

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE INGENIERÍA
MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA



Desarrollo de una metodología híbrida para la solución
numérica de los sistemas de enfriamiento
termosolar por absorción

T E S I S

Que para obtener el grado de:
Maestro en Ciencias

Presenta:
Ricardo Javier Pelayo Sánchez

Director:
Dr. Nicolás Velázquez Limón

Codirector:
Dr. Carlos Alberto Brizuela

Mexicali, B.C. México
Diciembre 2007

Dedicatorias

Dedico esta tesis a mi querida esposa Nayel y a mi pequeña princesa Ashley, a ellas por darle alegría y sentido a mi existencia.

A Mis padres Lucy y Guillermo por haberme traído a este mundo y haberme guiado por el camino del bien, a ustedes debo todo lo que soy.

A mis hermanos Edgar, Lupita, Memo y Daniel.

A todos ellos por ser mi fuerza motriz y razón de vivir.

Desarrollo de una metodología híbrida para la solución numérica de los sistemas de enfriamiento termosolar por absorción

Resumen

La simulación operativa de las unidades térmicas de enfriamiento solar, consiste en encontrar la solución a sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales. Las no linealidades en el modelo matemático son introducidas a través de la integración de energía. Precisamente por la naturaleza de los sistemas de absorción, se busca tener una mayor integración energética y por consiguiente estos sistemas presentan muchas corrientes con recirculación, lo que provoca que el modelo matemático presente puntos de no determinación complicando su convergencia.

En el presente trabajo, se evaluaron dos posibles metodologías basadas en el enfoque modular secuencial para la solución numérica de los sistemas de enfriamiento por absorción. Para probar la validez de las metodologías propuestas se resolvieron cinco ciclos de refrigeración por absorción de diferente grado de complejidad (Ciclo Básico, Ciclo Básico con Integración Energética, Ciclo GAX, Ramificado GAX con y sin ICS).

Para la solución de las variables iterativas, se utilizaron los métodos convencionales Sustitución, Wegstein y Broyden, así como una técnica de inteligencia artificial, un Algoritmo Genético el cual fue probado tanto en forma individual como híbrida con el método convencional.

En la primera metodología probada, el esquema para la asignación de los grados de libertad fue el tradicional entradas-salidas. Para la segunda, el flujo de información de los balances de materia, se modificó de tal manera que se lograra una secuencia acíclica, con lo cual se redujo el número de variables iterativas. De esta forma se aseguró el cumplimiento de los balances de materia y se dejó la convergencia de los balances de energía a los métodos.

Los resultados obtenidos muestran que para la implementación particular de este trabajo, la metodología que utiliza el esquema tradicional entradas-salidas, ni los métodos convencionales ni el algoritmo genético ni la propuesta del híbrido son capaces de resolver numéricamente los sistemas de enfriamiento por absorción.

Para la metodología con el esquema híbrido propuesto, los resultados muestran que efectivamente bajo este esquema se reduce la complejidad del problema y es una buena opción para la solución numérica de los sistemas de enfriamiento por absorción, siendo el algoritmo genético el único método que logró resolver todos los ciclos planteados. También se demuestra que las especificaciones de diseño predefinidas dentro de los equipos, son la principal causa de la no convergencia de los métodos convencionales al ser utilizados para resolver los ciclos de refrigeración por absorción.

Agradecimientos

Quiero agradecerle primeramente a Dios, por haberme permitido alcanzar este logro.

Agradezco también a mis directores de tesis, los Doctores Nicolás y Carlos, a ellos por haberme guiado en el desarrollo y elaboración de este trabajo.

A mis compañeros de maestría Luz, Angélica, Ulises, Rainier, Leonel, Alex, a ellos por brindarme su apoyo y amistad.

Índice general

Resumen	IV
Lista de figuras	XI
Lista de tablas	XIII
Nomenclatura	XIV
1. Introducción	1
1.1. Problemática y justificación	1
1.2. Antecedentes	2
1.3. Objetivos	5
1.3.1. Objetivo general	5
1.3.2. Objetivos específicos	5
1.4. Organización de la tesis	6
2. Simulación de procesos de ingeniería	7
2.1. Razones para usar simulación	7
2.2. Modelado matemático	8
2.3. Conceptos utilizados en simulación de procesos	9
2.4. El proceso de simulación	10
2.5. Enfoques de simulación	11
2.5.1. Simuladores globales u orientados a ecuaciones	12
2.5.2. Simuladores secuenciales modulares	13
2.5.3. Simuladores modulares simultaneos	15
2.6. Metodología modular secuencial	16
2.6.1. Resolución de un sistema de ejemplo	16
3. Algoritmos genéticos	20
3.1. Conceptos básicos	20
3.1.1. Fundamentos biológicos	20
3.1.2. Conceptos de computación evolutiva	21
3.2. ¿Qué es un Algoritmo Genético?	22
3.3. Componentes básicos de un Algoritmo Genético	23
3.3.1. Codificación	23
3.3.1.1. Codificación binaria	24

3.3.1.2.	Codificación real	24
3.3.2.	Población	24
3.3.2.1.	Tamaño	24
3.3.2.2.	Inicialización	25
3.3.3.	Función objetivo	25
3.3.4.	Estrategia de selección	26
3.3.4.1.	Selección por método de la ruleta	26
3.3.4.2.	Selección por elitismo	27
3.3.4.3.	Selección por torneo	27
3.3.4.4.	Selección de estado uniforme	27
3.3.5.	Cruce	28
3.3.6.	Mutación	29
3.3.7.	Criterio de terminación	29
3.3.7.1.	Criterio de convergencia de identidad	30
3.3.7.2.	Criterio de convergencia de aptitud	30
3.3.7.3.	Criterio de cantidad de generaciones	30
4.	Sistemas de enfriamiento termosolar	31
4.1.	Sistema de Enfriamiento térmico	31
4.2.	Sistema de captación	32
4.3.	Sistemas de enfriamiento termosolar por absorción	32
4.3.1.	Ciclo Solar GAX	33
5.	Evaluación de la metodología tradicional utilizando métodos convencionales y estocásticos	36
5.1.	Introducción	36
5.2.	Definición de sistemas en estudio	37
5.3.	Definición y resolución del modelo matemático por equipo	41
5.4.	Implementación de métodos y algoritmos para resolución a nivel sistema	42
5.4.1.	Métodos convencionales de convergencia	42
5.4.2.	Algoritmo genético	44
5.4.2.1.	Representación y codificación de las variables de corte	44
5.4.2.2.	Definición de los parámetros de control	44
5.4.2.3.	Generación de la población inicial	45
5.4.2.4.	Evaluación de la función objetivo	45
5.4.2.5.	Proceso de selección	46
5.4.2.6.	Cruce	46
5.4.2.7.	Generación de diversidad	47
5.4.2.8.	Mutación	48
5.4.2.9.	Criterio de terminación	48
5.5.	Diseño de experimentos	49
5.5.1.	Ciclos a resolver	49
5.5.2.	Resolución de variables iterativas con métodos convencionales .	49
5.5.3.	Resolución de variables iterativas con algoritmos genéticos . . .	51

5.5.4.	Resolución de variables iterativas con el híbrido algoritmos genéticos-métodos convencionales	52
5.6.	Análisis e interpretación de resultados	54
5.6.1.	Resolución de variables iterativas con métodos convencionales	54
5.6.2.	Resolución de variables iterativas con algoritmos genéticos	60
5.6.3.	Resolución de variables iterativas con el híbrido algoritmos genéticos-métodos convencionales	63
5.7.	Conclusiones	70
5.7.1.	Conclusiones específicas	70
5.7.2.	Conclusiones generales	71
6.	Definición y evaluación de metodología propuesta	72
6.1.	Definición de metodología propuesta	72
6.1.1.	Modificación de algoritmo genético	76
6.2.	Diseño de Experimentos	77
6.2.1.	Ciclos a resolver	77
6.2.2.	Resolución de variables iterativas con algoritmos genéticos	78
6.2.3.	Resolución de variables iterativas con el híbrido algoritmos genéticos-métodos convencionales	80
6.3.	Análisis e interpretación de resultados	80
6.3.1.	Resolución de variables iterativas con algoritmos genéticos	80
6.3.2.	Resolución de variables iterativas con el híbrido algoritmos genéticos-métodos convencionales	83
6.4.	Conclusiones	88
6.4.1.	Conclusiones específicas	88
6.4.2.	Conclusiones generales	89
7.	Conclusiones y trabajo futuro	90
7.1.	Conclusiones	91
7.2.	Aportaciones	92
7.3.	Trabajo futuro	93
	Referencias	94
	Apéndice	101
A.	Formulación del modelo matemático a nivel equipo	101
A.1.	Propiedades termodinámicas	101
A.1.1.	Ecuaciones de Pátek y Klomfar	101
A.1.2.	Ecuaciones de Ziegler y Trepp	102
A.1.3.	Polinomio de Ashrae	103
A.2.	Definición del modelo matemático	104
A.2.1.	Esquema	104
A.2.2.	Descripción operativa	104
A.2.3.	Consideraciones del modelo	105
A.2.4.	Balances de materia	105

A.2.5. Balances de energía	105
A.2.6. Balances de cantidad de movimiento	106
A.2.7. Ecuaciones de propiedades	106
A.2.8. Ecuaciones especiales	107
A.2.9. Restricciones	108
B. Tablas de coeficientes de propiedades termodinámicas	110
B.1. Ecuaciones de Pátek y Klomfar	110
B.2. Ecuaciones de Ziegler y Trepp	111
B.3. Polinomio de Ashrae	112
B.3.1. Amoníaco como fluido puro	112
B.3.2. Agua como fluido puro	113
B.3.3. Aire como gas estándar	113
C. Implementación de métodos convencionales	115
C.1. Sustitución directa	115
C.2. Wegstein	115
C.3. Broyden	116
D. Secuencias de solución de los ciclos	117
D.1. Particiones	117
D.2. Secuencia de cálculo	118
D.2.1. Esquema entradas-salidas	119
D.2.2. Esquema híbrido	120
E. Condiciones de operación	122

Lista de figuras

2.1. Esquema de un estudio de simulación	10
2.2. Diagrama de flujo de un sistema de ejemplo.	17
2.3. Diagrama de flujo de un sistema de ejemplo (con particionado).	18
3.1. Cromosoma usando codificación binaria.	21
3.2. Correspondencia genotipo-fenotipo.	21
3.3. La metáfora.	22
3.4. Ciclo de un Algoritmo Genético	23
3.5. Método de la ruleta	27
3.6. Selección por torneo	28
4.1. Diagrama esquemático del Sistema de Absorción Solar-GAX.	34
5.1. Ciclo Básico.	38
5.2. Ciclo básico con integración energética CBIE	38
5.3. Ciclo GAX.	39
5.4. Ciclo Ramificado GAX.	40
5.5. Ciclo Ramificado GAX con ICS.	41
5.6. Biblioteca de equipos.	42
5.7. Diversidad contra convergencia.	48
5.8. Explotación y exploración a través del cruce $BLX - \alpha$	48
5.9. Exploración del Ciclo Básico.	53
5.10. Diagrama de flujo de información del CBIE.	57
5.11. Resultado para el CBIE utilizando métodos convencionales con m_1 fija.	59
5.12. Tendencia de la aptitud del mejor individuo para el CBIE.	61
5.13. Tendencia de la aptitud del mejor individuo para el ciclo GAX.	62
5.14. m_1 vs T_1	63
5.15. Aproximación de región factible del Ciclo Básico.	64
5.16. Exploración del Ciclo Básico con algoritmos genéticos.	65
5.17. Individuos válidos en la 1ra generación vs ERP.	66
5.18. Mejor aptitud vs ERP.	66
5.19. Comportamiento de convergencia del CBIE con Métodos Convencionales.	69
5.20. Comportamiento de convergencia del ciclo GAX con métodos convencionales.	70
6.1. DFI columna generador-rectificador del ciclo GAX.	73
6.2. Secuencia acíclica de la columna generador-rectificador del ciclo GAX.	74

6.3. Delta de aproximación de corrientes del GAX.	79
6.4. Error por corrida utilizando algoritmos genéticos sin el delta de aproximación del GAX.	81
6.5. Corridas utilizando algoritmos genéticos sin el delta de aproximación del GAX.	82
6.6. Corridas del ciclo GAX utilizando algoritmos genéticos con el delta de aproximación del GAX.	83
6.7. Corridas del ciclo GAX utilizando métodos convencionales con el esquema híbrido.	85
6.8. Error en las variables de la corrida 3 del Ciclo GAX utilizando sustitución directa con el esquema híbrido.	86
6.9. Error en las variables de la corrida 3 del ciclo GAX utilizando Wegstein con el esquema híbrido.	86
6.10. Delta de desequilibrio de los equipos GES y GHX del ciclo GAX.	87
6.11. Error de la corrida 3 del ciclo GAX utilizando métodos convencionales con el esquema híbrido.	88
A.1. Esquema del generador GHX.	104

Lista de tablas

2.1. Principales Características de los Simuladores Orientados a Ecuaciones.	14
2.2. Principales Características de los Simuladores Modulares Secuenciales.	15
5.1. Sistemas en Estudio	37
5.2. Resumen de ciclos a resolver bajo el esquema entradas-salidas.	49
5.3. Tabla de verdad para las modificaciones de las condiciones de operación.	50
5.4. Incrementos y decrementos en las temperaturas externas a probar por ciclo.	50
5.5. Parámetros de control del Algoritmo Genético.	51
5.6. Operadores del Algoritmo Genético.	52
5.7. Resultados para el Ciclo Básico utilizando métodos convencionales.	54
5.8. Resultados para el CBIE utilizando métodos convencionales.	55
5.9. Resultados para el Ciclo GAX utilizando métodos convencionales.	56
5.10. Resultados para el CBIE con m_1 fija	58
5.11. Resultado para el CBIE utilizando métodos convencionales con m_1 y m_{11} fijas.	59
5.12. Resultados de CBIE utilizando algoritmos genéticos.	60
5.13. Resultados del Ciclo GAX utilizando algoritmos genéticos.	62
5.14. Parámetros calculados de las corridas con el genético.	65
5.15. Soluciones del genético seleccionadas como valores iniciales para los métodos convencionales.	67
5.16. Resultados para el CBIE con el híbrido Algoritmos Genéticos-Métodos Convencionales.	68
5.17. Resultados para el ciclo GAX con el híbrido Algoritmos Genéticos-Métodos Convencionales.	69
6.1. Resumen de ciclos a resolver bajo el esquema entradas-salidas.	78
6.2. Parámetros de control del Algoritmo Genético.	79
6.3. Operadores del Algoritmo Genético.	79
6.4. Resultados de las corridas utilizando algoritmos genéticos sin el delta de aproximación del GAX.	80
6.5. Resultados de las corridas del ciclo GAX utilizando algoritmos genéticos con el delta de aproximación del GAX.	82
6.6. Resultados de las 95 corridas con los métodos convencionales con el esquema híbrido.	84

