



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

FACULTAD DE QUIMICA

EXAMENES PROFESIONALES
FAC. DE QUIMICA

LA PROGRAMACION LINEAL COMO UNA
SOLUCION A LOS PROBLEMAS DE MEZCLADO
DE GASOLINAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

INGENIERO QUIMICO

P R E S E N T A

JOE DANIEL GUZMAN CARRAZCO



MEXICO, D. F.

1996

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

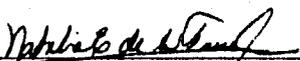
El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición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

JURADO ASIGNADO

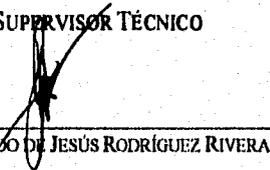
| | |
|---------------|--|
| PRESIDENTE | PROF. JAVIER AUDRY SÁNCHEZ |
| VOCAL | PROF. NATALIA ELVIRA DE LA TORRE ACEVES |
| SECRETARIA | PROF. LETICIA OFELIA CERVANTES ESPINOSA |
| 1ER. SUPLENTE | PROF. VICTORIA DINORAH VERDEJO COSS Y LEÓN |
| 2DO. SUPLENTE | PROF. MARCO ANTONIO URESTI MALDONADO |

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA: DEPARTAMENTO DE FISIQUÍMICA DE
LA FACULTAD DE QUÍMICA.

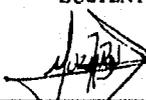
ASESOR DEL TEMA


NATALIA ELVIRA DE LA TORRE ACEVES

SUPERVISOR TÉCNICO


FERNANDO DE JESÚS RODRÍGUEZ RIVERA

SUSTENTANTE


JOB DANIEL GUZMÁN CARRAZCO

AGRADECIMIENTOS

Sin el constante y decidido apoyo de mis padres no hubiera sido posible ni la realización de este trabajo, ni la culminación de esta primera etapa de mi formación personal. Siempre estaré en deuda con ellos.

La UNAM ha sido también de una ayuda invaluable, en especial la maestra Natalia, quien fue una guía durante toda la carrera, y Fernando de Jesús a quien deben atribuírsele los aciertos de este trabajo.

Índice General

| | |
|--|-----|
| Resumen | 1 |
| Introducción | 1 |
| Capítulo 1: Fundamentos y aplicaciones de la programación lineal | 3 |
| Capítulo 2: Programas de cómputo comerciales | 40 |
| Capítulo 3: Reglas de Mezclado | 54 |
| Capítulo 4: La producción de gasolinas en México | 87 |
| Capítulo 5: Definición del problema | 103 |
| Capítulo 6: Optimización | 115 |
| Índice | 137 |

Resumen

Durante la refinación del petróleo crudo se obtienen diversos tipos de gasolina. Por si solo ninguno de estos tipos es capaz de cumplir las especificaciones ambientales, que se exigen a las gasolinas de consumo final. Pero mezclados en cierta proporción pueden cumplirlas. Tradicionalmente, la proporción necesaria se ha determinado mediante ensayos experimentales en las refinerías de PEMEX. Aquí, se propone el empleo de una técnica de optimización conocida como programación lineal, para determinar analíticamente la proporción económicamente óptima. Pues de hecho son muchas las proporciones o combinaciones que cumplen las especificaciones. Y, a diferencia del enfoque tradicional, la programación lineal explora todas las posibilidades y selecciona la más rentable.

La utilidad de la programación lineal se demuestra maximizando las ganancias de la refinería de Cadereyta, tal y como se encontrará en el año 2000, una vez que finalicen los proyectos que están siendo llevados a cabo en ella. Estos proyectos tienen la finalidad de producir gasolinas reformuladas, que cumplirán los más altos estándares de calidad. Los resultados de la optimización indican que no es económicamente viable, la producción de un 100% de gasolinas reformuladas. Por lo que la refinería producirá sólo un 60% de estas gasolinas y el resto de gasolinas de especificaciones más relajadas. Con lo que se concluye que la normatividad deberá ajustarse para producir dos grupos de gasolinas, uno para los grandes centros urbanos y otro para las zonas con baja densidad de población.

Contenido

- ◆ Los capítulos 1 y 2 explican los fundamentos matemáticos de la programación lineal, así como la manera de utilizar esta técnica.

- ◆ El capítulo 3 es una recopilación de reglas de mezclado lineales de alta precisión. Estas reglas de mezclado, mejoran el desempeño de la programación lineal, en problemas de mezclado de gasolinas.
- ◆ Los capítulos 4 y 5 describen la producción de gasolinas, definen las características de los tipos de gasolina a mezclar y establecen las especificaciones a cumplir.
- ◆ Finalmente, en el capítulo 6 se optimizan las ganancias de la refinería de Cadereyta utilizando programación lineal.

El documento completo, tiene el objetivo de hacer posible el uso de la programación lineal en las refinerías de PEMEX. Por ello explica las bases de la técnica, allana el terreno para su aplicación con la recopilación de reglas de mezclado, y finalmente, ejemplifica su uso en la refinería de Cadereyta. Si usted ya está familiarizado con la programación lineal, puede ahorrar tiempo comenzando a leer a partir del capítulo 4. Por otra parte, si su interés radica sólo en la programación lineal, el capítulo 1 debe bastar para cubrir sus necesidades.

Introducción

El mezclado es uno de los pasos más importantes en la transformación de petróleo crudo en gasolinas de consumo final. Los diferentes productos obtenidos de la destilación del crudo y de procesos como cracking, reformación catalítica y alquilación, deben ser mezclados para cumplir las especificaciones comerciales del producto terminado.

Resolver un problema de mezclado de gasolinas, significa: encontrar los componentes y la proporción óptima de estos para cumplir las especificaciones de la mezcla en: octanaje, presión de vapor, cantidad de azufre, de benceno, de olefinas, etc.

La solución del problema no es simple. Es necesario predecir, por ejemplo: el octanaje o la presión de vapor que tendrá una mezcla de varios hidrocarburos conociendo tan sólo las propiedades de cada componente. Pero además, no basta obtener la composición de la mezcla que cumpla las especificaciones del producto final. Es necesario asegurarnos de que esa composición es la mejor posible, no sólo debe cumplir la especificaciones, debe también cumplirlas al más bajo costo posible o generando las máximas ganancias alcanzables.

De hecho, en un problema real, el número de composiciones acertadas es enorme. Y es aquí donde la programación lineal y los algoritmos desarrollados con ella encuentran su aplicación.

La programación lineal es una herramienta que permite maximizar o minimizar a una función objetivo lineal de restricciones lineales.

La función objetivo, a minimizar, es aquella que de acuerdo con la composición usada arroja el costo total de mezclado, toma en cuenta el costo de cada componente y el costo de

aditivos especiales. O bien la función objetivo a maximizar es aquella que resulta de restar de los ingresos por ventas el costo total de mezclado.

Las restricciones no son otra cosa que las limitaciones en materia prima. ¿Cuánto hay disponible? La necesidad de cumplir con las especificaciones. Y otras no menos importantes como cubrir la demanda.

El objetivo de este trabajo es hacer posible el uso de la programación lineal en la solución de problemas de mezclado de gasolinas. Para ello es necesario modelar el problema de mezclado como un sistema de ecuaciones y desigualdades lineales que se acoplen a una función objetivo también lineal.

Es necesario entonces:

- Encontrar relaciones de mezclado *lineales* que predigan las propiedades de la mezcla a partir de las propiedades de cada componente. (Capítulo 3)
- Obtener información de los procesos de elaboración de gasolinas en México: ¿Qué tipo de gasolinas se mezclan, cuáles son sus propiedades y cuánto hay disponible? ¿Qué especificaciones debe cumplir la mezcla? ¿Cuál es la demanda?...etc. (Capítulo 5)
- Una vez reunidos todos los datos, es necesario expresar toda la información en el modelo matemático ya descrito. (Capítulo 6)
- Y finalmente, llevar a cabo una optimización lineal mediante un programa de cómputo y analizar los resultados arrojados por la optimización. (Capítulo 6)

Capítulo I

Fundamentos y aplicaciones de la programación lineal

Índice

| | |
|--|----|
| Un ejemplo simplificado | 7 |
| La solución gráfica | 10 |
| Problemas lineales degenerados | 15 |
| El método simplex | 18 |
| Obtención de una primera solución factible | 28 |
| Análisis de sensibilidad | 33 |
| El problema dual | 37 |
| Bibliografía para el capítulo I | 39 |

Capítulo 1

Fundamentos y Aplicaciones de la Programación Lineal

El término programación lineal fue acuñado por George Dantzig en 1947 para referirse al proceso de optimización en problemas en los que tanto la función objetivo como las restricciones son lineales. Al decir "programación" no se implica la codificación del problema en algún lenguaje de computadora, esto es: no hay que programar. Y, aunque la solución de casi todos los problemas prácticos mediante programación lineal requiere del uso de una computadora que ejecute los algoritmos explicados en este capítulo, ya existen diversos programas de cómputo para este propósito.

La programación lineal es una técnica de optimización ampliamente usada y es una de las más efectivas. En una planta de proceso, la programación lineal puede servir para:

- ◇ Asignar horarios a los trabajadores de tal forma que la fuerza laboral sea adecuada cada día y la satisfacción y la productividad del obrero sean tan altas como sea posible.
- ◇ Seleccionar los productos a elaborarse en el próximo periodo, sacando el mayor provecho de los recursos existentes y los precios actuales para alcanzar una utilidad máxima.
- ◇ Encontrar un patrón de distribución de las plantas a los almacenes que minimice los costos según las capacidades de cada almacén.
- ◇ Auxiliar en el diseño de un contrato de compra tomando en cuenta la utilidad, los contratos de la competencia y las restricciones en la operación.

Pero la programación lineal no sólo funciona en plantas de proceso, puede utilizarse para determinar constantes termodinámicas o para ajustar parámetros estadísticos y en general siempre que se desee saber la combinación óptima de recursos que produzcan un máximo beneficio o un mínimo perjuicio puede usarse la programación lineal.

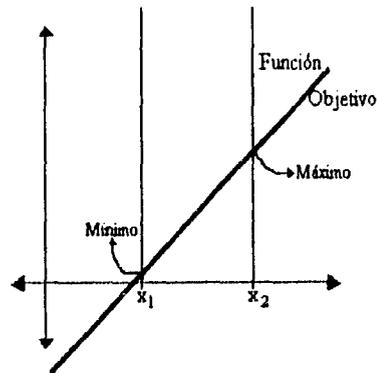
Cuando cada uno de estos problemas se expresa matemáticamente, involucra un número potencialmente grande de variables, ecuaciones e inecuaciones. La solución no sólo tiene que satisfacer la totalidad de las relaciones, sino que también tiene que alcanzar un extremo de la función objetivo tal como la maximización de una ganancia o la minimización de un costo. Pero con la ayuda de una computadora es posible resolver problemas con cientos e incluso miles de variables y restricciones. Además los problemas lineales* gozan de ciertas particularidades que simplifican su solución, por ejemplo un mínimo o un máximo local es siempre un mínimo o un máximo global. Pero la particularidad más importante es que el punto óptimo siempre se localiza en un extremo de la función, sobre alguna restricción o sobre la intersección de varias restricciones. Y no en el interior de la región donde las restricciones se cumplen cabalmente. Para entender esto es útil analizar el hipotético caso de un problema lineal de una sola variable. La función objetivo sería una línea recta ($y = ax$, por ejemplo) y a menos que se restrinja el valor de x , la función no tendría un máximo o un mínimo definibles. Esta es otra particularidad importante de los problemas lineales que a diferencia de los problemas no lineales, sólo tienen solución si existen restricciones.

Entonces supóngase que se le colocan dos restricciones: $x \geq x_1$ y $x \leq x_2$

Ahora el mínimo se localiza en x_1 , sobre la restricción $x \geq x_1$, y el máximo se localiza en x_2 , sobre la otra restricción.

* Un "problema lineal" es un problema de optimización que puede ser resuelto por programación lineal.

Observe la siguiente figura:



Aunque normalmente los problemas lineales no son de una variable, las particularidades resaltadas siguen siendo válidas para problemas multivariantes y constituyen la base de los algoritmos de resolución. Como el punto óptimo siempre cae sobre una restricción, para encontrarlo basta evaluar la función en los puntos donde esta interseca con una o varias restricciones.

Un ejemplo simplificado

Se ilustrará ahora la solución detallada de un problema lineal considerando un problema simplificado de mezclado de gasolinas:

Se desean producir 3500 barriles diarios de una gasolina que debe cumplir las siguientes especificaciones:

$$\text{Octanaje} \geq 95, \text{ RVP} \leq 6 \text{ psia}^*$$

Para preparar la gasolina se dispone de las gasolinas obtenidas del cracking, de la alquilación y de la destilación directa del crudo. Las propiedades de la materia prima se resumen en la siguiente tabla:

| Gasolina | RVP (psia) | Octanaje | Cantidad disponible (barriles/día) | Costo (dólares/barril) |
|----------------|------------|----------|------------------------------------|------------------------|
| de Alquilación | 5 | 100 | 2500 | 10 |
| de Cracking | 8 | 87 | 3000 | 5 |
| de Destilación | 4 | 80 | 2500 | 7 |

Se desea saber la cantidad de cada gasolina que debe ser usada para garantizar el costo más bajo posible.

Lo primero que debe hacerse es expresar el problema en forma matemática.

La función objetivo a minimizar es la que nos arroja el costo de mezclado:

$$\text{Costo} = 10 \text{ Alq} + 5 \text{ Crack} + 7 \text{ Dest}$$

Alq denota los barriles diarios usados de gasolina de alquilación, *Crack* los de gasolina de cracking y *Dest* los de destilación. Por lo que *Costo* denota los dólares diarios que la producción de la gasolina final consume.

* Reid Vapor Pressure (RVP) es una medida de la volatilidad, su significado preciso será explicado mas adelante.

Ahora podemos establecer los límites o fronteras de nuestras variables

$$0 \leq Alq \leq 2500$$

$$0 \leq Crack \leq 3000$$

$$0 \leq Dest \leq 2500$$

Los algoritmos básicos de la programación lineal manejan variables positivas, por lo que todas las variables están implícitamente restringidas a ser mayores o iguales a cero.

Para este problema esa restricción no sólo no presenta inconvenientes sino que es necesaria y así lo será en la mayoría de los casos. Pues la mayoría de las variables químicas o físicas son por definición positivas, por ejemplo: los flujos, la concentración, la presión o la temperatura absoluta.

Sin embargo si por alguna razón se requiere usar una variable capaz de tomar valores negativos basta usar un cambio de variable como el siguiente $x_1 = x_2 - x_3$ donde: $x_2 \geq 0$ y $x_3 \geq 0$ y dado que x_1 puede tomar cualquier valor debe ser sustituido donde quiera que aparezca para trabajar tan sólo con variables positivas. Cuando se está usando algún programa de cómputo comercial, este hace el cambio de variable automáticamente y presenta los resultados utilizando la variable original. De manera que el usuario no se percata de que hubo un cambio de variable.

Volviendo al problema, ahora es necesario expresar el resto de las restricciones del problema a partir de los datos dados. Se desean producir 3500 barriles diarios de gasolina de 95 números de octano y 6 psi. Suponiendo, como una simplificación, que no hay cambios de volumen durante el mezclado:

$$Alq + Crack + Dest = 3500$$

Para continuar, se debe generar una inecuación a partir del hecho de que la gasolina final debe tener un octanaje mayor o igual a 95. Para ello primero se supondrá, como otra simplificación, que el octanaje de la mezcla de gasolinas puede obtenerse como la suma del octanaje de cada componente multiplicado por su fracción volumétrica en la mezcla, es decir:

$$100 \frac{Alq}{Alq + Crack + Dest} + 87 \frac{Crack}{Alq + Crack + Dest} + 80 \frac{Dest}{Alq + Crack + Dest} \geq 95$$

Ahora para linealizar la restricción basta multiplicar ambos lados de la desigualdad por $Alq + Crack + Dest$ y sumar términos semejantes para llegar a:

$$5 Alq - 8 Crack - 15 Dest \geq 0$$

Análogamente para la RVP se puede suponer, como una simplificación más, que la RVP de una mezcla puede calcularse como la suma de la RVP de cada componente multiplicada por su fracción volumétrica:

$$5 \frac{Alq}{Alq + Crack + Dest} + 8 \frac{Crack}{Alq + Crack + Dest} + 4 \frac{Dest}{Alq + Crack + Dest} \leq 6$$

O alternativamente: $- Alq + 2 Crack - 2 Dest \leq 0$

Resumiendo el planteamiento del problema queda de la siguiente manera:

Minimizar:

$$Costo = 10 Alq + 5 Crack + 7 Dest$$

Restringidos a:

$$0 \leq Alq \leq 2500$$

$$0 \leq Crack \leq 3000$$

$$0 \leq Dest \leq 2500$$

$$Alq + Crack + Dest = 3500$$

$$5 Alq - 8 Crack - 15 Dest \geq 0$$

$$- Alq + 2 Crack - 2 Dest \leq 0$$

La solución gráfica

El problema así planteado está listo para ser resuelto. Sin embargo antes de ejemplificar el método simplex, que es el algoritmo en el que se basan la mayoría de los programas de cómputo, se procederá a solucionar el problema de manera gráfica. Esto ilustrará ampliamente las bases del método simplex, que será explicado en seguida.

Para solucionar el problema de manera gráfica, es necesario reducir su dimensionalidad, esto puede hacerse despejando *Dest* de la restricción de igualdad: $Dest = 3500 - (Alq + Crack)$ y sustituyendo su definición en todas las relaciones para así eliminar la variable. Sólo hay que recordar que la restricción implícita: $Dest \geq 0$ debe ser también considerada. De lo contrario al resolver el problema y reutilizar la definición de *Dest* para calcular su valor, se podría encontrar que la solución implica un valor negativo de *Dest*. Lo cual es físicamente imposible, pues *Dest* representa los barriles diarios de gasolina de destilación usados.

Una vez sustituida la definición de *Dest*, el problema queda replanteado de la siguiente manera:

Minimizar: $Costo = 24500 + 3 Alq - 2 Crack$

Restringidos a: $0 \leq Alq \leq 2500$

$$0 \leq Crack \leq 3000$$

$$Alq + Crack \leq 3500 \quad (Dest \geq 0)$$

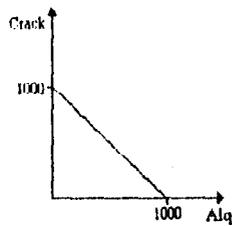
$$Alq + Crack \geq 1000 \quad (Dest \leq 2500)$$

$$20 Alq + 7 Crack \geq 52500 \quad (\text{Octanaje})$$

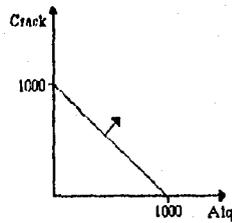
$$Alq + 4 Crack \leq 7000 \quad (\text{RVP})$$

Ahora dado que la función objetivo es sólo de dos variables, se puede solucionar el problema en forma gráfica. Para ello se comenzará por trazar todas las desigualdades en una gráfica de Crack contra Alq.

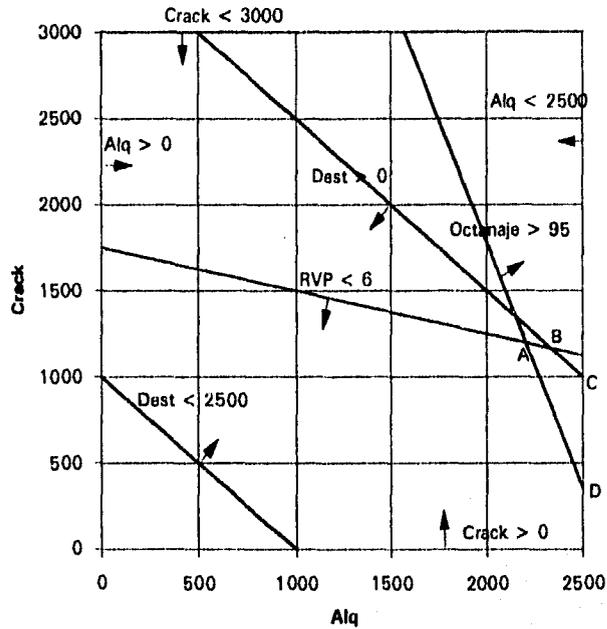
El trazo de las desigualdades es muy simple, por ejemplo para trazar la restricción $Alq + Crack \geq 1000$, se convierte la desigualdad en ecuación, se supone un valor para una variable y se calcula la otra. Si $Alq = 0$ entonces $Crack = 1000$ y si $Crack = 0$ $Alq = 1000$:



Con eso se ha establecido el limite de la desigualdad, ahora sólo resta indicar si la desigualdad se cumple arriba o abajo de la línea. Por simple inspección es claro que la restricción $Alq + Crack \geq 1000$ sólo se cumple arriba de la línea. Esto se indica de la siguiente manera:



Trazando todas las desigualdades se llega al siguiente diagrama:

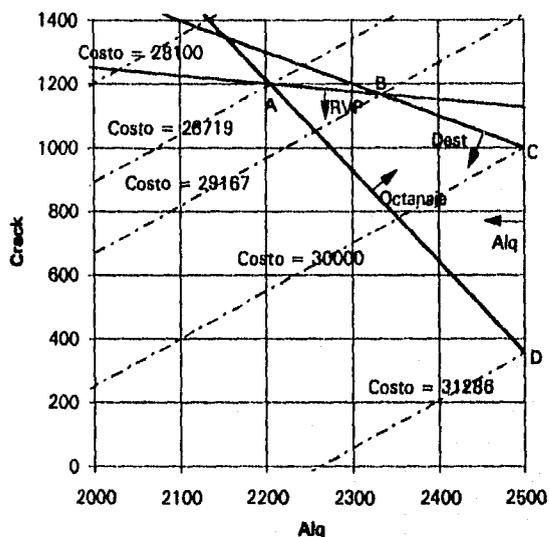


Observe que dentro del polígono: A-B-C-D todas las restricciones se cumplen. Pero como ya se dijo el mínimo no se encuentra dentro del polígono sino sobre la intersección de una o varias restricciones, es decir en alguno de los vértices del polígono. Por ello para encontrar el óptimo basta evaluar la función objetivo en cada uno de los vértices.

| Vértice | Alq (Barriles/día) | Crack (Barriles/día) | Costo (dólares/día) |
|---------|--------------------|----------------------|---------------------|
| A | 2205.48 | 1198.63 | 28719.18 |
| B | 2333.33 | 1166.66 | 29166.66 |
| C | 2500 | 1000 | 30000.00 |
| D | 2500 | 357.143 | 31285.70 |

El valor de Alq y Crack puede leerse de la gráfica o calcularse resolviendo el sistema de las dos inecuaciones que se intersectan en cada vértice. Y el Costo se obtiene sustituyendo los valores de Alq y Crack en la función objetivo.

También es muy ilustrativo mostrar en un diagrama amplificado los contornos de la función objetivo:



Los contornos de la función objetivo son líneas donde la función tiene un valor constante. Para trazarlas se fija un valor del costo, se supone una variable y se calcula la otra. En esta versión ampliada del diagrama de desigualdades pueden observarse varios contornos. Observe como la función objetivo disminuye en una dirección específica. No es posible que en una misma dirección la función primero disminuya y luego aumente porque se trata de una función lineal.

No se escoge el valor de 28100 ni ningún otro de los valores menores situados más arriba a la derecha porque estos no están dentro del polígono donde las restricciones se cumplen.

Está claro entonces que la solución al problema es usar 2205.5 barriles de gasolina de alquilación, 1198.6 barriles de gasolina de cracking y lo que falta para 3500: 95.9 barriles de gasolina de destilación.

Cualquier otra combinación implica un costo mayor innecesario. Puede verificarse que en efecto los valores encontrados cumplen las restricciones. Por ejemplo el octanaje de la

mezcla es: $100 \frac{2205.5}{3500} + 87 \frac{1198.6}{3500} + 80 \frac{95.9}{3500} = 95$, así mismo la RVP es de:

$5 \frac{2205.5}{3500} + 8 \frac{1198.6}{3500} + 4 \frac{95.9}{3500} = 6$. Y todas las variables se encuentran dentro de sus límites,

esto es: no se excede la cantidad disponible de ninguna, $2205.5 < 2500$, $1198.6 < 3000$ y

$95.9 < 2500$. Observe que el cumplimiento de estas restricciones está relajado, mientras que

el cumplimiento de las dos primeras está ya en el límite de la igualdad. Cuando una

restricción se encuentra en el límite se dice que está activa. Como se verá más adelante

cuando una restricción está activa tiene un valor asociado conocido como valor dual o

precio sombra. Dicho valor contiene información importante acerca del cambio de la

solución ante cambios pequeños en las restricciones activas. Observe que un cambio

pequeño en las restricciones inactivas no produce ningún efecto en la solución del problema.

Por ejemplo si la cantidad disponible de gasolina de destilación disminuye a 2000 barriles

diarios el problema conserva exactamente la misma solución. (Observe el diagrama de

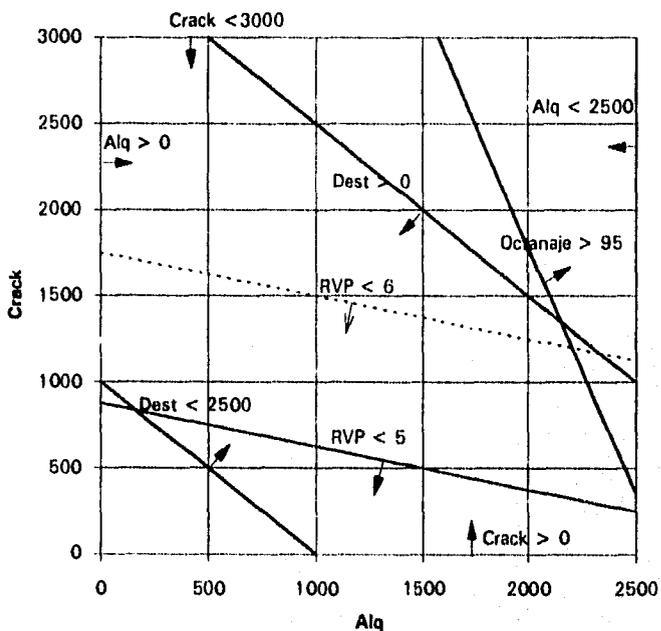
desigualdades). Sin embargo cualquier cambio pequeño en la RVP cambia la solución del

problema. Y un cambio grande puede tener consecuencias muy importantes.

Problemas lineales degenerados

Cuando un problema lineal está mal formulado se dice que es degenerado por ejemplo si se deseara una RVP de 5 el problema así planteado, no tendría solución.

Observe el diagrama de desigualdades cuando se especifica una $RVP \leq 5$



No existe ninguna zona en que las desigualdades se cumplan. Pues la restricciones de RVP* y octanaje se excluyen mutuamente. Cuando esto sucede el problema no tiene solución, por ello es importante formular las restricciones en forma adecuada.

* Observe como la restricción $RVP \leq 5$ es estrictamente paralela a la restricción $RVP \leq 6$. Los cambios pequeños pueden interpretarse como desplazamientos paralelos en la restricción.

Existen otras formas en las que un problema lineal carece de solución. Por ejemplo si las variables no se acotan y no se definen restricciones, no existe en el diagrama de iteraciones una región definida donde pueda buscarse el óptimo. Ya se explicó al principio del capítulo que sin restricciones y sin establecer los límites de las variables el problema lineal no tiene sentido. Y de hecho la razón de ser de la programación lineal radica en que en la realidad existen limitaciones. Es por las propias limitaciones que se desea minimizar costos o maximizar ganancias y es por ese deseo que surge la programación lineal.

Los problemas lineales degenerados presentan en general problemas de convergencia cuando se intentan resolver con algún algoritmo analítico en alguna computadora. Por eso es importante acotar nuestras variables y verificar que las restricciones no sean demasiado estrictas como para que no haya solución.

Es posible también que un problema, a pesar de tener un sistema de restricciones bien formulado, carezca de una solución única. En este caso la falla se localiza en la función objetivo cuyos contornos son paralelos a alguna de las restricciones. Nótese que el problema puede resolverse, y en general no presenta problemas de convergencia. Pero no existe un punto óptimo sino una cantidad muy grande de combinaciones que producen todas un mínimo costo o una máxima ganancia.

