MAC, se encuentra en el siguiente intervalo:

$$(C-1) \leq \Omega \leq P (C-1)$$

Nótese que la búsqueda espacial es para MAC únicamente, no para la síntesis entera, por lo que el número de opciones abiertas para la secuencia entera es, por supuesto, considerable.

Después de aplicar la heurística D1, SESS activa un análisis de corriente de "bypass" sobre MAC. El "bypass" puede o no reducir

el estado espacial. El motivo para usar el "bypass" es primordialmente de naturaleza económica, pues reduce la carga másica del sistema, el capital y los costos de operación. En resumen, el "bypass" reduce el tamaño del campo espacial y/o permite que ciertos cortes húmedos sean factibles.

#### b) Análisis de factibilidad.

La heurística D1 encamina la búsqueda para generar un arreglo de divisiones potenciales, suponiendo que éstas son técnicamente factibles. El análisis de factibilidad con la Tabla de Especificación de Separación (TES), analiza qué arreglo de divisiones son factibles. Basado en la ecuación de Fenske y en el balance global de materia, el análisis de factibilidad elimina divisiones inconvenientes. SESS califica los cortes como no factibles si no se obedece al balance global de materia.

Si la separación es factible, se coloca en una parte especial de la base de datos y es etiquetado como tal. Esta etapa analiza el bloque de generación del programa, en donde se considera un número de divisiones factibles técnicamente que obedecen al balance global de materia. Las divisiones generadas se envían a las heurísticas de rangos ordenados, etapa final de la búsqueda.

#### c) Heurísticas de rangos ordenados.

Cuando SESS implementa las heurísticas de rangos ordenados, se tiene ya generado un arreglo de divisiones factibles. El programa elige el mejor corte, lo recomienda como tal y pide la aprobación del usuario.

El usuario puede rechazar la divisiones recomendadas, entrando al modo manual, donde puede elegir el corte deseado. Si el usuario termina por elegir una división, SESS comienza de nuevo el análisis heurístico. Para detallar este punto, véase el ejemplo de aplicación número seis del capítulo anterior.

### 6.3 PROGRAMACION PROLOG.

El desarrollar un programa en PROLOG, particularmente con relaciones que requieren reglas y cláusulas, es un proceso evolutivo. Después de escribir una regla, se puede tener la necesidad de cambiarla posteriormente para dar cabida a situaciones imprevistas.

Escribir las relaciones en PROLOG implica planeación. Se debe decidir primero lo que se requiere en cada relación para alcanzar el objetivo. Se trata de evitar que una cláusula individual abarque demasiado. Si esto ocurre, será compleja, difícil de entender y de modificar o ajustar.

El paquete específico empleado en el desarrollo de SESS es Turbo Prolog y tiene las siguientes ventajas:

- \* La compilación del programa se ejecuta rápidamente.
- \* El "software" no es demasiado costoso.
- \* El paquete tiene un buen desarrollo de interfase para el programador.

Turbo Prolog es diferente de la mayoría de las versiones estándar de PROLOG. No obstante, el paquete tiene las siguientes limitaciones:

- \* Compilación en un solo lenguaje. El paquete no posee intérprete para compilarlo en otro.
- \* Escritura de datos. Todos los tipos de datos utilizados en un predicado deben ser declarados en el dominio de la sección.
- \* Inserta o retira solamente en una base de datos. Las reglas no pueden ser insertadas o retiradas.

En el desarrollo de SESS se recurrieron a diversas técnicas de programación, siendo más utilizadas las que involucran el uso de la memoria y del corte de seguimiento hacia atrás ("cut").

El paquete de Turbo Prolog es simple y fácil de usar. Una área limitada, no obstante, radica en el uso de la memoria. El paquete no tiene capacidad de manejo incorporado de memoria, cuestión que descansa totalmente en las manos del programador.

La memoria disponible es el problema principal en la implementación de los sistemas expertos en microcomputadoras. De este modo, SESS está diseñado para emplear menos de 640 KB de memoria RAM (barrera del MS-DOS).

La técnica más frecuentemente usada en SESS para la conservación de memoria es el predicado de fallo ("fail"). En lugar del uso de la recursión para obtener soluciones múltiples, SESS emplea el seguimiento hacia atrás ("backtracking"). El predicado de fallo obliga al seguimiento hacia atrás, el cual inicializa variables. Como SESS genera soluciones múltiples, continuamente inicializa y reinicializa variables. Consecuentemente, la memoria ocupada permanece constante, mientras que en la recursión, la carga de memoria de la computadora crece geométricamente con respecto al tamaño del campo de búsqueda, debido en gran parte a que la recursión acumula los valores asignados a las variables sin reiniciarlas.