6.7. Resultados del ciclo GAX utilizando métodos convencionales con el esquema híbrido.	84
B.1. Coeficientes de las ecuaciones de Pátek para Líquido.	110
B.2. Coeficientes de las ecuaciones de Pátek para Vapor.	111
B.3. Coeficientes de las ecuaciones de Ziegler y Trepp (Amoniac y Agua como fluidos puros).	111
B.4. Coeficientes para la ecuación de energía en exceso de Gibbs.	112
B.5. Coeficientes para el amoniaco como fluido puro en fase vapor.	112
B.6. Coeficientes para el amoniaco como fluido puro en fase líquido.	113
B.7. Coeficientes para el agua como fluido puro en fase vapor.	113
B.8. Coeficientes para el agua como fluido puro en fase líquido.	113
B.9. Coeficientes para el aire como gas estándar.	114
D.1. Ciclos	117
D.2. Particiones para el Ciclo Básico con Integración Energética (CBIE). . .	118
D.3. Particiones para el Ciclo GAX.	118
D.4. Particiones para el Ciclo Ramificado GAX.	118
D.5. Particiones para el Ciclo Ramificado GAX con ICS.	118
D.6. Secuencia de Cálculo para el Ciclo Básico.	119
D.7. Secuencia de Cálculo para el Ciclo Básico con Integración Energética (CBIE).	119
D.8. Secuencia de Cálculo para el Ciclo GAX.	120
D.9. Secuencia de Cálculo para el Ciclo GAX.	120
D.10. Secuencia de Cálculo para el Ciclo Ramificado GAX.	121
D.11. Secuencia de Cálculo para el Ciclo Ramificado GAX con ICS.	121
E.1. Condiciones de Operación de Ciclo Básico.	123
E.2. Condiciones de Operación de Ciclo Básico con Integración Energética. .	124
E.3. Condiciones de Operación de Ciclo GAX.	125
E.4. Condiciones de Operación de Ciclo GAX (cont.).	126
E.5. Condiciones de Operación de Ciclo Ramificado GAX.	127
E.6. Condiciones de Operación de Ciclo Ramificado GAX (Cont.).	128
E.7. Condiciones de Operación de Ciclo Ramificado GAX con ICS.	129
E.8. Condiciones de Operación de Ciclo Ramificado GAX con ICS (Cont.). .	130

Nomenclatura

Símbolo	Definición	Unidades
C	Cromosoma	adimensional
f	Función	adimensional
g	Gen	adimensional
h	Entalpía	kJ/kg
m	Flujo Másico	kg/s
p	Presión	Mpa o bar
P_{cruzar}	Probabilidad de Cruzar	adimensional
P_{mutar}	Probabilidad de Mutar	adimensional
T	Temperatura	$^{\circ}C$ o K
T_{sat}	Temperatura de Saturación	$^{\circ}C$ o K
v	variable	adimensional
x	Fracción de amoníaco en la fase líquida	kg amoniaco/kg Mezcla
\bar{x}	Fracción molar de amoníaco en la fase líquida	kg amoniaco/kg Mezcla
y	Fracción de amoníaco en la fase vapor	kg amoniaco/kg Mezcla
\bar{y}	Fracción molar de amoníaco en la fase vapor	kg amoniaco/kg Mezcla

Capítulo 1

Introducción

1.1. Problemática y justificación

Aunque la utilización de los equipos de climatización eléctricos, es muy cómoda y aparentemente limpia, su uso masivo ha provocado la aparición de dos grandes problemas: uno ambiental y el otro de infraestructura para la generación y distribución de la energía eléctrica [Velázquez et al., 2005]. El dramático incremento en el precio de la energía eléctrica, seguido por la alta y creciente demanda de refrigeración y aire acondicionado, aunado al fuerte impacto ambiental provocado tanto por las plantas de generación eléctrica como por la tecnología de enfriamiento por compresión mecánica de vapor, hacen prioritaria la búsqueda de nuevas alternativas sustentables para la generación eléctrica y producción de frío.

Se requiere entonces estudiar, desarrollar y evaluar el potencial de las diferentes tecnologías de enfriamiento ambientalmente sostenibles, con miras de promover las tecnologías que protegen el ambiente. La simulación es una de las piezas angulares dentro del proceso de desarrollo de nuevas tecnologías de enfriamiento térmico, ya que a través de ella es posible experimentar con el modelo de un sistema existente o propuesto, bajo diferentes configuraciones de interés y con diferentes periodos de tiempo, con el fin de estudiar su comportamiento. Lo cual ayudará a tener un mejor entendimiento del mismo y por consiguiente poder sugerir estrategias que mejoren su operación y eficiencia, permitiendo encontrar el diseño que maximiza su desempeño.

En la actualidad no existe un simulador dedicado específicamente a la evaluación de los sistemas de enfriamiento termosolar, lo que obliga a la comunidad interesada en esta área a recurrir a alternativas no tan adecuadas, que requieren de más tiempo y esfuerzo. Lo anterior provoca que el desarrollo de estas tecnologías se vaya dando de una forma más lenta. Todo esto, trae consigo la necesidad de desarrollar un simulador general de sistemas de enfriamiento térmico con diferentes fuentes energéticas que permita a los ingenieros e investigadores del área estudiar propuestas existentes y nuevos ciclos con una amplia variedad de alternativas energéticas.

El mayor problema a la hora de desarrollar un simulador de propósito general para este tipo de sistemas, consiste por lo general en encontrar la solución a sistemas de ecuaciones no lineales, con el cual se representa el comportamiento operativo de dichos procesos. A través de la integración de energía, nuevas no linealidades

son introducidas en el modelo matemático [Seider et al, 1991]. Precisamente por la naturaleza de los sistemas de absorción, se busca tener una mayor integración energética y por consiguiente estos sistemas presentan muchas corrientes de recirculación, lo que provoca que el modelo matemático presente puntos de no determinación y obligan a la incorporación de procedimientos iterativos, llamados bloques de convergencia.

En su correspondiente modelo matemático, el resolver un bloque de convergencia se convierte en un problema de búsqueda del valor adecuado de una o varias variables, de tal forma que cumplan con el modelo matemático de los módulos entre los cuales se aplica el bloque de convergencia. Esto implica establecer un valor inicial para las variables y resolver el modelo de uno de los módulos que intervienen. Para posteriormente, resolver el modelo del siguiente módulo, con lo cual se obtiene un nuevo valor de la o las variables supuestas, generando un gradiente de error entre los valores supuestos y los valores calculados. El problema radica en hacer que este gradiente tienda a cero a través de calcular un nuevo valor de la o las variables, utilizando un proceso iterativo en el cual el gradiente de error disminuye de manera gradual. Lo anterior se repite para cada una de las corrientes de recirculación que contenga el sistema [Pelayo et al, 2005].

El presente proyecto es una continuación del trabajo de Pelayo (2006), solo que ésta vez se pretende realizar un estudio más profundo, adoptar las mejoras prácticas de los simuladores actuales (esto es, métodos de convergencia y estrategias de simulación) y llegar a establecer una metodología que pueda ser implementada en un futuro dentro del núcleo de un simulador general de sistemas de enfriamiento termosolar.

El motivo principal que promueve la realización de esta tesis de maestría es la de impulsar el desarrollo de un simulador general de sistemas de enfriamiento termosolar que sea construido en un futuro por esta institución. El cual contribuiría en la creación de nuevos sistemas que cubran las necesidades de enfriamiento sin dañar el medio ambiente, con una inversión razonable y con bajo costo de operación y mantenimiento, mejorando la calidad de vida de la sociedad así como su economía. Y por otro lado, promovería el desarrollo de sistemas de simulación y tecnologías de información creadas por la propia institución, mejorando así el nivel académico de alumnos, docentes e investigadores, haciéndonos más competitivos ante otras instituciones tanto nacionales como internaciones y permitiéndonos dar servicios de mejor calidad a nuestra sociedad.

1.2. Antecedentes

En los últimos años ha surgido un renovado interés en los equipos de enfriamiento termosolar, debido a la problemática ambiental provocada por los sistemas de compresión mecánica de vapor, unido al aumento de la temperatura global del planeta y al incremento de las tarifas eléctricas. El uso de energía solar térmica para la activación de sistemas de refrigeración y aire acondicionado es atractivo, puesto que la alta demanda de enfriamiento en las edificaciones coincide con el período de máxima disponibilidad del recurso solar, lo cual permite la utilización de un sistema integrado, formado por un arreglo de colectores solares térmicos y una máquina de enfriamiento activada térmicamente [Velázquez et al., 2005].

Actualmente, existen cinco tipos básicos de tecnologías de enfriamiento térmico: por absorción, por adsorción, por desecante, por eyecto compresión y por compresión de vapor. De entre las tecnologías de enfriamiento con activación térmica destacan los sistemas de enfriamiento por absorción, esto debido a su madurez tecnológica y a su amplio campo de aplicación en los diferentes sectores (industrial, comercial y residencial). Además de utilizar fluidos de trabajo que no causan daños a la capa de ozono, por lo que han sido clasificados como amigables con el ambiente [Velázquez et al., 2005].

La comunidad de investigadores interesados en esta área están enfocados principalmente en el desarrollo de nuevos ciclos avanzados, nuevas combinaciones de fluidos de trabajo, equipo de transferencia de masa y calor más eficiente y compacto, una mayor integración energética interna y desarrollo de unidades de refrigeración que sean más eficientes y rentables [Grossman et al, 1994]. Este creciente interés en los sistemas de enfriamiento termosolar, ha creado la necesidad de sistemas de simulación confiables y efectivos para su estudio.

Se han desarrollado una gran variedad de simuladores específicos que han probado ser herramientas muy valiosas para la investigación, desarrollo y diseño de los sistemas de enfriamiento térmico por absorción [Kouremenos et al, 1987, Kaushick et al, 1988, Kaushick et al, 1991, Velázquez, 2002]. Dichos simuladores, están limitados a resolver los sistemas particulares para los cuales fueron creados y su modificación para la simulación de un nuevo ciclo o alguna variante, requiere reescribir la mayor parte del código, principalmente la secuencia de solución.

Gershon Grossman y Wilk (1994) financiados por el Departamento de Energía de Estados Unidos (DOE, por sus siglas en ingles) desarrollaron el simulador llamado ABSIM (ABSorption SIMulator) para la evaluación de sistemas por absorción con varias configuraciones de ciclos y con diferentes fluidos de trabajo. Esta primera versión presentó dos grandes limitantes: problemas de convergencia en sistemas complejos y una pobre interfaz gráfica, la cual hacía muy difícil la tarea de establecer la variables de entrada y estudiar los resultados obtenidos [Grossman, 2001]. Lo anterior obligó a corregir dichas limitantes, de manera que en 1999, se lanza al mercado una nueva versión de ABSIM la cual mejoró su capacidad de convergencia e introdujo una nueva interfaz gráfica, permitiéndole a los usuarios crear el diagrama del ciclo en la pantalla de la computadora, introducir interactivamente los datos de entrada y observar los resultados sobrepuestos en el diagrama del ciclo, así como graficarlos. A pesar de estas mejoras, ABSIM sigue teniendo problemas de convergencia en la simulación de sistemas más complejos. Pocos han sido los trabajos que han reportado utilizar ABSIM para la simulación de estos sistemas [Engler et al, 1997, Grossman, 2001, Tae et al, 2004].

Un software que se ha utilizado para la simulación de Sistemas de Absorción acoplados con sistemas solares es TRNSYS (2004). El cual fue desarrollado inicialmente en 1975, como proyecto doctoral de un estudiante del Laboratorio de Energía Solar de la Universidad de Wisconsin, Madison, USA. Este software es completamente modular y orientado al usuario, desarrollado principalmente para el estudio de nuevos conceptos de energía, desde sistemas de agua caliente hasta el diseño y simulación de edificios, incluyendo estrategias de control, comportamiento de los ocupantes, sistemas de energía alternos (eólica, solar térmica y fotovoltaica, sistemas de hidrógeno), etc.

Los trabajos recientes publicados utilizando este software [Luna et al, 2005, Assilzadeh et al, 2005, García, 2005], son principalmente estudios técnico- económicos de la factibilidad del uso de fuentes de energía renovables amigables con el ambiente para operar un sistema de absorción en particular en zonas donde dicho recurso se encuentra disponible.

En la actualidad, existen varios simuladores de propósito general para la industria química tales como ASPEN PLUS (AspenTech), HYSYS (Hyprotech), PROII (SimSci), Chem CAD. De los cuales ASPEN PLUS es uno de los que se ha utilizado para modelar y simular sistemas de absorción. ASPEN PLUS fue desarrollado en el MIT (Massachusetts Institute of Technology) y financiado por el Departamento de Energía de Estados Unidos [Evans et al, 1979]. Este software está diseñado principalmente para la simulación y optimización de procesos de plantas industriales químicas. Aspen Plus contiene una amplia librería para el cálculo de propiedades físicas, una extensa biblioteca de equipos, incluye varias bases de datos que contienen información de datos físicos, químicos y termodinámicos de una amplia variedad de compuestos químicos. Su interfaz de usuario permite dibujar el diagrama de flujo de manera gráfica, permite crear gráficas de los resultados de simulación, reportes, entre otras cosas. Además cuenta con un módulo llamado ACM (Aspen Custom Modeling) para el desarrollo de modelos orientados a ecuaciones. Dichos modelos pueden correr en ASPEN PLUS o en cualquier otro simulador que soporte el estándar CAPE-OPEN [Braunschweig et al, 2000].

Los trabajos realizados para simular ciclos de absorción con el software ASPEN PLUS son relativamente pocos [Balamuru et al, 2000, Cerezo, 2001, Zheng et al, 2002], esto debido principalmente a que es un simulador de propósito general y no cuenta con todos los módulos requeridos para simular los sistemas de absorción. A pesar de que cuenta con una interfaz que permite incorporar módulos creados por terceros, es importante estructurar los problemas de tal manera que faciliten la solución de las ecuaciones, lo cual requiere un alto grado de conocimientos y habilidades por parte de los usuarios. Lo anterior provoca que la mayoría de los usuarios se conformen con realizar simulaciones con los modelos que se encuentran disponibles en la biblioteca de equipos a través de arreglos que se aproximen al comportamiento de un equipo más complejo, incrementando así el número de equipos necesarios para la simulación y por consiguiente incrementando la complejidad del problema.

Hoy en día, las llamadas técnicas de "inteligencia artificial", son una atractiva alternativa para la simulación y optimización, tanto de este tipo de sistemas como de cualquier otro proceso de ingeniería. Por ejemplo, los Algoritmo Genéticos [Holland, 1975] se están volviendo muy comunes para resolver problemas de optimización de procesos de ingeniería [Wang et al, 1998, Tayal et al, 1999, Shopova et al, 2006] y la emulación de las redes neuronales han probado ser mejores que las técnicas convencionales para la estimación de parámetros.