Regresando al ejemplo, si los costos de las diferentes gasolinas cambiaran de la siguiente manera:

| Tipo de gasolina | Costo (dólares/día) |
|------------------|----------------------|
| de alquilación | 22 |
| de cracking | 9 |
| de destilación | 2 |

La nueva función objetivo a minimizar sería:

$$\text{Costo} = 22 \text{ Alq} + 9 \text{ Crack} + 2 \text{ Dest}$$

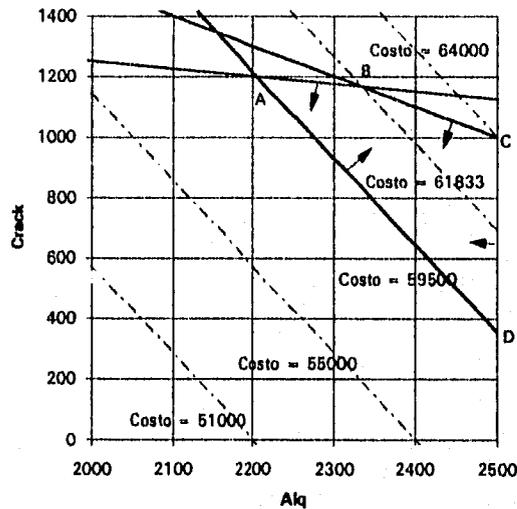
Sustituyendo $\text{Dest} = 3500 - (\text{Alq} + \text{Crack})$:

$$\text{Costo} = 7000 + 20 \text{ Alq} + 7 \text{ Crack}$$

Observe que la restricción de octanaje es ahora linealmente dependiente (paralela):

$$20 \text{ Alq} + 7 \text{ Crack} \geq 52500.$$

En forma gráfica el problema se ve así:



Observe que el mínimo de la función es 59500 dólares diarios, pero son muchas las combinaciones que producen ese resultado, $\text{Alq} = 2500$ con $\text{Crack} = 357.143$ (vértice D) y $\text{Alq} = 2205.48$ con $\text{Crack} = 1198.63$ (vértice A) son sólo algunas de ellas. Un problema bien formulado tiene una solución única.

El método Simplex

En la práctica los problemas lineales pueden involucrar un sinnúmero de variables. De manera que es necesario un algoritmo más versátil que el método gráfico para resolverlos.

George Dantzig fue el primero que propuso un algoritmo analítico para resolver problemas lineales de "n" variables. El algoritmo de Dantzig al igual que los algoritmos actuales se basa en el hecho de que la solución se encuentra en alguno de los vértices de la región donde las restricciones se cumplen. Lo que los algoritmos hacen es evaluar la función en alguno de los vértices y luego se mueven hacia otro vértice de tal forma que la función mejore su valor, y el proceso se repite hasta encontrar el óptimo.

La base de estos algoritmos será ilustrada resolviendo una vez más el ejemplo simplificado en su versión de dos variables para comparar el procedimiento con la solución gráfica ya explicada.

Reescribiendo, el problema a resolver es:

Minimizar: $Costo = 24500 + 3 Alq - 2 Crack$

Restringidos a: $Alq \leq 2500$

$$Crack \leq 3000$$

$$Alq + Crack \leq 3500 \quad (Dest \geq 0)$$

$$Alq + Crack \geq 1000 \quad (Dest \leq 2500)$$

$$20 Alq + 7 Crack \geq 52500 \quad (\text{Octanaje})$$

$$Alq + 4 Crack \leq 7000 \quad (\text{RVP})$$

* El algoritmo de Karmarkar emplea una técnica diferente, su coloca dentro de la región donde las desigualdades se cumplen y se mueve en dirección al vértice óptimo.

Para aplicar el método los lados derechos de las inecuaciones deben ser positivos, en este caso no es necesario multiplicar por -1 a ninguna de las ecuaciones.

En seguida hay que convertir todas las inecuaciones en ecuaciones agregando variables auxiliares. Las variables auxiliares, al igual que el resto de las variables, son siempre positivas por lo que se agregan sumando o restando dependiendo de la desigualdad. Por ejemplo para la restricción de octanaje hay que agregar una variable auxiliar restando:

$20 Alq + 7 Crack \geq 52500$ se convierte en $20 Alq + 7 Crack - Oct = 52500$. Si $(20 Alq + 7 Crack)$ es igual a 52500, Oct toma el valor de cero. Si $(20 Alq + 7 Crack)$ toma un valor mayor a 52500, digamos 70000, Oct toma un valor positivo que haga que la igualdad se cumpla, en este caso 17500. Si $(20 Alq + 7 Crack)$ tomara un valor menor a 52500 violando la inecuación, digamos 50000, Oct tendría que tomar un valor negativo para que la igualdad se cumpliera, -2500 en este caso. Como Oct es siempre positiva, $(20 Alq + 7 Crack)$ será siempre mayor o igual a 52500.

Para la restricción RVP la variable auxiliar se agrega sumando; $Alq + 4 Crack \leq 7000$ se convierte en: $Alq + 4 Crack + RVP = 7000$. Si $(Alq + 4 Crack)$ se mantiene por debajo de 7000, RVP toma un valor positivo para completar la igualdad. Pero si $(Alq + 4 Crack)$ tomase un valor mayor a 7000 forzaría a RVP a ser negativa, lo cual es imposible.

Convirtiendo todas las inecuaciones, se llega al siguiente sistema de ecuaciones:

$$Alq + RA = 2500, \quad Crack + RC = 3000,$$

$$Alq + Crack + D = 3500, \quad Alq + Crack - RD = 1000$$

$$20 Alq + 7 Crack - Oct = 52500, \quad y \quad Alq + 4 Crack + RVP = 7000$$

Observe que todas las variables auxiliares tienen un significado físico preciso. Por ejemplo RA, la Reserva de Alq, representa la cantidad de gasolina de alquilación que permanece almacenada sin ser usada. Pues si Alq alcanza el valor de 2500 (el máximo disponible), entonces RA, la reserva, será de cero; de otra forma la ecuación que define a RA no se cumple. Así mismo RC es la reserva de Crack. D es la cantidad de gasolina de destilación que se está empleando. RD es la reserva de destilado. Oct vale cero si la gasolina final tiene un valor exacto de 95 y tendrá un valor positivo si la mezcla tiene un octanaje mayor a 95. Y finalmente RVP vale cero si la RVP de la mezcla es 6 y toma un valor positivo si la RVP es menor a 6.

Ahora hay que expresar el recién formulado sistema de ecuaciones en una matriz pues el algoritmo hace uso de transformaciones matriciales muy similares a las del algoritmo de Gauss para solucionar un sistema de ecuaciones. De hecho como el algoritmo se mueve de vértice a vértice y en cada vértice se cumplen simultáneamente dos o más restricciones. De alguna forma el método consiste en solucionar repetidamente un sistema de ecuaciones.

Reescribiendo el sistema de ecuaciones tal como tiene que ser representado en la matriz:

$$\begin{aligned}
 \text{Alq} + \text{RA} &= 2500 \\
 \text{Crack} + \text{RC} &= 3000 \\
 \text{Alq} + \text{Crack} + \text{D} &= 3500 \\
 -\text{Alq} - \text{Crack} + \text{RD} &= -1000 \\
 -20\text{Alq} - 7\text{Crack} + \text{Oct} &= -52500 \\
 \text{Alq} + 4\text{Crack} + \text{RVP} &= 7000 \\
 -3\text{Alq} + 2\text{Crack} + \text{Costo} &= 24500
 \end{aligned}$$

Un par de ecuaciones fueron multiplicadas por -1 y se reestructuró la función objetivo.

La matriz será entonces:

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | Costo | b |
|-----|-----|-------|----|----|---|----|-----|-----|-------|--------|
| RA | 1 | | 1 | | | | | | | 2500 |
| RC | | 1 | | 1 | | | | | | 3000 |
| D | 1 | 1 | | | 1 | | | | | 3500 |
| RD | -1 | -1 | | | | 1 | | | | -1000 |
| Oct | -20 | -7 | | | | | 1 | | | -52500 |
| RVP | 1 | 4 | | | | | | 1 | | 7000 |
| | -3 | 2 | | | | | | | 1 | 24500 |

Observe que la matriz es simplemente la representación del sistema de ecuaciones ya formulado. La función objetivo se escribe de tal forma que sólo quede una constante del lado derecho. Y todos los espacios vacíos son ceros. La última columna contiene el valor de las constantes del lado derecho, pues se trata de una matriz aumentada. Observe que el sistema no tiene una solución exacta pues existen 9 variables y tan sólo 7 ecuaciones. Tenemos entonces 2 grados de libertad por lo que tienen que existir 2 variables llamadas variables no-básicas. Para resolver el sistema se fija el valor de las variables no-básicas en cero. Y tanto la función objetivo como el resto de las variables (las 6 variables básicas) deben estar expresadas exclusivamente en función de variables no-básicas. Téngase eso en mente: *las variables no-básicas tienen siempre el valor de cero y todo está expresado en función de ellas*. En este momento Alq y Crack son las variables no-básicas y por lo tanto su valor es cero. El resto de las variables: RA, RC, D, RD, Oct y RVP son las variables básicas. Cada renglón de la matriz está etiquetado con el nombre de una variable básica. Y de cada renglón puede leerse la ecuación que define a cada variable básica en función de las variables no-básicas. Por ejemplo del primer renglón: $Alq + RA = 2500$ Como el valor de Alq es cero el valor de RA es 2500. De la misma forma el valor del resto de las variables básicas se lee

en la columna b de constantes. Pues todas están en función exclusiva de Alq y Crack, las variables no-básicas, cuyo valor es cero.

Obsérvese la matriz. Todas las variables tanto las básicas como las no-básicas y también la función objetivo misma, tienen una columna asociada. Por ello cada columna está etiquetada con el nombre de una variable. Las columnas de las variables no-básicas están "llenas de números". Mientras que las columnas de las variables básicas y de la función objetivo están vacías. Casi todos sus elementos son ceros, pero en algún lugar de cada columna existe un uno. Por eso cada variable básica tiene también un renglón asociado, debidamente etiquetado. Y el último renglón corresponde a la función objetivo.

Entonces simplemente leyendo la tabla: Costo = 24500 dólares/día, Alq = Crack = 0 barriles/día, RA = 2500 barriles/día, RC = barriles/día, D = 3500 barriles/día, RD = -1000 barriles/día, Oct = -52500, RVP = 7000.

La tabla o matriz está mal planteada, Las variables RD y Oct son negativas. Es decir la gasolina no tiene el octanaje deseado y se pretende usar más gasolina de destilación de la disponible ($Dest \leq 2500$).

Esto es un problema común en programación lineal. Recuérdese que el algoritmo busca el óptimo de vértice en vértice, pero para empezar a buscar debe colocársele sobre un vértice. El algoritmo está fuera de la región donde las desigualdades se cumplen. Existe, por supuesto, un método especial para llegar a dicha región y será explicado más adelante en este mismo capítulo. Por ahora observe el diagrama de desigualdades de la página 12, el algoritmo comenzará su búsqueda en el vértice "C": Alq = 2500 y Crack = 1000. Sustituyendo estos valores es posible calcular el valor del resto de las variables:

$$\begin{aligned} \text{Costo} &= 24500 + 3(2500) - 2(1000) = 30000 \\ \text{RA} &= 2500 - 2500 = 0, & \text{RC} &= 3000 - 1000 = 2000 \\ \text{D} &= 3500 - 2500 - 1000 = 0, & \text{RD} &= -1000 + 2500 + 1000 = 2500 \\ \text{Oct} &= -52500 + 7(1000) + 20(2500) = 4500, & \text{RVP} &= 7000 - 4(1000) - 2500 = 500 \end{aligned}$$

Observe que todas las variables son positivas y que $\text{RA} = \text{D} = 0$. Por lo tanto RA y D son las variables no-básicas y todo debe ser expresado en función de ellas:

$$\begin{aligned} \text{Alq} &= 2500 - \text{RA} \text{ (usando el renglón de RA)} \\ \text{Crack} &= 3500 - \text{D} - \text{Alq} = 1000 - \text{D} + \text{RA} \text{ (usando el renglón de D y sustituyendo Alq)} \\ \text{Costo} &= 24500 + 3(2500 - \text{RA}) - 2(1000 - \text{D} + \text{RA}) = 30000 + 2\text{D} - 5\text{RA} \\ \text{RC} &= 3000 - \text{Crack} = 2000 + \text{D} - \text{RA} \\ \text{RD} &= -1000 + \text{Alq} + \text{Crack} = 2500 - \text{D} \\ \text{Oct} &= -52500 + 7\text{Crack} + 20 \text{Alq} = 4500 - 7\text{D} - 13 \text{RA} \\ \text{RVP} &= 7000 - 4\text{Crack} - \text{Alq} = 500 + 4\text{D} - 3\text{RA} \end{aligned}$$

La nueva matriz es:

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | Costo | b |
|-------|-----|-------|----|----|----|----|-----|-----|-------|-------|
| Alq | 1 | | 1 | | | | | | | 2500 |
| Crack | | 1 | -1 | | 1 | | | | | 1000 |
| RC | | | 1 | 1 | -1 | | | | | 2000 |
| RD | | | | | 1 | 1 | | | | 2500 |
| Oct | | | 13 | | 7 | | 1 | | | 4500 |
| RVP | | | 3 | | -4 | | | 1 | | 500 |
| | | | 5 | | -2 | | | | 1 | 30000 |

Esta matriz es la llamada primera solución factible y normalmente no corresponde con el óptimo por lo que se debe realizar una búsqueda del óptimo vértice a vértice. Recuérdese que el propósito es minimizar la función : $\text{Costo} = 30000 - 5\text{RA} + 2\text{D}$. RA y D valen cero en este momento y no pueden ser negativas. Por lo tanto la única forma de disminuir el valor de Costo es incrementando RA. Esto es: de todas las variables no-básicas en función de las cuales está expresada la función objetivo, RA es la que incrementándose produce una mejora más importante en dicha función. Como regla general lo que debe hacerse es seleccionar el

coeficiente positivo mayor en el renglón de la función objetivo. La variable RA por tener coeficiente 5, debe ser seleccionada.

Pero si RA se incrementa dejará de ser una variable no-básica y pasará a ser una variable básica. Por lo tanto es necesario que una de las variables que ahora son básicas pase a ser no-básica. Para saber cual variable debe convertirse en no-básica, hay que responder la pregunta: ¿Qué tanto puede incrementarse RA? Como la función objetivo es lineal conviene incrementar RA tanto como sea posible, de hecho si no se le asigna un valor infinito es porque existen restricciones que limitan ese valor. Pero ¿Cuál de todas estas restricciones es la más limitante? Hay que analizar todas las restricciones empezando por el primer renglón de la tabla: RA no puede ser mayor a 2500, pues de lo contrario Alq sería negativo, esto es obvio, la reserva de gasolina de alquiler no puede exceder los 2500 barriles porque eso es todo lo disponible. Pasando al segundo renglón: Crack - RA + D = 1000, no importa cuanto se incremente RA, siempre existirá un valor *positivo* de Crack que cumpla la igualdad. Observe además que si Crack fuese cero, esto es si Crack sustituyera a RA, RA sería negativa. Por lo tanto la variable Crack no es candidata para sustituir a RA como variable no-básica.

En el tercer renglón: RA + RC - D = 2000, como D = 0 y el mínimo valor que RC puede tomar es el de cero, el máximo valor de RA que la variable RC permite es el de 2000. Obsérvese que RC no sólo si es candidata sino que es hasta el momento la mejor candidata, pues Alq permite a RA tomar un valor de 2500 y RC es más restrictiva: sólo 2000. Si se cometiera el error de escoger a Alq como la variable sustituta, se violaría la restricción de no negatividad para la variable RC.

En el cuarto renglón $D + RD = 2500$, RA no está involucrada y por lo tanto puede incrementarse indefinidamente, por lo que RD no es una variable candidata.

En el quinto renglón $13RA + 7D + Oct = 4500$, el valor máximo que puede tomar RA es $4500/13 = 346.154$ pues $D = 0$ y el valor máximo se alcanza cuando $Oct = 0$, es decir cuando pasa a ser variable no-básica. Y finalmente el valor límite de RA en el sexto renglón, cuando RVP pasa a ser no-básica, se calcula dividiendo el término del lado derecho: 500 entre el coeficiente del sexto renglón, de la columna de RA: 3. Y resulta ser que $500/3 = 166.67$ es el valor más limitante (el número positivo más pequeño) y por lo tanto RVP es la variable que pasará de ser básica a ser no-básica. Es decir: se fijará su valor en cero.

Reescribiendo la tabla:

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | Costo | b |
|-------|-----|-------|----|----|----|----|-----|-----|-------|-------|
| Alq | 1 | | 1 | | | | | | | 2500 |
| Crack | | 1 | -1 | | 1 | | | | | 1000 |
| RC | | | 1 | 1 | -1 | | | | | 2000 |
| RD | | | | | 1 | 1 | | | | 2500 |
| Oct | | | 13 | | 7 | | 1 | | | 4500 |
| RVP | | | 3 | | -4 | | | 1 | | 500 ← |
| | | | 5 | | -2 | | | | 1 | 30000 |
| | | | ↑ | | | | | | | |

Se ha marcado la columna RA y el renglón RVP con una flecha. Se resalta en negro la intersección de las flechas, el elemento (6,3) de la tabla conocido como el elemento pivote.

Como ahora RVP pasará a ser variable no-básica todo debe ser expresado en función de RVP y de D que continua siendo no-básica, además de que ya nada debe estar en función de RA. Para efectuar la sustitución de RA por RVP, la forma más práctica es convertir en uno al elemento pivote. Esto se hace multiplicando todo el sexto renglón por $1/3$. (La igualdad

no se altera porque estamos multiplicando también el lado derecho de la ecuación) Después hay que convertir en cero a todos los elementos de la columna RA.

Esto también es simple por ejemplo para convertir al elemento (5,3) en cero se multiplica al renglón 6 por -13 y se le suma el resultado a todo el renglón 5. Recuerde que operaciones como estas son las que se utilizan en el algoritmo de Gauss para resolver sistemas lineales de ecuaciones.

Realizando las operaciones se llega a la siguiente tabla:

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | Costo | b |
|-------|-----|-------|----|----|--------------|----|-----|--------|-------|----------|
| Alq | 1 | | | | 1.333 | | | -0.333 | | 2333.3 |
| Crack | | 1 | | | -0.333 | | | 0.333 | | 1166.6 |
| RC | | | | 1 | 0.333 | | | -0.333 | | 1833.3 |
| RD | | | | | 1 | 1 | | | | 2500 |
| Oct | | | | | 24.33 | | 1 | -4.333 | | 2333.3 ← |
| RA | | | 1 | | -1.33 | | | 0.333 | | 166.6 |
| | | | | | 4.666 | | | -1.667 | 1 | 29166.6 |
| | | | | | ↑ | | | | | |

Ahora RA es básica y tiene un valor de 166.6 y RVP se ha convertido en no-básica. Obsérvese que ahora estamos en el vértice "B" del diagrama de desigualdades y que la función objetivo a disminuido a 29166.6. Sin embargo podemos disminuirla aun más, pues aun existen coeficientes positivos en el último renglón. En este caso el mayor de todos es 4.66 que corresponde a D. El valor limite de D que cada variable básica permite o sea el valor que tendría D al ser sustituido por cada una de las variables básicas, se puede calcular fácilmente dividiendo el vector de constantes "b" entre los coeficientes de la columna de D:

| | | | | | | |
|---------------|--------------|-----------------|--------------|----------|---------------|----------------|
| Variable: | Alq | Crack | RC | RD | Oct | RA |
| Valor limite: | $2333.3/1.3$ | $1166.6/(-0.3)$ | $1833.3/0.3$ | $2500/1$ | $2333.3/24.3$ | $166.3/(-1.3)$ |
| = | 1750 | -3500 | 5500 | 2500 | 96 | -125 |

Los valores negativos deben ser descartados porque D no puede ser negativa, en seguida se escoge el valor (positivo) más pequeño. 96 en este caso. Por lo que Oct debe sustituir a D.

Con ello nos movemos al vértice "A" del diagrama de desigualdades:

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | Costo | b |
|-------|-----|-------|----|----|---|----|-----------|---------|-------|----------|
| Alq | 1 | | | | | | -0.054795 | 0.0959 | | 2202.48 |
| Crack | | 1 | | | | | 0.013699 | 0.274 | | 1198.63 |
| RC | | | | 1 | | | -0.0137 | -0.274 | | 1801.37 |
| RD | | | | | | 1 | -0.041 | 0.178 | | 2404.1 |
| D | | | | | 1 | | 0.041 | -0.178 | | 95.89 |
| RA | | | 1 | | | | 0.054795 | 0.0959 | | 294.52 |
| | | | | | | | -0.19178 | -0.8356 | 1 | 28719.18 |

Ahora la función objetivo se escribe como: Costo = 28719.18 + 0.19178 Oct + 0.8356 RVP.

Aumentar Oct o aumentar RVP no produce ninguna mejora sobre la función objetivo, de hecho cualquier cambio empeora la función objetivo. Se ha encontrado el óptimo. Cuando todos los coeficientes del último renglón (excepto el de "b" y el de la función objetivo) son negativos, se ha alcanzado el óptimo.

Leyendo la tabla final:

| Variable | Valor en barriles/día |
|---|-----------------------|
| Gasolina de alquilación (Alq) | 2205.48 |
| Gasolina de cracking (Crack) | 1198.63 |
| Gasolina de destilación (Dest o D) | 95.89 |
| Reserva de gasolina de alquilación (RA) | 294.52 |
| Reserva de gasolina de cracking (RC) | 1801.37 |
| Reserva de gasolina de destilación (RD) | 2404.1 |

Costo del mezclado: 28719.18 dólares diarios

Como en la tabla final Oct y RVP son variables no-básicas, entonces las restricciones de octanje y RVP están activas, en el límite. Por lo tanto la mezcla final tiene un octanje de 95 y una RVP de 6.

Obtención de un primera solución factible

Para llegar a la solución mostrada, se recurrió al diagrama de desigualdades y se escogió un primer vértice de la región donde las desigualdades se cumplen. Normalmente no es posible construir un diagrama de desigualdades, pues la mayoría de los problemas lineales son multivariantes y no pueden ser representados en forma gráfica. Esto hace necesario un algoritmo capaz de situarse en algún vértice de la región factible. Existen varios algoritmos para este propósito. Uno particularmente efectivo es el método faseI-faseII.

La faseI consiste en obtener una primera solución factible y la faseII simplemente culmina la optimización partiendo de un vértice de la región factible tal y como ya se hizo

Para llevar a cabo la faseI hay que agregar una variable ficticia a cada una de las restricciones. Las variables ficticias siempre se agregan sumando. Una vez que las desigualdades se han convertido debidamente en ecuaciones mediante la adición de variables auxiliares y teniendo cuidado de que todos los lados derechos de las restricciones sean positivos.

Después se define una función objetivo ficticia como la suma de todas las variables ficticias.

Y se emplea el algoritmo ya conocido para minimizar dicha función. Cuando la función ficticia sea llevada a cero se habrá encontrado una primera solución factible.

Esto se ilustrará resolviendo el ejemplo empleando la metodología faseI-faseII. El planteamiento inicial del problema, una vez convertidas las desigualdades en ecuaciones, era de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} -3Alq + 2Crack + Costo &= 24500 \\ Alq + RA &= 2500 \\ Crack + RC &= 3000 \\ Alq + Crack + D &= 3500, & Alq + Crack - RD &= 1000 \\ 20Alq + 7Crack - Oct &= 52500, & Alq + 4Crack + RVP &= 7000 \end{aligned}$$

Por el momento la función objetivo real no es importante. Hay que agregar una variable auxiliar a cada restricción:

$$\begin{aligned} \text{Alq} + \text{RA} + w_1 &= 2500 \\ \text{Crack} + \text{RC} + w_2 &= 3000 \\ \text{Alq} + \text{Crack} + \text{D} + w_3 &= 3500 \\ \text{Alq} + \text{Crack} - \text{RD} + w_4 &= 1000 \\ 20\text{Alq} + 7\text{Crack} - \text{Oct} + w_5 &= 52500 \\ \text{Alq} + 4\text{Crack} + \text{RVP} + w_6 &= 7000 \end{aligned}$$

La función objetivo ficticia a minimizar es $Wt = w_1 + w_2 + w_3 + w_4 + w_5 + w_6$.

Dada la forma en que están definidas las restricciones siempre existe una primera solución factible para este problema: Las variables básicas son las variables ficticias agregadas: $w_1, w_2, w_3, w_4, w_5, w_6$. Las variables no-básicas son todas las demás: Alq, Crack, D, RA, RC, RD, Oct y RVP. Por lo tanto su valor es cero y la función objetivo Wt debe estar expresada en función de ellas. Expresar Wt en función de las variables no-básicas es muy simple, para obtener el coeficiente de Alq se suman los coeficientes de Alq en cada restricción y lo mismo se hace con el resto de las variables. Observe el último renglón de la tabla:

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | w_1 | w_2 | w_3 | w_4 | w_5 | w_6 | Wt | b |
|-------|-----|-------|----|----|---|----|-----|-----|-------|-------|-------|-------|-------|-------|----|--------|
| w_1 | 1 | | 1 | | | | | | 1 | | | | | | | 2500 |
| w_2 | | 1 | | 1 | | | | | | 1 | | | | | | 3000 |
| w_3 | 1 | 1 | | | 1 | | | | | | 1 | | | | | 3500 |
| w_4 | 1 | 1 | | | | -1 | | | | | | 1 | | | | 1000 ← |
| w_5 | 20 | 7 | | | | | -1 | | | | | | 1 | | | 52500 |
| w_6 | 1 | 4 | | | | | | 1 | | | | | | 1 | | 7000 |
| | 24 | 14 | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | | | | | | | 1 | 69500 |
| | ↑ | | | | | | | | | | | | | | | |

69500 es la suma de todas las constantes: $2500 + 3000 + 3500 + \dots + 7000$, 24 es la suma de todos los coeficientes de Alq, 14 de los de Crack y 1 ó -1 del resto. En la tabla ya se marcó la variable que produce la mejora más importante al dejar de ser no-básica: Alq. Y w_1 es la variable básica apropiada para sustituir a Alq.