Además de la técnica de mantenimiento de memoria para la programación en PROLOG, SESS emplea el corte de seguimiento hacia atrás y sirve en muchas ocasiones como medio para mejorar la eficiencia del programa. En los sistemas expertos utilizados en ciencias e ingeniería, a menudo se tienen casos en donde se involucran situaciones que son mutuamente exclusivas. La exclusividad mutua es un caso ideal para utilizar el corte de seguimiento hacia atrás.

En SESS se proponen separaciones factibles en el desarrollo de una secuencia. La factibilidad es mutuamente exclusiva, ya que verifica si un corte es posible de realizarse o no. Cuando ocurre la exclusividad mutua, se puede utilizar libremente el corte de seguimiento hacia atrás, considerando que no en todos los casos se puede emplear.

El desarrollo de SESS involucra la realización de cinco módulos:

- \* Módulo Principal. Contiene las cláusulas centrales de operación y control del programa.
- \* Módulo de "Bypass" (Recirculación). Realiza el análisis completo del "bypass".
- \* Módulo de Tabla de Especificación de Separación (TES). Realiza el análisis de factibilidad y construye la TES. Envía las separaciones factibles al Módulo de Corte.
- \* Módulo de Corte. Implementa las heurísticas en los cortes potenciales, recibidos del módulo anterior.
- \* Módulo de Servicios. Elabora la lista del procesamiento y contiene cláusulas de apoyo para los otros módulos.

A continuación, se presenta un resumen de la forma organizacional de cada módulo. El listado del programa no se incluye por cuestiones de protección de propiedad intelectual.

## 1.-MODULO PRINCIPAL.

Maneja por completo el bloque de planeación. La FIGURA 6.1 muestra el diagrama de flujo para las actividades de este módulo.

El módulo principal contiene el cerebro de operación y control, así como las instrucciones para desarrollar la secuencia de separación.

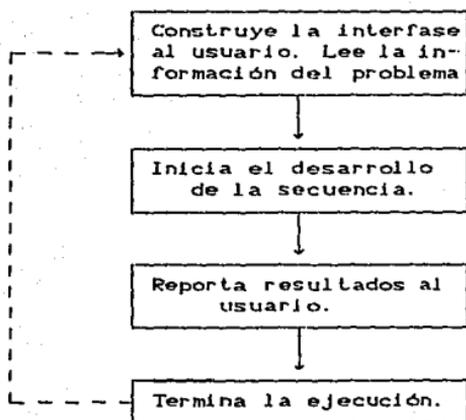


FIGURA 6.1

## 2.-MODULO DE "BYPASS".

Realiza el análisis de "bypass" y recalcula el balance de materia, si es necesario. El diagrama de flujo para las actividades centrales de este módulo aparece en la FIGURA 6.2.

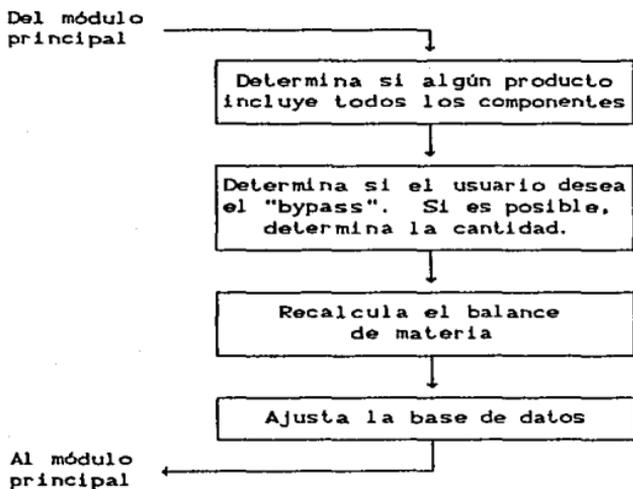


FIGURA 6.2

### 3.-MODULO DE TABLA DE ESPECIFICACION DE SEPARACION (TES).

Este módulo es el bloque de generación del programa, llamado desde el módulo principal. Realiza el análisis de factibilidad y genera un arreglo de posibles cortes para pruebas subsecuentes. Su última propuesta es el insertar elementos a la base de datos para todas las divisiones dadas por MAC y el análisis de "bypass".

La FIGURA 6.3 muestra el diagrama de flujo para la actividades centrales de este módulo.