Sencan (2006) realizó un análisis y evaluación de un sistema de absorción, a través de una red neuronal artificial y otro par de técnicas, a través de una minería de datos sin la necesidad de lidiar con el sistema de ecuaciones no lineales.

Pelayo (2006) desarrolló un simulador específico para la resolución del modelo matemático de un sistema de absorción avanzado (Ciclo Solar Gax). En dicho trabajo se abordó el problema de las recirculaciones presentes en este tipo de sistemas, utilizando

para su solución un algoritmo genético. Los resultados obtenidos mostraron que el algoritmo resuelve el sistema satisfactoriamente, sin embargo la metodología propuesta presenta dificultades a la hora de modelar un sistemas más complejo y no está lo suficientemente madura como para ser implementada en un simulador de carácter general.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo general

Establecer una metodología para la solución numérica del modelo matemático de los sistemas de enfriamiento termosolar por absorción, con miras de que pueda ser implementada en un futuro dentro del núcleo de un simulador general para este tipo de sistemas desarrollados por la propia institución.

1.3.2. Objetivos específicos

1. Realizar un estudio del estado del arte de la simulación de procesos industriales y de los métodos de convergencia más utilizados por los simuladores comerciales.
2. Realizar estudio de los sistema de enfriamiento termosolar por absorción y de los simuladores desarrollados para su resolución.
3. Realizar un estudio de las técnicas de inteligencia artificial que pudieran aplicarse en la resolución del modelo matemático de los sistemas de enfriamiento termosolar por absorción.
4. Formular, resolver y codificar el modelo matemático de los módulos necesarios para la simulación de los sistemas de enfriamiento termosolar por absorción. Así como, del cálculo de propiedades físicas y termodinámicas.
5. De acuerdo a la investigación bibliográfica, seleccionar e implementar los métodos y algoritmos que se van a utilizar para la convergencia del modelo matemático.
6. Evaluar la estrategia tradicional de simulación para la resolución del modelo matemático de los sistemas de enfriamiento termosolar por absorción con todos los métodos y algoritmos implementados.
7. Definir y Evaluar una propuesta híbrida para la resolución del modelo matemático de los sistemas de enfriamiento termosolar por absorción con todos los métodos y algoritmos implementados.
8. Concluir con la propuesta metodológica para la resolución del modelo matemático de los sistemas de enfriamiento termosolar por absorción que mejores resultados obtenga.

1.4. Organización de la tesis

En el Capítulo 2 se da una breve introducción al campo de la simulación en ingeniería, las razones de por qué hacer simulación, se definen algunos conceptos básicos, se describe el proceso de simulación y se presentan las ventajas y desventajas de los distintos paradigmas de simulación.

En el Capítulo 3 se aborda el tema de computación evolutiva y se definen algunos conceptos básicos de la misma antes de abordar el tema de Algoritmos Genéticos.

En el Capítulo 4 se da una justificación del por qué se requiere desarrollar y evaluar el potencial de las diferentes tecnologías de enfriamiento térmico y se da una breve descripción de cada una de ellas.

En el Capítulo 5 se presenta el procedimiento que se siguió para la realización de este estudio, así como la evaluación del enfoque modular secuencial bajo el esquema tradicional entradas-salidas.

En el Capítulo 6 se presenta la definición y evaluación del enfoque modular secuencial bajo un esquema híbrido propuesto.

En el Capítulo 7 se presentan las conclusiones obtenidas durante el estudio, así como el trabajo futuro.

En el Apéndice A se describe el procedimiento que se aplicó para la formulación del modelo matemático de los equipos.

En el Apéndice B se reportan las tablas de los coeficientes de las propiedades termodinámicas descritas en el Apéndice A.

En el Apéndice C se presentan los detalles de los métodos convencionales implementados en este estudio.

Finalmente, en los Apéndices D y E, se reportan las secuencias de solución y las condiciones de operación para cada uno de los ciclos utilizados en este estudio, respectivamente.

Capítulo 2

Simulación de procesos de ingeniería

La simulación por computadora ha sido ampliamente usada en el diseño, optimización y análisis de procesos de ingeniería. El término simulación se ha utilizado para referirse a varias cosas, por ejemplo: ingenieros construyen simulaciones de sistemas físicos, tales como barcos sobre agua; los pilotos de la fuerza aérea son entrenados en simuladores de vuelo, los cuales son dispositivos físicos que recrean la respuesta del vuelo, y le permiten al piloto aprender como controlar el avión. Los videojuegos también pueden ser considerados como simuladores. Todas estas simulaciones usan un modelo que representa el comportamiento de un sistema que puede o no existir y que es generalmente mucho más complejo. El modelo puede ser físico, como en el caso de un simulador aéreo, o puede estar representado a través de un programa de computadora, como en el caso de los simuladores de redes y manufactura. En todos los casos, la idea clave es que la simulación es una alternativa de realización que se aproxima al sistema real, que tiene como propósito analizar y entender el comportamiento de este bajo varias condiciones de acción o decisión [Seyla, 1995].

En un mundo cada vez más competitivo, la simulación se ha convertido para los ingenieros, diseñadores y administradores, en una herramienta indispensable para resolver problemas complejos [Shanon, 1998].

Simulación se define como "El proceso de diseñar un modelo de un sistema real y conducir experimentos utilizando este modelo con el propósito de entender su comportamiento o evaluar varias estrategias para la operación del mismo " [Shanon, 1975].

2.1. Razones para usar simulación

La simulación es uno de los métodos más frecuentemente utilizado para el análisis de sistemas. Hay un número de razones para esto. Primero, la simulación puede ser usada para analizar modelos de complejidad arbitraria. La complejidad de un modelo está limitada solo por la habilidad del modelador y la metodología utilizada para representar la complejidad del sistema, así como la capacidad de la computadora utilizada para cargar y correr el programa de simulación.

A través de la simulación, es posible experimentar con el modelo de un sistema bajo

diferentes configuraciones de interés y con diferentes periodos de tiempo, con el fin de entender su comportamiento y sugerir estrategias que mejoren su operación así como el diseño que maximiza su desempeño. Permite probar hipótesis acerca de cómo y por qué cierto fenómeno ocurre en un sistema. Se pueden probar nuevos diseños, distribuciones, etc., sin necesidad de invertir recursos y tiempo para su implementación, ni correr riesgos con la experimentación del sistema real.

A pesar de que la simulación tiene muchas fortalezas y ventajas, también existen algunos inconvenientes, que deben ser tomados en cuenta. El modelado de simulación es considerado para algunos como un arte que requiere de entrenamiento especializado y de cierto nivel de conocimientos y habilidades por parte de los practicantes [Shanon, 1998].

2.2. Modelado matemático

Antes de poder hablar sobre el modelado matemático, es necesario introducir los términos de sistema y modelo [Seyla, 1995].

Un *sistema* es un conjunto de componentes o entidades que interactúan entre sí para alcanzar un objetivo en común. La mayoría de los sistemas que se desean estudiar son grandes y complejos, por lo que resultaría muy difícil y caro experimentar con ellos directamente. Un *modelo* es una abstracción y simplificación de la representación de un sistema. El modelo representa los componentes más importantes del sistema y la manera en que interactúan.

Dada la complejidad de los fenómenos fisicoquímicos, estas construcciones abstractas, conocidas genéricamente como modelos, son aproximaciones de la realidad. De aquí se desprende que si bien el sistema real a estudiar es único, puede existir un número muy grande de modelos asociados al mismo. En efecto, para obtener un modelo que pueda resolverse (es decir que sea útil), resulta necesario adoptar un conjunto de hipótesis. Por ejemplo, si consideramos la fricción, si es importante o no contemplar el intercambio de energía por radiación, si existen y se consideran los efectos electromagnéticos, etc. Las necesidades de exactitud que el problema a resolver nos impone, determinan el conjunto de hipótesis a utilizar. Por ejemplo, el error de una milésima de grado en el cálculo de un ángulo puede no tener implicaciones en el punto de impacto de un proyectil que recorre una distancia pequeña, pero no puede afirmarse lo mismo para una trayectoria intergaláctica.

En síntesis, dado el sistema real y los objetivos tecnológicos perseguidos, existirá un conjunto de hipótesis adecuadas que determinarán las características del modelo, o sistema de ecuaciones a resolver. Lo expresado recientemente implica una relación entre modelo (conjunto de hipótesis asumidas) y objetivos del ingeniero.

Para diseñar un proceso en ingeniería es fundamental obtener su modelo matemático, el cual consiste en una serie de ecuaciones que lo representa y cuya función primordial es predecir o simular el comportamiento de dicho proceso [Sowa, 1997]; este modelo ayudará posteriormente a encontrar bajo qué condiciones el proceso se "comporta". En ingeniería de procesos, diseñar consiste en determinar sus condiciones de operación óptimas (por ejemplo temperaturas, presiones, concentraciones, etc.) [Carlson, 1996].

2.3. Conceptos utilizados en simulación de procesos

En esta sección, se describirán algunos de los conceptos que más se manejan en simulación de procesos [Luyben, 1990].

Para que el sistema de ecuaciones que representan el comportamiento de un proceso (modelo matemático) sea resuelto matemáticamente, se requiere que el número de ecuaciones sea igual al número de variables. En general, en los modelos matemáticos que simulan procesos químicos se tienen más variables que ecuaciones. Los *grados de libertad* G_l de una serie de ecuaciones corresponden al número de variables menos el número de ecuaciones [Sommerfeld, 1986].

- Si $G_l > 0$, entonces el sistema tiene varias soluciones o diseños posibles.
- Si $G_l = 0$, entonces el sistema tiene una sola solución.
- Si $G_l < 0$, entonces el sistema es incoherente y no tiene solución.

Si existen grados de libertad en el proceso, el diseñador debe asignarle valores a tantas variables como grados de libertad haya en las ecuaciones que representan el proceso. A las variables elegidas para asignarles un valor y así tener cero grados de libertad, se les conoce como *variables de diseño*, ya que se puede ir variando arbitrariamente su valor y así obtener diferentes alternativas de diseño para el proceso.

Hay variables del sistema cuyo valor puede considerarse constante por variar poco o nada en el funcionamiento real del proceso. Estas variables se conocen como *parámetros*.

El *orden de cálculo* o *secuencia de cálculo* es la secuencia o algoritmo como se resuelven las ecuaciones del proceso o como se calculan los equipos o módulos que integran el proceso y el resto de las variables. El orden de cálculo se conoce también como "flujo de información".

Durante la ejecución de la secuencia de cálculo, que consiste en resolver las ecuaciones que gobiernan el sistema una tras otra, a veces es necesario suponer el valor de una (o varias) variables para poder resolver una ecuación y en alguna ecuación posterior se calcula el valor de la variable supuesta; entonces se compara el valor calculado contra el supuesto; si son iguales (o su diferencia es igual al porcentaje de error permitido) se continúa el orden de cálculo; si no, se regresa al lugar de la suposición, considerando ahora como valor supuesto el calculado y se sigue iterando hasta que los valores supuestos y calculado sean iguales o casi iguales. A estas variables que tienen que ser supuestas, se les conoce como *variables iterativas*.

Estas variables iterativas surgen debido a que las ecuaciones que gobiernan el sistema, contienen variables comunes que no es posible despejar o sustituir algebraicamente.

Se dice que hay *convergencia en la simulación de procesos* cuando se ha terminado de iterar todas las variables iterativas del sistema y se han calculado el resto de las variables.

2.4. El proceso de simulación

Un estudio de simulación parte de un sistema real, para el cual es creado un modelo matemático, el cual es una abstracción del sistema real, dicho modelo será traducido en un programa ejecutable (ej. un simulador). Posteriormente, se hace una verificación y validación tanto del modelo conceptual como del ejecutable dentro del contexto de simulación experimental. Con los datos obtenidos a partir del experimento de simulación, se lleva a cabo un análisis e interpretación de los resultados. Finalmente se obtienen conclusiones y se realiza una alteración al sistema real. El ciclo se repite una y otra vez hasta alcanzar los resultados deseados [Maria, 1997]. (Ver Figura 2.1)

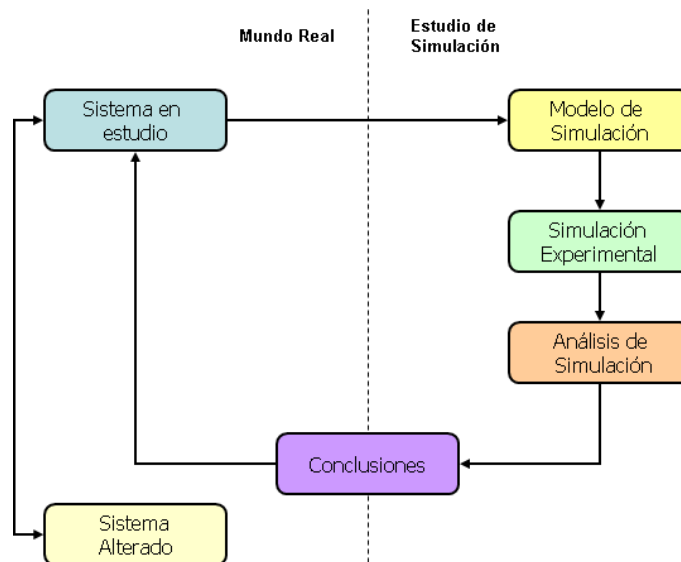


Figura 2.1: Esquema de un estudio de simulación

A continuación, se da una breve explicación de los pasos involucrados en el desarrollo del modelo de simulación, diseño del experimento de simulación, y realización del análisis de simulación:

1. Formular el Problema y los Objetivos: La heurística ha mostrado que iniciar un proyecto de simulación apropiadamente, puede marcar una diferencia crítica entre el éxito y el fracaso. Debe estar claramente definido el problema o sistema en estudio, así como los objetivos, de manera que se pueda identificar fácilmente cual es el propósito del estudio, por ejemplo: ¿Por qué estamos estudiando el sistema y que preguntas esperamos responder con dicho estudio?
2. Análisis del Sistema: El modelador debe entender bien las operaciones del sistema que va a modelar, por lo que es importante, recolectar especificaciones y restricciones del sistema, variables de entrada, interacciones entre variables, desempeño de los sistemas existentes, etc. y realizar un análisis preliminar. En este punto, los componentes del sistema y sus interacciones deben ser identificados

y descritos como un preludio del modelo a construir. Todos los parámetros y las variables aleatorias involucradas en el modelo deben también ser identificadas.