Haciendo esta sustitución y las subsecuentes se llega a las siguientes tablas:

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | w ₁ | w ₂ | w ₃ | w ₄ | w ₅ | w ₆ | Wt | b | |
|----------------|-----|-------|----|----|---|----|-----|-----|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----|-------|---|
| w ₁ | | -1 | 1 | | | 1 | | | 1 | | | | | | | 1500 | ← |
| w ₂ | | 1 | | 1 | | | | | | 1 | | | | | | 3000 | |
| w ₃ | | | | | 1 | 1 | | | | | 1 | | | | | 2500 | |
| Alq | 1 | | | | | -1 | | | | | | | | | | 1000 | |
| w ₄ | | -13 | | | | 20 | -1 | | | | | | 1 | | | 32500 | |
| w ₅ | | 3 | | | | 1 | | 1 | | | | | | 1 | | 6000 | |
| | | -10 | 1 | 1 | 1 | 23 | -1 | 1 | | | | -24 | | | 1 | 45500 | |
| | | | | | | ↑ | | | | | | | | | | | |

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | w ₁ | w ₂ | w ₃ | w ₄ | w ₅ | w ₆ | Wt | b | |
|----------------|-----|-------|-----|----|---|----|-----|-----|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----|-------|---|
| RD | | -1 | 1 | | | 1 | | | 1 | | | -1 | | | | 1500 | |
| w ₁ | | 1 | | 1 | | | | | | 1 | | | | | | 3000 | |
| w ₂ | | 1 | -1 | | 1 | | | | -1 | | 1 | | | | | 1000 | |
| Alq | 1 | | 1 | | | | | | | 1 | | | | | | 2500 | |
| w ₃ | | 7 | -20 | | | | -1 | | -20 | | | | 1 | | | 2500 | ← |
| w ₄ | | 4 | -1 | | | | | 1 | -1 | | | | | 1 | | 4500 | |
| | | 13 | -22 | 1 | 1 | | -1 | 1 | -23 | | | -1 | | | 1 | 11000 | |
| | | | | | | ↑ | | | | | | | | | | | |

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | w ₁ | w ₂ | w ₃ | w ₄ | w ₅ | w ₆ | Wt | b | |
|----------------|-----|-------|-------|----|---|----|-------|-----|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----|-------|---|
| RD | | | -1 | | | 1 | -0.14 | | -1.86 | | | -1 | 0.14 | | | 1857 | |
| w ₁ | | | 2.86 | 1 | | | 0.143 | | 2.86 | 1 | | | -0.14 | | | 2642 | |
| w ₂ | | | 1.86 | | 1 | | 0.143 | | 1.86 | | 1 | | -0.14 | | | 642.9 | |
| Alq | 1 | | | | | | | | | 1 | | | | | | 2500 | |
| Crack | | 1 | -2.86 | | | | -0.14 | | -2.86 | | | | 0.14 | | | 357.1 | |
| w ₄ | | | 10.4 | | | | 0.571 | 1 | 10.4 | | | | -0.57 | 1 | | 3071 | ← |
| | | | 5.1 | 1 | 1 | | 0.857 | 1 | 14.1 | | | -1 | -1 | | 1 | 6357 | |
| | | | | | | ↑ | | | | | | | | | | | |

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | w ₁ | w ₂ | w ₃ | w ₄ | w ₅ | w ₆ | Wt | b | |
|----------------|-----|-------|----|----|---|----|-------|--------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----|------|---|
| RD | | | | | | 1 | -0.04 | 0.178 | | | | -1 | 0.041 | 0.18 | | 2404 | |
| w ₁ | | | | 1 | | | -0.01 | -0.274 | | 1 | | | 0.011 | -0.3 | | 1801 | |
| w ₂ | | | | | 1 | | 0.041 | -0.178 | | | 1 | | -0.04 | -0.2 | | 95.9 | ← |
| Alq | 1 | | | | | | -0.06 | -0.96 | | | | | 0.055 | -0.1 | | 2205 | |
| Crack | | 1 | | | | | 0.014 | 0.274 | | | | | -0.01 | 0.3 | | 1199 | |
| RA | | | 1 | | | | 0.055 | 0.096 | 1 | | | | -0.06 | 0.1 | | 294 | |
| | | | | 1 | 1 | | 0.027 | -0.352 | -1 | | | -1 | -1.01 | -1.5 | 1 | 1897 | |
| | | | | | | ↑ | | | | | | | | | | | |

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | w ₁ | w ₂ | w ₃ | w ₄ | w ₅ | w ₆ | Wt | b |
|----------------|-----|-------|----|----|---|----|-------|--------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----|--------|
| RD | | | | | | 1 | -0.04 | 0.178 | | | | -1 | 0.041 | 0.18 | | 2404 |
| w ₂ | | | | 1 | | | -0.01 | -0.274 | | 1 | | | 0.013 | -0.1 | | 1801 ← |
| D | | | | | 1 | | 0.041 | -0.178 | | | 1 | | -0.04 | -0.2 | | 95.9 |
| Alq | 1 | | | | | | -0.06 | -0.96 | | | | | 0.055 | -0.1 | | 2205 |
| Crack | | 1 | | | | | 0.014 | 0.274 | | | | | -0.01 | 0.1 | | 1199 |
| RA | | | 1 | | | | 0.055 | 0.096 | 1 | | | | -0.06 | 0.1 | | 294 |
| | | | | 1 | | | -0.01 | -0.274 | -1 | | -1 | -1 | -0.99 | -1.3 | 1 | 1801 |

Y finalmente:

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | w ₁ | w ₂ | w ₃ | w ₄ | w ₅ | w ₆ | Wt | b |
|-------|-----|-------|----|----|---|----|-------|--------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----|------|
| RD | | | | | | 1 | -0.04 | 0.178 | | | | -1 | 0.041 | 0.18 | | 2404 |
| RC | | | | 1 | | | -0.01 | -0.274 | | 1 | | | 0.013 | -0.1 | | 1801 |
| D | | | | | 1 | | 0.041 | -0.178 | | | 1 | | -0.04 | -0.2 | | 95.9 |
| Alq | 1 | | | | | | -0.06 | -0.96 | | | | | 0.055 | -0.1 | | 2205 |
| Crack | | 1 | | | | | 0.014 | 0.274 | | | | | -0.01 | 0.1 | | 1199 |
| RA | | | 1 | | | | 0.055 | 0.096 | 1 | | | | -0.06 | 0.1 | | 294 |
| | | | | | | | | | -1 | -1 | -1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 0 |

Si el mínimo de Wt no es cero al finalizar la fase I, significa que el problema está mal planteado y que no tiene solución. Por ejemplo: que no existe una región factible.

Como el mínimo de Wt es cero, entonces todas las variables ficticias han sido reducidas a cero. Pues Wt queda expresado como la suma de cantidades positivas. Esto significa que se ha llegado a un vértice de la región factible.

Para comenzar la fase II hay que eliminar todas las columnas con coeficientes negativos en el último renglón y introducir la función objetivo original usando la solución factible arrojada por la fase I.

La solución factible se lee de la tabla final:

RD = 2404.1, RC = 1801.37, D = 95.89, RA = 294.52, Alq = 2205.48, Crack = 1198.63 y

Oct = RVP = 0. Como Oct y RVP son nuestras variables no-básicas la función objetivo debe estar expresada en términos de Oct y RVP.

Del renglón de Alq: $\text{Alq} - 0.0548\text{Oct} - 0.0959\text{RVP} = 2205.4795$

o bien: $\text{Alq} = 2205.4795 + 0.0548 \text{ Oct} + 0.0959 \text{ RVP}$.

Análogamente: $\text{Crack} = 1198.63 - 0.0137 \text{ Oct} - 0.27397 \text{ RVP}$.

Sustituyendo en: $\text{Costo} = 24500 + 3\text{Alq} - 2\text{Crack}$

Se llega a: $\text{Costo} = 28719.1785 + 0.19118 \text{ Oct} + 0.83564 \text{ RVP}$

La tabla inicial de la fase II es igual a la final de la fase I excepto porque se eliminan las columnas de las variables ficticias, y se sustituye el último renglón por la función objetivo real:

| | Alq | Crack | RA | RC | D | RD | Oct | RVP | Costo | b |
|--------------|-----|-------|----|----|---|----|---------|---------|-------|-----------------|
| RD | | | | | | 1 | -0.0411 | 0.178 | | 2404.1 |
| RC | | | | 1 | | | -0.0137 | -0.274 | | 1801.37 |
| D | | | | | 1 | | 0.0411 | -0.178 | | 95.89 |
| Alq | 1 | | | | | | -0.0548 | -0.96 | | 2205.48 |
| Crack | | 1 | | | | | 0.0137 | 0.274 | | 1198.63 |
| RA | | | 1 | | | | 0.0548 | 0.096 | | 294.52 |
| | | | | | | | -0.1918 | -0.8356 | 1 | 28719.18 |

Como probablemente ya se había advertido, este vértice de la solución factible corresponde casualmente al vértice óptimo. Aunque es siempre posible, esto normalmente no ocurre y son necesarias algunas iteraciones más para alcanzar el óptimo.

Análisis de Sensibilidad

Hacer un análisis de sensibilidad significa estudiar cómo cambia el valor del punto óptimo ante cambios en las restricciones o en la función objetivo. Una de las principales ventajas del método simplex es que puede hacerse este análisis sin recalcular el punto óptimo.

En la tabla final la función objetivo quedó expresada como $\text{Costo} = 28719.18 + 0.19178 \text{ Oct} + 0.8356 \text{ RVP}$. Los valores 0.19178 y 0.8356 son conocidos como valores duales o precios sombra (shadow prices) e indican la recompensa o castigo en el valor de la función objetivo por un aumento o un decremento unitario en el lado derecho de una restricción.

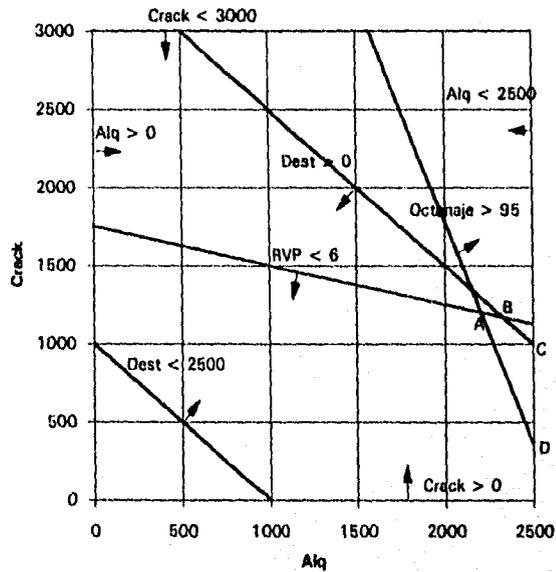
Recuérdese la restricción: $\text{Alq} + 4\text{Crack} + \text{RVP} = 7000$. En el punto óptimo esta restricción está activa, es decir $\text{Alq} + 4\text{Crack} = 7000$. Si el valor derecho se incrementara en uno, $\text{Alq} + 4\text{Crack}$ podría tener el valor de 7001. O equivalentemente RVP tendría el valor de -1 para cumplir la igualdad inicial, y la función objetivo cambiaría su valor a $28719.18 - 0.8356 = 28718.34$. Recuérdese que el valor de 7000 proviene del hecho que deseamos una $\text{RVP} \leq 6$. Un valor de 7001 se obtiene si se desea una $\text{RVP} \leq 6.0002857$. Es decir se está relajando la restricción. Por ejemplo si una RVP de 6.1 fuera aceptable, el valor derecho de la restricción sería 7350, es decir aumentaría en 350 unidades por lo que el costo de mezclado sería de $350(0.8356) = 292.46$ dólares diarios más barato. Así mismo si se deseara una RVP de 5.9 o menor, el lado derecho cambiaría a 6650, es decir disminuiría 350 unidades y por lo tanto el costo de mezclado aumentaría en 292.46 dólares diarios.

Un análisis análogo puede hacerse para el octanaje. Un octanaje más estricto por ejemplo de 96 implica un incremento en el valor derecho de 3500 unidades, lo que significa un costo adicional de $3500(0.19178) = 671.23$ dólares diarios. Y un octanaje más relajado de 94 implica un ahorro de 671.23 dólares diarios.

Debe tenerse mucho cuidado cuando se hace este tipo de análisis, la confiabilidad de la predicción depende de que las variaciones en el lado derecho de las restricciones sean lo suficientemente pequeñas como para que las restricciones continúen activas. De lo contrario la predicción será errónea.

Si el ejemplo de mezclado de gasolinas propuesto se resuelve para cada una de las variaciones indicadas. Se encontrará que en efecto una RVP de 6.1 implica un ahorro de 292.46 dólares diarios y una RVP de 5.9 implica un costo de mezclado 292.46 dólares diarios mayor. Es decir las predicciones se cumplen a la perfección. Para el octanaje es cierto que un octanaje de 94 significa un ahorro de 671.23 dólares diarios. Pero un octanaje de 96 significa un costo adicional de 896.2 dólares diarios contra los 671.23 predichos. Esto se debe a que para un octanaje de 96 las condiciones del punto óptimo han cambiado. La restricción de octanaje continúa activa, pero no así la restricción de RVP. En su lugar la restricción $Dest \geq 0$ se ha activado.

Observemos nuevamente el diagrama de desigualdades:



Hacer la restricción de octanaje más estricta implica un desplazamiento paralelo de la línea de octanaje hacia la derecha. Cuando se desea un octanaje de 96 esta línea ya ha rebasado el vértice "B", reduciendo considerablemente el área donde las desigualdades se cumplen y estableciendo el punto óptimo en la intersección de $Dest = 0$ y $Octanaje = 96$.

Cuando la restricción se relaja, la línea de octanaje se desplaza paralelamente hacia la izquierda, esto causa menos problemas. Por ejemplo un octanaje de 90 implicaría un valor derecho en la desigualdad de 35000, esto es 17500 unidades menor, por lo que se predeciría un ahorro de $17500(0.19178) = 3356.15$ dólares diarios. El cual en efecto se produce.

Sin embargo es obvio que si la restricción se relaja demasiado llegará a un punto en donde ya no esté activa y las predicciones sobre su efecto sean entonces incorrectas.

Los cambios en la función objetivo se interpretan geoméricamente como cambios en la pendiente de los contornos de la función. Estos cambios pueden ser importantes. Si, por ejemplo, el costo de alguna materia prima se reduce considerablemente, el óptimo podría cambiar su ubicación.

Normalmente los programas de cómputo comerciales proporcionan información suficiente para realizar un análisis de sensibilidad. Los programas de cómputo informan los valores duales y también proporcionan información sobre el efecto de cambiar los coeficientes de la función objetivo.

El problema dual

Los valores duales reciben tal nombre porque son la base de una importante característica de la programación lineal conocida como dualidad. Observe la siguiente operación:

$$0.191780821917(52500) + 0.835616438362(-7000) + 24500 \cong 28719.178$$

El resultado no es una coincidencia, cada valor dual está multiplicado por el valor derecho que la desigualdad tenía inicialmente. 7000 es negativo porque se trataba de una restricción del tipo "menor que". Y la constante 24500 debe ser recuperada porque no fue objeto de optimización.

Todo esto significa que el problema inicial puede ser reformulado de una manera alterna para generar el problema conocido como problema dual.

En general si el problema inicial es:

$$\text{Minimizar: } C = c_1X_1 + c_2X_2 + \dots + c_nX_n$$

Restringidos a:

$$\begin{aligned} a_{11}X_1 + a_{12}X_2 + \dots + a_{1n}X_n &\geq b_1 \\ a_{21}X_1 + a_{22}X_2 + \dots + a_{2n}X_n &\geq b_2 \\ \dots &\dots \\ a_{m1}X_1 + a_{m2}X_2 + \dots + a_{mn}X_n &\geq b_m \\ \text{Con } X_i &\geq 0 \end{aligned}$$

El problema dual sería:

$$\text{Maximizar: } B = b_1Y_1 + b_2Y_2 + \dots + b_mY_m$$

Restringidos a:

$$\begin{aligned} a_{11}Y_1 + a_{21}Y_2 + \dots + a_{m1}Y_m &\leq c_1 \\ a_{12}Y_1 + a_{22}Y_2 + \dots + a_{m2}Y_m &\leq c_2 \\ \dots &\dots \\ a_{1n}Y_1 + a_{2n}Y_2 + \dots + a_{mn}Y_m &\leq c_n \\ \text{Con } Y_i &\geq 0 \end{aligned}$$

Una ventaja de la formulación dual es que puede evitar la fase I, pues como las restricciones del problema dual son diferentes a las del problema inicial, el primer planteamiento puede corresponder con una primera solución factible.

Existen todavía muchas cosas por decir acerca de la dualidad y acerca de la programación lineal, pero los conceptos fundamentales han sido ya introducidos. Por eso, y para avanzar hacia la aplicación práctica de la programación lineal se ha de dar por terminado este capítulo.

Bibliografía para el capítulo 1

Optimization of Chemical Processes

T.F. Edgar & D.M. Himmelblau

McGraw-Hill International Editions 1989

Matemática Superiores

P.E. Dankó, A.G. Popov & T.Ya. Kozhévnikova

Editorial Mir, Moscu 1983

Capítulo 2
Programas de cómputo comerciales

Índice

| | |
|--|----|
| El programa <i>XA</i> | 43 |
| El ejemplo simplificado | 46 |
| Análisis de Sensibilidad con <i>XA</i> | 49 |
| Bibliografía para el Capítulo 2 | 53 |

Capítulo 2

Programas de Cómputo Comerciales

Los algoritmos realmente usados por los programas de cómputo comerciales, son en cierta forma diferentes al método simplex explicado aquí. Para evitar cálculos innecesarios se divide la matriz en segmentos y se usan o modifican sólo las partes necesarias. Además los problemas lineales generan matrices dispersas. Esta dispersidad puede aprovecharse mediante técnicas especiales. También puede incorporarse la programación dual al solucionar conjuntamente ambos problemas para asegurar una convergencia por ambos lados de la solución. Pero todos estos recursos, son simplemente artimañas para reducir la memoria usada, asegurar la convergencia o incrementar la velocidad de ejecución del programa. En general las bases de todos los algoritmos comerciales están dadas por el método simplex aquí explicado.

(Existen algoritmos recientes como el de Karmarkar que realmente difieren del método simplex. Y aunque han probado su eficacia en ciertos puntos, aun están lejos de sustituir a los algoritmos tipo simplex)

Algunos de los programas de cómputo comerciales que ponen en práctica la programación lineal se muestran a continuación:

| Nombre | Fuente | Computadora | Lenguaje | Precio (dólares) |
|----------------|---|---------------------------|-----------------------|------------------|
| LINDO | Prof. Linus Schrage, Graduate School Business, Univ. Chicago, Chicago, IL 60637 | Cualquiera* | Fortran | 750 |
| MICROSOLVE | Holden-Day Inc., 4432 Telegraph Ave., Oakland, CA, 94609 | IBM PC | Basic | 49.95 |
| SCICONIC | Scicon Ltd., Brick Close, Milton Keynes, MK11 3EF, UK | Cualquiera | Fortran | 15,000 |
| MPSX | IBM | IBM | Ensamblador y Fortran | 1000-16,000 |
| WHIZARD | Kentron, 1700 N. Moore St., Arlington, VA 22209 | Cualquiera | Ensamblador | 550 |
| LP83/MIP83 | Sunset Software Technology 1613 Chelsa Road, Suite 153 San Marino, California 91108 | IBM-PC | Escribir | Escribir |
| MINOS-HP | Tennessee Valley Authority, P.O. Drawer E, Norris, TN 37828 | HP 1000 | Fortran | Escribir |
| OMNI OPTIMIZER | Harverly Systems, Inc. P.O. Box 919, Denville, NJ 07834 | IBM 370, 303X, 43XX y CDC | Especial | Escribir |

*"Cualquiera" significa que además de con computadoras personales puede usarse con muchas otras como CDC, Cyber o las IBM 370/303X/43XX

El programa *XA*

En este trabajo se pretende resolver un problema de mezclado real acorde con la realidad nacional. El problema como tal, será más complejo que el problema simplificado que se explicó en el capítulo 1. Por ello, es necesario utilizar algún programa de cómputo comercial para resolver dicho problema.

El programa escogido es el programa *XA*. *XA* fue desarrollado en 1987 por Sunset Software Technology. El nombre *XA* significa *eXtended Application*, pues *XA* es una versión mejorada de su predecesor, el programa: LP83/MIP83 también desarrollado por Sunset.

XA puede ser usado en cualquier computadora personal con o sin coprocesador matemático, es en realidad un programa rudimentario si se le compara con programas más modernos como PIIMS o SCICONIC, pero puede resolver problemas suficientemente extensos y es adecuado para las necesidades de este trabajo.

XA ofrece al usuario, diversas formas de introducir los datos del problema a resolver: "Equation Formulation", "Spreadsheet Formulation" y "MPS Formulation." La forma utilizada aquí será la llamada: "Equation Formulation". Por ser la más intuitiva y la más relacionada con las formulaciones o planteamientos del problema que se han hecho en el primer capítulo.

Para usar "Equation Formulation" es necesario crear un archivo de tipo texto y escribir en él, el planteamiento del problema. El archivo de tipo texto debe ser leído por el compilador integrado en el programa *XA*. El compilador necesita que se respeten ciertas normas al elaborar el archivo con el planteamiento del problema. Para empezar, debe tener la extensión LP y como ya se mencionó, el archivo donde se escriba el problema debe ser de tipo texto;

es decir debe poder ser leído por editores simples como el editor de MS-DOS o como el block de notas de Windows.

Dentro del archivo, el problema se divide en cuatro secciones: `..TITLE`, `..OBJECTIVE`, `..BOUNDS` y `..CONSTRAINT`. Los títulos de cada sección deben estar presentes y debe respetarse su orden. Bajo cada título se define el problema:

Bajo `..TITLE` se escribe el título del problema. Si se desea escribir un renglón de comentarios se empieza el renglón con un asterisco.

Un ejemplo sería:

```
..TITLE
Primer ejemplo
* aquí se puede escribir un comentario (Primer ejemplo es el título)
```

En la sección: `..OBJECTIVE` primeramente se indica si se desea maximizar o minimizar mediante el comando `MAXIMIZE` o `MINIMIZE` según sea el caso. En seguida se escribe la función objetivo. Observe el siguiente ejemplo:

```
..OBJECTIVE MINIMIZE
2 X1 + 9 X2 + 5 X3 + X4
```

Aquí X_1 , X_2 , X_3 y X_4 son las variables que `XA` cambiará hasta encontrar el punto óptimo y los coeficientes 2,9,5 y 1 se interpretan como los costos o precios de dichas variables.

En: `..BOUNDS` se escriben los límites de las variables, por ejemplo:

```
..BOUNDS
X1 <= 10
X2 >= -15 <= 20
X3 = FREE
```

Aquí se indica que X_1 puede variar de 0 a 10, X_2 de -15 a 20, X_3 puede tomar cualquier valor desde menos infinito hasta más infinito pues se usó el comando FREE, y como no se especificó X_4 , X_4 puede variar desde cero hasta más infinito.

Por último en: `..CONSTRAINT` se escriben las restricciones del problema. Es muy conveniente darle un nombre a cada restricción, para ello simplemente se escribe, antes de la restricción, su nombre seguido de dos puntos “.”.

`..CONSTRAINT`

Restricción 1: $X_1 + 2 X_2 + X_3 - X_4 \geq 15$

Restricción 2: $X_1 - X_4 \leq 500$

Una vez preparado el archivo se ejecuta el programa `X1` indicándole cuál es el archivo donde se encuentra el planteamiento del problema y cuál es el archivo donde deberá escribir los resultados.

El ejemplo simplificado

La mejor manera de ilustrar el uso del programa *XA* es mediante un ejemplo. Se resolverá una vez más el ejemplo simplificado propuesto, pero esta vez, con *XA*...

El planteamiento inicial del problema era:

Minimizar:

$$\text{Costo} = 10 \text{ Alq} + 5 \text{ Crack} + 7 \text{ Dest}$$

Restringidos a:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \text{Alq} \leq 2500 \\ 0 &\leq \text{Crack} \leq 3000 \\ 0 &\leq \text{Dest} \leq 2500 \\ \text{Alq} + \text{Crack} + \text{Dest} &= 3500 \\ 5 \text{ Alq} - 8 \text{ Crack} - 15 \text{ Dest} &\geq 0 \\ - \text{Alq} + 2 \text{ Crack} - 2 \text{ Dest} &\leq 0 \end{aligned}$$

Recuerde que *XA* necesita que se cree un archivo de tipo texto que contenga el planteamiento del problema. Observe el archivo *GBE_CAP2.LP* que se creó para resolver este problema:

```
..TITLE
Gasoline Blending example
*el ejemplo simplificado

..OBJECTIVE MINIMIZE
10 Alq + 5 Crack + 7 Dest

..BOUNDS
Alq <= 2500
Crack <= 3000
Dest <= 2500

..CONSTRAINT
Yield: Alq + Crack + Dest = 3500
Octanaje: 5 Alq - 8 Crack - 15 Dest >= 0
RVP: - Alq + 2 Crack - 2 Dest <= 0
```

Una vez listo GBE_CAP2.LP, se ejecuta el programa XA escribiendo:

XA GBE_CAP2 OUTPUT GBE_CAP2.REP ←

Con el comando OUTPUT se indica al programa que escriba los resultados de la optimización en el archivo GBE_CAP2.REP. El cual se muestra a continuación :

FILE: Gbe_cap2. TITLE: Gasoline Blending example
OBJECTIVE FUNCTION IS MINIMIZED.

OPTIMAL SOLUTION → OBJECTIVE: 28,719.17808

VARIABLES

| Variable | Activity | Cost | Variable | Activity | Cost |
|----------|-------------|------|----------|-------------|------|
| Alq | 2,205.47945 | 10 | Crack | 1,198.63014 | 5 |
| Dest | 95.89041 | 7 | | | |

CONSTRAINTS

| Constraint | Activity & RHS | Dual Value | Constraint | Activity & RHS | Dual Value |
|------------|----------------|------------|------------|----------------|------------|
| Yield | 3500 = 3500 | 8.20548 | Octanaje | $0 \geq 0$ | 0.19178 |
| RVP | $0 \leq 0$ | 0.83562 | | | |

Cumulative Variable Error: 0.000000000

Cumulative Constraint Error: 0.000000000

Según estos resultados. El valor mínimo de la función objetivo es de 28,719.17808. Y en la columna Activity se informa el valor que tiene cada variable en el punto óptimo

Los resultados coinciden perfectamente con los resultados previos encontrados por otros métodos. Pero observe que esta vez fue mucho más simple llegar al resultado.

Además de estos resultados, se incluye en el reporte información completa sobre los posibles errores. Y se proporcionan los valores duales o precios sombra cuyo uso se explico en el primer capítulo. Por ejemplo, ahora se sabe que cada barril extra que tenga que ser

producido costará 8.2 dólares más. Y que cada barril menos que se produzca ahorrará 8.2 dólares.

Análisis de Sensibilidad con XA

Además del análisis de sensibilidad convencional que ya se explicó. La rapidez con que el programa genera los resultados, permite hacer un análisis más profundo del problema contestando algunas interrogantes pendientes como por ejemplo:

¿Cuánta gasolina de 95 octanos y 6 psi puede producirse?

Para contestar la pregunta se editó el archivo GBE_CAP2.LP y se almacenó como MXG_CAP2.LP. El archivo MXG_CAP2.LP se muestra a continuación:

```
..TITLE
Gasoline Blending example
* máxima cantidad de gasolina

..OBJECTIVE MAXIMIZE
Alq + Crack + Dest

..BOUNDS
Alq <= 2500
Crack <= 3000
Dest <= 2500

..CONSTRAINT
Octanaje: 5 Alq - 8 Crack - 15 Dest >= 0
RVP: - Alq + 2 Crack - 2 Dest <= 0
```

Y al ejecutar XA con este nuevo archivo se obtuvieron los siguientes resultados:

FILE: Mxg_cap2. TITLE: Gasoline Blending example
OBJECTIVE FUNCTION IS MAXIMIZED.

OPTIMAL SOLUTION → OBJECTIVE: 3,967.39130

VARIABLES

| Variable | Activity | Cost | Variable | Activity | Cost |
|----------|-----------|------|----------|-------------|------|
| Alq | 2,500 | 1 | Crack | 1,358.69565 | 1 |
| Dest | 108.69565 | 1 | | | |

CONSTRAINTS

| Constraint | Activity & RHS | Dual Value | Constraint | Activity & RHS | Dual Value |
|------------|----------------|------------|------------|----------------|------------|
| Octanaje | $0 \geq 0$ | 0.08696 | RVP | $0 \leq 0$ | 0.15217 |

Cumulative Variable Error: 0.000000000

Cumulative Constraint Error: 0.000000000

Entonces la máxima cantidad de gasolina producible es de 3,967.39 barriles diarios. Y la razón por la cual no se puede producir más gasolinas es por que sólo se dispone de hasta 2500 barriles diarios de gasolina de alquilación. Si se deseara producir más se tendría que aumentar de alguna forma el suministro de Alq. (Observe que es inútil aumentar los suministros de las otras gasolinas).

Otra pregunta interesante que podría hacerse es:

¿Cuál es el máximo octanaje producible?

Recuérdese que el octanaje de la mezcla se calcula como:

$$100 \frac{Alq}{Alq + Crack + Dest} + 87 \frac{Crack}{Alq + Crack + Dest} + 80 \frac{Dest}{Alq + Crack + Dest}$$

Esta expresión es ahora la función objetivo, para linealizarla se sustituye ($Alq + Crack +$

$Dest$) por 3500. Lo que resulta en:

$$0.0285714286 Alq + 0.0248571429 Crack + 0.0228571429 Dest$$

Luego para contestar la pregunta se preparó MXOC_CP2.LP:

..TITLE

Gasoline Blending example

..OBJECTIVE MAXIMIZE

0.0285714286 Alq + 0.0248571429 Crack + 0.0228571429 Dest

..BOUNDS

Alq <= 2500

Crack <= 3000

Dest <= 2500

..CONSTRAINT

Yield: Alq + Crack + Dest = 3500

RVP: - Alq + 2 Crack - 2 Dest <= 0

Y al ejecutar XA con este archivo se obtuvieron los siguientes resultados:

FILE: Max_oct. TITLE: Gasoline Blending example
OBJECTIVE FUNCTION IS MAXIMIZED.