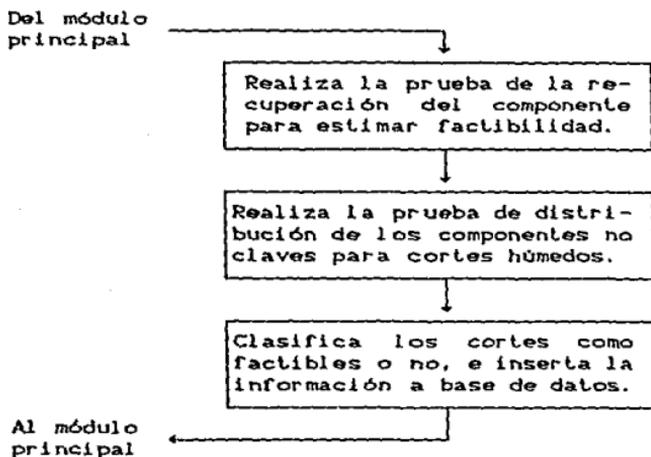


FIGURA 6.3

#### 4.-MODULO DE CORTE.

El módulo de corte (bloque de prueba), llamado por el módulo principal, toma los cortes factibles generados por el módulo TES, realizando el análisis heurístico y recomendando el mejor corte. Al efectuar este corte, la Matriz de Asignación de Componentes original se divide en dos submatrices, una para domos y otra para fondos, regresando al módulo principal.

#### 5.-MODULO DE SERVICIOS.

Este módulo aloja herramientas poderosas y utilería para todos los módulos, destinadas al manejo de los datos alimentados. A diferencia de los demás modulos, el módulo de servicios no es llamado explícitamente.

## CONCLUSIONES

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

El desarrollo global y la estructuración lógica del presente trabajo, permiten afirmar, categóricamente, que los objetivos originalmente planteados se han cubierto en su totalidad, conforme a los siguientes lineamientos:

\* La revisión presentada con respecto a los conceptos más importantes dentro del área de la Inteligencia Artificial, enfocados principalmente a los Sistemas Expertos, proporciona los elementos básicos necesarios para el establecimiento de una plataforma didáctica, sobre la cual se apoye el desarrollo y la implementación de cualquier sistema computacional de esta naturaleza, especialmente los destinados a las diversas ramas de la Ingeniería Química.

\* El análisis de los diversos métodos para la síntesis de secuencias de separación (heurísticos, algorítmicos, evolutivos, termodinámicos o combinados), considerando su coincidencia y enfoque hacia un mismo fin (la obtención de una secuencia eficiente, con un número mínimo de unidades de procesamiento y gran atractivo económico), conduce a la afirmación de que los métodos de naturaleza heurística son los más adecuados para la estructuración de un sistema experto, pues han demostrado ser de manejo más simple que el resto, generan resultados altamente satisfactorios y poseen características comunes al funcionamiento típico de un sistema experto basado en conocimiento. Esto último es de particular importancia, puesto que un sistema experto es un instrumento en el que se utilizan primordialmente reglas heurísticas de base rígida, para encaminar la búsqueda en su campo de conocimiento específico. .

\* Dentro del marco general de los métodos heurísticos de síntesis de secuencias de separación, destaca el procedimiento sistemático propuesto por V. M. Nadgir y Y. A. Liu, debido a su relativa simplicidad y sus buenos resultados. Con la incorporación de herramientas eficientes en la representación del problema (matriz de asignación de componentes, tabla de especificación de separación), este método heurístico resalta en mayor medida la mencionada compatibilidad existente con la estructura típica de un sistema experto.

\* El empleo del lenguaje de programación Turbo Prolog, incluyendo las diversas técnicas para la edición, la compilación y la depuración del sistema, da como resultado un programa que posee gran flexibilidad en su ejecución, y al mismo tiempo, una interfase que responde a las demandas del usuario, sin que éste deba ser necesariamente experto en la materia.

\* La presentación del Sistema Experto para la Síntesis de Secuencias de Separación (SESS), como una herramienta de apoyo didáctico y técnico en la ingeniería de procesos, es el reflejo culminante de la combinación interactiva de los elementos de conocimiento de la Inteligencia Artificial y de la Síntesis de Secuencias de Separación, lo cual representa tan sólo un ejemplo de las aplicaciones que pueden alcanzarse dentro de la Ingeniería Química.