3. Formular el modelo matemático: Se debe decidir que detalles del sistema se incluirán en el modelo y cuales se excluirán. El modelo debe ser una representación simplificada del sistema, pero debe de incluir suficiente detalle para tener una buena aproximación con el sistema real. Para ello se procede a la formulación de los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, junto a las ecuaciones de restricción que imponen aspectos funcionales y operacionales del sistema.
4. Diseño y Codificación del Programa de Simulación: Una vez que el modelo ha sido especificado, este debe ser implementado en la forma de un programa de computadora. En este paso, se define cual será la arquitectura y el flujo de información que tendrá el simulador. La naturaleza de este paso dependerá en gran medida del software específico usado para implementar el modelo.
5. Verificar el Programa de Simulación: Verificación es el proceso de asegurar que el programa de simulación es una fiel representación del modelo formulado.
6. Validar el Modelo: Antes de que el modelo sea usado para tomar decisiones, es necesario asegurarse que este se aproxime al comportamiento del sistema real. Usualmente, este paso involucra la comparación de los datos arrojados por la simulación con los datos recolectados del sistema real y verificar que estos no difieran sustancialmente. Esto no solo asegura que las suposiciones del modelo son correctas, completas y consistentes, sino que también aumenta la confianza en el modelo. Al finalizar este paso, el modelo puede ser utilizado como una herramienta para evaluar decisiones o posibles modificaciones concernientes al sistema.
7. Documentar el Modelo para su Futuro Uso: Es importante documentar las suposiciones, restricciones y convenciones que se utilizaron en la construcción del modelo para su futuro uso.
8. Seleccionar un Diseño de Experimento Apropriado: Con el fin de usar el modelo para tomar decisiones relacionadas con el sistema, es necesario planificar como serán las corridas de la simulación, cuales serán los valores de los parámetros, que variables se moverán, cuanto durarán estas corridas, etc.
9. Realizar las Corridas de Simulación: Ejecutar el experimento de simulación y realizar un análisis de sensibilidad.
10. Análisis e Interpretación de resultados: Finalmente, con los datos obtenidos, se lleva a cabo un análisis y se obtienen inferencias para la toma de decisiones.

2.5. Enfoques de simulación

Antes de adentrarnos en los distintos enfoques de simulación, debe diferenciarse la noción de un simulador de propósito general con la de uno específico.

Como su nombre lo indica, un simulador de propósito específico está limitado a resolver un sistema en particular, por lo que sólo se requiere establecer una secuencia de cálculo del modelo matemático que lo representa y un control de entrada/salida de datos para comunicarse eficientemente con el usuario.

En cambio, programar un simulador de uso general implica varios problemas adicionales. En primer lugar deberá contemplarse una biblioteca de módulos individuales para poder simular distintas operaciones o equipos del proceso. Deberá programarse la forma de interacción de los equipos de acuerdo al flujo físico de información de la planta; además del procedimiento de ingreso de los datos, tanto de la estructura (flowsheet) como de cada unidad individual. Dependerá del tipo de estructura del flowsheet (con reciclos, lineal, etc.), la complejidad matemática para resolver los balances correspondientes, ya que por lo general deberá recurrirse a métodos iterativos. El orden y la secuencia de cálculo dependerá de cada caso en particular y será un nuevo aspecto a tener en cuenta en la programación del simulador. En resumen, deberán utilizarse métodos numéricos para la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales, tanto algebraicas como diferenciales, así como también técnicas de rasgado, particionado y ordenamiento.

En definitiva, son numerosos los aspectos instrumentales y metodológicos que deben superarse al desarrollar un simulador de propósitos generales. Dentro de este contexto, resulta muy importante comprender esta problemática para lograr un conocimiento más profundo de la forma de operar de los principales simuladores comerciales comúnmente utilizados para la simulación de procesos de ingeniería. Baste con mencionar que el diseño e implementación definitiva desde los primeros esbozos, hasta la versión de uso comercial de un simulador típico, es una tarea que involucra varios cientos de miles de horas hombre y es además una tarea continua, ya que los sistemas comerciales están incorporando constantemente nuevos métodos de resolución, de estimación de propiedades, etc., generando nuevas versiones periódicamente.

En los puntos siguientes se tratará de describir brevemente los principales aspectos estructurales vinculados a la arquitectura de un sistema típico de simulación de procesos industriales.

Los simuladores de procesos pueden dividirse en los siguientes tipos según la filosofía bajo la cual se plantea el modelo matemático que representa el proceso a simular:

- Simuladores globales u orientados a ecuaciones
- Simuladores secuenciales modulares
- Simuladores híbridos o modular secuencial-simultáneo

2.5.1. Simuladores globales u orientados a ecuaciones

Bajo el enfoque de la simulación global u orientada a ecuaciones, se plantea el modelo matemático que representa al proceso, construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas y/o diferenciales que representa a todo el conjunto o planta a simular. De esta forma el problema se traduce en resolver un gran sistema de ecuaciones algebraicas, por lo general altamente no lineales.

En la década de los setentas, cuando se generaron los primeros simuladores, no existían los medios apropiados (principalmente hardware) para la resolución numérica de sistemas de ecuaciones de gran dimensión. Es por ello que los primeros simuladores comerciales adoptaron principalmente la arquitectura modular, en vez de la global.

El principal problema asociado a la filosofía de resolución global u orientada a ecuaciones es la convergencia del sistema y la consistencia de las soluciones que se encuentran. En efecto, los sistemas no lineales como los que corresponden a modelos de plantas industriales pueden por ejemplo, producir múltiples soluciones. Además, la solución numérica para grandes sistemas, exige inicializaciones apropiadas, es decir próximas a un entorno de la solución, de lo contrario pueden presentarse serios inconvenientes. Si ocurre un error durante la simulación, es muy difícil determinar cual fue la causa, dado que una vez que se hubo armado el sistema total, es tratado como un sistema de ecuaciones a resolver y pierde su correspondencia con el flujo de información del sistema que representa. Históricamente, estas dificultades han sido la causa que ha limitado el desarrollo de este tipo de simuladores en forma masiva. Las principales características (virtudes y defectos históricamente remarcados) se resumen en la Tabla 2.1 [Scenna et al, 1999].

Una ventaja importante es que puede lograrse una velocidad de convergencia cuadrática, esto es, mayor que en los simuladores secuenciales. Además, dado que el sistema se plantea orientado a ecuaciones, es posible fácilmente incorporar las expresiones de restricción para definir problemas de optimización en forma directa, ya que solo basta con plantear las restricciones y la función de optimización. Esta flexibilidad es imposible en los simuladores secuenciales modulares, debido a que los módulos están orientados y definidos en forma rígida, esto es, resulta imposible agregar restricciones y/o variables.

2.5.2. Simuladores secuenciales modulares

Estos simuladores se basan en módulos de simulación independientes, que siguen aproximadamente la misma filosofía que las operaciones unitarias, es decir, cada equipo: bomba, válvula, intercambiadores, etc., son representados a través de modelos específicos para los mismos y además, el sentido de la información coincide con el flujo físico en la planta. De manera que para representar el proceso real de una planta, será necesario la conexión de varios módulos disponibles en una biblioteca de equipos del simulador.

En esta filosofía se tiene como ventaja el hecho que cada sistema de ecuaciones es resuelto con una metodología que resulta adecuada para el mismo, ya que se puede analizar bajo todas las circunstancias posibles, el comportamiento del proceso de resolución propuesto, esto es sistemas ideales, no ideales, topología diversas del equipo, distintas variantes, etc.

Dado que se puede analizar específicamente el desempeño de los distintos métodos de resolución es factible lograr un modelo robusto y eficiente para cada módulo específico.

Conceptualmente, bajo esta filosofía, para cada módulo de simulación (equipos) deberá plantearse su modelo matemático. Para obtener la solución de cualquier sistema de ecuaciones deben diferenciarse los valores conocidos (variables de diseño) y los que

Tabla 2.1: Principales Características de los Simuladores Orientados a Ecuaciones.

PRINCIPALES CARACTERÍSTICAS DE LOS SIMULADORES GLOBALES U ORIENTADOS A ECUACIONES

- Cada equipo se representa por las ecuaciones que lo modelan. El modelo es la integración de todos los subsistemas.
- Desaparece la distinción entre variables de proceso y parámetros operativos, por lo tanto se simplifican los problemas de diseño.
- Resolución simultánea del sistema de ecuaciones algebraicas (no lineares) resultante.
- Mayor velocidad de convergencia.
- Necesita una mejor inicialización (mejor cuanto mayor sea el problema a resolver).
- A mayor complejidad, menor confiabilidad en los resultados y más problemas de convergencia (soluciones sin sentido físico).
- Más difícil de usar por "no especialistas".

deben calcularse, todo esto teniendo en cuenta los grados de libertad; es decir, el número de incógnitas menos el número de ecuaciones, a fin de obtener un sistema con solución única. El enfoque en la teoría modular secuencial, por definición supone que se conocen (especifican) las variables de las corrientes de entrada, es decir, las alimentaciones a los equipos, mientras que deben calcularse las corrientes de salida y los correspondientes parámetros de operación. Esto, impone cierta rigidez que sacrifica, según sea el caso, la posibilidad de encontrar asignaciones tales que minimicen el tiempo de cómputo (secuencias acíclicas de resolución del sistema de ecuaciones asociado). Sin embargo esto resulta conveniente desde otro punto de vista, ya que de esta manera se impone una dirección al flujo de información entre módulos. Por otra parte, el análisis de los grados de libertad, las combinaciones posibles de especificación de variables son muy amplias, incrementándose en forma dramática la cantidad de módulos a disponer si se quisiera cubrir todas las posibilidades.

Resumiendo, en un simulador modular se define cada módulo por un sistema de ecuaciones independiente que se resuelve de la manera óptima, subordinados sin embargo a las limitaciones que ha impuesto la especificación de variables seleccionadas. Esto implica una ventaja en el sentido de que se podrían utilizar progresivamente distintos niveles de cálculo, dependiendo de la etapa del proyecto en la que se realiza la simulación, o bien en función de los datos disponibles hasta el momento, aprovechando

el conocimiento que proviene de la experiencia y análisis del método de convergencia para cada caso en particular. No obstante, uno de los problemas que se originan es la conexión de los módulos según el proceso a simular y la rigidez que ello impone. En la tabla 2.2 se resumen las características principales históricamente remarcadas como específicas para los simuladores modulares secuenciales [Scenna et al, 1999].

Tabla 2.2: Principales Características de los Simuladores Modulares Secuenciales.

SIMULADORES MODULAR SECUENCIALES Y SUS CARACTERÍSTICAS HISTÓRICAMENTE REMARCABLES

- Biblioteca de módulos (equipos).
- Orden de resolución fijo (iteraciones).
- Tres niveles de iteración (se incorpora otro si se desea optimizar)
 1. Calculo de propiedades
 2. Secuencia de cálculo a nivel módulo.
 3. Secuencia de calculo a nivel sistema (reciclos).
 4. Optimización

Características relevantes

- Modelos individuales resueltos eficientemente.
- Fácilmente comprendido por ingenieros "no especialistas en simulación".
- La información ingresada por el usuario (relacionable con equipos o corrientes) resulta fácilmente verificable e interpretable.
- Los problemas de diseño (selección de parámetros) son más difíciles de resolver.
- Se incrementa la dificultad cuando se plantea un problema de optimización (funcionan como cajas negras)
- Poco versátiles, pero muy flexibles, muy confiables y bastante robustos

2.5.3. Simuladores modulares simultaneos

Los simuladores modulares simultaneos son considerados como simuladores híbridos, ya que combinan la estrategia modular secuencial y la orientada a ecuaciones de forma

tal que se aproveche los aspectos positivos de ambas metodologías. El enfoque modular simultáneo, al igual que en enfoque modular secuencial, requiere que se escriba el modelo de las unidades (equipos) de tal manera que dados los valores de las corrientes de entrada y los parámetros de equipos sean calculados los valores de las corrientes de salidas. La principal diferencia ocurre precisamente en este punto, ya que en este enfoque se requiere escribir un modelo lineal aproximado para cada una de las unidades. De manera que se resuelven los modelos lineales aproximados en forma simultánea y los valores resultantes de su ejecución son alimentados a los modelos rigurosos y resueltos de acuerdo a la filosofía modular secuencial [Westerberg et al,1979]. Es por ello que a esta filosofía también se le conoce como "two-tear" o de dos niveles jerárquicos, ya que se trabaja en uno con las variables tratadas simultáneamente, y en el otro secuencialmente.

2.6. Metodología modular secuencial

A pesar de lo bien documentado que están las desventajas y limitantes del enfoque modular secuencial [Rosen, 1980], en la actualidad sigue siendo el más utilizado, especialmente en los simuladores comerciales de procesos industriales. A pesar de los avances que ha tenido el enfoque orientado a ecuaciones, resolver el modelo matemático sigue siendo complejo, ya que utiliza métodos de propósito general para resolver el sistema de ecuaciones que por lo regular es heterogéneo, los cuales provocan que a mayor complejidad en el modelo se tenga menor confiabilidad en los resultados y presente más problemas de convergencia (soluciones sin sentido físico). En cambio, la estrategia modular tiene como ventaja el hecho de que cada unidad del proceso es resuelta con una metodología que resulta adecuada para la misma, lo cual se traduce en confiabilidad y robustez. Es más sencilla de programar, mantener y se puede tener un mejor control de la convergencia tanto a nivel equipo como a nivel sistema.

De acuerdo a lo descrito anteriormente, el enfoque de simulación para la resolución del modelo matemático a utilizar en este estudio será el modular secuencial.

2.6.1. Resolución de un sistema de ejemplo

La Figura 2.2 ilustra el diagrama de flujo de un proceso muy simple, el cual se utilizará como ejemplo para ilustrar y analizar como se resuelve un sistema bajo el enfoque modular secuencial. Dicho ejemplo, fue tomado de [Westerberg et al,1979], solo que los nombres de las unidades (equipos) se renombraron arbitrariamente como A, B, C y D.