OPTIMAL SOLUTION → OBJECTIVE: 96.28571

VARIABLES

| Variable | Activity | Cost | R. C. | Variable | Activity | Cost | R. C. |
|----------|----------|---------|-------|----------|----------|---------|-------|
| Alq | 2,500 | 0.02857 | | Crack | 1,000 | 0.02486 | |
| Dest | 0 | 0.02286 | 0.002 | | | | |

CONSTRAINTS

| Constraint | Activity & RHS | Dual Value | Constraint | Activity & RHS | Dual Value |
|------------|----------------|------------|------------|----------------|------------|
| Octanaje | $0 \geq 0$ | 0.02486 | RVP | $-500 \leq 0$ | |

Cumulative Variable Error: 0.000000000

Cumulative Constraint Error: 0.000000000

El octanaje máximo producible es de 96.29. Esto se logra utilizando toda la gasolina de alquilación (la gasolina de mayor octanaje) y completando con la gasolina de Cracking (la segunda en octanaje). La gasolina de destilación, que es la de más bajo octanaje, no se utiliza (la variable Dest está inactiva). Y ha aparecido un nuevo renglón en la tabla de variables: El renglón R. C. (Reduced Cost) que indica la cantidad en la que el costo de la variable inactiva debe cambiar para que la variable se active. En la tabla de variables, el costo se refiere en realidad al octanaje de cada gasolina (dividido entre 3500). Por lo tanto el valor R.C. indica el octanaje que debe tener la gasolina de destilación para que su uso en la mezcla se

justifique. Esto es si la gasolina de destilación tuviera un octanaje de $(0.002)(3500) = 7$ números de octano más, entonces parte de ella se hubiera utilizado en la mezcla. Como el octanaje de la gasolina de destilación es de 80 con 7 más habría alcanzado los 87 números de octano de la gasolina de Cracking. Y por lo tanto formaría parte de la gasolina final (de 95 octanos y 6 psi).

Por último observe que la restricción RVP ya no tiene un valor dual asociado. Esto se debe a que la restricción RVP ya no está activa. La gasolina tiene una RVP de 5.86 psia y bastaba con que fuera de 6 psia.

Con esto se ha realizado un análisis completo del ejemplo simplificado propuesto. Ahora sólo resta, eliminar las simplificaciones. Para ello se debe reconocer que calcular las propiedades de la mezcla como la suma de la propiedad de cada componente multiplicada por su fracción volumétrica, no es necesariamente la mejor opción.

Bibliografia

Optimization of Chemical Processes

T.F. Edgar & D.M. Himmelblau

McGraw-Hill International Editions 1989

Professional Linear Programming System XA

Sunset Software Technology

USA, 1987

Capítulo 3
Reglas de Mezclado

Índice

| | |
|---|----|
| Un enfoque general | 56 |
| Parámetros de Interacción Binaria | 57 |
| Seudocomponentes | 58 |
| Índices de Mezclado | 60 |
| Linealización de Reglas de Mezclado | 64 |
| RVP | 66 |
| Octanaje | 69 |
| Puntos de congelación | 73 |
| Puntos de inflamación | 74 |
| Viscosidad | 75 |
| Cambios de Volumen durante el mezclado | 76 |
| El ejemplo Simplificado | 78 |
| Desarrollos recientes en Reglas de Mezclado | 85 |
| Bibliografía para el Capítulo 3 | 86 |

Capítulo 3

Reglas de Mezclado

Si durante el cálculo del factor de compresibilidad de una mezcla de gases, se le preguntara a un estudiante de los primeros semestres de licenciatura: ¿Cómo se calcula la temperatura crítica de una mezcla? Este respondería tímidamente: ¿Se saca el promedio? Si luego de su respuesta se le lanzara una mirada de desaprobación. El estudiante escondería su cabeza lleno de vergüenza. Sin embargo eso: sacar el promedio, es precisamente lo que normalmente se hace[1].

El tratamiento de mezclas es, hasta el momento, uno de los puntos oscuros de la ciencia moderna. El problema se ha atacado con reglas esencialmente empíricas, a veces sin ninguna validez teórica pero que funcionan de manera aceptable y sobre todo, que son lo mejor que se tiene.

Un enfoque general

En general las reglas de mezclado pueden representarse con la siguiente ecuación:

$$P_m = \sum_i \sum_j x_i x_j P_{ij}$$

Donde P_m es la propiedad de la mezcla que se está buscando, P_u o P_v son las propiedades de los componentes puros y la composición se expresa con las fracciones x_i o x_j . Por ejemplo para una mezcla binaria de los componentes 1 y 2 cuyas fracciones mol fueran x_1 y x_2 respectivamente. Podría estimarse la densidad de la mezcla (ρ_m) como:

$$x_1 x_1 \rho_{11} + x_1 x_2 \rho_{12} + x_2 x_1 \rho_{21} + x_2 x_2 \rho_{22}$$

Donde ρ_{11} sería la densidad del componente 1 y ρ_{22} la del componente 2. Pero observe que se desconocen los términos: ρ_{12} y ρ_{21} . Es decir los términos P_{ij} de la ecuación general.

Las reglas para encontrar estos términos se llaman reglas de combinación. Si se establece P_v como la media aritmética o como la media geométrica, la doble suma se convierte en una suma simple:

$$\text{Si } P_v = \frac{P_u + P_v}{2} \text{ entonces } P_m = \sum_i x_i P_i$$

$$\text{Si } P_v = \sqrt{P_u P_v} \text{ entonces } P_m = \left[\sum_i x_i P_i^{1/2} \right]^2$$

Donde P_u y P_v son exactamente lo mismo. En general, aunque no siempre, la media geométrica se utiliza para propiedades energéticas (Temperatura, Presión, etc.), mientras que la media aritmética se usa para el resto de las propiedades (Densidad, masa molecular, etc.).

Parámetros de Interacción Binaria

Frecuentemente, reglas de combinación tan simples, son insuficientes para predecir las propiedades de la mezcla. Por lo que se agregan parámetros de interacción binaria k_{ij} . Por ejemplo:

$$P_{ij} = \frac{k_{ij}(P_i + P_j)}{2}$$

Donde todas las k_{ii} (y las k_{jj}) valen uno. Y las k_{ij} , para todas las combinaciones binarias posibles, se evalúan a partir de datos experimentales. Esto es, se hacen regresiones estadísticas para encontrar los parámetros que mejor se ajusten a los datos experimentales. Es fácil encontrar datos experimentales para mezclas binarias. Y una vez que los parámetros hayan sido acoplados, la regla de mezclado predecirá propiedades de mezclas multicomponentes con una precisión aceptable. Y en general se asume que los parámetros binarios son independientes de la temperatura, la presión y la composición.

Existen varias otras formas en que los parámetros k_{ij} pueden ser definidos, por ejemplo:

$$P_{ij} = k_{ij} \sqrt{P_i P_j} \quad (k_{ii} = 1)$$

$$P_{ij} = \frac{(1 - k_{ij})(P_i + P_j)}{2} \quad (k_{ii} = 0)$$

$$P_{ij} = (1 - k_{ij}) \sqrt{P_i P_j} \quad (k_{ii} = 0)$$

Seudocomponentes

Cuando se trabaja, como en este caso, con mezclas que involucran una cantidad enorme de componentes; se agrupan los componentes enseudocomponentes. Por ejemplo al decir que se mezclará gasolina de destilación directa con gasolina de cracking, es claro que ninguna de las dos gasolinas es un componente puro. Aunque implícitamente se esté suponiendo lo contrario se sabe que ambas gasolinas son mezclas extremadamente complejas. Por ejemplo se ha estimado que el petróleo crudo contiene miles de diferentes sustancias químicas la mayoría de las cuales ni siquiera han sido identificadas. El American Petroleum Institute en un esfuerzo costoso y extensivo, sólo ha logrado identificar unos 200 compuestos[2].

Y es precisamente por esta gran complejidad que no se puede resolver un problema de mezclado de gasolinas usando los verdaderos componentes. Por un lado, aunque se conocieran con precisión todos los componentes contenidos en un cierto tipo de gasolina, el calcular la propiedad de la mezcla usando estos componentes requeriría de un esfuerzo de cálculo considerable. Muy laborioso aún en una computadora, si se considera que la regla de mezclado (una doble suma de 1 a 1000) debe ser aplicada: primero a cada tipo de gasolina y luego a la mezcla de todas las gasolinas. Además debe aplicarse una regla de mezclado para cada propiedad. Y todo el proceso debe repetirse una y otra vez hasta encontrar la combinación óptima que nos produce un mínimo costo o una máxima ganancia.

Es mucho más fácil medir las propiedades de un tipo estándar de gasolina, que calcularlas a partir de su composición, la cual por cierto puede ser muy difícil de determinar.

De hecho la dificultad no radica en lo laborioso del cálculo. Aunque la solución demore un poco más de lo normal, con las computadoras actuales realmente puede resolverse un

problema de mezclado usando los componentes reales. Pero no se dispone de la información necesaria: Además de una composición detallada (que se desconoce) se requiere un sinfín de parámetros de interacción binaria. Cuya determinación implicaría un esfuerzo, extenuante, muy costoso e innecesario.

Como a fin de cuentas se está aplicando una regla empírica, es mucho mejor simplificar el problema tratando a cada tipo de gasolina como si fuera un componente puro.

Índices de Mezclado

Para resolver el problema de mezclado no sólo bastan unas reglas de mezclado eficientes. Es necesario además que estas reglas sean relaciones *lineales*.

No es posible usar reglas de mezclado complejas, aunque sean eficientes. De hecho la única regla de mezclado que se puede usar es la más simple de todas:

$$P_m = \sum_i x_i P_i$$

Donde P_m es la propiedad de la mezcla. x_i denota la fracción peso, volumen o mol del componente i . Y P_i es la propiedad del componente i puro (0 en este caso del seudocomponente i "puro").

Esta regla de mezclado se aplica bien para algunas propiedades. Por ejemplo la presión de vapor de una mezcla puede calcularse, con una precisión aceptable, como la suma de las presiones de vapor de cada componente multiplicadas por su fracción mol. Cuando esta regla de mezclado funciona bien para una propiedad, se dice que la propiedad es aditiva. Entonces: la presión de vapor es aditiva en fracción mol. Pero sólo en fracción mol. Si se están utilizando fracciones volumétricas la presión de vapor ya no es aditiva.

Además existen otras propiedades que no son aditivas ni en mol, ni en peso, ni en volumen, como la viscosidad o el octanaje que no pueden ser calculadas de una forma tan simplista.

Para manejar las propiedades que no son aditivas, se pueden convertir estas propiedades en índices que sí sean aditivos. Dichos índices son llamados: Índices de Mezclado.

Para convertir una propiedad en un índice se utiliza alguna función, tan compleja como sea necesario. Por ejemplo: $I = \sqrt{\ln(P)} - 0.048P^{0.25}$

Donde P es la propiedad e I es el índice que es aditivo en fracción peso (por ejemplo).

Como se conocen las propiedades de cada componente así como la propiedad que la mezcla debe tener. Utilizando la función se convierte cada propiedad en un índice (por ejemplo un octanaje de 95 en un índice de $\sqrt{\ln(95)} - 0.048(95)^{0.25} \approx 1.984$). Y después simplemente se escribe una restricción con base en que $I_m = \sum_i x_i I_i$, donde I_m es el índice de la mezcla, I_i es el índice de cada componente, y la composición se expresa mediante la fracción x_i . Observe que debe especificarse qué tipo de fracción debe usarse (peso, mol o volumen). Aunque la función para convertir una propiedad en un índice puede ser tan compleja como sea necesario, es decir no tiene por qué ser lineal, es deseable que la función sea invertible para convertir un índice en una propiedad. Pues en algunos casos, por ejemplo cuando la restricción no queda activa, se necesitará saber a cuánto equivale el índice final en términos de la propiedad que está representando. Supóngase como un ejemplo que se desea una gasolina que tenga como mínimo 95 números de octano. Si la restricción está activa al final de la optimización se sabrá que la gasolina producida tiene un octanaje de 95 (exactamente). Pero si la restricción no está activa (porque se logró un octanaje mayor a 95) sólo se sabrá que el índice de la gasolina mezclada o producida vale, por ejemplo: 1.994. Si la función de conversión no es invertible (como en este caso) se necesita realizar una búsqueda numérica hasta encontrar la propiedad que se convierte en un índice de 1.994 (un octanaje de 100, en este caso, equivale a un índice de 1.994).

Pero: ¿Cómo se llegó a la expresión: $I = \sqrt{\ln(P)} - 0.048P^{0.25}$? ¿Por qué se toma el ln de P? ¿Por qué se eleva P precisamente a la 0.25?

Primero hay que aclarar, que la expresión: $I = \sqrt{\ln(P)} - 0.048P^{0.25}$ fue tan sólo un ejemplo arbitrario, que no corresponde a ninguna propiedad real.

Téngase en mente que para cada propiedad se elabora una función de conversión diferente.

Y cámbiense todas esas preguntas por una sola:

¿Cómo se elabora la función de conversión?

El desarrollo de la función de conversión involucra cuatro pasos:

1. Obtención de datos experimentales. Debido a que se requiere una gran precisión en los datos, estos deben ser obtenidos bajo un estricto control en un laboratorio. Los datos directos de la refinería, medidos con los instrumentos del campo, no son apropiados.
2. Desarrollo de la forma de la función. La forma de la función depende de la propiedad que se esté modelando. Si la propiedad puede ser relacionada con otras propiedades, entonces la función puede basarse en un modelo teórico o semi teórico. Sin embargo muchas de las propiedades usadas en la industria petrolera son de naturaleza empírica, y por lo tanto no tienen relación con ninguna propiedad física o química simple. Por ejemplo el contenido de azufre en la mezcla final está claramente relacionado con la cantidad de azufre presente en cada componente. Pero el octanaje no tiene una interpretación tan simple... Relacionando a las propiedades empíricas con las propiedades físicas que las afectan cuando estas se miden experimentalmente y usando técnicas de regresión múltiple y optimización no lineal puede desarrollarse una buena función de conversión empírica.
3. Cálculo de los coeficientes. Una vez establecida la forma de la función resta determinar todos los parámetros que esta contenga. Normalmente esto se hace ajustándolos para que representen los datos experimentales de la mejor manera posible.

4. Verificar la validez del Índice. Finalmente hay que verificar la validez de la función desarrollada, probándola con datos experimentales independientes de los usados para su derivación.

En resumen:

Para usar programación lineal es necesario que nuestras restricciones sean lineales por lo que es inevitable utilizar reglas de mezclado demasiado simples para muchas propiedades. Pero, ¡Usando índices de mezclado, es posible utilizar la más simple de las reglas de mezclado sin perder precisión en los cálculos! Por lo tanto el problema global de mezclado se reduce, sin hacer ninguna simplificación, a un problema lineal de solución casi inmediata. A continuación se presentarán las propiedades más comúnmente manejadas en el mezclado de gasolinas y las funciones necesarias para convertir estas propiedades en Índices de Mezclado.

Lamentablemente no existen funciones de conversión para todas las propiedades, por lo que en algunos casos será necesario linealizar las complejas reglas de mezclado que se proponen para ciertas propiedades importantes como el octanaje.

Linealización de Reglas de Mezclado

De todas las reglas de mezclado no lineales, la siguiente es una de las más aceptadas para el mezclado de gasolinas [3]

$$P_m(\vec{x}) = \sum_{i=1}^n P_i x_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n k_{ij} x_i x_j \quad \text{Con:} \quad \begin{matrix} k_{ii} = k_{jj} = 0 \\ k_{ij} = k_{ji} \end{matrix}$$

Como siempre P_m es la propiedad de la mezcla. Pero para su posterior linealización véase como una función del vector composición: $\vec{x} = x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$. Donde n es el número de componentes de la mezcla, P_i es la propiedad del pseudocomponente "i" puro, y las k 's son los parámetros de interacción binaria de los que ya se ha hablado.

Para linealizar la función P_m se usará el teorema de Taylor. El teorema de Taylor dice, en esencia, que se puede aproximar una función alrededor de un cierto punto: x_0 , mediante la función evaluada en x_0 más las derivadas (primera, segunda, tercera, etc.) de la función evaluadas también en x_0 pero multiplicadas por la variable h que es la separación entre el punto x_0 y el punto donde se desea evaluar la función x . Aplicando el teorema de Taylor únicamente hasta la primera derivada, sobre la función P_m que es una función de n variables,

se llega a la siguiente expresión: $P_m(\vec{x}_0 + \vec{h}) \approx P_m(\vec{x}_0) + \sum_{i=1}^n h_i \frac{\partial P_m}{\partial x_i}(\vec{x}_0)$ Observe

que tanto \vec{h} como \vec{x}_0 son vectores. \vec{x}_0 es un vector constante alrededor del cual se evalúa la función. Y \vec{h} es la distancia entre \vec{x}_0 y \vec{x} . Entre más pequeño sea \vec{h} mejor será la aproximación, por lo que conviene situar \vec{x}_0 justo "a la mitad". Por ejemplo para una mezcla

de $n = 2$, se usaría $x_0^1 = x_0^2 = 0.5$. Para una mezcla de n componentes conviene usar $x_0^1 = x_0^2$

$= \dots = x_0^n = 1/n$. Sustituyendo este valor de \vec{x}_0 se llega a: $P_m(\vec{x}_0) = \frac{1}{n} \sum P_i + \frac{1}{2n^2} \sum \sum k_{ij}$

Y evaluando las derivadas parciales, agrupando términos y sustituyendo \bar{x}_0 , se llega

a:
$$\sum_i h_i \frac{\partial P_m}{\partial x_i}(\bar{x}_0) = \sum_i h_i P_i + \frac{1}{n} \sum_i \sum_j h_i k_{ij}$$
 Ahora simplemente uniendo los pedazos

se llegaría a una expresión en la que P_m sería función de \bar{h} . Pero interesa P_m en función de la composición real: $\bar{x} = \bar{x}_0 + \bar{h}$. Sustituyendo h_i como $x_i - 1/n$, sumando términos semejantes y reagrupando se llega a la expresión final:

$$P_m(\bar{x}) = \sum_i \left(x_i \left[P_i + \frac{1}{n} \sum_j k_{ij} \right] \right) - \frac{1}{2n^2} \sum_i \sum_j k_{ij}$$

Observe que la expresión final es lineal y puede escribirse como: $I_m = \sum_i x_i I_i$. Donde I_m

es el índice de la mezcla cuya función de conversión es: $I_m = P_m + \frac{1}{2n^2} \sum_i \sum_j k_{ij}$

Y donde I_i es el índice de cada propiedad calculado como: $I_i = P_i + \frac{1}{n} \sum_j k_{ij}$

Con esto ya sólo resta hablar de las propiedades más importantes en el mezclado de gasolinas y mencionar el índice o los parámetros binarios usados para cada una de ellas.

RVP

Las moléculas de un líquido se mantienen en fase líquida debido a que existen fuerzas cohesivas que las mantienen unidas. Sin embargo, debido a la distribución de la energía, existe una fracción de moléculas cuya energía supera dichas fuerzas cohesivas, y por lo tanto abandona la fase líquida convirtiéndose en vapor. La presión ejercida por esta fracción de moléculas se conoce como presión de vapor. Cada líquido tiene fuerzas cohesivas particulares. Por ello líquidos diferentes tienen presiones de vapor diferentes. Por otro lado la presión de vapor de todos los líquidos aumenta con la temperatura. Pues al aumentar la temperatura aumenta la energía global de las moléculas del líquido, y consecuentemente aumenta la fracción de moléculas que superan sus fuerzas cohesivas. La ecuación de Antoine relaciona la presión de vapor con la temperatura: $P^{\circ} = A e^{\frac{-B}{T+C}}$ donde A , B y C son constantes que dependen del líquido en particular, T es la temperatura y P° es la presión de vapor. Si se aumenta consistentemente la temperatura, llegará un momento en que la presión de vapor alcance la presión atmosférica, en ese momento el líquido hierve. La temperatura de ebullición es la temperatura a la cual la presión de vapor iguala la presión atmosférica. Observe que si la presión atmosférica disminuye lo suficiente, es posible que el líquido hierva sin que sea necesario aumentar su temperatura. La presión de vapor a una temperatura dada, es la presión (atmosférica) a la cual un líquido herviría, manteniéndose a dicha temperatura. La presión atmosférica disminuye con la altitud, según la ecuación: $P_{atm} = 760 e^{-1.1579 \cdot 10^{-4} h}$ Donde h es la altura en metros sobre el nivel del mar y P_{atm} es la presión atmosférica en mmHg. Lo que significa que a mayor altitud, los líquidos hierven con mayor facilidad. Finalmente si se define la volatilidad como: P° / P_{atm} se ve que

con una presión de vapor alta y una presión atmosférica baja (que equivale a una gran altitud), un líquido se evapora con suma facilidad.

La presencia de hidrocarburos en el aire que respiramos, es altamente indeseable. Por ello se busca reducir la volatilidad o evaporación de las gasolinas, reduciendo su presión de vapor. Una gasolina cuya presión de vapor es alta, es particularmente alarmante en ciudades de una gran altitud. La ciudad de México con sus 2240 metros sobre el nivel del mar, es una de las ciudades más altas del mundo. Su presión atmosférica es apenas de 586 mmHg. Por lo que incluso una gasolina cuya presión de vapor fuera aceptable al nivel del mar, podría ser peligrosamente volátil en la ciudad de México.

Ahora bien, la gasolina es una mezcla, y como tal no tiene una temperatura de ebullición definida. Si se aumenta su temperatura, comienza a hervir a una temperatura conocida como temperatura de burbuja, y finaliza la ebullición (evaporándose completamente) a una temperatura llamada temperatura de rocío (la cual es obviamente mayor). Asimismo no tiene una presión de vapor claramente definida. Si se disminuye su presión a temperatura constante, comenzaría a hervir a una presión llamada presión de burbuja y finalizaría a una presión llamada presión de rocío (la cual es menor). Ya que siempre se habla de la presión de vapor del líquido, suena razonable el identificar a la presión de vapor de la mezcla con la presión de burbuja. Sin embargo, para caracterizar sus gasolinas, la industria petrolera ha preferido determinar, un parámetro conocido como RVP por las siglas en inglés de Presión de Vapor de Reid. La RVP de una gasolina, es la presión a la cual ésta tiene una razón volumétrica vapor-líquido de cuatro, y una temperatura de 100 °F (37.78 °C). Es decir, la RVP es una presión intermedia entre la presión de burbuja y la presión de rocío a 100 °F.

Pues a la presión de burbuja la razón vapor-liquido es de cero, mientras que a la presión de rocío es infinita.

Índice de Mezclado

Suponiendo un comportamiento ideal, la presión de vapor de la mezcla, esto es: la presión de burbuja, puede calcularse con una precisión aceptable como: $P_m = \sum_i x_i P_i$ donde P_m

es la presión de burbuja, x_i es la fracción mol de "i" y P_i es su presión de vapor.

Sin embargo, en las refineries se usan fracciones volumétricas o gravimétricas, nunca fracciones mol. Y la RVP, que es el parámetro que desea cumplirse, no es ni numérica ni conceptualmente igual a la presión de burbuja. Por ello, es más conveniente utilizar el índice de mezclado desarrollado por la compañía Chevron[3]:

$$I_{RVP} = RVP^{1.25}$$

Donde I_{RVP} es el índice de mezclado aditivo en fracción volumétrica y RVP es la presión de vapor de Reid expresada en psia.

Octanaje

En un motor de combustión interna que use gasolina, normalmente la mezcla de combustible y aire se comprime dentro de uno de los cilindros del motor, y una vez que está comprimida, la bujía enciende la mezcla mediante una chispa. La pequeña explosión subsecuente levanta el pistón del cilindro y mueve la cigüeñal donde están acopladas las ruedas y los otros cilindros. Por lo que al mover la cigüeñal se mueven las ruedas y se comprime la mezcla explosiva de algún otro cilindro. Observe que es muy importante la coordinación entre todos los cilindros. Si la mezclas combustibles de dos cilindros distantes se incendiaron al mismo tiempo moverían la cigüeñal en direcciones opuestas. Por eso es importante que el combustible no se incendie espontáneamente, esto es: que no detone hasta que la bujía lo indique. La gasolina de mala calidad detona en desorden y antes de la chispa de la bujía, provocando un desperdicio de combustible y a la larga dañando el motor. Mientras que la gasolina de buena calidad espera la chispa y detona uniformemente. El octanaje es un número con el que se mide esa calidad, o cualidad antidetonante. El n-heptano es un combustible muy malo, detona espontáneamente con demasiada frecuencia, por lo que se le ha asignado el valor de cero números de octano. Por otro lado el isoocatano (2,2,4-trimetilpentano) tiene unas excelentes propiedades antidetonantes, por lo que se le ha asignado el valor de 100. El octanaje de una gasolina cualquiera, es el porcentaje en volumen de isoocatano en una mezcla isoocatano-n-heptano, que iguala el desempeño de la gasolina cuyo octanaje se está midiendo. El desempeño se mide en un motor especial bajo condiciones estándar preestablecidas. Existen compuestos con mejores características antidetonantes que el isoocatano. En estos casos el octanaje se calcula, midiendo los mililitros

por galón de tetraetilo de plomo que requiere el isoocatano puro para igualar el desempeño del compuesto o la mezcla en cuestión, y utilizando la siguiente formula:

$$Oct = 100 + \frac{1 + 0.736TEP - \sqrt{1 + 1.472TEP - 0.035216TEP^2}}{0.0204TEP}$$

Donde Oct es el octanaje y TEP son los mililitros de tetraetilo de plomo adicionados por cada galón de isoocatano.

Existen en realidad para las gasolinas automotrices dos tipos de octanaje, uno conocido como RON que se mide simulando las condiciones de manejo en una ciudad, y otro conocido como MON que se mide simulando las condiciones de manejo en carretera. Para las gasolinas de aviación también existen dos tipos de octanaje: uno para condiciones de despegue y otro para las condiciones de vuelo.

Regla de Mezclado

Para el octanaje la regla de mezclado más aceptada es la siguiente[3]:

$$Oct_m = \sum_{i=1}^n Oct_i x_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n k_{ij} x_i x_j$$

Donde Oct_m es el octanaje de la mezcla, Oct_i es el octanaje del componente "i", x_i es su fracción volumétrica, y los parámetros k_{ij} son los parámetros de interacción binaria.

Tal y como está, la regla de mezclado no puede usarse para escribir una restricción lineal por lo que debe llevarse a su forma de índices (ver linealización de reglas de mezclado):

$$I_m^{Oct} = Oct_m + \frac{1}{2n^2} \sum_i \sum_j k_{ij} \quad \text{y} \quad I_i^{Oct} = Oct_i + \frac{1}{n} \sum_j k_{ij}$$

Donde n es el número de componentes en la mezcla y los índices son aditivos en fracción volumétrica.

Adición de tetraetilo de Plomo

Aumentar el octanaje de una gasolina mediante algún proceso como alquilación o reformado es costoso y a veces insuficiente. Por ello pese a los peligros a la salud que conlleva, el plomo continua usándose, pues basta agregar un poco de esta sustancia para aumentar considerablemente el octanaje de una gasolina. Observe los siguientes valores típicos de las gasolinas con y sin plomo:

| Gasolina | Octanajes Típicos | | | |
|------------------------------------|-------------------|-----------------|--------|-----------------|
| | RON | | MON | |
| | Limpia | con 3g Pb/galón | Limpia | con 3g Pb/galón |
| de Destilación directa (o natural) | 63.2 | 80.9 | 58.7 | 79.5 |
| de Cracking ligera | 85.5 | 95.3 | 77.4 | 85.2 |
| de Cracking pesada | 82 | 91.8 | 76 | 83 |
| de Alquilación | 94.5 | 104 | 91.8 | 104.2 |
| de Reformación | 91.3 | 98.9 | 82.3 | 90 |

El octanaje aumenta cuando se aumenta la cantidad de tetraetilo de plomo agregado, sin embargo no aumenta linealmente. Los primeros gramos de plomo son los más efectivos, después el aumento en octanaje es mínimo. El aumento en octanaje observado a una concentración de plomo de tres gramos por cada galón se denota por "S". El aumento en octanaje para cualquier concentración de plomo puede calcularse multiplicando "S" por un factor especial conocido como LLE que es función de la cantidad de Pb agregado:

$$\ln(\text{LLE}) = (0.3851 + 0.0847\text{PB}^{-0.5087}) \ln(\text{PB}/3)$$
 donde PB es la concentración de plomo en gramos de plomo por galón. LLE tiende a cero cuando PB tiende a cero y vale uno para gasolinas con 3 g Pb / galón.