# BIBLIOGRAFIA.

## INTELIGENCIA ARTIFICIAL, SISTEMAS EXPERTOS Y PROGRAMACION PROLOG.

1. Badiru, A. B., Expert System Applications in Engineering and Manufacturing, Prentice-Hall, Englewood Cliffs N. J., U. S. A., (1992).
2. Bowen, K. A., Prolog and Expert Systems, McGraw-Hill, N. Y., (1991).
3. Gevarter, W. B., "Introduction to Artificial Intelligence.", Chem. Eng. Prog., 83 (9), pp. 21-37, (1987).
4. Ignizio, J. P., Introduction to Expert Systems, McGraw-Hill, N. Y., U. S. A., (1991).
5. Kim, S. H., Knowledge Systems through Prolog, Oxford University Press, N. Y., U. S. A., (1991).
6. Robinson, P., Using Turbo Prolog, Osborne McGraw-Hill, N. Y., U. S. A., (1988).
7. Russo, M. F. and R. L. Peskin, "Knowledge-based systems for the engineer.", Chem. Eng. Prog., 83 (9), pp. 38-43, (1987).
8. SanGiovanni, J. P. and H. C. Romans, "Expert Systems in Industry: A Survey.", Chem. Eng. Prog., 83 (9), pp. 52-59, (1987).
9. Stephanopoulos, G., "The Future of Expert Systems in Chemical Engineering.", Chem. Eng. Prog., 83 (9), pp. 44-51, (1987).
10. Turbo Prolog 2.0, Reference Manual and User's Guide, Borland International, Scotts Valley CA., U. S. A., (1986).

## INGENIERIA DE PROCESOS DE SEPARACION.

11. Cheng, S. and Y. A. Liu, "Studies in Chemical Process Design and Synthesis. Part 8. A Simple Heuristic Method for the Synthesis of Initial Sequences for Sloppy Multicomponent Separations.", Ind. Eng. Chem. Res., 27, pp. 2304-2322, (1988).

12. Gomez, M. A. and J. D. Seader, "Separation Sequence Synthesis by Predictor-Based Ordered Search.", *AIChE Journal*, 22 (6), pp. 970-979, (1976).
13. Gomez, M. A. and J. D. Seader, "Synthesis of Distillation Trains by Thermodynamic Analysis.", *Comp. Chem. Eng.*, 9 (4), pp. 311-341, (1985).
14. Hendry, J. E. and R. R. Hughes, "Generating Separation Process Flowsheets.", *Chem. Eng. Prog.*, 68 (6), pp. 71-76, (1972).
15. Henley, E. J. and J. D. Seader, *Equilibrium Stage Separation Operations in Chemical Engineering*, Wiley, N. Y., U. S. A., (1981).
16. Liu, Y. A., T. E. Quantille and S. Cheng, "Studies in Chemical Process Design and Synthesis. Part 9. A Unifying Method for the Synthesis of Multicomponent Separation Sequences with Sloppy Product Streams.", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 29, pp. 2227-2241, (1990).
17. Nadgir, V. M. and Y. A. Liu, "Studies in Chemical Process Design and Synthesis. Part V. A Simple Heuristic Method for Systematic Synthesis of Initial Sequences for Multicomponent Separation.", *AIChE Journal*, 29 (6), pp. 926-934, (1983).
18. Nath, R. and R. L. Motard, "Evolutionary Synthesis of Separation Processes.", *AIChE Journal*, 27 (4), pp. 578-587, (1981).
19. Nishida, N., G. Stephanopoulos and A. W. Westerberg, "A Review of Process Synthesis.", *AIChE Journal*, 27 (3), pp. 321-348, (1981).
20. Rodrigo, B. F. R. and J. D. Seader, "Synthesis of Separation Sequences by Ordered Branch Search.", *AIChE Journal*, 21 (5), pp. 885-893, (1975).
21. Rudd, D. F., G. J. Powers and J. J. Siirola, *Process Synthesis*, Prentice-Hall, N. J., U. S. A., (1973).
22. Seader, J. D. and A. W. Westerberg, "A Combined Heuristic and Evolutionary Strategy for the Synthesis of Simple Separation Sequences.", *AIChE Journal*, 23 (6), pp. 951-954, (1977).

23. Souders, M., "Countercurrent Separation Processes.", Chem. Eng. Prog., 60 (2), pp. 75-82, (1964).
24. Stephanopoulos, G. and A. W. Westerberg, "Studies in Process Synthesis. II. Evolutionary Synthesis of Optimal Process Flowsheets.", Chem. Eng. Sci., 31, pp. 195-204, (1976).
25. Thompson, D. W. and C. J. King, "Systematic Synthesis of Separation Schemes.", AIChE Journal, 18 (5), pp. 941-948, (1972).
26. Westerberg, A. W. and G. Stephanopoulos, "Studies in Chemical Process Synthesis. I. Branch and Bound Strategy with List Techniques for the Synthesis of Separation Schemes.", Chem. Eng. Sci., 30, pp. 963-972, (1975).