Las ecuaciones que representan este diagrama de flujo son las siguientes:

(1) Ecuaciones de las unidades (equipos)

$$\begin{aligned} f_1(x_{11}, x_{12}, y_{11}, u_1) &= 0 \\ f_2(x_{21}, y_{21}, u_2) &= 0 \\ f_3(x_{31}, y_{31}, y_{32}, u_3) &= 0 \\ f_4(x_{41}, x_{42}, y_{41}, u_4) &= 0 \end{aligned}$$

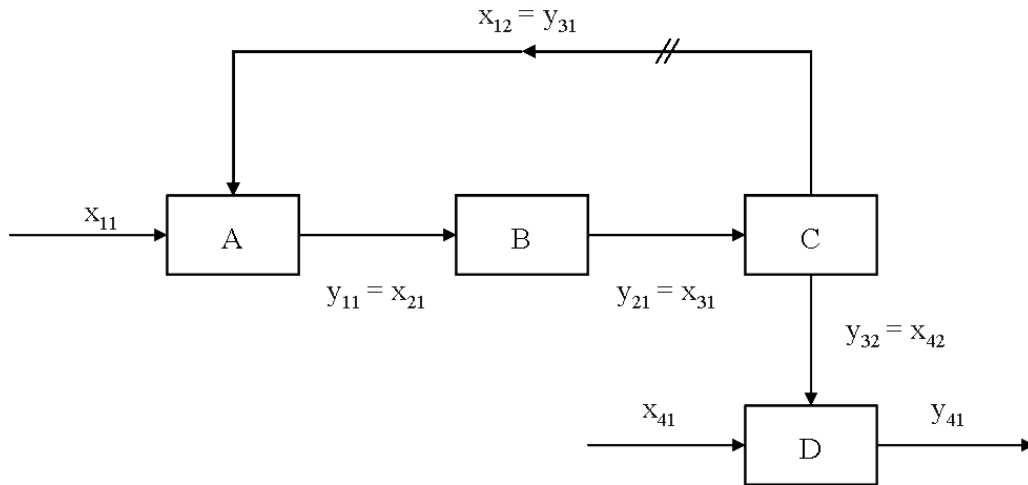


Figura 2.2: Diagrama de flujo de un sistema de ejemplo.

usando la notación siguiente:

x_{ij} entrada j a unidad i
 y_{ij} salida j desde unidad i
 u_i parámetros para unidad i

(2) Ecuaciones de conexión

$$\begin{aligned} x_{12} - y_{31} &= 0 \\ x_{21} - y_{11} &= 0 \\ x_{31} - y_{21} &= 0 \\ x_{41} - y_{32} &= 0 \end{aligned}$$

Las ecuaciones del modelo representan los balances de materia y energía, las propiedades físicas, correlaciones, entre otras. Para cada unidad, existe un número de parámetros de equipos u_i , los cuales deben ser especificados para completar la descripción de unidad. Por ejemplo, para una válvula de expansión, el diferencial de presión entre la entrada y la salida es un parámetro que se requiere para resolver el modelo de dicha unidad.

El primer paso después de haber establecido el modelo matemático del sistema que se desea resolver es el particionado, el cual consiste básicamente en descomponer el sistema en particiones de manera que se obtenga una secuencia acíclica de ser posible o con el menor número de corrientes de recirculación. En la Figura 2.3, se ilustra el resultado de haber realizado el particionado. Como se puede observar, el sistema se dividió en 2 particiones, la partición I compuesta por las unidades A, B y C, y la

partición compuesta solo por la unidad D.

De manera que dada como entrada la corriente (x_{11}) se resuelve la partición I y los valores calculados de la corriente de salida (y_{32}) se pasan como entradas a la corriente (x_{42}) de la partición II y aunado con el valor de la corriente (x_{41}) se calcula la corriente de salida (y_{41}), teniendo así una secuencia de cálculo acíclica a nivel sistema.

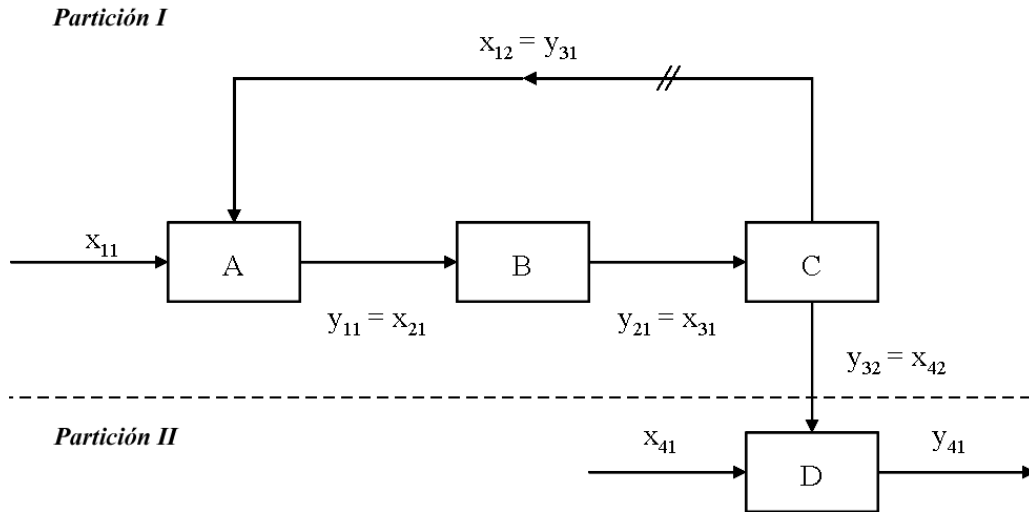


Figura 2.3: Diagrama de flujo de un sistema de ejemplo (con particionado).

Una vez obtenida el orden de precedencia de cálculo de las particiones, el siguiente paso es establecer el orden de precedencia de cálculo de las unidades que componen las particiones, con el menor número de corrientes de recirculación. Observando nuevamente la Figura 2.3, se puede notar que la partición I, es la única que contiene un corriente de recirculación (marcada con el símbolo //), de forma que se realizara un "corte" en dicha corriente (de ahí que se les nombre corrientes de corte) y cuando se requiera el valor de dicha corriente se tendrá que suponer un valor. Un proceso industrial real, puede contener un número considerable de corrientes de corte, complicando seriamente su solución. Como se mencionó en el Capítulo 1, la mayoría de estas recirculaciones en los sistemas de enfriamiento por absorción se deben a integraciones energéticas, con lo cual se pretende tener una mayor eficiencia de estos sistemas.

La secuencia de cálculo final para el sistema del ejemplo manejado en esta sección es el siguiente:

1. Dar como entrada los valores de x_{11} y x_{41}
2. Suponer un valor para x_{12} .
3. Usar la ecuación del modelo $y_{11} = g_{11}(x_{11}, x_{12}, u_1)$ para calcular y_{11} .
4. Igualar los valores de la variables x_{21} e y_{11} .
5. Usar la ecuación del modelo $y_{21} = g_{21}(x_{21}, u_2)$ para calcular y_{21} .

6. Igualar los valores de las variables x_{31} e y_{21} .
7. Usar la ecuación del modelo $y_{31} = g_{31}(x_{31}, u_3)$ y $y_{32} = g_{32}(x_{31}, u_3)$ para calcular y_{31} y y_{32} .
8. Evaluar la diferencia entre las variables y_{31} (calculada) y x_{12} (supuesta), después:
 - a) Si no es igual a cero, usar los valores de y_{31} y x_{12} para suponer un nuevo valor de x_{12} . Regresar al paso 3.
 - b) Si es igual a cero, se ha logrado convergencia del reciclo para la partición I, continuar con el paso 9.
9. Igualar los valores de las variables x_{42} e y_{32} .
10. Usar la ecuación del modelo $y_{41} = g_{41}(x_{41}, x_{42}, u_4)$ para calcular la última variable y_{41} .

Como se puede notar, en el paso 8, no se especificó cual fue el criterio para obtener el nuevo valor de la variable x_{12} , para esta parte se utiliza regularmente un método de convergencia como Sustitución Directa o Wegstein, los cuales se discutirán en los capítulos siguientes.

Capítulo 3

Algoritmos genéticos

3.1. Conceptos básicos

3.1.1. Fundamentos biológicos

Todos los seres vivos estamos compuestos de un material genético conocido como ADN (Ácido Desoxirribonucleico). Dentro de las células existen cadenas de ADN que son responsables de la transmisión genética; estas cadenas reciben el nombre de *cromosomas*.

Un *gen* es una sección de ADN que codifica cierta función o característica que se encuentra en un lugar específico dentro del cromosoma. A los diferentes valores que puede tomar un gen se les denomina *alelos*.

Al conjunto total de genes de un organismo se le llama *genoma*. Reciben el nombre de gametos aquellas células que tienen la mitad de cromosomas con el fin de unirse con otro gameto durante la reproducción sexual. La reproducción sexual consiste de manera general en la recombinación o cruce de los genes de uno (asexual) o dos (sexual) padres para dar lugar al genoma de un nuevo individuo. Durante este proceso eventualmente ocurren errores de copiado conocidos como *mutaciones*.

Un individuo es el elemento básico de una población, donde una población es un conjunto de individuos capaces de relacionarse e interactuar juntos. Cada individuo está determinado por su composición genética, la cual recibe el nombre de *genotipo*. Posteriormente, el genotipo da lugar a los rasgos específicos u observables del individuo, los cuales reciben el nombre de *fenotipo*.

Un individuo se desarrolla dentro de un cierto *ambiente* y este último a su vez actúa sobre el individuo alterando su capacidad de reproducirse, mejor conocida como *aptitud*. Con base en la aptitud de cada individuo, el proceso de *selección* determinará cuáles son los individuos que se reproducirán para dar lugar a nuevas generaciones.

A través de las generaciones, las frecuencias de los alelos correspondientes a los individuos de una población van cambiando como resultado del proceso de selección. Sin embargo, este cambio puede también ser un resultado de mutaciones o del azar; a este fenómeno es al que se le conoce como *deriva genética* [Reyes, 2002].

3.1.2. Conceptos de computación evolutiva

La Computación Evolutiva, es una rama de la Inteligencia Artificial, la cual esta formada por un conjunto de técnicas matemáticas, implementadas en sistemas de computo, que resuelven problemas complejos imitando la vida natural. Dichas técnicas matemáticas corresponden a modelos de evolución basados en poblaciones, cuyos elementos representan soluciones a problemas.

A la hora de resolver un problema utilizando Computación Evolutiva (CE), un *cromosoma* se representa con una estructura de datos que codifica los parámetros de una posible solución a dicho problema.

Cada cromosoma corresponde a un *individuo* de la población. Los cromosomas usualmente son representados por cadenas binarias, como se verá más adelante en la sección de codificación. Dado que un *gen* es una subsección de un cromosoma, codificará el valor de un solo parámetro (ver figura 3.1).

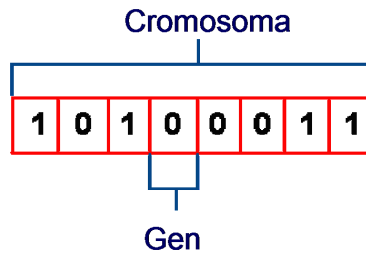


Figura 3.1: Cromosoma usando codificación binaria.

Así pues, el *genotipo* corresponde con la codificación del cromosoma y el *fenotipo* con la decodificación del mismo (ver figura 3.2).



Figura 3.2: Correspondencia genotipo-fenotipo.

Como ya se dijo, los *alelos* son los valores posibles que puede tomar cada posición genética. Por ejemplo, si la codificación fuera binaria, un alelo puede tomar el valor de 0 o 1.

Se denomina *aptitud* al valor que se le asigna a cada individuo y que denota la calidad de éste con respecto a los demás para la solución de un problema. Este valor podría ser por ejemplo, el valor de la función objetivo.

Se le llama *generación* a la creación de una población nueva a partir de la existente, es decir a partir de un previo cálculo de aptitudes [Reyes, 2002].

Finamente, es importante mencionar que en CE, un *individuo* representa una solución candidata a un problema determinado (entorno), siendo su *aptitud* la calidad con la cual está solución resuelve dicho problema (figura 3.3).

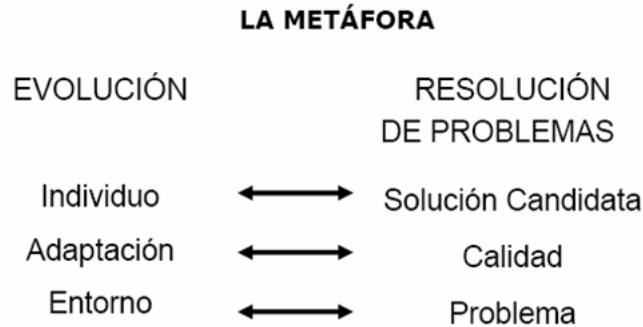


Figura 3.3: La metáfora.

3.2. ¿Qué es un Algoritmo Genético?

Los Algoritmos Genéticos (AGs) son métodos adaptativos que pueden usarse para resolver problemas de búsqueda, optimización y aprendizaje. Están inspirados en los procesos de evolución natural y evolución genética. La figura 3.4 esquematiza el ciclo de vida de un AG, estos trabajan con una población de individuos, cada uno de los cuales representa una solución factible a un problema dado. A cada individuo se le asigna un valor ó puntuación, dependiendo que tan bien resuelva el problema. En la naturaleza esto equivaldría al grado de efectividad de un organismo para competir por unos determinados recursos. Cuanto mayor sea la adaptación de un individuo al problema, mayor será la probabilidad de que el mismo sea seleccionado para reproducirse, cruzando su material genético con otro individuo seleccionado de igual forma. Este cruce producirá nuevos individuos descendientes de los anteriores los cuales comparten algunas de las características de sus padres. Cuanto menor sea la adaptación de un individuo, menor será la probabilidad de que dicho individuo sea seleccionado para la reproducción, y por tanto de que su material genético se propague en sucesivas generaciones.

De esta manera se produce una nueva población de posibles soluciones, la cual reemplaza a la anterior, propagándose así las mejores características de generación en generación. Ocasionalmente, se introducen pequeñas mutaciones con el fin de explorar áreas más prometedoras del espacio de búsqueda. Si el AG ha sido bien diseñado, la población convergerá hacia una solución óptima del problema.

Versiones más complejas de algoritmos genéticos generan un ciclo iterativo que directamente toma a la especie (el total de los ejemplares) y crea una nueva generación que reemplaza a la antigua una cantidad de veces determinada por su propio diseño. Una de sus características principales es la de ir perfeccionando su propia heurística en el proceso de ejecución, por lo que no requiere largos períodos de entrenamiento especializado por parte del ser humano, principal defecto de otros métodos para solucionar problemas, como los Sistemas Expertos.

En resumen, podemos decir que los Algoritmos Genéticos son métodos de búsqueda, optimización y aprendizaje que combinan la supervivencia del más apto (Selección Natural) con los operadores de cruce y mutación de individuos en una población de

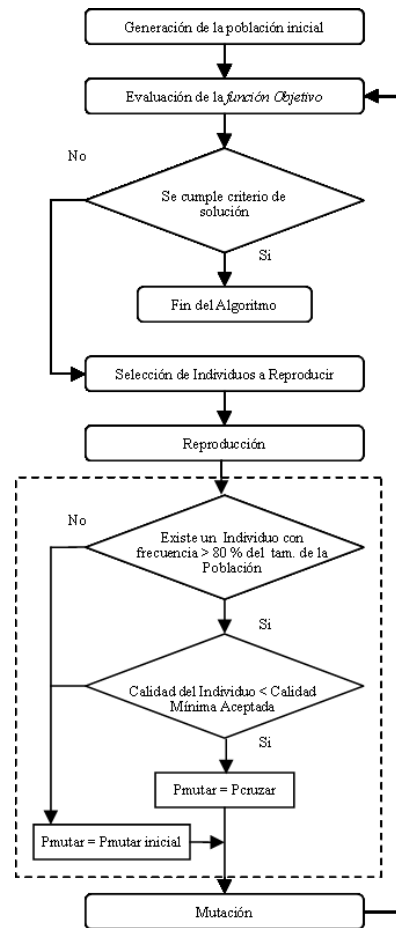


Figura 3.4: Ciclo de un Algoritmo Genético

posibles soluciones.