Regla de Mezclado cuando se usa plomo

La regla de mezclado es la misma pero debe usarse el octanaje de cada componente considerando el efecto del plomo. Y deben corregirse los parámetros de interacción binaria. Normalmente se conoce la concentración de plomo en la gasolina de consumo final, por lo que usando esa concentración se calcula el factor LLE de la mezcla. Con ese factor se calcula el octanaje de cada componente y se corrigen los parámetros binarios de la siguiente manera: $k_{ij} \text{ corregido} = k_{ij} (1 - LLE) + (k_{ij} \text{ 3g Pb}) LLE$ Donde el "kij 3g Pb" es el parámetro de interacción cuando se mezclan gasolinas con 3 gramos de plomo por galón. Observe que si el factor LLE es igual a uno el kij corregido es el "kij 3g Pb". Por lo que el kij corregido no es mas que el kij a cualquier concentración de plomo.

Los parámetros de interacción binaria típicos, para los componentes (gasolinas) más comunes se muestran a continuación.

| Gasolina | | k _{ij} para RON | | k _{ij} para MON | |
|------------------------|--------------------|--------------------------|-----------|--------------------------|-----------|
| i | j | limpia | 3g Pb/gal | limpia | 3g Pb/gal |
| de Destilación directa | de Cracking ligera | 8.6 | 4.9 | 18.4 | 9.5 |
| | de Cracking pesada | 4.3 | -0.2 | 16.4 | 3.9 |
| | de Alquilación | 0.0 | 1.4 | 8.8 | 1.4 |
| | de Reformación | 3.2 | 3.6 | 9.1 | 7.0 |
| de Cracking ligera | de Cracking pesada | -0.2 | -1.4 | 1.2 | -1.7 |
| | de Alquilación | 0.3 | -3.7 | -1.6 | -10.1 |
| | de Reformado | 0.9 | -0.6 | 0.0 | -1.5 |
| de Cracking pesada | de Alquilación | 1 | -3.6 | -3.6 | -16.0 |
| | de Reformado | -0.3 | -2.5 | -1.5 | -4.0 |
| de Alquilación | de Reformado | -1.6 | -4.6 | -2.8 | -6.2 |

Puntos de Congelación

Como cualquier gasolina es una mezcla compleja de muchos hidrocarburos, no tiene un punto de congelación definido, cuando se le enfria lentamente empieza a cristalizarse, y los alcanos (también conocidos como parafinas) precipitan como cera.

Para estudiar el comportamiento de las gasolinas y otros hidrocarburos a bajas temperaturas, se han definido varios puntos: El punto de nublamiento (Cloud point) cuando se empiezan a formar cristales de cera y el hidrocarburo se torna turbio. Si se usa debajo del punto de nublamiento, el hidrocarburo puede obstruir las líneas o los filtros de combustible en un motor dejándolo sin gasolina. Los aviones que viajan durante mucho tiempo a grandes altitudes pueden alcanzar temperaturas muy bajas, por lo que es importante que la gasolina tenga un punto de nublamiento suficientemente bajo. Otros puntos son el punto de flujo (Pour point) que es la temperatura mínima a la que la gasolina sigue fluyendo y la prueba de frío (Cold test) que es la temperatura a la que el hidrocarburo se vuelve sólido.

Índice de Mezclado

Puede utilizarse el siguiente índice de mezclado[3]:

$$I^{PN} = 10,000 \left(\frac{PN}{600} \right)^{\frac{1}{x}}$$

Donde I^{PN} es el índice del punto de nublamiento o del punto de flujo aditivo en fracción volumétrica, PN es el punto de nublamiento o el punto de flujo en °R y x es un parámetro ajustable que tiene un valor típico de 0.05 para el punto de nublamiento y de 0.08 para el punto de flujo.

Por último la función puede invertirse para dar: $PN = 600(I^{PN}/10,000)^x$

Puntos de Inflamación

Existen dos puntos: el primero conocido como punto flash, es la temperatura a la cual los vapores de la gasolina se encenderán momentáneamente, y el segundo conocido como punto de inflamación, es la temperatura a la cual los vapores continuarán ardiendo. Estos puntos indican la máxima temperatura a la que el hidrocarburo puede ser almacenado o matedado sin correr riesgos. Pero en general dicen muy poco acerca del desempeño del hidrocarburo en un motor.

Índice de Mezclado

Existe un índice de mezclado aditivo en fracción volumétrica[3]:

$$\text{Log}(I^{PF}) = [4345.2 / (PF + 383)] - 6.1188$$

Donde I^{PF} es el índice y PF es el punto flash en °F. Y la función puede ser fácilmente invertida para dar: $PF = [4345.2 / (\text{Log}(I^{PF}) + 6.1188)] - 383$

Viscosidad

La viscosidad de un líquido puede interpretarse como la resistencia de este a fluir. La viscosidad (absoluta) se expresa generalmente en cP (centipoise) y la viscosidad cinemática, que es el cociente de la viscosidad absoluta del fluido entre su densidad, se expresa generalmente en centistokes (cSt).

Índice de Mezclado

La compañía Chevron desarrolló el siguiente índice aditivo en fracción volumétrica.

$$I^{VSC} = \ln(VSC) / \ln(1000 VSC)$$

Donde I^{VSC} es el índice y VSC es la viscosidad cinemática expresada en centistokes, la función puede invertirse para dar: $VSC = \exp [I^{VSC} \ln(1000) / (1 - I^{VSC})]$

Cambios de Volumen durante el mezclado

Cuando se mezclan productos petrolíferos no se forma una solución ideal, pues los productos petrolíferos contienen una gran variedad de moléculas de diferentes tipos. Por lo tanto al hacer un mezclado se espera que siempre haya un cambio de volumen. Aunque en teoría el cambio podría ser una ganancia o una pérdida de volumen, casi siempre es una pérdida.

Cuando se mezclan hidrocarburos pesados, los cambios de volumen son insignificantes, el encogimiento oscila entre el 0.1% y el 0.2%.

Cuando se mezclan gasolinas el encogimiento es un poco mayor, pero en general es menor al 1%. Por lo que generalmente el encogimiento se desprecia y no se han desarrollado reglas de mezclado para calcularlo.

Por otra parte cuando se mezclan hidrocarburos ligeros, como la gasolina de destilación directa (también conocida como gasolina natural), con petróleo crudo, sí existe una pérdida de volumen importante. Para calcular la pérdida de volumen en estos casos el American

Petroleum Institute desarrolló la siguiente relación: $S = 0.00214 C^{-0.0704} G^{1.76}$

Donde S es el encogimiento expresado como un porcentaje en volumen del componente ligero. Es decir $V_m = V_c + S V_l$, donde V_m es el volumen de la mezcla, V_c es el volumen del crudo y V_l es el volumen del componente ligero. C es el porcentaje en volumen del componente ligero antes del encogimiento ($C = 100V_l / (V_c + V_l)$). Y G es la diferencia de densidades entre el crudo y el componente ligero expresada en °API. La relación es muy buena cuando C es menor al 21%, pero para valores de C mayores al 50% la ecuación ya no funciona.

Dado que en este trabajo no se pretende mezclar gasolinas ligeras con petróleo crudo, sino gasolinas entre sí. La relación anterior no aplica. De cualquier manera, no es necesario aplicar ninguna relación pues como ya se dijo los cambios de volumen al mezclar gasolinas pueden despreciarse. Sin embargo a gran escala los cambios de volumen al mezclar gasolinas pueden ser importantes (especialmente por que la gasolina se vende en litros y no en kilogramos). Para solucionar este inconveniente se supondrá que al mezclar las gasolinas el volumen se reduce en un 1%. El establecer un encogimiento del 1% es mejor que ignorar por completo que la mezcla va a encogerse. Puede ser que en la realidad el encogimiento sea menor. Pero así se garantiza que se está produciendo la cantidad de gasolina esperada. Las fracciones volumétricas usadas en las reglas de mezclado pueden seguir calculándose como: $V_i / \Sigma V_i$. Pues si la ΣV_i disminuye es porque cada V_i disminuyó y el cociente permanecerá esencialmente inalterado.

Por otro lado, si no existe ninguna restricción en cuanto al volumen final producido, lo mejor es ignorar el encogimiento durante la optimización. Reservando la posibilidad de realizar ajustes posteriores.

El Ejemplo Simplificado

Ahora es posible resolver nuevamente el ejemplo simplificado, pero esta vez eliminando las suposiciones hechas en cuanto a la aditividad de todas las propiedades, es decir: esta vez sin las simplificaciones...

El enunciado original del problema era:

Se desean producir 3500 barriles diarios de una gasolina que debe cumplir las siguientes especificaciones: $\text{Octanaje} \geq 95$, $\text{RVP} \leq 6 \text{ psia}$

Para preparar la gasolina se dispone de las gasolinas obtenidas del cracking, de la alquilación y de la destilación directa del crudo. Las propiedades de la materia prima se resumen en la siguiente tabla:

| Gasolina | RVP (psia) | Octanaje | Cantidad disponible (barriles/día) | Costo (dólares/barril) |
|----------------|------------|----------|------------------------------------|------------------------|
| de Alquilación | 5 | 100 | 2500 | 10 |
| de Cracking | 8 | 87 | 3000 | 5 |
| de Destilación | 4 | 80 | 2500 | 7 |

Se desea saber la cantidad de cada gasolina que debe ser usada para garantizar el costo más bajo posible.

La función objetivo a minimizar y las fronteras o límites de las variables permanecen inalteradas:

$$\text{Costo} = 10 \text{ Alq} + 5 \text{ Crack} + 7 \text{ Dest}$$

$$0 \leq \text{Alq} \leq 2500$$

$$0 \leq \text{Crack} \leq 3000$$

$$0 \leq \text{Dest} \leq 2500$$

Cambios de Volumen durante el mezclado

Ahora para reconocer que puede ocurrir una reducción de volumen y para garantizar los 3500 barriles diarios necesarios, se supondrá una reducción de volumen del 1%. Lo que conduce a:

$$Alq + Crack + Dest = 3535.4$$

Pues $(3535.4)(0.99) = 3500$. Observe que la máxima cantidad de gasolina producible (calculada en el capítulo dos) es de 3967.39 barriles diarios, por lo que pese a la reducción de volumen aún es posible encontrar una solución factible.

Octanaje

Al resolver el problema de una forma más estricta, es notorio que el enunciado del problema no contiene información suficiente: No se especifica la concentración permisible de plomo en la gasolina de consumo final y no se dice si el octanaje de 95 es RON o MON. Esto se debe a que el problema tenía un propósito introductorio y se quiso formular de la forma más simple posible. Ahora es posible agregar los siguientes enunciados al problema:

Las gasolinas de Cracking ligera y de Alquilación están libres de plomo pero la gasolina de destilación contiene 3g Pb/gal. Por otra parte, el octanaje especificado para cada gasolina y el deseado para la mezcla es de tipo RON.

Los octanajes típicos reportados en la tabla de la página 71 concuerdan bien con el hecho de que Alq y Crack estén libres de plomo y Dest si lo contenga. Pero con un problema formulado así, se desconoce la concentración de plomo en la mezcla final (esta depende de la cantidad de gasolina de destilación que se use). Normalmente se conoce la concentración de plomo en la gasolina de consumo final porque se especifica como una norma legal. Se

pensaría entonces en mezclar los componentes libres de plomo y agregar plomo a la mezcla final. Pero puede darse el caso, como en este problema, de que se disponga de gasolina ya mezclada con plomo. En este caso, en lugar de calcular un sólo factor LLE para todos los componentes, se calcula para cada uno y el octanaje se calcula usando el factor correspondiente. Para este problema esto significa dejar los octanajes como están, no es necesario hacer ninguna modificación. Los parámetros binarios se corrigen ahora usando la ecuación: $k_{ij} \text{ corregido} = k_{ij} (1 - \text{LLE}_i) + (k_{ij} \text{ 3g Pb}) \text{LLE}_i$. Es decir usando un factor LLE para cada componente, esto tiene la implicación importante de que ahora $k_{ij} \neq k_{ji}$.

Como Dest tiene exactamente 3g Pb por galón, basta con copiar el parámetro adecuado de la tabla de la página 72 para llegar a los siguientes parámetros:

| j | i | Dest | Alq | Crack | |
|----------|---|------|-----|-------|------|
| Dest | | 0 | 0.0 | 8.6 | |
| Alq | | 1.4 | 0 | 0.3 | |
| Crack | | 4.9 | 0.3 | 0 | |
| Σ | | 6.3 | 0.3 | 8.9 | 15.5 |

Abajo de las primeras tres columna se encuentra la $\sum_j k_{ij}$ y en la última columna la suma de

las primeras tres, es decir: $\sum_i \sum_j k_{ij}$. Con esta información ahora hay que obtener los índices

de mezclado: $I_m^{Oct} = Oct_m + \frac{1}{2n^2} \sum_i \sum_j k_{ij}$ y $I_i^{Oct} = Oct_i + \frac{1}{n} \sum_j k_{ij}$

El índice de la mezcla es: $95 + (1/18)(15.5) = 95.861$

El índice de Dest es: $80 + (1/3)(6.3) = 82.1$

El índice de Alq es: $100 + (1/3)(0.3) = 100.1$

El índice de Crack es: $87 + (1/3)(8.9) = 89.967$

Como los índices son aditivos en fracción volumétrica podemos escribir:

$$100.1 \frac{Alq}{Alq + Crack + Dest} + 89.967 \frac{Crack}{Alq + Crack + Dest} + 82.1 \frac{Dest}{Alq + Crack + Dest} \geq 95.861$$

Para linealizar la restricción se multiplican ambos lados de la desigualdad por $Alq + Crack + Dest$ y sumar términos semejantes para llegar a:

$$4.239 Alq - 5.894 Crack - 13.761 Dest \geq 0$$

Un modo sencillo de obtener los coeficientes de la desigualdad lineal es restar a cada índice el índice de la mezcla, por ejemplo $4.239 = 100.1 - 95.861$.

RVP

La función de conversión a índice para RVP es: $I_{RVP} = RVP^{1.25}$

Los índices de Alq, Crack y Dest son de: $5^{1.25} = 7.477$, $8^{1.25} = 13.454$ y $4^{1.25} = 5.657$ respectivamente. Y el índice de la mezcla es $6^{1.25} = 9.391$. Como los índices son aditivos en fracción volumétrica puede escribirse una desigualdad análoga a la escrita para el octanaje y una vez linealizada se llega a: $-1.914 Alq - 4.064 Crack - 3.734 Dest \leq 0$

Resumiendo el planteamiento del problema queda de la siguiente manera:

Minimizar:

$$Costo = 10 Alq + 5 Crack + 7 Dest$$

Restringidos a:

$$\begin{aligned} 0 &\leq Alq \leq 2500 \\ 0 &\leq Crack \leq 3000 \\ 0 &\leq Dest \leq 2500 \\ Alq + Crack + Dest &= 3535.4 \\ 4.239 Alq - 5.894 Crack - 13.761 Dest &\geq 0 \\ -1.914 Alq + 4.064 Crack - 3.734 Dest &\leq 0 \end{aligned}$$

Compárese con el planteamiento original:

Minimizar:

$$\text{Costo} = 10 \text{ Alq} + 5 \text{ Crack} + 7 \text{ Dest}$$

Restringidos a:

$$0 \leq \text{Alq} \leq 2500$$

$$0 \leq \text{Crack} \leq 3000$$

$$0 \leq \text{Dest} \leq 2500$$

$$\text{Alq} + \text{Crack} + \text{Dest} = 3500$$

$$5 \text{ Alq} - 8 \text{ Crack} - 15 \text{ Dest} \geq 0$$

$$- \text{Alq} + 2 \text{ Crack} - 2 \text{ Dest} \leq 0$$

Simplemente cambiaron los coeficientes de tres desigualdades. Ahora se resolverá el problema con el programa de computo escogido.

El programa *XA*

Para resolver el problema se creó el archivo *GBE_CP3.LP*:

```
..TITLE
Gasoline Blending example
* Reglas de Mezclado

..OBJECTIVE MINIMIZE
10 Alk + 5 Crack + 7 Dest

..BOUNDS
Alk <= 2500
Crack <= 3000
Dest <= 2500

..CONSTRAINT
Yield: Alk + Crack + Dest = 3535.4
Octanaje: 4.239 Alk - 5.894 Crack - 13.761 Dest >= 0
RVP: -1.914 Alk + 4.064 Crack - 3.734 Dest <= 0
```

Y después de: *XA gbe_cp3 output gbe_cp3.rep* ← se llegó a:

FILE: Gbe_cp3 TITLE: Gasoline Blending example
 OBJECTIVE FUNCTION IS MINIMIZED.

OPTIMAL SOLUTION → OBJECTIVE: 28,940.0583

VARIABLES

| Variable | Activity | Cost | R. C. | Variable | Activity | Cost | R. C. |
|----------|----------|------|-------|----------|----------|------|-------|
| Alq | 2,185.90 | 10 | | Crack | 1,182.72 | 5 | |
| Dest | 166.78 | 7 | | | | | |

CONSTRAINTS

| Constraint | Activity & RHS | Dual Value | Constraint | Activity & RHS | Dual Value |
|------------|----------------|------------|------------|----------------|------------|
| Yield | 3535.4=3535.4 | 8.18579 | Octanaje | $0 \geq 0$ | 0.21448 |
| RVP | $0 \leq 0$ | 0.47285 | | | |

Cumulative Variable Error: 0.000000000
 Cumulative Constraint Error: 0.000000000

Comparese con la solución obtenida inicialmente:

OPTIMAL SOLUTION → OBJECTIVE: 28,719.17808

VARIABLES

| Variable | Activity | Cost | Variable | Activity | Cost |
|----------|-------------|------|----------|-------------|------|
| Alq | 2,205.47945 | 10 | Crack | 1,198.63014 | 5 |
| Dest | 95.89041 | 7 | | | |

El costo "real" del mezclado es un poco mayor, pero ahora si se están produciendo 3500 barriles y no $3500(0.99) = 3465$. De hecho el costo por barril es menor: $28940/3500 = 8.27$ dólares/barril para la solución estricta y $28719/3465 = 8.29$ dólares/barril para la solución aproximada.

El Octanaje de la solución aproximada es un poco mayor de lo necesario:

Las fracciones volumétricas son 0.63, 0.34 y 0.03 para Alq Crack y Dest respectivamente. El índice de mezcla es: $0.63(100.1) + 0.34(89.97) + 0.03(82.1) = 96.14$ y bastaba 95.861. El octanaje de la solución aproximada es de $96.14 - (1/18)(15.5) = 95.28$. Mientras que el de la solución estricta es de 95 pues la restricción de octanaje está activa.

Un error más importante es que en la solución aproximada la restricción de RVP no se cumple. El índice de la mezcla vale: $0.63(7.48) + 0.34(13.45) + 0.03(5.66) = 9.47$ cuando debería ser menor a 9.391. La RVP de la solución aproximada es de $9.47^{1/1.25} = 6.04$. (debería ser menor a 6)

Conclusiones

Al utilizar las reglas de mezclado adecuadas se obtuvo una solución más precisa, sin embargo observe que la simplificación inicial de que todas las propiedades son aditivas, es realmente muy buena. Aunque desde un punto de vista cualitativo: se está produciendo un octanaje mayor del necesario y una RVP mayor a la permitida con un costo por barril mayor al óptimo, para todos los propósitos prácticos los números son iguales. Ambas soluciones son igualmente buenas desde un punto de vista cuantitativo. Tal vez en este caso particular no se justifica el esfuerzo de cálculo adicional que el aplicar los índices de mezclado conlleva. Sin embargo no se puede asegurar que sea así en todos los casos, por lo que, lo más conveniente es hacer las cosas de la mejor manera posible: Usando los índices.

Desarrollos recientes en Reglas de Mezclado

Las reglas de mezclado tradicionales, fallan cuando se aplican a mezclas de componentes polares y a mezclas multicomponentes muy complejas. Los esfuerzos actuales están encaminados a solucionar esas fallas.

Modelos de Reacción: Se supone que los compuestos polares existen como una mezcla en equilibrio de monómeros y dímeros. La desventaja es que tiene que resolverse un problema de equilibrio de fases con reacción química cada vez que se aplica. La ventaja es que funciona[1].

Modelos de composición local: Aquí la premisa es que la composición no es uniforme en una mezcla. Por ejemplo en una mezcla binaria de los componentes A y B, si las moléculas de A se sienten más atraídas por las otras moléculas de A que por las de B, la "fracción molar local" de A será mayor que la fracción molar global. Esta idea implica que los parámetros binarios no son simétricos, es decir se asume que: $k_{ij} \neq k_{ji}$.

Modelos de distribución continua: Para manejar mezclas multicomponentes complejas, como el petróleo, donde el cálculo de las tradicionales sumas puede ser muy inconveniente, se ha dividido la mezcla en fracciones llamadas pseudocomponentes. Un nuevo enfoque consiste en suponer que la mezcla puede ser descrita por una función de distribución continua. Las sumas son entonces reemplazadas por integrales con lo que los cálculos pueden llevarse a cabo de una forma más eficiente.

Bibliografía para el Capítulo 3

- [1] Robert C. Reid, John M. Prausnitz & Bruce E. Poling
"The Properties of Gases & Liquids"
Fourth Edition, McGraw-Hill International Editions, 1988
- [2] George T. Austin
"Manual de Procesos Químicos en la Industria
Refinación del Petróleo"
Tomo III, 5a. Edición, McGraw-Hill, México 1989
- [3] Cud Thomas Baird IV
"Guide to Petroleum Product Blending"
1989 HPI Consultants, Inc., Austin, Texas
- [4] Jerrold E. Marsden & Anthony J. Tromba
"Cálculo Vectorial"
Tercera Edición, Addison-Wesley, U.S.A. 1991

Capítulo 4
La producción de gasolinas en México

Índice

| | |
|--|------------|
| Resumen Histórico | 90 |
| Esquema de Producción | 93 |
| Situación Actual | 95 |
| Perspectivas (Reformulación de Gasolinas) | 97 |
| Bibliografía para el Capítulo 4 | 101 |

Capítulo 4

La Producción de Gasolinas en México

La producción de gasolinas en México la lleva a cabo PEMEX. Como PEMEX es una empresa que pertenece a la nación, su manejo no es necesariamente igual al de una empresa privada. En una empresa privada la obtención de ganancias es el objetivo primordial, y los bienes y/o servicios que se brindan se ven como un medio para obtener esas ganancias, nunca como un fin. PEMEX al igual que otras empresas estatales pretende compaginar las dos necesidades: obtener ganancias y ofrecer bienes y servicios. Recuérdese que la razón de ser y a veces el único propósito de muchas "empresas" estatales es precisamente brindar bienes y servicios, sin tratar de obtener ganancias. Ejemplos de estas "empresas" son la Comisión Nacional del Agua, la Secretaría de Salubridad y Asistencia y la Secretaría de Educación Pública. Tal vez le sorprenda ver, por ejemplo, a la SEP catalogada como empresa, pero recuérdese que en manos privadas la salud y la educación pueden ser un negocio pujante. En manos del gobierno la SEP no genera ganancias pero brinda un servicio más importante al que brindaría si se privatizara, pues ninguna empresa privada ofrecería educación gratuita a todo el que quisiera tomarla. Tal vez existen muchas escuelas privadas que ofrecen una educación de mejor calidad a la ofrecida por la SEP, pero la ofrecen sólo a las personas que pueden pagarla. Sin la SEP la mayor parte de la población no recibiría educación alguna. Las empresas estatales son necesarias para cubrir las áreas que la iniciativa privada descuida por no generar ganancias suficientemente rápidas o tangibles.

Pero no se trata aquí de discutir los diferentes modelos económicos o de definir los límites de las obligaciones del estado, tal vez usted piense que la SEP funcionaría mejor privatizada y que son las prácticas populistas las que han llevado a este país a la ruina. O tal vez sea cierto que la labor de PEMEX no le corresponde al estado, pues su labor es altamente rentable y la iniciativa privada puede realizarla sin problemas. Si esa o cualquier otra es su opinión lo invito a que la conserve. De lo que se trata aquí, es de entender que las empresas estatales son diferentes a las empresas privadas y como PEMEX es una empresa estatal, debe tomarse con precaución cualquier estudio que pretenda realizarse alrededor de él. En este trabajo se ha visto, cómo la programación lineal puede minimizar costos o maximizar ganancias pero recuérdese que ese no es necesariamente el objetivo primordial de PEMEX. La preservación del medio ambiente o el seguimiento de una política gubernamental, pueden ser en su momento objetivos más importantes para una empresa estatal como PEMEX.

No está de más recordar que, PEMEX es la empresa más importante de México. Sus ingresos por ventas y el valor de sus activos, son muy superiores a los de cualquier otra empresa mexicana. La utilidad de operación de PEMEX en el primer semestre de 1996, totalizó 4,027.4 millones de dólares, más de 44 millones de dólares diarios. Durante 1995 aportó al gobierno federal alrededor de 14,000 millones de dólares, que representaron el 35.3% del total de los ingresos presupuestales del gobierno federal durante ese año[3]. Por todo ello PEMEX, siempre ha estado estrictamente controlado por el gobierno. Al realizar la optimización de la refinería de Cadereyta en el capítulo 6, se ha hecho un esfuerzo por tomar en cuenta este control. Se ha buscado la maximización de las ganancias, sin olvidar las preocupaciones fundamentales del estado.

Resumen Histórico[1]

La evolución de las gasolinas en México y en el mundo, ha sido paralela al avance tecnológico de la industria automotriz. La producción de automóviles comenzó desde los años 20's pero esos automóviles eran distintos a los actuales. Así al formarse PEMEX en 1938, el país consumía un sólo tipo de gasolina de 57 octanos y 3 ml de TEP* /gal que satisfacía los motores de la época. Sin embargo dos años después fue necesario introducir la MEXOLINA de 70 octanos y 3 ml de TEP/gal. Y para 1950 los motores exigían gasolina de 80 octanos por lo que se produjo la SUPERMEXOLINA con 4 ml de TEP/gal. En aquella época eran pocos los automóviles en circulación y no se tenían los problemas de contaminación que se tienen ahora, la preocupación fundamental era satisfacer la creciente demanda de octanaje. En 1956 apareció GASOLMEX 90 con 90 octanos y en 1966 PEMEX 100 con 100 octanos RON ambas con 4 ml de TEP/gal.

La producción de las cuatro gasolinas: MEXOLINA, SUPERMEXOLINA, GASOLMEX 90, y PEMEX 100 se mantuvo en el mercado hasta 1973. En ese año las cuatro gasolinas se sustituyeron por dos: NOVA de 81 octanos y EXTRA de 94 octanos RON, ambas con 3.5 ml de TEP/gal.

En 1974 comenzó el fin de la era del plomo en México. La gasolina EXTRA se especificó en 92 octanos RON y se redujo significativamente el contenido de Pb desde 3.5 ml de TEP/galón hasta 0.1 g de Pb/gal (0.17 ml TEP/galón)[†] y en 1975 se disminuyó el plomo en esta gasolina hasta 0.05 g de Pb/gal.

* Tetractilo de plomo

† 1 ml de TEP contiene aproximadamente 0.58 gramos de plomo

En 1986 PEMEX continuó la mejora de las gasolinas con la aparición de la NOVA PLUS reduciendo el contenido de plomo de 3.5 ml de TEP/gal a un intervalo de 0.5 a 1 ml de TEP por galón. Y en 1991 el plomo se redujo nuevamente a un intervalo de 0.3 a 0.54 ml de TEP/gal. Este nivel de plomo es igual al que permiten actualmente los países de la Comunidad Económica Europea. Pero nuevamente en octubre de 1992 se redujo el plomo en la NOVA PLUS a un intervalo de 0.2 a 0.3 ml de TEP/gal. Este nivel de plomo es el nivel vigente. Sin embargo en la ZMVM* el contenido típico de plomo en la NOVA PLUS es de 0.1 ml de TEP/gal.