## APENDICE

PBR es un programa desarrollado para auxiliar a SESS en el cálculo de las constantes de equilibrio líquido-vapor (valores  $K$ ) de los componentes de la mezcla que se va a procesar en la síntesis de separación. Para calcular estos valores, la mezcla debe estar en el punto de burbuja o en el de rocío.

Existen métodos para realizar el cálculo y obtener la información en condiciones de equilibrio líquido-vapor. Los hay gráficos, como la técnica por nomogramas sugerida por DePriester<sup>(1)</sup>, o utilizando gráficos de  $K$  contra presión de convergencia, como el propuesto por Dodge<sup>(2)</sup>. La desventaja de estos métodos radica en el uso manual y la búsqueda tediosa de cada uno de los componentes en una gráfica.

Otra opción de cálculo consiste en el empleo de ecuaciones de estado, aplicando métodos numéricos, en donde los criterios de convergencia son funciones altamente no lineales con respecto a la temperatura, pero en cambio moderadamente no lineales con respecto a la presión, excepto en la región de convergencia de la presión, donde los valores de  $K$  de componentes muy ligeros o muy pesados, pueden variar muy drásticamente con la presión; por lo tanto, se requieren valores iterativos para calcular las condiciones de los puntos de burbuja y de rocío<sup>(3)</sup>.

PBR utiliza, como opción, las ecuaciones de estado de Peng-Robinson y de Soave-Redlich-Kwong. Además, maneja la posibilidad de calcular el punto de burbuja o rocío, así como iterar la presión o la temperatura absoluta.

La desventaja de aplicar métodos numéricos en la obtención de una rápida respuesta, radica en el estimado inicial de presión o temperatura. El tiempo de cálculo será mayor si el estimado

inicial tiene una desviación considerable con respecto al valor real. En el caso de iniciar con un estimado de temperatura o presión muy por debajo en relación a las condiciones de equilibrio reales, la convergencia podría dar como resultado que la composición del vapor sea exactamente igual a la del líquido, es decir, la mezcla estaría en una sola fase (líquido) y todos los valores de K serían igual a la unidad. De la misma manera, si se da un estimado muy alto de la variable a calcular, la convergencia resultaría en una fase única (vapor).

Los casos anteriores no son condiciones de equilibrio, debido a que únicamente se obtienen las condiciones de una sola fase; por lo tanto, los valores no deben ser tomados en cuenta. Por consiguiente, se propone la siguiente ecuación, obtenida a partir de la ecuación de Clasius-Clayperon y utilizando la regla de Trouton, para dar una aproximación inicial en el cálculo de temperatura o presión.

$$T_{eb}/T = [ 1 - 9.46191 \times 10^{-2} \ln(P/P_0) ]$$

Donde:

$T_{eb}$  = media de temperatura normal de ebullición de la mezcla, calculada como:

$$T_{eb} = \sum x_i T_{ebi}$$

$x_i$  = fracción mol de cada componente en la mezcla.

$T_{ebi}$  = Temperatura de ebullición normal de cada componente.

T = Temperatura absoluta de operación.

P = Presión de operación.

$P_0$  = Presión a condiciones normales.

T o P son las variables a despejar en la ecuación, cuyos valores serán los estimados iniciales para introducirse al programa.

PBR es un programa basado en el uso de las ecuaciones de estado, y para tales, los datos que se piden son:

Temperatura (T) o presión (P).

Composición de la mezcla (xi para punto de burbuja o yi para punto de rocío).

Temperatura crítica de cada uno de los componentes (Tc).

Presión crítica de cada uno de los componentes (Pc).

Factor acéntrico ( $\omega$ ).

Para una mejor aproximación se recomienda utilizar el banco de datos publicado por R.C. Reid, et. al.<sup>(4)</sup>. Para componentes polares en la mezcla es recomendable proporcionar los datos de interacción binaria  $K_{ij}$ , publicados por S.M. Walas<sup>(5)</sup>. El listado del programa no se incluye por cuestiones de protección de propiedad intelectual.

#### REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS.

1. De Priestler, C.L., Chem. Eng. Progr. Symp. Ser., 49 (7), 1, (1953).
2. Hines, A.L. y Maddox, R.N., Transferencia de Masa, Prentice Hall S.A., México D.F., (1987), pp. 220-226.
3. Henley, E. J. y Seader, J.D., Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química, Repla S.A., México D.F., (1990), pp. 301-312.
4. Reid, R.C., et al. The Properties of Gases and Liquids, 4th ed., McGraw-Hill Book Company, U.S.A., (1983), pp. 121-137, 337-349.
5. Walas, S.M., Phase Equilibria in Chemical Engineering, Butterworth-Heinemann, (1985), USA, pp. 52-57, 596-598.