3.3. Componentes básicos de un Algoritmo Genético

3.3.1. Codificación

Algo que es fundamental en la estructura de un AG es el mecanismo de codificación que se utilice para representar las variables del problema que se desean optimizar.

El mecanismo de codificación depende de la naturaleza de las variables del problema, muchas aplicaciones de AGs utilizan cadenas de bits de longitud fija y orden fijo, a este tipo de representación se le conoce como codificación binaria. Sin embargo en los últimos años se ha hecho mucha experimentación con otro tipo de codificación que es, la codificación con valores reales.

La elección de uno u otro tipo de codificación puede afectar el desempeño de un AG, principalmente por que: “1) los AG manipulan una representación codificada del problema y 2) la representación puede limitar en gran medida la visión que tiene un

sistema sobre su entorno” [Lozano, 1996]. Es necesario resaltar que los operadores de cruce y mutación dependen del tipo de codificación empleada.

En la literatura existen más tipos de codificaciones, en esta sección solo se muestran dos de las estrategias mas comunes para este proceso, la codificación binaria y la codificación real.

3.3.1.1. Codificación binaria

La codificación binaria (o cadena de bits), es la forma mas común para codificar soluciones en un AG. Esto por varias razones, una de ellas es histórica, debido a que John Holland en su trabajo pionero sobre la implementación de estos algoritmos, utilizó esta notación, y la tendencia de utilizarla fue adoptada por todos los entusiastas que siguieron experimentando esta técnica. Por otro lado, mucha de la teoría existente sobre AGs utiliza este tipo de codificación.

En la codificación binaria se representa la estructura de una solución (cromosoma que la caracteriza) a través de una cadena de bits, donde a su vez cada uno de esos bits representa una característica (gen) de la misma. Por ejemplo: Si suponemos que se desea encontrar el mínimo de una función en el rango de 0 al 128 de su dominio. Para codificar todo este rango con números binarios se necesitan 7 bits debido a que 128 decimal es igual a 1111111 binario. Entonces, el algoritmo utilizaría una codificación de siete bits binarios para representar la estructura de la solución.

Es importante recalcar que no solo números enteros pueden ser representados con la codificación binaria, si no que también es posible representar números reales. El numero de decimales estará limitado por el numero de bits que sean dedicados para este propósito.

3.3.1.2. Codificación real

Para muchas aplicaciones, una forma más natural de codificar una solución es utilizando valores reales como genes. Ya que para estos problemas es mucha más sencillo representar su solución con números reales que como números binarios.

Actualmente no existe una guía rigurosa para definir cual tipo de codificación trabajará mejor. Lawrence Davis, un investigador con mucha experiencia en la implementación de AGs, recomienda utilizar el tipo de codificación más natural para el problema de codificación [Davis, 1991].

3.3.2. Población

3.3.2.1. Tamaño

Una de las primeras cuestiones en la implementación de un AG corresponde a determinar cuál es el tamaño idóneo de la población. Parece intuitivo que las poblaciones pequeñas corren el riesgo de no cubrir adecuadamente el espacio de búsqueda, mientras que el trabajar con poblaciones de gran tamaño puede acarrear problemas relacionados con el excesivo costo computacional.

Goldberg efectuó un estudio teórico, obteniendo como conclusión que el tamaño óptimo de la población para ristras (trenzas hecha de los tallos de ajos o cebollas) de longitud I , con codificación binaria, crece exponencialmente con el tamaño de la ristra.

Este resultado traería como consecuencia que la aplicabilidad de los Algoritmos Genéticos en problemas reales sería muy limitada, ya que resultarían no competitivos con otros métodos de optimización combinatoria. Alander Jarmo, basándose en evidencia empírica sugiere que un tamaño de población comprendida entre 1 y 21 es suficiente para atacar con éxito los problemas por él considerados [Jarmo, 1992].

3.3.2.2. Inicialización

La generación de la población inicial de un algoritmo genético puede ser realizada de forma determinística o aleatoria. Habitualmente, la inicialización del primer conjunto de posibles soluciones (población inicial), es a través de la generación de valores aleatorios. Dichos valores estarán limitados por el valor mínimo y máximo que puede llegar a tener una solución. Siguiendo con el ejemplo de encontrar el mínimo de una función en el rango de 0 al 128 de su dominio, los valores iniciales de una población de tamaño igual a 5 podrían ser [45,10, 74, 49,38].

Otra forma de generar la población inicial, es con la utilización de alguna técnica heurística o de optimización local. En los pocos trabajos que existen sobre este aspecto, se constata que esta inicialización no aleatoria de la población inicial, puede acelerar la convergencia del Algoritmo Genético. Sin embargo en algunos casos la desventaja resulta ser la prematura convergencia del algoritmo, queriendo indicar con esto la convergencia hacia óptimos locales.

3.3.3. Función objetivo

Dos aspectos que resultan cruciales en el comportamiento de los Algoritmos Genéticos son la determinación de una adecuada función de adaptación o función objetivo, así como la codificación utilizada. La función Objetivo es el criterio con el cual se evalúa cada uno de los miembros de la población para definir el grado en que resuelve el problema.

Idealmente nos interesaría construir funciones objetivo con "ciertas regularidades", es decir funciones objetivo que verifiquen que para dos individuos que se encuentren cercanos en el espacio de búsqueda, sus respectivos valores en las funciones objetivo sean similares. Por otra parte una dificultad en el comportamiento de los Algoritmos Genéticos puede ser la existencia de gran cantidad de óptimos locales, así como el hecho de que el óptimo global se encuentre muy aislado.

La regla general para construir una buena función objetivo es que ésta debe reflejar el valor del individuo de una manera "real", pero en muchos problemas de optimización combinatoria, donde existe gran cantidad de restricciones, buena parte de los puntos del espacio de búsqueda representan individuos no válidos.

Para este planteamiento en el que los individuos están sometidos a restricciones, se han propuesto varias soluciones. La primera sería la que podríamos denominar absolutista, en la que aquellos individuos que no verifican las restricciones, no son

considerados como tales, y se siguen efectuando cruces y mutaciones hasta obtener individuos válidos, o bien, a dichos individuos se les asigna una función objetivo igual a cero.

Otra posibilidad consiste en reconstruir aquellos individuos que no verifican las restricciones. Dicha reconstrucción suele llevarse a cabo por medio de un nuevo operador que se acostumbra denominar reparador.

Otro enfoque está basado en la penalización de la función objetivo. La idea general consiste en dividir la función objetivo del individuo por una cantidad (la penalización) que guarda relación con las restricciones que dicho individuo viola. Dicha cantidad puede simplemente tener en cuenta el número de restricciones violadas ó bien el denominado costo esperado de reconstrucción, es decir el costo asociado a la conversión de dicho individuo en otro que no viole ninguna restricción.

Otra técnica que se ha venido utilizando en el caso en que la computación de la función objetivo sea muy compleja, es la denominada evaluación aproximada de la función objetivo. En algunos casos la obtención de n funciones objetivo aproximadas puede resultar mejor que la evaluación exacta de una única función objetivo (supuesto el caso de que la evaluación aproximada resulta como mínimo n veces más rápida que la evaluación exacta).

De todo lo anterior, podemos concluir que la función objetivo es muy dependiente del tipo de problema que se desee resolver y de la experiencia de la persona que implementa el problema.

3.3.4. Estrategia de selección

El método que se utilice para la selección debe garantizar que los mejores individuos tienen una mayor posibilidad de ser padres (reproducirse) frente a los individuos menos buenos. Pero además, debe dar la oportunidad de reproducirse a los individuos menos buenos, ya que éstos pueden incluir material genético útil en el proceso de reproducción. Esta idea nos define la presión selectiva que determina en qué grado la reproducción está dirigida por los mejores individuos.

Al igual que en el caso de los métodos de codificación, existen varias formas de realizar el proceso de selección. A continuación se describen algunos de los métodos más utilizados según la literatura.

3.3.4.1. Selección por método de la ruleta

El mecanismo de selección por método de la ruleta fue propuesto por Kenneth De Jong [De Jong, 1975], y fue el más utilizado en los orígenes de los AGs, el cual se esquematiza en la figura 3.5. En este método, a cada individuo le es asignado una parte de la ruleta proporcional al valor de su aptitud. La ruleta es puesta a girar y el valor señalado por la marca es seleccionado como sigue:

1. Sumar los valores esperados de cada uno de los individuos de la población. Llamar a ésta T .
2. Repetir N veces:

- a) Generar un valor entero aleatorio r entre 0 y T .
- b) Generar un ciclo entre los miembros de la población, sumando el valor esperado hasta que la suma sea mayor o igual a r .
- c) El miembro cuyo valor esperado ponga la suma por arriba de este límite, es el seleccionado.

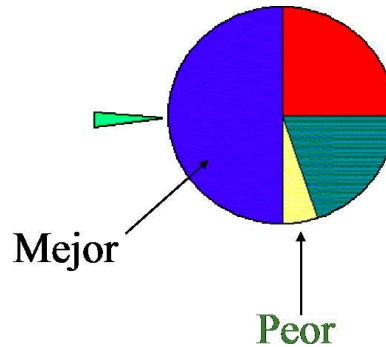


Figura 3.5: Método de la ruleta

3.3.4.2. Selección por elitismo

En éste método, los individuos seleccionados para la reproducción serán aquellos que tengan la mayor aptitud en toda la población. Con este se asegura que los más aptos sean seleccionados, a diferencia de otros métodos en los cuales la selección es más estocástica y pueden ser seleccionados tanto individuos con buena aptitud como mala. El problema que presenta este método es que, al elegir solo individuos con aptitudes altas, estos dominarán la población y causarán una convergencia prematura cayendo en un óptimo local.

3.3.4.3. Selección por torneo

Este método fue propuesto por Wetzel y estudiado en la tesis doctoral de Brindle [Brindle, 1981] (ver figura 3.6). El cual consiste básicamente en escoger aleatoriamente un número T de cromosomas de la población de manera que, aquel que tenga mayor aptitud será el seleccionado para reproducirse, sustituyendo su descendencia por el que tiene menor puntuación. Es una técnica eficiente y fácil de implementar, pero puede introducir una presión de selección muy alta porque a los individuos menos aptos no se les da una oportunidad de sobrevivir.

3.3.4.4. Selección de estado uniforme

Esta técnica fue propuesta por Whitley en 1989 y se usa en AGs no generacionales, en los cuales sólo unos cuantos individuos son reemplazados en cada generación (los menos aptos). Esta técnica suele usarse cuando se evoluciona sistemas basados en reglas

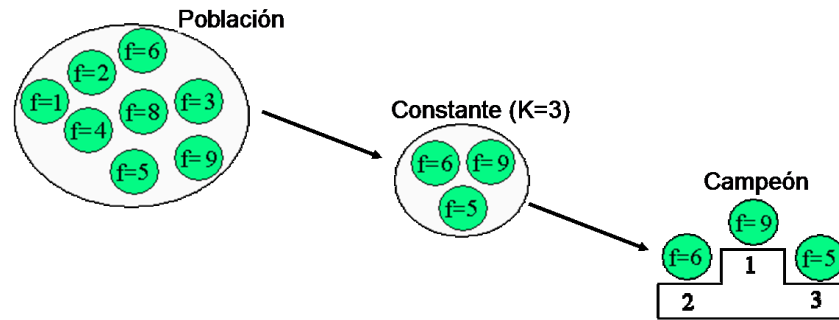


Figura 3.6: Selección por torneo

(p.ej., sistemas clasificadores) en los que el aprendizaje es incremental. Esta técnica es útil cuando los miembros de la población resuelven colectivamente (y no de manera individual) un problema. Así mismo, los AGs no generacionales se usan cuando es importante recordar lo que se ha aprendido antes.

3.3.5. Cruce

Consiste en el intercambio de material genético entre dos cromosomas . El cruce es el principal operador genético, hasta el punto que se puede decir que no es un algoritmo genético si no tiene cruce, y, sin embargo, puede serlo perfectamente sin mutación, según descubrió Holland. El teorema de los esquemas confía en él para hallar la mejor solución a un problema, combinando soluciones parciales.

Para aplicar el cruce, entrecruzamiento o recombinación, se escogen aleatoriamente dos miembros de la población. No pasa nada si se emparejan dos descendientes de los mismos padres; ello garantiza la perpetuación de un individuo con buena puntuación. Sin embargo, si esto sucede demasiado a menudo, puede crear problemas: toda la población puede aparecer dominada por los descendientes de algún gen, que además, puede tener caracteres no deseados. Esto se suele denominar en otros métodos de optimización atranque en un mínimo local, y es uno de los principales problemas con los que se enfrentan los que aplican algoritmos genéticos.

Como se mencionó anteriormente, los operadores de cruce y mutación dependen del tipo de codificación que se utilice. La forma mas sencilla de realizar el cruzamiento en cadena de bits (codificación binaria) es hacer cruzamiento de punto simple. En éste, se elige de manera aleatoria una posición a lo largo de la cadena, y tomando la misma posición en ambas cadenas, sus partes son intercambiadas para formar dos nuevos individuos.

A continuación se muestra un ejemplo de cruzamiento simple.

Individuo A	00110110011
Individuo B	11000011100

Si se elige al azar la posición 5 de derecha a izquierda como el punto simple para realizar el cruzamiento, entonces se generan dos nuevos individuos como se muestra a continuación:

Padres	Punto de Cruce		Hijos
00110110011	001101	10011	00110111100
11000011100	110000	11100	11000010011

La posición de cruzamiento en las cadenas cambia de una ejecución a otra, esto es, se calcula un número aleatorio para definir la posición de cruzamiento cada vez que se realiza uno, aún cuando se trate de la misma población y la misma iteración.

Se dice que los operadores de cruce ayudan a *explotar* el espacio de búsqueda; es decir, realiza pequeños movimientos dentro del espacio de búsqueda, en la dirección que según la información obtenida de los individuos parezca prometedora.

3.3.6. Mutación

En la Evolución, una mutación es un suceso bastante poco común (sucede aproximadamente una de cada mil replicaciones), como ya se ha visto anteriormente. En la mayoría de los casos las mutaciones son letales, pero en promedio, puede introducir material genético valioso contribuyen a la diversidad genética de la especie. En un algoritmo genético tendrán el mismo papel, y la misma frecuencia (es decir, muy baja).