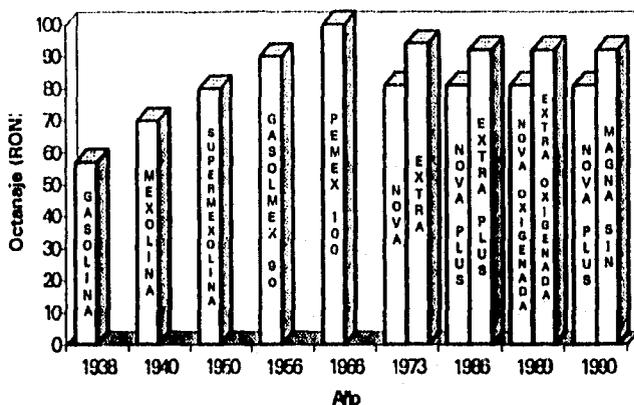
Por su parte la EXTRA PLUS continuó con 0.05 gr. de Pb/gal y en ambas gasolinas se especificó un intervalo de 7 a 9.5 lb/plg² de RVP. Se incorporó un aditivo detergente de tecnología IMP (IMP-DG-2A) para evitar el ensuciamiento del carburador y mejorar la calidad de los gases de combustión. En 1989 este aditivo detergente se sustituyó por uno mejorado también de tecnología IMP (IMP-DDCV-3), este nuevo aditivo además de ser detergente también es dispersante y disminuye las emisiones de monóxido de carbono. También en 1989 se incorporó el compuesto oxigenado MTBE† en las gasolinas NOVA y EXTRA PLUS consumidas en la ZMVM; este compuesto mejora la combustión en los lugares de mayor altitud donde el contenido de oxígeno por m³ en la atmósfera es menor.

Finalmente en septiembre de 1990 se sustituyó la gasolina EXTRA PLUS con la MAGNA SIN este nuevo producto sin plomo (máximo 0.01 g de Pb/gal), satisface los requerimientos de los vehículos con convertidor catalítico que salieron al mercado en 1991. Su calidad es comparable a la gasolina UNLEADED REGULAR que se vende en los Estados Unidos. La

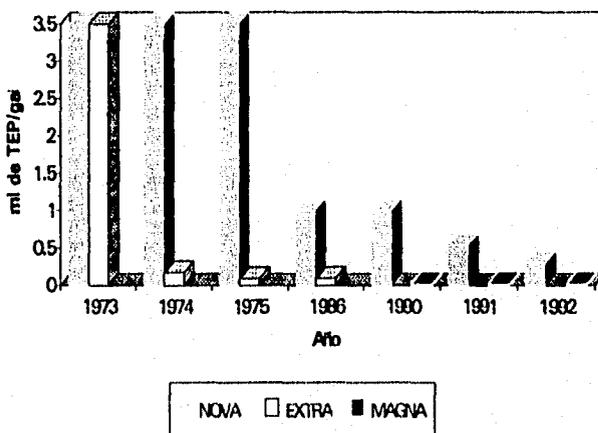
* Zona Metropolitana del Valle de México
† Metil-Terbutil-Eter

MAGNA SIN tiene 92 octanos RON, una RVP de 6.5 a 8.5 lb/plg² y no más de 0.1% en peso de azufre. (0.05% en la ZMVM a partir de marzo de 1996)[6]

Evolución de las Gasolinas en México



Evolución del Contenido de Plomo en las Gasolinas Mexicanas

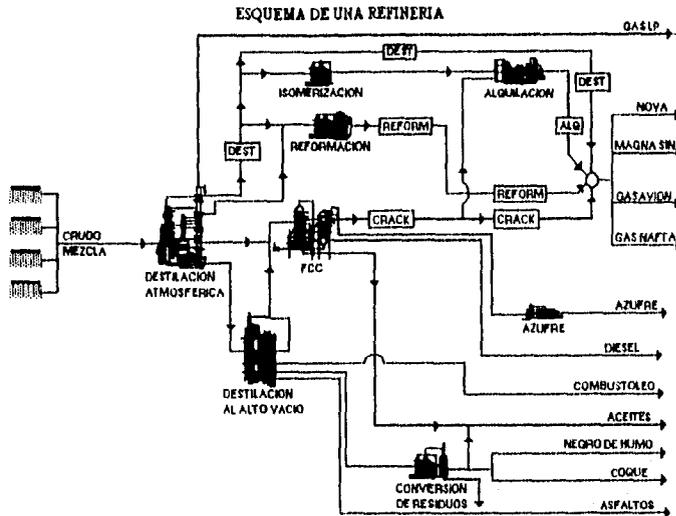


Esquema de Producción[2] y [4]

Se ha hablado aquí de cuatro tipos de gasolinas llamadas arbitrariamente: gasolina de destilación directa, gasolina de cracking, gasolina de alquilación y gasolina de reformación. Es claro que la gasolina de cracking, por ejemplo, viene de un proceso de crackeo o pirólisis; y a su vez la gasolina de reformación viene de un proceso de reformación. Pero no está de más recordar brevemente lo que cada uno de estos procesos significa.

| Proceso | Descripción del Proceso |
|---|---|
| Destilación | Lo primero que se hace al crudo es destilarlo a presión atmosférica. Por los domos de la torre de destilación se obtiene, entre otros productos intermedios: "gasolina de destilación directa" constituida esencialmente por alcanos de bajo octanaje. Los residuos pesados de la destilación atmosférica se destilan nuevamente al alto vacío y se envían a la planta FCC. |
| Cracking o FCC (Fluid Catalytic Cracking) | La planta FCC rompe por medio de un catalizador sólido y altas temperaturas (alrededor de 500°C) las grandes moléculas provenientes de los domos de la destilación al alto vacío. Las moléculas generan al romperse varios fragmentos, más ligeros, entre los cuales siempre hay alguna olefina (alqueno). El catalizador se hace fluir para su regeneración continua suspendiéndolo en un gas, y además de acelerar la reacción, el catalizador también tiene un papel importante en el control de la temperatura. Los hidrocarburos generados gracias a esta pirólisis constituyen la "gasolina de cracking". |
| Reformación | En la reformación la "gasolina de destilación directa" y otros alcanos de bajo octanaje obtenidos de la destilación atmosférica, se convierten en compuestos aromáticos de un excelente octanaje, llamados aquí: "gasolina de reformación". Las parafinas (alcanos) primeramente se ciclan para obtener ciclohexanos y luego estos se deshidrogenan para obtener benceno y otros compuestos aromáticos. Generalmente se emplea un catalizador de Pt o Cr sobre alúmina que tiene una larga vida y no necesita ser regenerado continuamente como en el caso del cracking. |
| Alquilación | La "gasolina de alquilación" es resultado de la reacción de isobutano con olefinas para producir hidrocarburos con cadenas ramificadas. Esta gasolina tiene un octanaje alto y no presenta los problemas de contaminación que presenta por ejemplo la "gasolina de reformación" por su contenido de aromáticos; por lo que es un componente muy importante. La alquilación se lleva a cabo catalizada con HF y H ₂ SO ₄ , no se requieren altas temperaturas y generalmente se usa un exceso de isobutano. El isobutano se genera en la planta de isomerización que a su vez se alimenta de "gasolina de destilación directa", y las olefinas provienen del cracking. |

La relación entre los procesos se observa mejor en un esquema:



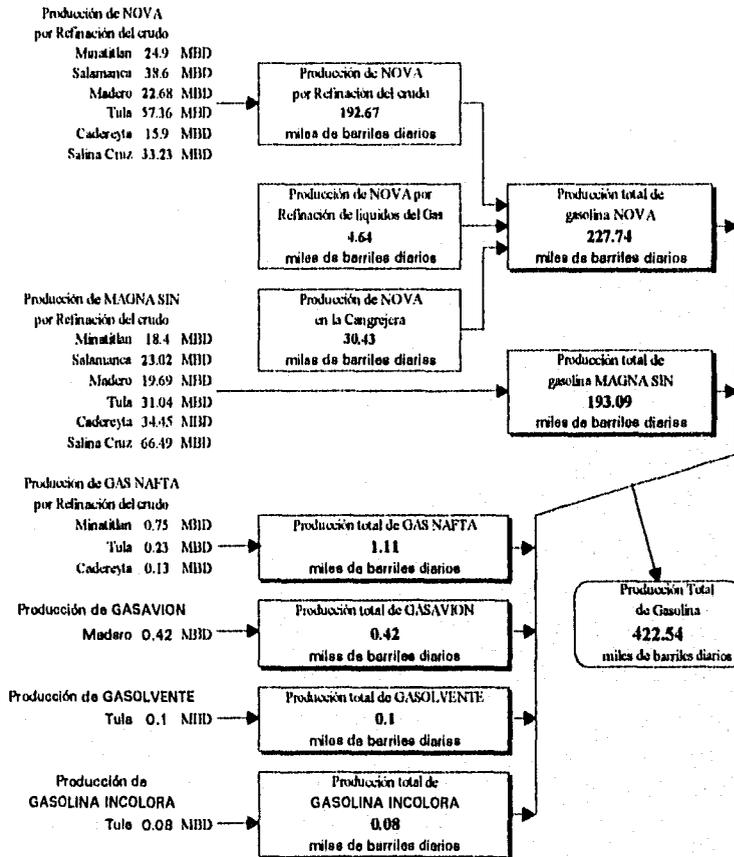
Aquí DEST denota: gasolina de destilación directa, CRACK: gasolina de cracking, REFORM: gasolina de reformado, y ALQ: gasolina de alquilación. Observe dónde se genera cada una de las gasolinas y cómo finalmente se mezclan para producir varios tipos de gasolina. La gasolina es el producto más importante de una refinería, alrededor de la mitad de todo el crudo se utiliza para producirla, pero también existen otros productos. Unos más ligeros como el gas LP y mucho otros más pesados.

El esquema aquí mostrado es una representación muy general de una refinería, las refinerías son diferentes entre sí. No todas las refinerías generan los mismos productos, por ejemplo la producción de azufre característica de las refinerías mexicanas, es menos importante en otros países. Y, a diferencia de otras refinerías, las refinerías mexicanas producen poca o ninguna gasolina de alquilación.

Situación Actual (Primavera de 1996)[3] y [4]

Actualmente en México existen seis importantes refinéncias: Minatitlán, Salamanca, Madero, Tula, Cadereyta y Salina Cruz. Además de un gran complejo petroquímico: La Cangrejera. Y se producen seis tipos diferentes de gasolina: NOVA, MAGNA SIN, GASAVION, GASOLINA INCOLORA, GAS NAFTA y GASOLVENTE...

Producción por Refinería y tipo de gasolina durante 1995



Como puede observarse la producción total de gasolina durante 1995 fue de 422,540 barriles diarios de los cuales 420,830 barriles, es decir el 99.6% correspondió a la producción de NOVA y MAGNA.

Las características actuales (primavera de 1996) de las gasolinas MAGNA y NOVA en la ZMVM pueden observarse en la siguiente tabla: [1] , [4] y [6]

| Propiedad | NOVA | MAGNA SIN |
|--------------------------|------------------|---------------|
| Octanaje RON | 81 (mínimo) | 92 (mínimo) |
| Octanaje MON | 75 (mínimo) | 82 (mínimo) |
| Índice de octano (R+M)/2 | 78 (mínimo) | 87 (mínimo) |
| RVP (psi) | de 7 a 9.5 | de 6.5 a 8.5 |
| Plomo (g/gal) | de 0.058 a 0.116 | 0.01 (máximo) |
| Azufre (% peso) | 0.05 | 0.05 |
| Aromáticos (% vol.) | 25 (máximo) | 25 (máximo) |
| Benceno (% vol.) | 1 (máximo) | 1 (máximo) |
| Olefinas (% vol.) | 10 (máximo) | 10 (máximo) |

Se habla muy poco sobre las características de la gasolina que se vende fuera del valle de México pero es claro que su calidad es menor. Parte del trabajo de esta tesis consiste en establecer las características óptimas de esa "gasolina de provincia".

Las gasolinas del valle de México son similares a las de Estados Unidos, aunque las nuestras tienen más azufre. Y en comparación con las gasolinas europeas, las gasolinas mexicanas tienen mayor cantidad de azufre, compuestos aromáticos y olefinas, pero contienen menor cantidad de plomo. [4]

Por último: Los 422,540 barriles de gasolina producidos diariamente no satisfacen la demanda nacional por lo que es necesario importar. En 1995 se importaron 70,800 barriles de gasolina diarios. Lo que significa que alrededor del 14% del total de la gasolina consumida en el país es importada. [3]

Perspectivas (Reformulación de Gasolinas){4}

El continuo desarrollo de la industria automotriz y los problemas de contaminación ambiental de la ZMVM hacen indispensable una mejora continua de la calidad de las gasolinas. Actualmente se intenta producir gasolinas de una nueva era llamadas gasolinas reformuladas, para ello PEMEX persigue los siguientes objetivos:

Objetivos de PEMEX

| Para 1997 | de 1997 en adelante |
|---|---|
| reducción de la RVP reducción de benceno producción de oxigenados producción de alquilados | reducción de azufre reducción de olefinas reducción de aromáticos |

El alcance de estos objetivos implica realizar ajustes al esquema de producción actual. Cada uno de estos objetivos tiene una repercusión directa sobre el proceso:

Acciones necesarias sobre los procesos

| Objetivo | Acción |
|---------------------------------------|--|
| Reducción de la RVP | Desbutanizar y Despentanizar Remoción de azufre y de diolefinas Isomerización de butanos Reformación a baja presión |
| Reducción de benceno | Saturación, Isomerización y Alquilación del reformado Extracción del benceno |
| Producción de oxigenados | Producir MTBE a partir de C ₄ 's Remover diolefinas Isomerizar butanos |
| Producción de gasolina de alquilación | Instalar nuevas plantas de alquilación y mejorar las existentes |
| Reducción de olefinas | Conversión a TAME* y alquilados Remoción de azufre y de diolefinas |
| Reducción de aromáticos | Disminuir el uso de reformado en la gasolina. |
| Reducción de azufre | Hidrodesulfuración de la carga y/o los productos de la FCC Hidrotratamiento a la gasolina pesada de la FCC |

* Teramil-metil-eter

Para llevar a cabo estas acciones se ha pensado en los siguientes cambios a los procesos

Cambios a los Procesos

| Proceso | Cambios |
|---------------|--|
| Cracking | Actualmente la gasolina de cracking es parte de la gasolina final, se pretende reorientarla hacia las unidades de alquilación y TAME, utilizando al proceso más como productor de olefinas que como productor de gasolina. Para ello es necesario: integrar unidades de tratamiento de la carga y los productos, incorporar un sistema separador de C ₃ , cambiar catalizadores y aprovechar los residuos entre otras cosas. |
| Reformación | Para disminuir la participación de la gasolina de reformación en la gasolina final se deberá fraccionar la gasolina de reformación para integrar sus productos a la industria petroquímica. También se busca utilizar al proceso como productor de hidrogeno y como alimentación hacia otras unidades como las de alquilación. |
| Alquilación | Para mejorar las plantas existentes se busca: Disminuir el riesgo por el uso de ácidos instalando sistemas de seguridad. Disminuir las emisiones de HC debidas a alquilados de alto peso molecular alimentando sólo olefinas ligeras. Integrar una unidad de TAME para aprovechar las olefinas C ₃ . Hacer más selectiva la alquilación y alquilar la gasolina de reformación para reducir el contenido de benceno y bajar la RVP |
| Isomerización | Actualmente la gasolina de isomerización forma parte de la gasolina final se busca utilizar al proceso sólomente como productor de isómeros para la producción de oxigenados y alquilados. |
| MTBE y TAME | El MTBE se obtiene mediante la reacción de metanol con isobutileno y el TAME reaccionando metanol con isopentileno. Estos eteres tienen un alto octanaje y una baja RVP, y aunque su contribución masiva a la gasolina final estará limitada hasta comprobar su efecto en la producción de compuestos fotoquímicamente reactivos, constituyen un ingrediente fundamental de las gasolinas reformuladas. |

Concretamente se llevarán a cabo los siguientes proyectos:

Proyectos

| REFORMACION | |
|---|---|
| Tula, Hgo U-500-1; Cadereyta, N.L. U-500; Salamanca, Gto. RR-2; Minatitlán, Ver U-500 | Conversión de reformadoras UOP semi-regenerativas tipo estacado a continuas. |
| Madero, Tamps. U-700 | Aumento de capacidad y conversión a operación continua. |
| Salina Cruz, Oax. U-500-2; Tula, Hgo. U-500-2 | Conversión de reformadoras IMP semi-regenerativas tipo "side by side" a operación continua. |

| Isomerización | |
|--|---|
| Cangrejera, Ver | Isomerizadora de C ₅ |
| Minatitlán, Ver, Cadereyta, N.L.; Madero, Tamps.; Salamanca, Gto.; Salina Cruz, Oax.; Tula, Hgo. | Isomerizadoras de C ₅ y C ₆ |

| Oxigenados | |
|--|------|
| Tula, Hgo. | TAME |
| Morelos, Ver.; Tula, Hgo.; Salamanca, Gto.; Salina Cruz, Oax.; Cadereyta, N.L. | MTBE |

| Alquilación | |
|---|---|
| Cadereyta, N.L.; Madero, Tamps.; Salamanca, Gto.; Salina Cruz, Oax.; Tula, Hgo. | Plantas de alquilados ligeros con catalizador de HF |

| FCC | |
|--------------------|--|
| Tula, Hgo. (FCC-2) | Nueva unidad FCC |
| Cadereyta, N.L. | Integración y modernización de la FCC-2. Modernización de la FCC1. |

Todos estos proyectos se completarán para el año 2000. Entonces se habrán logrado mejoras importantes en la calidad de la gasolina nacional. Se esperan mejoras en el octanaje y en la RVP del "pool" de gasolinas nacional (la mezcla de todas las gasolinas).

Mejoras esperadas en la RVP y el Octanaje RON del pool de gasolinas[4]

| Refinería | Balance 1994 | | Proyectos año 2000 | |
|-------------|--------------|--------------|--------------------|--------------|
| | RVP (psi) | Octanaje RON | RVP (psi) | Octanaje RON |
| Cadereyta | 7.75 | 83.61 | 6.13 | 92.31 |
| Madero | 7.70 | 75.89 | 6.41 | 91.83 |
| Minatitlán | 7.46 | 86.80 | 7.62 | 86.49 |
| Salamanca | 7.66 | 79.59 | 6.95 | 85.91 |
| Salina Cruz | 8.79 | 83.60 | 6.30 | 92.93 |
| Tula | 7.15 | 79.44 | 6.21 | 89.06 |
| Nacional | 7.19 | 81.24 | 6.45 | 90.44 |

Actualmente la gasolina NOVA es la principal gasolina producida en el país (228 MBD de NOVA contra 193 MBD de MAGNA). Pero gracias a estos y posiblemente otros proyectos será posible en un plazo muy corto invertir el orden de producción. Como el pool de gasolinas tendrá mejor calidad podrá producirse más gasolina MAGNA, de hecho se introducirá una nueva gasolina llamada PREMIUM aún mejor que la MAGNA[6]. Se venderán las tres gasolinas PREMIUM, MAGNA y NOVA pero la producción y el consumo de NOVA será cada vez menor hasta desaparecer, o cuando menos se eliminará por completo el plomo de la NOVA.[1]

Sin embargo, la producción de gasolina reformulada tiene un alto costo. De todas las empresas en que se ha dividido PEMEX, PEMEX REFINACIÓN es la que genera la menor utilidad de operación, debido a las enormes inversiones que está realizando. Por ello, ningún país del mundo pretende producir un 100% de gasolina reformulada[7]. Después de un gran esfuerzo México logrará producir un cierto porcentaje de gasolina reformulada el cual debe usarse sólo donde más se necesite.

Bibliografía para el Capítulo 4

- [1] **Ing. José Alberto Celestinos I.**
**"Evolución de la Calidad de las Gasolinas en México,
Tecnologías Aplicadas y Acciones para su Logro"**
Programa de Conferencias de PEMEX-REFINACION
Convenio de Colaboración PEMEX-UNAM
Cd. Universitaria, 3 de Mayo de 1995
- [2] **George T. Austin**
"Manual de Procesos Químicos en la Industria, Refinación del Petróleo"
Tomo III, 5a. Edición, McGraw-Hill, México 1989
- [3] **Fernando de Jesús Rodríguez Rivera**
Información Personal
- [4] **Miguel A. Leiva y Nuncio**
"La Reformulación de Gasolinas en México"
Artículo en Prensa, revista IMIQ

[5]

PEMEX-REFINACION

Subdirección de Producción

“Comentarios de los Eventos Sobresalientes durante 1995”

[6]

PEMEX, Gerencia Corporativa de Información y Relaciones Publicas

Boletín numero 80/96, 18 de Marzo de 1996

[7]

“U.S. refiners clear hurdles to produce reformulated gasoline”

PennWell, International Petroleum Encyclopedia

Capítulo 5
Definición del Problema

Índice

| | |
|--|-----|
| Propiedades de los componentes a mezclar | 106 |
| Propiedades de las gasolinas a producir | 107 |
| Estimación de la Demanda a cubrir | 111 |
| Resumen | 112 |
| Bibliografía para el Capítulo 5 | 114 |

Capítulo 5

Definición del Problema

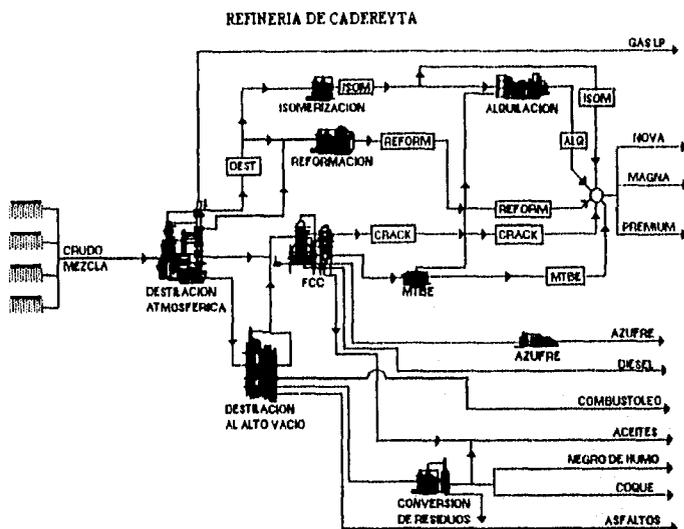
Ahora que ya se han explicado los fundamentos matemáticos de la programación lineal, que se ha explicado el uso de esta mediante un programa de cómputo comercial, que se han reunido las reglas de mezclado necesarias para formular con rigor un problema de mezclado de gasolinas y que se sabe más de la producción de estas en México. Es hora de aplicar la programación lineal sobre un problema más complejo que el problema introductorio de los primeros capítulos

Se ha escogido para este problema a la refinería de **Cadereyta**.

Al menos hasta diciembre de 1995 la refinería no producía gasolina de alquilación por lo que simplemente mezclaba gasolina de cracking, de destilación y de reformación para producir alrededor de 50,000 barriles diarios. Sin embargo gracias a los proyectos de reformulación de gasolinas que se están llevando a cabo en México, Cadereyta incrementará substancialmente su capacidad de producción en un plazo muy corto. Así mismo producirá componentes de mejor calidad como gasolina de alquilación y MTBE.

Buscando que el presente estudio tenga una mayor validez y que conserve su actualidad durante un plazo más largo, se ha decidido plantear el problema de mezclado sobre las condiciones futuras de la refinería de Cadereyta. No sobre las condiciones pasadas de 1995 y tampoco sobre las efímeras condiciones de transición actuales (primavera de 1996).

Se espera que Cadereyta produzca gasolina de cracking (Crack), gasolina de reformación (Rfcn), MTBE, gasolina de alquilación (Alq) y gasolina de isomerización (Isom). Las cinco gasolinas serán mezcladas para producir en principio tres tipos de gasolina NOVA, MAGNA y PREMIUM. Observe el siguiente esquema.



Observe que a diferencia del esquema general presentado en la página 94, la gasolina de destilación ya no se alimenta directamente al pool sino que constituye un precursor de gasolinas de mayor calidad. Como antes: las plantas de cracking e isomerización alimentan a la planta de alquilación, pero ahora se suman a la alimentación de esta planta corrientes de las plantas de reformación y MTBE. Otra diferencia importante es que algo de la gasolina de isomerización se alimenta al pool junto con el valioso MTBE.

Propiedades de los componentes a mezclar

Las propiedades de las gasolinas del pool se resumen a continuación:

Componentes a Mezclar[1]

| | Crack | Rfcn | MTBE | Alq | Isom |
|--------------------------------|--------|--------|-------|-------|--------|
| Costo (USD/barril)* | 16.06 | 21.18 | 39.54 | 31.37 | 13.48 |
| Barriles diarios disponibles | 57,751 | 36,686 | 2,645 | 9,330 | 11,079 |
| Octanaje (R+M)/2 | 85 | 91.5 | 109.5 | 92.5 | 79.5 |
| RVP (psi) | 6.2 | 3.5 | 7.9 | 5.1 | 13.5 |
| Benceno (%vol) | 0.6 | 2.26 | 0 | 0 | 0 |
| Aromáticos (%vol) | 23.5 | 48.6 | 0 | 0 | 0 |
| Azufre (ppm, peso) | 1970 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Olefinas (%vol) | 35 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Oxígeno (% peso) | 0 | 0 | 18.18 | 0 | 0 |
| Densidad (lb/ft ³) | 45.1 | 47.7 | 44 | 41.1 | 38.7 |

Además de las gasolinas producidas en la refinería se dispone de gasolinas de importación. Es común que las refinerías importen algo de oxigenados (MTBE) para mejorar su pool. En general México importa gasolina de reformación, gasolina de alquilación y MTBE. Las propiedades de las gasolinas importadas son esencialmente iguales. Pero sus costos son mayores. Los costos de importación de Rfcn, Alq y MTBE son respectivamente 28.17, 41.72 y 52.59 dólares por barril.

* Costos al 30 de abril de 1996

Propiedades de las gasolinas a producir

Ahora se deben definir las características de las gasolinas a producir. Ya se habló de las características de las gasolinas en la ZMVM. Estas corresponden con los más altos estándares de exigencia a nivel mundial y precisamente por ello no puede producirse un 100% de estas "gasolinas del valle de México", que se conocen como: "gasolinas reformuladas". Debe producirse un cierto porcentaje de gasolinas reformuladas y el resto de gasolinas "convencionales" de estándares más relajados. Las características de las gasolinas reformuladas se resumen en la siguiente tabla.

Gasolinas Reformuladas a Producir [2] y [3]

| | PREMIUM | MAGNA RFLD | NOVA RFLD |
|-------------------------|---------|------------|-----------|
| Precio (USD/barril) | 58.51 | 47.65 | 46.26 |
| Octanaje mínimo (R+M)/2 | 92 | 87 | 78 |
| RVP máxima (psi) | 7.1 | 7.1 | 7.1 |
| Benceno %vol máximo | 1 | 1 | 1 |
| Aromáticos %vol máximo | 25 | 25 | 25 |
| Azufre ppm peso máximas | 500 | 500 | 500 |
| Olefinas %vol máximo | 10 | 10 | 10 |
| Oxígeno % peso mínimo | 2 | 2 | 2 |
| Oxígeno % peso máximo | 3.5 | 3.5 | 3.5 |
| Pb g/galón máximos | 0.01 | 0.01 | 0.01 |

En general estos valores coinciden con los anunciados por PEMEX para las gasolinas de la ZMVM a partir de marzo de 1996. Sin embargo en algunos casos la información de PEMEX fue insuficiente y se recurrió a los estándares de la EPA* [3]. Por otro lado observe que la gasolina Nova reformulada *no* contiene plomo. Si la materia prima es un pool de "gasolinas del futuro", la gasolina producida debe también ser de mejor calidad. Un breve análisis justifica la decisión de retirar el plomo de la NOVA. El octanaje exigido para la

*Environmental Protection Agency (El equivalente norteamericano de la SEDUE)

NOVA es de $78 (R+M)/2$ y *todos* los componentes del pool superan ese octanaje, por lo tanto sea cual sea la combinación que se use para producir NOVA, esta siempre tendrá un octanaje mayor a 78 y el adicionar plomo es absolutamente innecesario.