En la codificación binaria, este operador invierte de manera aleatoria algunos de los bits de un cromosoma. Para ello se define una frecuencia de mutación, por ejemplo, uno por mil. Si un número generado aleatoriamente está por debajo de esa probabilidad, se cambiará el bit (es decir, de 0 a 1 o de 1 a 0). Si no, se dejará como está. Al igual que en el cruce se elige un punto en donde se llevara a cabo la modificación.

A continuación se muestra un ejemplo de la mutación de un individuo, en el cual se elige al azar la posición 2 de izquierda a derecha como el punto para realizar la mutación:

Individuo	Punto de Mutación	Individuo Mutado
00000100	0[0]000100	01000100

Dependiendo del número de individuos que haya y del número de bits por individuo, puede resultar que las mutaciones sean extremadamente raras en una sola generación.

Como se mencionó antes, la mutación es uno de los mecanismos que generan diversidad y, por tanto, es la solución cuando un algoritmo genético está estancado, pero también es cierto que reduce el algoritmo genético a una búsqueda aleatoria. Siempre es más conveniente usar otros mecanismos de generación de diversidad, como aumentar el tamaño de la población, o garantizar la aleatoriedad de la población inicial.

Se dice que los operadores de mutación colaboran a *explorar* el espacio de búsqueda, ya que a través de estos, se realizan saltos a regiones no exploradas, con el fin de encontrar regiones mas prometedoras que puedan ser explotadas a través de los operadores de cruce y a las vez evitar quedar atrapados en óptimos locales.

3.3.7. Criterio de terminación

El criterio de terminación del algoritmo genético es el encargado de definir el momento en el cual debe detenerse el ciclo de evolución y adoptar el cromosoma más

apto como la solución encontrada por el algoritmo genético. A continuación se describen los criterios más comúnmente utilizados.

3.3.7.1. Criterio de convergencia de identidad

Este criterio consiste en detener al algoritmo genético cuando un determinado porcentaje de los cromosomas de la población representa a la misma solución. Los operadores del algoritmo genético tienden a preservar y difundir el material genético de los cromosomas más aptos, por lo que es de esperar que luego de un gran número de generaciones, alguna solución con gran valor de aptitud se imponga y domine la población.

3.3.7.2. Criterio de convergencia de aptitud

Puede suceder que existan soluciones equivalentes o casi equivalentes a un problema, que obtengan valores de aptitud similares. En ese caso, es probable que no haya una solución que se imponga en la población y el criterio de terminación por convergencia de identidad nunca se cumpla.

Este criterio no espera a que la población se componga mayoritariamente de una sola solución, sino que finaliza la ejecución del algoritmo cuando los valores de aptitud de un determinado porcentaje de las soluciones son iguales, o difieren en un porcentaje. Por ejemplo, cuando el 90 % de las soluciones tenga valores de aptitud que no difieran en más de un 1 %.

3.3.7.3. Criterio de cantidad de generaciones

Los métodos anteriores apuntan a esperar a que la evolución de la población llegue a su fin. Cuando alguno de ellos se cumple, es probable que las soluciones no sigan mejorando mucho más, no importa cuantas generaciones más se ejecuten.

Sin embargo, los algoritmos genéticos pueden necesitar un número de generaciones muy grande para llegar a la convergencia, dependiendo de las tasas de reproducción y mutación. Utilizando cualquiera de los dos criterios anteriores no puede estimarse un número máximo de generaciones, ya que esto dependerá no solamente de los parámetros del algoritmo genético sino también del azar.

Esto puede ser un problema, sobre todo si se quieren comparar los tiempos de resolución de un problema mediante algoritmos genéticos con otros métodos.

El criterio de terminación por cantidad de generaciones consiste simplemente en finalizar la ejecución una vez que ha transcurrido un número determinado de generaciones. Este método permite determinar con precisión los tiempos de ejecución del algoritmo a costa de detener la evolución sin la certeza de que las soluciones no seguirán mejorando.

Capítulo 4

Sistemas de enfriamiento termosolar

La conservación de productos perecederos y el acondicionamiento térmico de espacios es una necesidad fundamental para el desarrollo de cualquier sociedad. Si se logran crear nuevos sistemas que cubran estas necesidades sin dañar el medio ambiente, con una inversión inicial razonable y con bajo costo de operación y mantenimiento, el beneficio para la sociedad sería importante, tanto en su calidad de vida como en su economía.

La climatización en el sector residencial, comercial e industrial representa una clara oportunidad para la implementación de la energía solar térmica, puesto que los beneficios ambientales, económicos y energéticos son considerables. Hasta la fecha, el aprovechamiento de la energía solar térmica para enfriamiento en dichos sectores no ha sido desarrollado por una combinación de razones tecnológicas y económicas que han venido restringiendo su desarrollo, sin embargo todas estas barreras pueden ser superadas. Las nuevas tecnologías desarrolladas, tanto en los sistemas de captación solar como en los sistemas térmicos de enfriamiento, han abierto nuevas perspectivas en este campo del conocimiento.

Las tecnologías de enfriamiento termosolar ambientalmente sostenibles aprovechan que el sol es una fuente de energía limpia, inagotable y gratuita. La transformación de energía solar en energía térmica o eléctrica puede realizarse en el propio lugar de consumo, sin tener que requerir transporte ni depender de infraestructuras propiedad de terceros.

4.1. Sistema de Enfriamiento térmico

Existe una amplia gama de tecnologías de enfriamiento que son activadas térmicamente, tres de las más importantes son: Sistemas de Enfriamiento por Absorción, Sistemas de Enfriamiento por Adsorción y Sistemas de Enfriamiento Evaporativo con Desecante [Velázquez et al., 2005].

De entre estas tecnologías de enfriamiento con activación térmica, destacan los sistemas de enfriamiento por absorción, por ser ampliamente conocidos, tener una madurez tecnológica, ser utilizada en todo tipo de aplicaciones y en los diferentes sectores (industrial, comercial y residencial), por estar disponible comercialmente en

toda la gama de potencias, por poder utilizar diferentes fuentes térmicas de activación, por su fiabilidad y flexibilidad de funcionamiento y además por utilizar refrigerantes naturales que no dañan la capa de ozono.

Los sistemas de absorción se basan en la propiedad que poseen ciertos disolventes de absorber grandes cantidades de un vapor determinado y de restituir dicho vapor cuando se calienta la solución formada en la absorción. Por ejemplo, a 0 °C el agua absorbe alrededor 1000 veces su volumen de amoníaco y sobre 700 veces a 15 °C. El agua restituye casi la totalidad de este gas si se calienta la solución a 100 °C. Haciendo uso de dichas propiedades, se puede reemplazar el compresor eléctrico de un sistema de compresión mecánica (SCM) por una máquina termomecánica, que consiste en un circuito de solución (refrigerante-absorbente) compuesto por un absorbedor, un generador y una bomba de solución. En la sección 4.3 se explicará el funcionamiento de un ciclo de refrigeración por absorción y que además es activado térmicamente con energía solar.

4.2. Sistema de captación

La función de las tecnologías de colectores solares térmicos es absorber la radiación solar incidente sobre el colector y transferir dicha energía a un fluido que circula a través del mismo. La energía solar puede ser usada en los ciclos de enfriamiento principalmente para tres propósitos, 1) para proveer aire acondicionado (temperaturas de 20 a 7 °C), 2) para conservar medicamentos y productos alimenticios perecederos (temperaturas de 7 a -10 °C) y 3) para procesos de congelamiento industrial (temperaturas menores a -10 °C). Según el grado de concentración de la energía solar captada, los colectores solares pueden clasificarse en dos grandes grupos:

1. Colectores solares planos (concentración = 1)
2. Colectores solares de concentración (concentración >1)

Dentro del primer grupo se tienen a los colectores de placa plana, placa plana con aislamiento térmico transparente, tubos evacuados y tubos de calor. Por el lado de los colectores de concentración, se tienen a los concentradores parabólicos compuestos, cilindro parabólico, fresnel, torre central, entre otros.

4.3. Sistemas de enfriamiento termosolar por absorción

En las máquinas de enfriamiento termosolar por absorción, la solución de agua-amoníaco es calentada por la energía solar en el generador, donde el amoníaco se evapora, separándose del agua. Dicho vapor pasa al condensador, donde se enfría debido al paso de un flujo de aire producido por un ventilador externo, y se condensa saliendo en estado líquido. El líquido de amoníaco resultante pasa por una válvula de expansión donde al bajar su presión provoca que baje su temperatura y este listo para entrar

al evaporador donde, recibe calor y se evapora, el calor que recibe puede ser del agua procedente de un circuito externo o del espacio a acondicionar. Posteriormente el vapor de amoníaco es conducido al absorbedor, donde se encuentra con el agua que queda tras la separación en el generador. En este momento, tiene lugar la absorción, proceso que da nombre al ciclo de trabajo de esta aplicación: el vapor de amoníaco es absorbido por el agua en la solución líquida procedente del generador, para a continuación iniciar de nuevo el ciclo en el generador.

Una línea en la investigación de ciclos de absorción avanzados que inclusive, se tienen disponibles comercialmente, es la de los ciclos de múltiple efecto (comercialmente existen hasta triple efecto). Si en un ciclo de absorción básico, se divide el generador en dos partes a diferentes presiones y el vapor generado en la primera sección (alta presión) se utiliza para calentar la segunda sección (presión baja) del generador, se tiene como resultado un ciclo de doble efecto. Aplicando este principio se puede obtener un ciclo de doble, triple y múltiple efecto. Conforme se adicionan efectos el equipo es más eficiente térmicamente, pero económicamente va dejando de ser factible.

Existen muchos sistemas de absorción avanzados, de hecho, con tantas opciones es necesario establecer criterios de comparación y selección, lo cual dependerá del sector del mercado que se quiera atacar. Los nuevos ciclos de enfriamiento por absorción se caracterizan por los métodos de recuperación de calor o integración energética interna con lo cual mejoran el rendimiento: recuperación de calor de condensación, recuperación de calor de absorción, recuperación de calor de condensación/absorción, aumento de calor de evaporación, entre otros [Velázquez et al., 2005].

4.3.1. Ciclo Solar GAX

Uno de los sistemas de estudio a resolver numéricamente en el presente trabajo es el ciclo Solar-GAX, el cual es mostrado esquemáticamente en la Figura 4.1. Dicho ciclo como se mencionó anteriormente en los antecedentes, fue resuelto por [Pelayo, 2006] utilizando un algoritmo genético para encontrar el valor de las variables iterativas causadas por las recirculaciones. Los resultados fueron satisfactorios, sin embargo, la metodología utilizada para su solución, carecía de generalidad, por lo que su futura implementación en un simulador general para este tipo de sistemas no era viable. Es por ello que en el presente trabajo, se pretende resolver éste y otros ciclos con menor y mayor complejidad, con el objetivo de obtener una metodología general de resolución.

El Ciclo Solar-GAX utiliza amoníaco-agua como fluido de trabajo y es enfriado por aire, esta compuesto por los siguientes equipos principales: columna generador-rectificador, condensador, pre-enfriador, evaporador, columna absorbedor-GAX, dos válvulas de expansión y una bomba de solución [Velázquez, 2002]. A su vez la columna generador rectificador esta integrada por: generador gas natural (1G), generador energía solar (2G), intercambiador de calor de la solución (GHX), cámara de separación y rectificador. La columna absorbedor-GAX esta integrada por: absorbedor enfriado por aire (1A), intercambiador de calor de la solución (AHX) e intercambiador de calor absorbedor-generador (GAX).

Para explicar el funcionamiento del sistema de absorción avanzado, se utilizará la Figura 4.1. Iniciando con el vapor de refrigerante cuando sale del rectificador en el estado

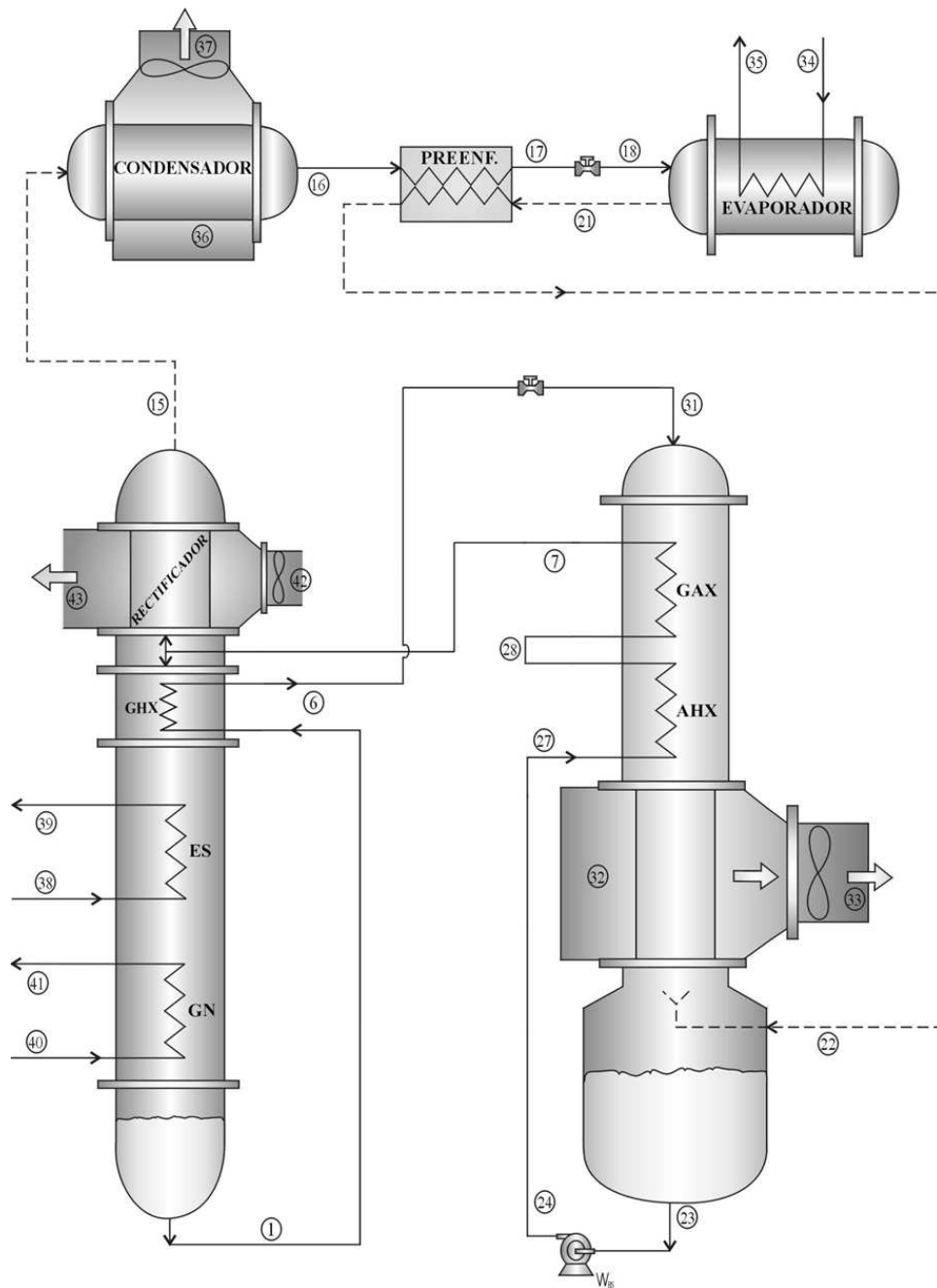


Figura 4.1: Diagrama esquemático del Sistema de Absorción Solar-GAX.