Una vez definido el pool de gasolinas (los componentes a mezclar) y las gasolinas reformuladas (a producir) puede verse que no es posible producir un 100% de gasolinas reformuladas utilizando (exclusivamente) el pool de Cadereyta. El pool de Cadereyta es de 117,491 barriles diarios en total, con una densidad de 45 lb/ft³. Como los 57,751 BPD* de gasolina de cracking tiene 1970 ppm peso de azufre y una densidad de 45.1 lb/ft³. Entonces el pool de Cadereyta tiene una concentración de azufre de $(57751/117491)(45.1/45)1970 = 970.5$ ppm peso de azufre. Contra las 500 ppm que se desean en la gasolina reformulada. Es claro para producir sólo gasolinas reformuladas utilizando exclusivamente el pool de Cadereyta, una buena parte de la gasolina de cracking quedará sin usarse. Para que el pool de Cadereyta tenga una concentración de 500 ppm de azufre sólo pueden utilizarse $(500*45*(117491-57751)) / (1970*45.1-500*45) = 20,259^{\dagger}$ barriles diarios de gasolina de cracking, por lo que el $1-(20259/57751) = 65\%$ de la gasolina de cracking tendría que desecharse. Algo similar sucede si se hace el análisis con las olefinas del cracking o con el benceno o los aromáticos del reformado. En todos los caso se ve que no es posible producir un 100% de gasolina de reformación utilizando sólo el pool de Cadereyta. El pool del resto de las refinarias mexicanas será de las mismas características. Por lo que no puede pensarse en obtener de ellas gasolina de alquilación o MTBE (estos componentes están libres de

* Barriles por día

Despejando Crack de: $(Crack \cdot (117491-57751+Crack))(45.1/45)1970 = 500$

azufre, olefinas, benceno y aromáticos). Las importaciones tampoco solucionan el problema, al menos no satisfactoriamente. Para usar todo el pool de Cadereyta se debe importar una cantidad tal que la concentración global de la mezcla sea de 500 ppm de azufre, es decir $57751(1970/500)(45.1/45)-117491 = 110,554^*$ barriles diarios de gasolina de manera que del total "producido" $110554+117491 = 228,045$ BPD el $110554/228045 = 48\%$ sería importado. Un porcentaje así es indeseable, además, como se verá más adelante, los 228,045 BPD "producidos" exceden la demanda nacional que le corresponde a Cadereyta. Por todo ello es necesario producir un tipo de gasolinas cuyas restricciones sean más laxas. Las propiedades de estas gasolinas llamadas aquí gasolinas convencionales se resumen en la siguiente tabla.

Gasolinas convencionales a producir

| | MAGNA CVNL | NOVA CVNL |
|-------------------------|--------------|--------------|
| Precio (USD/barril) | 47.65 | 46.26 |
| Octanaje mínimo (R+M)/2 | 87 | 78 |
| RVP máxima (psi) | 7.1 | 7.1 |
| Benceno %vol máximo | 1 | 1 |
| Aromáticos %vol máximo | 25 | 25 |
| Azufre ppm peso máximas | 1500 | 1500 |
| Olefinas %vol máximo | 30 | 30 |
| Oxígeno | No requerido | No requerido |
| Pb g/galón máximos | 0.01 | 0.01 |

Las propiedades mostradas son el resultado de una optimización. Se probaron todas las combinaciones: Los compuestos oxigenados no son requeridos en gasolinas como estas que serán vendidas fuera de los grandes centros urbanos[3] sin embargo si se desea pueden agregarse sin un fuerte colapso de las utilidades (Las utilidades bajan de 3.5 a 3.4 millones de dólares diarios al añadir 2% de Oxígeno). Por otro lado, disminuir la cantidad de azufre u

*Despejando Imp de: $(57751 / ((117491 + Imp) \cdot (45.1/45))) \cdot 1970 = 500$

olefinas permisibles repercute con más fuerza sobre las utilidades (Las ganancias bajan a 3 millones de dólares diarios al reducir el azufre a 500 ppm) pero sobre todo repercute en que no es posible utilizar la gasolina de cracking producida y para sustituirla deben importarse grandes volúmenes de gasolina. Observe que las restricciones en oxígeno, azufre y olefinas son la única diferencia entre las gasolinas convencionales y las reformuladas. Las gasolinas convencionales cumplen el resto de las especificaciones. De hecho si se relajaran las restricciones de las gasolinas convencionales en Benceno y aromáticos se obtendría un incremento de las ganancias (hasta 3.6 millones de dólares diarios si se permite 1.3%vol de Benceno y 34% de Aromáticos) *pero* no se utilizaría todo el pool de Cadereyta, dado que el reformado importado es más barato que el alquilado nacional, sería más rentable cubrir la demanda con el reformado importado. Se estarían obteniendo más ganancias en detrimento de la calidad de las gasolinas del país y se estaría despreciando una gasolina de alta calidad nacional por una extranjera de menor calidad. Al restringir bencenos y aromáticos en la gasolina convencional, se mejora la calidad de la gasolina y se utilizan para ello los recursos nacionales. Ahora el reformado importado compite desventajosamente (el importado es más caro) con el nacional por cubrir el pequeño hueco permisible de 1% Benceno, 25% Aromáticos.

Observe que en la determinación de las propiedades óptimas de las gasolinas convencionales, no sólo se buscó maximizar las ganancias. También se hizo énfasis en minimizar las importaciones y en producir gasolinas de la mejor calidad posible. Tal y como se dijo en la página 89, se están tomando en cuenta las preocupaciones fundamentales del estado.

Estimación de la Demanda a cubrir

Finalmente sólo resta determinar la demanda a cubrir: La producción que tendrá el país para el año 2000 será de 585,000 barriles diarios[4] de ellos Cadereyta estará produciendo 117,491 barriles diarios, es decir aproximadamente el 20%. La demanda del 2000 será de 644,440 barriles diarios[4] si Cadereyta debe cubrir el 20% de esa demanda le corresponden 130,000 barriles diarios. (Por lo que será necesario importar un poco).

De esos 130,000 barriles diarios sólo una fracción corresponderá a gasolinas reformuladas. Durante 1995 la demanda de la ZMVM, Guadalajara y Monterrey combinadas ascendió a 164,220 barriles diarios y la demanda total fue de 478,790 barriles diarios[5]. Es decir que sólo el $164220/478790 = 34\%$ de la gasolina consumida en el país se consumió en los grandes centros urbanos. Por lo que en principio puede pensarse que basta un 34% de gasolinas reformuladas.

Ahora se debe estimar la demanda de la gasolina PREMIUM. Es claro que las personas que usan gasolina NOVA no cambiarán a PREMIUM (en todo caso cambiarían a MAGNA), sólo algunos de los usuarios de MAGNA cambiarán a PREMIUM. Así que la demanda de PREMIUM puede expresarse como un porcentaje de la demanda de MAGNA. Todavía más, dado que los autos de lujo que usarán PREMIUM transitan fundamentalmente en las ciudades, PREMIUM será un porcentaje de MAGNA Reformulada, no de Magna total. Como el precio de la gasolina PREMIUM es mayor, se estima que no más del 20% de los usuarios de MAGNA RFLD cambiarán a PREMIUM. Es muy importante fijar la demanda de PREMIUM pues por ser la gasolina cuya venta aporta más ingresos, el algoritmo tratará de incrementar la producción de PREMIUM hasta donde se le permita.

Resumen

Componentes a Mezclar [1]

| | Crack | Rfcn | MTBE | Alq | Isom |
|-----------------------------------|--------|--------|-------|-------|--------|
| Costo de producción(USD/barril) | 16.06 | 21.18 | 39.54 | 31.37 | 13.48 |
| Costo de importación (USD/barril) | | 28.17 | 52.59 | 41.72 | |
| Barriles diarios disponibles | 57,751 | 36,686 | 2,645 | 9,330 | 11,079 |
| Octanaje (R+M)/2 | 85 | 91.5 | 109.5 | 92.5 | 79.5 |
| RVP (psi) | 6.2 | 3.5 | 7.9 | 5.1 | 13.5 |
| Benceno (%vol) | 0.6 | 2.26 | 0 | 0 | 0 |
| Aromáticos (%vol) | 23.5 | 48.6 | 0 | 0 | 0 |
| Azufre (ppm, peso) | 1970 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Olefinas (%vol) | 35 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Oxígeno (% peso) | 0 | 0 | 18.18 | 0 | 0 |
| Densidad (lb/ft ³) | 45.1 | 47.7 | 44 | 41.1 | 38.7 |

Gasolinas Reformuladas a Producir [2] y [3]

| | PREMIUM | MAGNA RFLD | NOVA RFLD |
|-------------------------|---------|------------|-----------|
| Precio (USD/barril) | 58.51 | 47.65 | 46.26 |
| Octanaje mínimo (R+M)/2 | 92 | 87 | 78 |
| RVP máxima (psi) | 7.1 | 7.1 | 7.1 |
| Benceno %vol máximo | 1 | 1 | 1 |
| Aromáticos %vol máximo | 25 | 25 | 25 |
| Azufre ppm peso máximas | 500 | 500 | 500 |
| Olefinas %vol máximo | 10 | 10 | 10 |
| Oxígeno % peso mínimo | 2 | 2 | 2 |
| Oxígeno % peso máximo | 3.5 | 3.5 | 3.5 |
| Pb g/galón máximos | 0.01 | 0.01 | 0.01 |

Gasolinas convencionales a producir

| | MAGNA CVNL | NOVA CVNL |
|-------------------------|--------------|--------------|
| Precio (USD/barril) | 47.65 | 46.26 |
| Octanaje mínimo (R+M)/2 | 87 | 78 |
| RVP máxima (psi) | 7.1 | 7.1 |
| Benceno %vol máximo | 1 | 1 |
| Aromáticos %vol máximo | 25 | 25 |
| Azufre ppm peso máximas | 1500 | 1500 |
| Olefinas %vol máximo | 30 | 30 |
| Oxígeno | No requerido | No requerido |
| Pb g/galón máximos | 0.01 | 0.01 |

Demanda

- Demanda total = 130,000 barriles diarios. La "producción" total (incluidas las importaciones) no debe exceder los 130,000 barriles diarios.
- Demanda de gasolinas reformuladas = 0.34 de la demanda total. La producción mínima de gasolinas reformuladas equivale al 34% de la producción total.
- Demanda de PREMIUM = 0.2 de Magna Reformulada. La producción máxima de Premium equivale al 20% de la Magna reformulada.

Bibliografía para el Capítulo 5

- [1] Instituto Mexicano del Petróleo
"Estimaciones sobre el proyecto Cadereyta
Tabla VA: Análisis del pool de gasolina"

- [2] PEMEX, Gerencia Corporativa de Información y Relaciones Publicas
Boletín numero 80/96, 18 de Marzo de 1996

- [3] "U.S. refiners clear hurdles to produce reformulated gasoline"
Penn Well, International Petroleum Encyclopedia

- [4] Miguel A. Leiva y Nuncio
"La Reformulación de Gasolinas en México"
Artículo en Prensa, revista IMIQ

- [5] Fernando de Jesús Rodríguez Rivera
Información Personal

Capítulo 6
Optimización

Índice

| | |
|--------------------------|-----|
| Formulación del Problema | 117 |
| Optimización | 126 |
| Resultados | 129 |
| Análisis de Sensibilidad | 132 |
| Conclusiones | 135 |

Capítulo 6

Optimización

Con base en la definición del problema elaborada en el capítulo anterior y resumida en la página 112, se debe ahora formular al problema como un sistema de desigualdades lineales acoplado a una función objetivo lineal.

Una vez formulado de esta manera, el problema será resuelto por el programa *X1* y se analizarán los resultados.

Formulación del Problema

Función Objetivo

Se buscará maximizar las utilidades brutas, definidas como ingresos por ventas menos costo de lo vendido.

$$\text{Ingresos} = 58.51\text{Premium} + 47.65(\text{MagRfld} + \text{MagCvnl}) + 46.26(\text{NovRfld} + \text{NovCvnl})$$

Los precios están expresados en dólares por barril. Premium denota los barriles diarios producidos de gasolina Premium. MagRfld los barriles diarios de Magna Reformulada. MagCvnl los barriles diarios de Magna Convencional. Y NovRfld y NovCvnl los barriles diarios de Nova, Reformulada y Convencional respectivamente. Así que los ingresos están expresados en dólares diarios.

$$\begin{aligned} \text{Costo} = & 16.06\text{Crack} + 21.18\text{RfcnNa} + 28.17\text{RfcnIm} + 39.54\text{MtbeNa} + 52.59\text{MtbeIm} \\ & + 31.37 \text{AlqNa} + 41.72\text{AlqIm} + 13.48\text{Isom} \end{aligned}$$

Crack, Rfcn, Mtbe, Alq e Isom denotan respectivamente: los barriles diarios de gasolina de cracking, reformación, MTBE, alquilación e isomerización. Los sufijos 'Na' e 'Im' diferencian a la gasolina Nacional de la Importada.

La función objetivo es entonces:

$$\begin{aligned} & 58.51\text{Premium} + 47.65(\text{MagRfld} + \text{MagCvnl}) + 46.26(\text{NovRfld} + \text{NovCvnl}) \\ & - (16.06\text{Crack} + 21.18\text{RfcnNa} + 28.17\text{RfcnIm} + 39.54\text{MtbeNa} + 52.59\text{MtbeIm} \\ & + 31.37 \text{AlqNa} + 41.72\text{AlqIm} + 13.48\text{Isom}) \end{aligned}$$

Fronteras

Hay que definir los valores que pueden tomar las variables. Los componentes nacionales a mezclar no pueden exceder su producción disponible:

$$\begin{aligned} \text{Crack} &\leq 57,751 \\ \text{RfcnNa} &\leq 36,686 \\ \text{MtbeNa} &\leq 2,645 \\ \text{AlqNa} &\leq 9,330 \\ \text{Isom} &\leq 11,079 \end{aligned}$$

No hay un límite directo sobre la cantidad de componentes importados que pueden consumirse, pero estos se ven limitados indirectamente por la existencia de una demanda finita.

$$\text{PROD} \leq 130,000$$

Donde PROD denota los barriles totales de gasolina de consumo final 'producidos' (incluyendo los componentes importados involucrados en la 'producción').

Restricciones

Demanda

Las primeras restricciones tienen que ver con la demanda. Primeramente una definición de

$$\text{PROD} = \text{Premium} + \text{MagRfld} + \text{MagCvnl} + \text{NovRfld} + \text{NovCvnl}$$

Luego establecer que como mínimo las gasolinas reformuladas deben ser el 34% de la producción: $\text{Premium} + \text{MagRfld} + \text{MagCvnl} \geq 0.34\text{PROD}$

La producción de Premium no debe exceder al 20% de la producción de Magna reformulada: $\text{Premium} \leq 0.2\text{MagRfld}$

Para escribir el resto de las restricciones debemos definir un número importante de variables "internas", que no aparecen explícitamente en la función objetivo. Por ejemplo: Crack

denota los barriles totales de gasolina de cracking usados, pero es claro que sólo una fracción de Crack se utiliza en la producción de Premium y otra diferente en la producción de MagRfld y así sucesivamente. Por ello 'CrackPr' denota los barriles diarios de gasolina de cracking usados para producir gasolina Premium. El sufijo 'Pr' distingue a los barriles totales de gasolina de cracking usados (Crack) de los barriles de cracking usados exclusivamente para producir Premium (CrackPr). Los otros sufijos usados son: MR para MagRfld, MC para MagCvnl, NR para NovRfld y NC para NovCvnl. Así, por ejemplo: RfcnNaMC denota los barriles usados de gasolina de reformación nacional para producir gasolina Magna Convencional.

Las definiciones de estas variables son parte de las restricciones:

$$\begin{aligned}
 \text{Crack} &= \text{CrackPr} + \text{CrackMR} + \text{CrackMC} + \text{CrackNR} + \text{CrackNC} \\
 \text{RfcnNa} &= \text{RfcnNaPr} + \text{RfcnNaMR} + \text{RfcnNaMC} + \text{RfcnNaNR} + \text{RfcnNaNC} \\
 \text{RfcnIm} &= \text{RfcnImPr} + \text{RfcnImMR} + \text{RfcnImMC} + \text{RfcnImNR} + \text{RfcnImNC} \\
 \text{MibeNa} &= \text{MibeNaPr} + \text{MibeNaMR} + \text{MibeNaMC} + \text{MibeNaNR} + \text{MibeNaNC} \\
 \text{MibeIm} &= \text{MibeImPr} + \text{MibeImMR} + \text{MibeImMC} + \text{MibeImNR} + \text{MibeImNC} \\
 \text{AlqNa} &= \text{AlqNaPr} + \text{AlqNaMR} + \text{AlqNaMC} + \text{AlqNaNR} + \text{AlqNaNC} \\
 \text{AlqIm} &= \text{AlqImPr} + \text{AlqImMR} + \text{AlqImMC} + \text{AlqImNR} + \text{AlqImNC} \\
 \text{Isom} &= \text{IsomPr} + \text{IsomMR} + \text{IsomMC} + \text{IsomNR} + \text{IsomNC} \\
 \\
 \text{Premium} &= \text{CrackPr} + \text{RfcnNaPr} + \text{RfcnImPr} + \text{MibeNaPr} + \text{MibeImPr} \\
 &\quad + \text{AlqNaPr} + \text{AlqImPr} + \text{IsomPr} \\
 \text{MagRfld} &= \text{CrackMR} + \text{RfcnNaMR} + \text{RfcnImMR} + \text{MibeNaMR} + \text{MibeImMR} \\
 &\quad + \text{AlqNaMR} + \text{AlqImMR} + \text{IsomMR} \\
 \text{MagCvnl} &= \text{CrackMC} + \text{RfcnNaMC} + \text{RfcnImMC} + \text{MibeNaMC} + \text{MibeImMC} \\
 &\quad + \text{AlqNaMC} + \text{AlqImMC} + \text{IsomMC} \\
 \text{NovRfld} &= \text{CrackNR} + \text{RfcnNaNR} + \text{RfcnImNR} + \text{MibeNaNR} + \text{MibeImNR} \\
 &\quad + \text{AlqNaNR} + \text{AlqImNR} + \text{IsomNR} \\
 \text{NovCvnl} &= \text{CrackNC} + \text{RfcnNaNC} + \text{RfcnImNC} + \text{MibeNaNC} + \text{MibeImNC} \\
 &\quad + \text{AlqNaNC} + \text{AlqImNC} + \text{IsomNC}
 \end{aligned}$$

Ahora usando estas variables internas se delimitarán las propiedades de cada gasolina.

Octanaje

Para efectos prácticos las gasolinas no contienen plomo. Sin embargo para ilustrar el uso de la regla de mezclado cuando la gasolina tiene plomo, se aprovechará el pequeño pero existente nivel de plomo de las gasolinas.

Hay que calcular el factor LLE con la concentración de plomo (0.01g/gal). Leyendo la

formula de la página 71: $LLE = EXP\{(0.3851+0.0847(0.01)^{0.58}\} \{ \ln(0.01/3) \} = 7.28 \cdot 10^{-4}$

Ahora usando LLE se debe calcular el octanaje que tendrá cada componente gracias a la adición de plomo. Por ejemplo: la gasolina de cracking tiene un octanaje de 85 cuando está libre de plomo y de 93.8 cuando contiene 3 g/gal. A una concentración de 0.01 g Pb/gal tendrá. $85 + (93.8-85)(7.28)10^{-4} = 85.0064 \approx 85.01$. Como ya se había advertido el octanaje permanece prácticamente inalterado. Y lo mismo sucede con los otros componentes:

Octanajes a diferentes concentraciones de plomo

| Gasolina | (R+M)/2 sin plomo | (R+M)/2 con 3g Pb/gal* | (R+M)/2 con 0.01 g Pb/gal |
|----------|-------------------|------------------------|---------------------------|
| Crack | 85 | 93.8 | 85.01 |
| Rfn | 91.5 | 99.2 | 91.51 |
| Mtbe | 109.5 | 118.6 | 109.51 |
| Alq | 92.5 | 103.5 | 92.51 |
| Isom | 79.5 | 88.6 | 79.51 |

En seguida se deben corregir los parámetros de interacción binaria de la página 72. El primer problema es que no se dispone de parámetros para índice de octano: (R+M)/2, sino sólo para RON o para MON. Pero los parámetros de la página 72 son sólo parámetros típicos. En realidad la refinería de Cadereyta debería desarrollar sus propios índices experimentando con sus gasolinas. Pues sus gasolinas pueden comportarse de una forma diferente. El

* Valores estimados a partir de los incrementos típicos para cada tipo de gasolina (ver página 71)

objetivo de este trabajo es sentar las bases para la aplicación de la programación lineal sobre problemas de mezclado de gasolinas. El desarrollo vía experimental de índices de mezclado para cada refinería mexicana es necesario, pero queda fuera de los alcances de este trabajo. Por ello simplemente se usarán los parámetros típicos de RON ignorando que estamos manejando $(R+M)/2^*$ y dado que se carece de ellos los parámetros de Mtbe e Isom serán tomados como cero. Regresando a la corrección de los parámetros binarios: El kij a cualquier concentración de Plomo, es igual a: $kij \text{ limpio}(1-LLE)+kij \text{ 3g Pb/gal} \cdot LLE$. Por ejemplo para el par Rfcn-Crack, el kij limpio es de 0.9 y el kij a 3g de Pb/gal de -0.6 por lo que el kij a 0.01 g Pb/gal es de 0.899. Los kij limpios y a 3 g Pb/gal pueden verse en la página 72. Usándolos se llegó a la siguiente tabla:

| j | i | Crack | Rfcn | Mtbe | Alq | Isom | Σ |
|----------|---|-------|--------|------|--------|------|----------|
| Crack | | 0 | 0.899 | 0 | 0.297 | 0 | 1.196 |
| Rfcn | | 0.899 | 0 | 0 | -1.602 | 0 | -0.703 |
| Mtbe | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Alq | | 0.297 | -1.602 | 0 | 0 | 0 | -1.305 |
| Isom | | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Σ | | 1.196 | -0.703 | 0 | -1.305 | 0 | -0.812 |

Ahora es posible calcular los índices de mezclado. Por ejemplo el índice de Crack es: $85.01 + 1/5(1.196) = 85.25$, el de Rfcn $91.51 + 1/5(-0.703) = 91.37$ y así para el resto de los componentes. Para Premium el índice es: $92 + 1/50(-0.812) = 91.98$ y para Magna $87 + 1/50(-0.812) = 86.98$. Los resultados se resumen en la siguiente tabla:

*Otra opción sería manejar RON en lugar de $(R+M)/2$ pero se desconoce el octanaje RON que tendrá Premium

Índices de Mezclado para el Octanaje

| Gasolina | Octanaje (R+M)/2 | Índice de Mezclado |
|----------|------------------|--------------------|
| Crack | 85 | 85.25 |
| Rfcn | 91.5 | 91.37 |
| Mtbe | 109.5 | 109.51 |
| Alq | 92.5 | 92.25 |
| Isom | 79.5 | 79.51 |
| Premium | 92 | 91.98 |
| Magna | 87 | 86.98 |
| Nova | 78 | 77.98 |

Como estos índices son aditivos en fracción volumétrica, con ellos se escriben las restricciones:

$$85.25 \frac{\text{CrackPr}}{\text{Premium}} + 91.37 \frac{\text{RfcnNaPr} + \text{RfcnImPr}}{\text{Premium}} + 109.51 \frac{\text{MtbeNaPr} + \text{MtbeImPr}}{\text{Premium}} + 92.25 \frac{\text{AlqNaPr} + \text{AlqImPr}}{\text{Premium}} + 79.51 \frac{\text{IsomPr}}{\text{Premium}} \geq 91.98$$

O bien:

$$85.25\text{CrackPr} + 91.37(\text{RfcnNaPr} + \text{RfcnImPr}) + 109.51(\text{MtbeNaPr} + \text{MtbeImPr}) + 92.25(\text{AlqNaPr} + \text{AlqImPr}) + 79.51\text{IsomPr} \geq 91.98\text{Premium}$$

Análogamente:

$$85.25\text{CrackMR} + 91.37(\text{RfcnNaMR} + \text{RfcnImMR}) + 109.51(\text{MtbeNaMR} + \text{MtbeImMR}) + 92.25(\text{AlqNaMR} + \text{AlqImMR}) + 79.51\text{IsomMR} \geq 86.98\text{MagRfld}$$

$$85.25\text{CrackMC} + 91.37(\text{RfcnNaMC} + \text{RfcnImMC}) + 109.51(\text{MtbeNaMC} + \text{MtbeImMC}) + 92.25(\text{AlqNaMC} + \text{AlqImMC}) + 79.51\text{IsomMC} \geq 86.98\text{MagCvnl}$$

No es necesario incluir una restricción de octanaje para las Novas pues sea cual sea la combinación de componentes, la mezcla siempre tendrá un octanaje superior al deseado.

Observe como serían las restricciones de octanaje para las Novas.

$$85.25\text{CrackNR} + 91.37(\text{RfcnNaNR} + \text{RfcnImNR}) + 109.51(\text{MtbeNaNR} + \text{MtbeImNR}) + 92.25(\text{AlqNaNR} + \text{AlqImNR}) + 79.51\text{IsomNR} \geq 77.98\text{NovRfld}$$

$$85.25\text{CrackNC} + 91.37(\text{RfcnNaNC} + \text{RfcnImNC}) + 109.51(\text{MtbeNaNC} + \text{MtbeImNC}) + 92.25(\text{AlqNaNC} + \text{AlqImNC}) + 79.51\text{IsomNC} \geq 77.98\text{NovCvnl}$$

RVP

Para convertir los valores de RVP en índices basta elevar a la 1.25. A continuación se resumen los índices:

| Índices de Mezclado para la RVP | | |
|---------------------------------|-----------|--------------------|
| Gasolina | RVP (psi) | Índice de Mezclado |
| Crack | 6.2 | 9.783 |
| Rfcn | 3.5 | 4.787 |
| Mtbe | 7.9 | 13.245 |
| Alq | 5.1 | 7.664 |
| Isom | 13.5 | 25.877 |
| Premium | 7.1 | 11.59 |
| Magna | 7.1 | 11.59 |
| Nova | 7.1 | 11.59 |

Con estos índices es posible escribir las siguientes restricciones:

$$\begin{aligned}
 & 9.783\text{CrackPr} + 4.787(\text{RfcnNaPr} + \text{RfcnImPr}) + 13.245(\text{MtbeNaPr} + \text{MtbeImPr}) \\
 & \quad + 7.664(\text{AlqNaPr} + \text{AlqImPr}) + 25.877\text{IsomPr} \leq 11.59\text{Premium} \\
 & 9.783\text{CrackMR} + 4.787(\text{RfcnNaMR} + \text{RfcnImMR}) + 13.245(\text{MtbeNaMR} + \text{MtbeImMR}) \\
 & \quad + 7.664(\text{AlqNaMR} + \text{AlqImMR}) + 25.877\text{IsomMR} \leq 11.59\text{MagRfld} \\
 & 9.783\text{CrackMC} + 4.787(\text{RfcnNaMC} + \text{RfcnImMC}) + 13.245(\text{MtbeNaMC} + \text{MtbeImMC}) \\
 & \quad + 7.664(\text{AlqNaMC} + \text{AlqImMC}) + 25.877\text{IsomMC} \leq 11.59\text{MagCvnl} \\
 & 9.783\text{CrackNR} + 4.787(\text{RfcnNaNR} + \text{RfcnImNR}) + 13.245(\text{MtbeNaNR} + \text{MtbeImNR}) \\
 & \quad + 7.664(\text{AlqNaNR} + \text{AlqImNR}) + 25.877\text{IsomNR} \leq 11.59\text{NovRfld} \\
 & 9.783\text{CrackNC} + 4.787(\text{RfcnNaNC} + \text{RfcnImNC}) + 13.245(\text{MtbeNaNC} + \text{MtbeImNC}) \\
 & \quad + 7.664(\text{AlqNaNC} + \text{AlqImNC}) + 25.877\text{IsomNC} \leq 11.59\text{NovCvnl}
 \end{aligned}$$

Compuestos Oxigenados (MTBE)

El 2% en peso de oxígeno exigido como mínimo puede transformarse en % en volumen de MTBE. Una mol de MTBE contiene 88 g de MTBE y 16 g de oxígeno. La densidad de la gasolina es de 45 lb/ft³ y la del MTBE de 44 lb/ft³. De manera que: (2%)(88/16)(45/44) = 11.25% vol de MTBE. Lo que permite plantear las siguientes restricciones:

$$\begin{aligned}
 & \text{MtbeNaPr} + \text{MtbeImPr} \geq 0.1125\text{Premium} \\
 & \text{MtbeNaMR} + \text{MtbeImMR} \geq 0.1125\text{MagRfld} \\
 & \text{MtbeNaNR} + \text{MtbeImNR} \geq 0.1125\text{NovRfld}
 \end{aligned}$$

Así mismo el 3.5% en peso de oxígeno se convierte en 19.69% en volumen de MTBE y:

$$\begin{aligned} \text{MtbeNaPr} + \text{MtbeImPr} &\leq 0.1969\text{Premium} \\ \text{MtbeNaMR} + \text{MtbeImMR} &\leq 0.1969\text{MagRfld} \\ \text{MtbeNaNR} + \text{MtbeImNR} &\leq 0.1969\text{NovRfld} \end{aligned}$$

Compuestos Aromáticos

Se permite máximo un 25%vol de compuestos aromáticos. Rfcn tiene 48.6%vol y Crack

23.5%. El resto de los componentes no contiene aromáticos.

$$\begin{aligned} 23.5\text{CrackPr} + 48.6(\text{RfcnNaPr} + \text{RfcnImPr}) &\leq 25\text{Premium} \\ 23.5\text{CrackMR} + 48.6(\text{RfcnNaMR} + \text{RfcnImMR}) &\leq 25\text{MagRfld} \\ 23.5\text{CrackNR} + 48.6(\text{RfcnNaNR} + \text{RfcnImNR}) &\leq 25\text{NovRfld} \\ 23.5\text{CrackMC} + 48.6(\text{RfcnNaMC} + \text{RfcnImMC}) &\leq 25\text{MagCvnl} \\ 23.5\text{CrackNC} + 48.6(\text{RfcnNaNC} + \text{RfcnImNC}) &\leq 25\text{NovCvnl} \end{aligned}$$

Benceno

Se permite máximo un 1 %vol. Crack contiene 0.6% y Rfcn 2.26%:

$$\begin{aligned} 0.6\text{CrackPr} + 2.26(\text{RfcnNaPr} + \text{RfcnImPr}) &\leq \text{Premium} \\ 0.6\text{CrackMR} + 2.26(\text{RfcnNaMR} + \text{RfcnImMR}) &\leq \text{MagRfld} \\ 0.6\text{CrackNR} + 2.26(\text{RfcnNaNR} + \text{RfcnImNR}) &\leq \text{NovRfld} \\ 0.6\text{CrackMC} + 2.26(\text{RfcnNaMC} + \text{RfcnImMC}) &\leq \text{MagCvnl} \\ 0.6\text{CrackNC} + 2.26(\text{RfcnNaNC} + \text{RfcnImNC}) &\leq \text{NovCvnl} \end{aligned}$$

Olefinas

Se permite un 10%vol para las gasolinas reformuladas y hasta un 30%vol para las convencionales. El único componente que aporta olefinas es la gasolina de cracking:

$$\begin{aligned} 35\text{CrackPr} &\leq 10\text{Premium} \\ 35\text{CrackMR} &\leq 10\text{MagRfld} \\ 35\text{CrackNR} &\leq 10\text{NovRfld} \\ 35\text{CrackMC} &\leq 30\text{MagCvnl} \\ 35\text{CrackNC} &\leq 30\text{NovCvnl} \end{aligned}$$

Azufre

La gasolina de cracking contiene 1970 ppm peso de azufre. Y se permite como máximo 500 ppm peso en las gasolinas reformuladas y hasta 1500 ppm en las convencionales.

La densidad del azufre es de 125 lb/ft³ y la de la gasolina de cracking de 45.1 lb/ft³. Así que 1970 ppm peso equivalen a $1970 \times (45.1/125) \approx 711$ ppm volumen. La densidad típica de la gasolina de consumo final es de 45 lb/ft³. Así que 500 ppm peso equivalen a 180 ppm volumen. Y 1500 ppm peso a 540 ppm volumen.

711CrackPr \leq 180Premium

711CrackMR \leq 180MagRfld

711CrackNR \leq 180NovRfld

711CrackMC \leq 540MagCvnl

711CrackNC \leq 540NovCvnl

Optimización

Para que el programa *XA* optimice o soluciones el problema de mezclado basta reescribir las restricciones en un archivo de tipo texto. Sin embargo existen dos puntos importantes a considerar:

1. En la función objetivo, deben de estar presentes *todas* las variables del problema. Esto incluye a las variables internas. Para incluir a las variables internas se les asigna un coeficiente o precio de cero.
2. En el lado derecho de todas las restricciones sólo puede haber un número. No se permite colocar ninguna variable.

Observe el archivo *CADEREY.LP* que contiene la formulación del problema bajo estos términos:

..TITLE

Mezclado de Gasolinas en la Refinería de CADEREYTA

..OBJECTIVE MAXIMIZE

58.51 Premium + 47.65 (MagRfd + MagCvnl) + 46.26 (NovRfd + NovCvnl)
-(16.06 Crack + 21.18 RfcnNa + 28.17 RfcnIm + 39.54 MibeNa + 52.59 Mibelm
+ 31.37 AlqNa + 41.72 AlqIm + 13.48 Isom)
+ 0 (CrackPr + CrackMR+ CrackMC+ CrackNR+ CrackNC
+ RfcnNaPr + RfcnNaMR + RfcnNaMC + RfcnNaNR + RfcnNaNC
+ RfcnImPr + RfcnImMR + RfcnImMC + RfcnImNR + RfcnImNC
+ MibeNaPr + MibeNaMR + MibeNaMC + MibeNaNR + MibeNaNC
+ MibelmPr + MibelmMR + MibelmMC + MibelmNR + MibelmNC
+ AlqNaPr + AlqNaMR + AlqNaMC + AlqNaNR + AlqNaNC
+ AlqImPr + AlqImMR + AlqImMC + AlqImNR + AlqImNC
+ IsomPr + IsomMR + IsomMC + IsomNR + IsomNC + PROD)

..BOUNDS

Crack <= 57751
RfcnNa <= 36686
MibeNa <= 2643
AlqNa <= 9330
Isom <= 11079
PROD <= 130000

..CONSTRAINT

*****Demanda*****

DProd: PROD - (Premium + MagRfld + MagCvnl + NovRfld + NovCvnl) = 0
DemRflds: (Premium + MagRfld + NovRfld) - 0.34 PROD >= 0
DeinPr: Premium - 0.2 MagRfld <= 0

*****Balances de Materia*****

BCK: Crack - (CrackPr + CrackMR+ CrackMC+ CrackNR+ CrackNC) = 0
BRfNa: RfcnNa - (RfcnNaPr + RfcnNaMR + RfcnNaMC + RfcnNaNR - RfcnNaNC) = 0
BRfM: RfcnM - (RfcnMPr + RfcnMMR + RfcnMMC + RfcnMNR + RfcnMNC) = 0
BMbNa: MibeNa - (MibeNaPr + MibeNaMR + MibeNaMC + MibeNaNR + MibeNaNC) = 0
BMbM: MibeM - (MibeMPr + MibeMMR + MibeMMC + MibeMNR + MibeMNC) = 0
BAfNa: AlqNa - (AlqNaPr + AlqNaMR + AlqNaMC + AlqNaNR + AlqNaNC) = 0
BAfM: AlqM - (AlqMPr + AlqMMR + AlqMMC + AlqMNR + AlqMNC) = 0
BIsM: Isom - (IsomPr + IsomMR + IsomMC + IsomNR + IsomNC) = 0
BPr: Premium - (CrackPr + RfcnNaPr + RfcnMPr + MibeNaPr + MibeMPr
+ AlqNaPr + AlqMPr + IsomPr) = 0
BMR: MagRfld - (CrackMR + RfcnNaMR + RfcnMNR + MibeNaMR + MibeMNR
+ AlqNaMR + AlqMNR + IsomMR) = 0
BMC: MagCvnl - (CrackMC + RfcnNaMC + RfcnMMC + MibeNaMC + MibeMMC
+ AlqNaMC + AlqMMC + IsomMC) = 0
BNR: NovRfld - (CrackNR + RfcnNaNR + RfcnMNR + MibeNaNR + MibeMNR
+ AlqNaNR + AlqMNR + IsomNR) = 0
BNC: NovCvnl - (CrackNC + RfcnNaNC + RfcnMNC + MibeNaNC + MibeMNC
+ AlqNaNC + AlqMNC + IsomNC) = 0

*****Octanaje*****

OctPr: 85.25CrackPr + 91.37(RfcnNaPr + RfcnMPr) +
109.51(MibeNaPr + MibeMPr)+ 92.25(AlqNaPr + AlqMPr)
+ 79.51IsomPr - 91.98Premium >= 0
OctMR: 85.25CrackMR + 91.37(RfcnNaMR + RfcnMNR) +
109.51(MibeNaMR + MibeMNR)+ 92.25(AlqNaMR + AlqMNR)
+ 79.51IsomMR - 86.98MagRfld >= 0
OctMC: 85.25CrackMC + 91.37(RfcnNaMC + RfcnMMC) +
109.51(MibeNaMC + MibeMMC)+ 92.25(AlqNaMC + AlqMMC)
+ 79.51IsomMC - 86.98MagCvnl >= 0

*****RVP*****

RVPPr: 9.783CrackPr + 4.787(RfcnNaPr + RfcnMPr) + 13.245(MibeNaPr +
MibeMPr)+ 7.664(AlqNaPr + AlqMPr) + 25.877IsomPr - 11.59Premium <= 0
RVPMR: 9.783CrackMR + 4.787(RfcnNaMR + RfcnMNR) + 13.245(MibeNaMR +
MibeMNR)+ 7.664(AlqNaMR + AlqMNR) + 25.877IsomMR - 11.59MagRfld <= 0
RVPMC: 9.783CrackMC + 4.787(RfcnNaMC + RfcnMMC) + 13.245(MibeNaMC +
MibeMMC)+ 7.664(AlqNaMC + AlqMMC) + 25.877IsomMC - 11.59MagCvnl <= 0
RVPNR: 9.783CrackNR + 4.787(RfcnNaNR + RfcnMNR) + 13.245(MibeNaNR +
MibeMNR)+ 7.664(AlqNaNR + AlqMNR) + 25.877IsomNR - 11.59NovRfld <= 0
RVPNC: 9.783CrackNC + 4.787(RfcnNaNC + RfcnMNC) + 13.245(MibeNaNC +
MibeMNC)+ 7.664(AlqNaNC + AlqMNC) + 25.877IsomNC - 11.59NovCvnl <= 0

*****Oxígeno*****

OxPrMi: MibeNaPr + MibeImPr - 0.1125Premium >= 0
OxMRMi: MibeNaMR + MibeImMR - 0.1125MagRfld >= 0
OxNRMi: MibeNaNR + MibeImNR - 0.1125NovRfld >= 0
OxPrMa: MibeNaPr + MibeImPr - 0.1969Premium <= 0
OxMRMa: MibeNaMR + MibeImMR - 0.1969MagRfld <= 0
OxNRMa: MibeNaNR + MibeImNR - 0.1969NovRfld <= 0

*****Aromáticos y Benceno*****

AromPr: 23.5CrackPr + 48.6(RfcnNaPr + RfcnImPr) - 25Premium <= 0
AromMR: 23.5CrackMR + 48.6(RfcnNaMR + RfcnImMR) - 25MagRfld <= 0
AromNR: 23.5CrackNR + 48.6(RfcnNaNR + RfcnImNR) - 25NovRfld <= 0
AromMC: 23.5CrackMC + 48.6(RfcnNaMC + RfcnImMC) - 25MagCvnl <= 0
AromNC: 23.5CrackNC + 48.6(RfcnNaNC + RfcnImNC) - 25NovCvnl <= 0

C6H6Pr: 0.6CrackPr + 2.26(RfcnNaPr + RfcnImPr) - Premium <= 0
C6H6MR: 0.6CrackMR + 2.26(RfcnNaMR + RfcnImMR) - MagRfld <= 0
C6H6NR: 0.6CrackNR + 2.26(RfcnNaNR + RfcnImNR) - NovRfld <= 0
C6H6MC: 0.6CrackMC + 2.26(RfcnNaMC + RfcnImMC) - MagCvnl <= 0
C6H6NR: 0.6CrackNC + 2.26(RfcnNaNC + RfcnImNC) - NovCvnl <= 0

*****Olefinas y Azufre*****

OlefPr: 35CrackPr - 10Premium <= 0
OlefMR: 35CrackMR - 10MagRfld <= 0
OlefNR: 35CrackNR - 10NovRfld <= 0
OlefMC: 35CrackMC - 30MagCvnl <= 0
OlefNC: 35CrackNC - 30NovCvnl <= 0

AzufPr: 711CrackPr - 180Premium <= 0
AzufMR: 711CrackMR - 180MagRfld <= 0
AzufNR: 711CrackNR - 180NovRfld <= 0
AzufMC: 711CrackMC - 540MagCvnl <= 0
AzufNC: 711CrackNC - 540NovCvnl <= 0

Una vez escrito el archivo basta teclear: XA Caderey output Caderey.rep ←

Para que el programa resuelva el problema de mezclado.

Resultados

Se generan ganancias por 3.51 millones de dólares diarios (1281 millones de dólares al año).

Se producen 130,000 barriles diarios de gasolina: 13,034 BPD de Premium (10%v del total), 65,170 BPD de Magna reformulada (50.2%v del total) y 51,796 BPD de Magna Convencional (39.8%v del total). No se produce ningún tipo de Nova, el pool tiene un gran octanaje y no necesita producir una gasolina de bajo octanaje. Esto es congruente con las predicciones acerca de la pronta desaparición de la Nova.

Del total de gasolinas producidas el 60.16%v corresponde a gasolinas reformuladas. Como bastaba con el 34%v. Esto significa que los proyectos realizados en la refinería de Cadereyta, le permitirán a esta cubrir completamente la demanda de gasolinas reformuladas, tanto a corto como a mediano plazo.

Premium es exactamente el 20% de MagRfd. Como se había previsto el algoritmo trata de producir tanta Premium como se le permita. Más adelante se analizará lo que sucede si cambia la demanda de Premium que se estimó.

Se utiliza todo el pool nacional. Observe que las gasolinas importadas compitieron con las nacionales por cubrir la demanda de 130,000 BPD. Y el uso de las nacionales ha probado ser más rentable. Del total 'producido' sólo el 9.62%v es importado.

Como se esperaba el MTBE y el Alq nacionales son insuficientes y es ahí donde se dan las mayores importaciones: Del total importado el 8%v es Rfcn, el 49%v es MTBE y el 43%v es Alq. Del total de Rfcn usado el 3%v es importado. Del total de MTBE usado el 70%v es importado. Y del total de Alq usado el 37%v es importado. El volumen total de las importaciones asciende a 12,509 BPD y tiene un valor de 575,834 dólares diarios. Si los

costos de las gasolinas importadas cambian pueden aparecer cambios en los resultados del problema, más adelante se analizarán algunas posibles variaciones.

A continuación se resumen las propiedades de las gasolinas producidas

| Propiedades de las Gasolinas producidas | | | |
|---|---------|------------|------------|
| | PREMIUM | MAGNA RFLD | MAGNA CVNL |
| BPD | 13,034 | 65,170 | 51,796 |
| Octanaje | 92.1 | 89.9 | 87 |
| RVP | 5.1 | 6.7 | 5.7 |
| Oxígeno %peso | 2 | 2 | 0 |
| Benceno %v | 1 | 1 | 0.8 |
| Aromáticos %v | 24.19 | 24.19 | 25 |
| Olefinas %v | 8.86 | 8.86 | 25.65 |
| Azufre ppm peso | 500 | 500 | 1447 |

Obviamente las tres gasolinas están dentro de sus especificaciones, pero las gasolinas reformuladas, por ejemplo, contienen sólo la cantidad mínima de oxígeno y las cantidades máximas de azufre y benceno. El octanaje de la Magna convencional es apenas el deseable, el de la Premium está ligeramente excedido y el de la Magna convencional muy por encima de lo necesario. Se deduce entonces que la refinería tiene, al menos potencialmente, capacidad para producir más Premium de la que está produciendo.

Finalmente observe que la gasolina convencional tiene propiedades aceptables. Hasta marzo de 1996, la gasolina Magna vendida en la ZMVM tenía 1000 ppm peso de azufre. Así que las 1447 ppm, de una gasolina que será vendida sólo en carreteras y otros sitios de baja densidad de población, no deben ser preocupantes. A altas concentraciones las olefinas producen ozono. Pero, ya que en zonas de baja densidad de población no se alcanzarán altas concentraciones de olefinas, no se producirá ozono.

Sin embargo la mejor justificación de las características de la MagRfld, es que dadas las condiciones del pool es inevitable producir una gasolina de este tipo (ver capítulo 5).

La solución al problema de mezclado

Lo dicho hasta el momento es de poca o ninguna utilidad desde un punto de vista operativo. Es decir, para realizar el mezclado no es necesario saber si el octanaje de la magna va a estar excedido no. Lo que es importante, es conocer la proporción necesaria de cada componente para cumplir las especificaciones, generando las máximas ganancias.

BPD de cada componente que deben ser usados en cada gasolina

| | PREMIUM | MAGNA RFLD | MAGNA CVNL | Total |
|----------|---------|------------|------------|---------|
| CRACK | 3,300 | 16,499 | 37,952 | 57,751 |
| RFCN NAC | 3,937 | 24,456 | 8,293 | 36,686 |
| RFCN IMP | 954 | 0 | 0 | 954 |
| MTBE NAC | 0 | 2,645 | 0 | 2,645 |
| MTBE IMP | 1,466 | 4,687 | 0 | 6,153 |
| ALQ NAC | 3,377 | 5,804 | 149 | 9,330 |
| ALQ IMP | 0 | 0 | 5,402 | 5,402 |
| ISOM | 0 | 11,079 | 0 | 11,079 |
| Total: | 13,034 | 65,170 | 51,796 | 130,000 |

No está de más explicar la tabla. Si se lee el primer renglón se debe entender que de los 57,751 barriles de cracking, 3300 deben ir a la gasolina Premium, 16,499 a MagRfld y 37,952 a MagCvnl. O bien si se lee la primera columna (lo cual no se recomienda) se debe entender que los 13,034 barriles de Premium se forman con 3,300 barriles de Crack, 4,891 barriles de Rfcn (de los cuales 954 son importados), 1,466 barriles de MTBE (importado) y 3,377 barriles de Alq nacional.

Análisis de Sensibilidad

Efecto de la demanda global

Si la demanda global, esto es el valor máximo de PROD disminuye. Entonces las características fijadas para las gasolinas convencionales dejan de ser las óptimas. En concreto las restricciones en aromáticos y benceno deben ser relajadas para poder usar todo el pool nacional. Sin embargo es difícil que ocurra una disminución drástica de la demanda nacional y en todo caso sería posible realizar exportaciones de gasolina.

Si la demanda global aumenta las ganancias aumentan. El aumento en ganancias puede calcularse fácilmente a partir del valor dual o precio sombra de la restricción en donde se define PROD. El precio sombra de esta restricción es de 13.45. De manera que por cada barril adicional producido se ganan 13.45 dólares diarios más. Así para una producción de 180,000 BPD las ganancias ascienden a $3'510,000 + (180,000-130,000)(13.45) = 4'182,500$ dólares diarios. Sin embargo dado que no hay aumento en la producción nacional, este aumento de ganancias es engañoso pues se obtiene a costa de aumentar las importaciones.

Efecto de la demanda de Premium

La demanda de Premium como una fracción de MagRfId tiene un efecto moderado sobre las ganancias pero una influencia importante sobre el porcentaje de gasolinas reformuladas producidas. Observe la siguiente tabla (la situación actual se encuentra resaltada):

| Fracción de MagRfId | Ganancias (millones USD/día) | % de RfIds |
|---------------------|------------------------------|--------------|
| 0 | 3.42 | 34 |
| 0.05 | 3.44 | 34 |
| 0.1 | 3.46 | 34 |
| 0.2 | 3.51 | 60.16 |
| 0.3 | 3.56 | 60.16 |
| 0.5 | 3.65 | 62.26 |
| 1 | 3.78 | 62.26 |

Observe que una disminución en el consumo de Premium trae consigo un colapso en la cantidad óptima de gasolinas reformuladas producidas.

Efecto de los costos de importación

Se estimó que los costos de importación serían 33% superiores a los costos de producción. Los cambios en este porcentaje afectan ligeramente a las ganancias pero no a la localización del punto óptimo. Las cantidades y proporciones producidas permanecen inalteradas cuando se varían los costos de importación. Observe la siguiente tabla:

| % de incremento en los Costos de importación | Ganancia millones de dólares diarios | % de Rfids |
|--|--------------------------------------|--------------|
| 10% | 3.61 | 60.16 |
| 25% | 3.54 | 60.16 |
| 33% | 3.51 | 60.16 |
| 50 | 3.44 | 60.16 |

Sin embargo si los costos de importación aumentan excesivamente, digamos hasta un 100% más de los costos de producción. La ganancia baja hasta 3.25 millones de dólares diarios, el porcentaje de reformuladas a 34%, el porcentaje de importaciones a 7.49 y la producción a 127,007 barriles diarios. Se vuelve tan caro importar que es mejor no producir nada más allá de lo que se puede producir con el pool nacional.

Efecto de las variaciones en el octanaje de la gasolina Premium

Disminuir el octanaje especificado para la gasolina Premium no afecta ni la localización del punto óptimo, ni el valor de las ganancias. Por otra parte, aumentar el octanaje produce una disminución de las ganancias y del porcentaje de gasolinas reformuladas producidas. Y si se exige un octanaje de 96 para la Premium, entonces su producción deja de ser rentable, a pesar de su alto precio.

Efecto del octanaje de la Premium

| Octanaje | Ganancia millones de dólares diarios | % de Rfids | Producción de Premium como un porcentaje de MagnaRfid |
|-----------|---|--------------|--|
| 92 | 3.509 | 60.16 | 20% |
| 93 | 3.503 | 57.5 | 20% |
| 94 | 3.497 | 55.3 | 20% |
| 95 | 3.489 | 55.29 | 20% |
| 96 | 3.420 | 34% | CERO |

Efecto de las variaciones en el octanaje de la MagnaCvnl

Reducir de 87 a 86 el octanaje deseado para la MagnaCvnl, produce un aumento de las ganancias y del porcentaje de gasolinas reformuladas. Pues existen más compuestos de alto octanaje disponibles. Sin embargo reducciones mayores en el octanaje de la MagnaCvnl, no traen consigo ningún beneficio adicional. Aumentar el octanaje de la MagnaCvnl, produce una disminución de las ganancias y del porcentaje de gasolinas reformuladas. Si el octanaje alcanza los 89 octanos, se inicia además la producción de NovaCvnl.

Efecto del Octanaje de la MagnaCvnl

| Octanaje | Ganancias 10 ⁶ dólares/día | % Rfids | % MagnaCvnl | % NovaCvnl |
|-----------|--|--------------|--------------|-------------|
| 80 | 3.510 | 62.26 | 37.74 | CERO |
| 86 | 3.510 | 62.26 | 37.74 | CERO |
| 87 | 3.509 | 60.16 | 39.84 | CERO |
| 88 | 3.492 | 48.1 | 51.9 | CERO |
| 89 | 3.455 | 35.64 | 40.73 | 23.63 |

Conclusiones

Sobre la aplicación de la programación lineal a problemas de mezclado de gasolinas

La programación lineal ha demostrado tener una utilidad mucho más amplia que el enfoque tradicional de PEMEX para resolver problemas de mezclado. El análisis de sensibilidad por ejemplo, ofrece un completo entendimiento del problema de mezclado, inalcanzable con el enfoque tradicional. El enfoque tradicional está además, limitado a cumplir las especificaciones, y no considera la posibilidad de maximizar las utilidades de la refinería. Sin embargo existen aún obstáculos para la cabal aplicación de la programación lineal. El primero, consiste en la necesidad de generar parámetros de interacción binaria para cada refinería por medios experimentales y por supuesto, en la necesidad de realizar una concienzuda verificación experimental de las reglas de mezclado recopiladas aquí. El segundo, consiste en la determinación precisa de los costos de las corrientes intermedias de la refinería. El determinar dichos costos con precisión es una tarea muy complicada, por ejemplo: dado el costo de operación y de la materia prima de una torre de destilación, ¿Cómo atribuirle un costo a cada uno de los diversos productos que se obtienen de la torre? Las estimaciones presentadas aquí, pueden ser una buena aproximación, pero es la propia refinería quien es capaz de determinar costos reales. Sin esa determinación, poco puede hacerse para optimizar económicamente los procesos.

Sobre la producción de gasolinas en México

A pesar de todos los esfuerzos y las cuantiosas inversiones realizadas y por realizar de aquí al año 2000, el país no podrá producir, a corto plazo, mucho más de un 60% de gasolinas reformuladas.

Ya que es inevitable la producción de cerca de un 40% de gasolinas de baja calidad. La normatividad debe ajustarse para tomar en cuenta la existencia de dos grupos de gasolinas (reformuladas y convencionales).

Las especificaciones establecidas en este trabajo para las gasolinas convencionales, son un buen punto de partida. Funcionan bien para la refinería de Cadereyta, habrá que analizar otras refinerías para llegar a unas especificaciones nacionales.

El azufre siempre será un serio problema para las gasolinas mexicanas debido a las características particulares del crudo mexicano. El desarrollo de procedimientos más eficaces para la reducción de azufre debe tener un interés prioritario sobre muchos otros proyectos de investigación. Las tecnologías extranjeras no están pensadas para manejar las concentraciones de azufre que se manejan en el sistema de refinación nacional. Por lo que debe tratarse de generar tecnología propia.

Y por último: deben estudiarse otras formas de reducir la contaminación del valle de México que no impliquen mejoras en la calidad de las gasolinas. La construcción de más líneas del metro, por ejemplo, podría ser más efectiva y tal vez menos costosa.

Índice

| | |
|---|-----------|
| Resumen | I |
| Introducción | 1 |
| Capítulo 1: Fundamentos y aplicaciones de la programación lineal | 3 |
| Un ejemplo simplificado | 7 |
| La solución gráfica | 10 |
| Problemas lineales degenerados | 15 |
| El método simplex | 18 |
| Obtención de una primera solución factible | 28 |
| Análisis de sensibilidad | 33 |
| El problema dual | 37 |
| Bibliografía para el capítulo 1 | 39 |
| Capítulo 2: Programas de cómputo comerciales | 40 |
| El programa XA | 43 |
| El ejemplo simplificado | 46 |
| Análisis de Sensibilidad con XA | 49 |
| Bibliografía para el Capítulo 2 | 53 |

| | |
|---|-----------|
| Capítulo 3: Reglas de Mezclado | 54 |
| Un enfoque general | 56 |
| Parámetros de Interacción Binaria | 57 |
| Seudocomponentes | 58 |
| Índices de Mezclado | 60 |
| Linealización de Reglas de Mezclado | 64 |
| RVP | 66 |
| Octanaje | 69 |
| Puntos de congelación | 73 |
| Puntos de inflamación | 74 |
| Viscosidad | 75 |
| Cambios de Volumen durante el mezclado | 76 |
| El ejemplo Simplificado | 78 |
| Desarrollos recientes en Reglas de Mezclado | 85 |
| Bibliografía para el Capítulo 3 | 86 |
| Capítulo 4: La producción de gasolinas en México | 87 |
| Resumen Histórico | 90 |
| Esquema de Producción | 93 |
| Situación Actual | 95 |
| Perspectivas (Reformulación de Gasolinas) | 97 |
| Bibliografía para el Capítulo 4 | 101 |

| | |
|--|------------|
| Capítulo 5: Definición del problema | 103 |
| Propiedades de los componentes a mezclar | 106 |
| Propiedades de las gasolinas a producir | 107 |
| Estimación de la Demanda a cubrir | 111 |
| Resumen | 112 |
| Bibliografía para el Capítulo 5 | 114 |
| Capítulo 6: Optimización | 115 |
| Formulación del Problema | 117 |
| Optimización | 126 |
| Resultados | 129 |
| Análisis de Sensibilidad | 132 |
| Conclusiones | 135 |