15. Se trata entonces de vapor de amoníaco saturado con alta pureza, a la presión alta del sistema. El refrigerante al ser enfriado en el condensador se condensa y sale como líquido saturado, estado 16; Luego es subenfriado en el pre-enfriador (estado 17) y posteriormente pasa a un proceso de expansión en una válvula de estrangulamiento, donde la presión es reducida, dando como resultado un fluido frío en dos fases (mezcla vapor líquido), estado 18. El refrigerante entra al evaporador, donde al recibir calor del agua a enfriar, termina de convertirse en vapor, produciendo el efecto frigorífico deseado y sale en forma de vapor saturado en el estado 21 o en algunos casos con un poco de líquido, este líquido que es en mayor proporción agua, se termina de evaporar en el pre-enfriador, saliendo en el estado 22. El vapor relativamente frío entra luego a la columna absorbedor-GAX por la parte inferior, donde es condensado y absorbido en tres diferentes etapas por medio de una solución acuosa caliente. La reacción de disolución del amoníaco es exotérmica, de modo que se deben colocar equipos con intercambio de calor en el absorbedor con el fin de enfriar dicha solución caliente, mejorando así su capacidad de absorción al retirar la entalpía de condensación y el calor de reacción. Lo anterior se logra por medio de aire de enfriamiento y la utilización de la misma solución fría que deja el absorbedor.

La solución acuosa con alto porcentaje de amoníaco en agua (solución fuerte), sale de la columna absorbedor-GAX en el estado 23 y entra en la bomba, de donde sale a la presión alta del sistema, estado 24. Luego es introducida de nuevo a la sección media de la columna (AHX), donde enfría o recibe calor del absorbedor, saliendo en el estado 28, posteriormente entra en la parte más caliente del absorbedor (sección GAX), en donde al recibir calor de absorción de alta calidad, alcanza el punto de saturación e inicia el proceso de cambio de fase (liberación de amoníaco), sale en el estado 7, como una mezcla vapor-líquido.

La mezcla de dos fases a alta presión, entra en la cámara de separación de la columna generador-rectificador, en donde la parte líquida (fase líquida) se incorpora al vapor condensado proveniente del rectificador y entra al generador, en donde se le agrega calor para terminar de extraer el amoníaco de la solución. El líquido caliente con un bajo porcentaje de amoníaco (solución débil), sale por el fondo de la columna generador-rectificador en el estado 1, posteriormente la solución caliente se introduce de nuevo a la columna para que caliente la sección GHX del generador, saliendo en el estado 6, luego reduce su presión al pasar por una válvula de estrangulamiento, para salir en el estado 31. La solución acuosa todavía caliente entra después a la columna absorbedor-GAX por la parte superior, en donde se pone en contacto en contra corriente con el vapor de amoníaco a absorber.

Regresando al generador, la liberación del amoníaco en forma de vapor se realiza en tres etapas y sale del generador, pasando a la cámara de separación de la columna generador-rectificador en donde se une con la fase vapor proveniente de la columna absorbedor-GAX (estado 7). La corriente de vapor ascendente, sale de la cámara de separación y entra al rectificador en donde se le retira calor y como se trata de un vapor saturado, se condensa en mayor proporción el componente más pesado (agua), de esta forma se realiza la purificación o rectificación del flujo de vapor, saliendo después amoníaco de alta pureza en el estado 15. De esta manera se completa el ciclo [Velázquez, 2002].

Capítulo 5

Evaluación de la metodología tradicional utilizando métodos convencionales y estocásticos

5.1. Introducción

Dentro del proceso de desarrollo de tecnologías de enfriamiento por absorción, es fundamental obtener y resolver el modelo matemático que las representa. Dicho modelo, esta formado por un sistema de ecuaciones no lineales y su función primordial es estudiar y predecir su comportamiento.

En esta sección se presenta la evaluación de los métodos convencionales, un algoritmo genético y el híbrido genético-convencional para la resolución del modelo matemáticos de los ciclos de refrigeración por absorción (CRAs) utilizando el enfoque modular secuencial. Dado que por definición en el enfoque modular secuencial se especifican las variables de las corrientes de entrada para posteriormente calcularse las corrientes de salida, a este enfoque se le denomina esquema Entradas-Salidas.

Primeramente, se definen los ciclos de refrigeración por absorción con los cuales se pretende probar la validez de la metodología propuesta para su resolución numérica. En la literatura están reportados una amplia gama de CRAs con varias topologías y que utilizan diferentes mezclas de trabajo. El objetivo del presente estudio, es establecer una metodología para la solución numérica del modelo matemático de CRAs y dada la gran variedad que existen, no se pretende cubrirlos todos, de manera que solo se utilizarán 5 ciclos representativos con diferentes grado de complejidad para probar que la metodología establecida funciona.

El siguiente paso es definir y resolver el modelo matemático de los equipos necesarios para modelar los sistemas en estudio, e implementar dichos modelos en una biblioteca de equipos. También se implementan los métodos de convergencia convencionales más utilizados por los simuladores actuales (Sustitución Directa, Wegstein y Broyden), así como una técnica de inteligencia artificial, en concreto un algoritmo genético, el cual se utilizará en forma individual e híbrida con los métodos anteriores para la convergencia de las variables iterativas.

Posteriormente se definen los experimentos de simulación con los cuales se llevará a cabo la evaluación de la metodología tradicional utilizando los distintos métodos implementados previamente para la resolución de los sistemas en estudio, incrementado su complejidad de forma gradual.

Finalmente, se realizan las corridas de simulación, se analizan e interpretan los resultados y se obtienen conclusiones.

5.2. Definición de sistemas en estudio

Los CRAs que se contemplaron para este estudio son los siguientes:

1. Ciclo Básico, compuesto por los equipos evaporador, absorbedor, generador (desorbedor), condensador, rectificador, una bomba y dos válvulas de expansión (una de solución y otra de refrigerante)
2. El mismo Ciclo Básico con la adición de un preenfriador y un intercambiador de calor entre las soluciones débil y fuerte, se convierte en el Ciclo Básico con Integración Energética (CBIE).
3. El mismo CBIE solo que sin el intercambiador de calor entre las soluciones débil y fuerte, y con la adición de dos recuperadores de calor (uno en el absorbedor y otro en el generador), y un intercambiador de calor entre el absorbedor y el generador, se convierte en el Ciclo GAX (Generator-Absorber Heat eXchange).
4. El mismo Ciclo GAX, con la adición de una bomba y una línea de ramificación para recircular parte de la solución del absorbedor al generador. A este ciclo se le denomina Ciclo Ramificado GAX.
5. El mismo Ciclo Ramificado GAX, con la adición de un intercambiador de calor (ICS) entre la ramificación proveniente del absorbedor y la salida del generador, referido como Ciclo Ramificado GAX con ICS.

La Tabla 5.1, muestra el número de equipos (componentes) que tiene cada ciclo, así como el número total de ecuaciones y variables que representan a cada uno de ellos:

Tabla 5.1: Sistemas en Estudio

Ciclo	Equipos	No. Ecuaciones	No.Variables
Básico	7	122	174
Básico con Integración Energética	11	211	298
GAX	16	292	422
Ramificado GAX	18	324	465
Ramificado GAX con ICS	19	354	503

Los diagramas esquemáticos de cada uno de los ciclos son los que se muestran en las figuras siguientes.

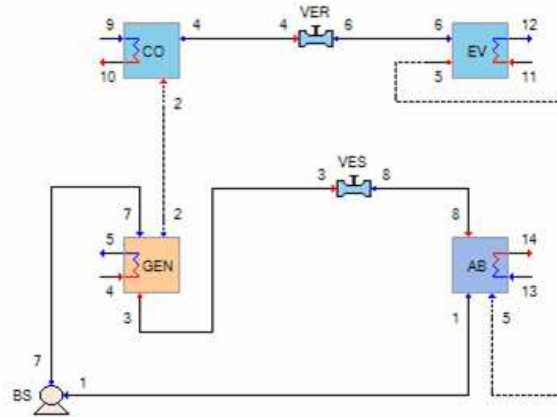


Figura 5.1: Ciclo Básico.

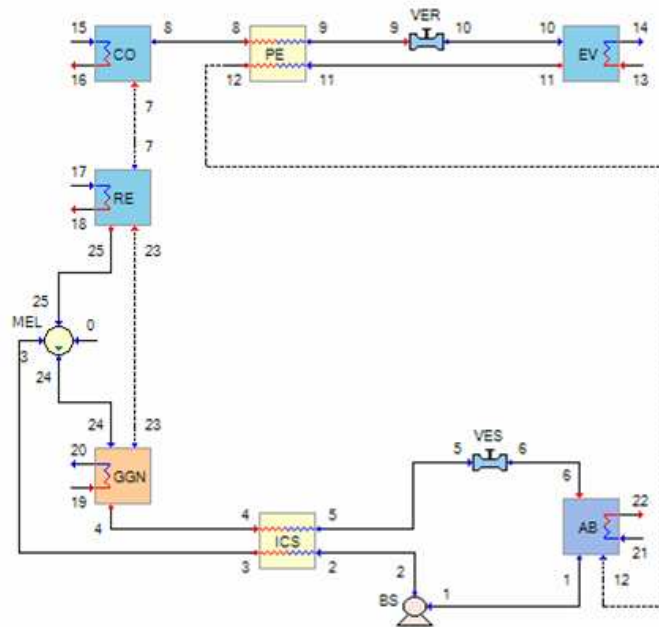


Figura 5.2: Ciclo básico con integración energética CBIE

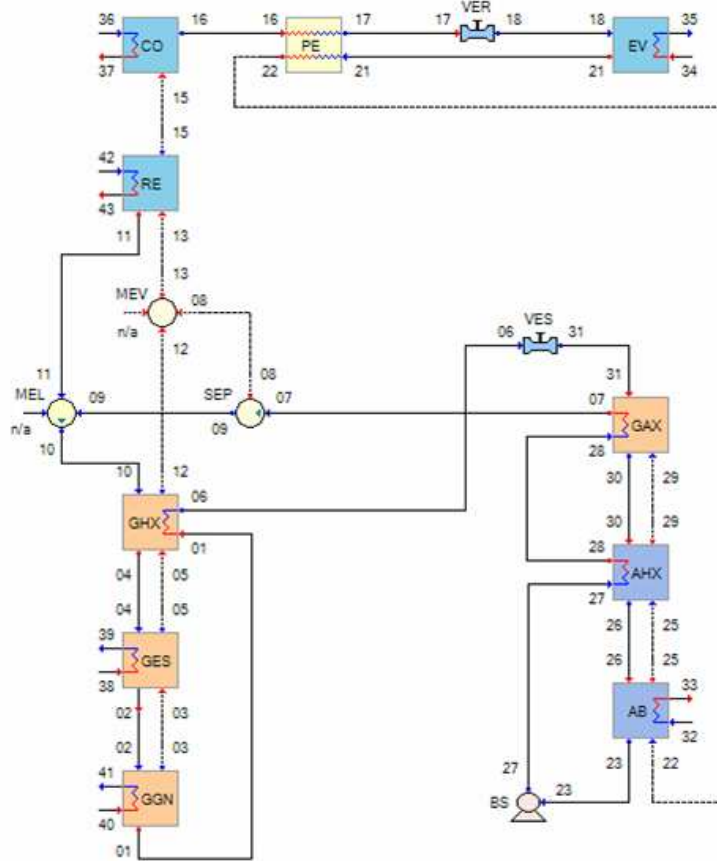


Figura 5.3: Ciclo GAX.

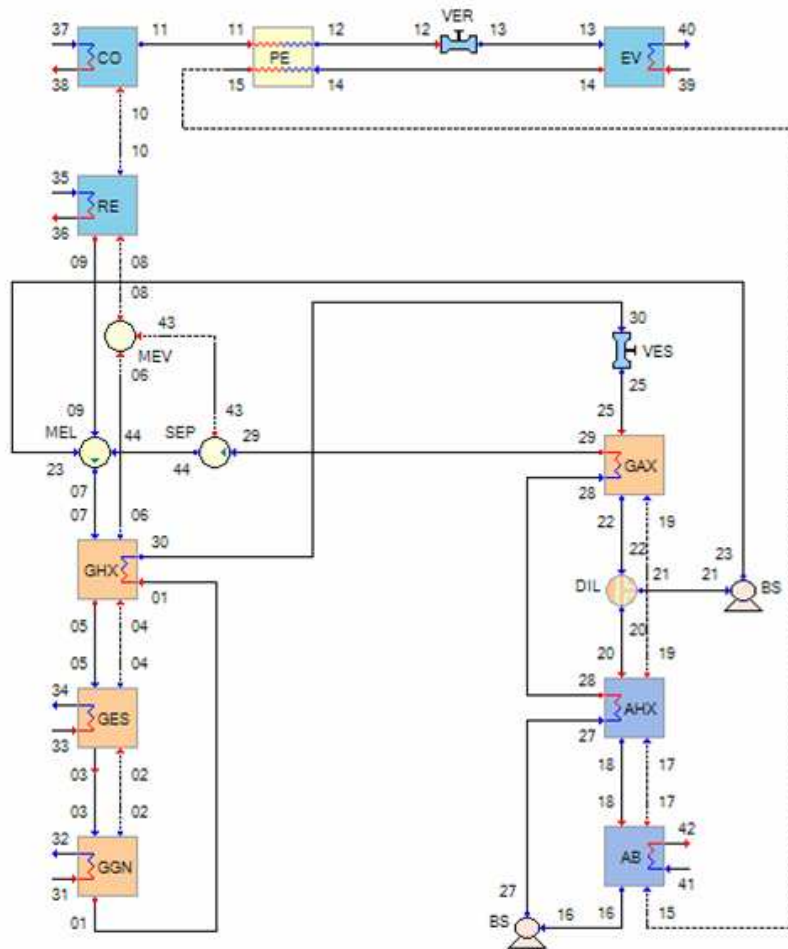


Figura 5.4: Ciclo Ramificado GAX.

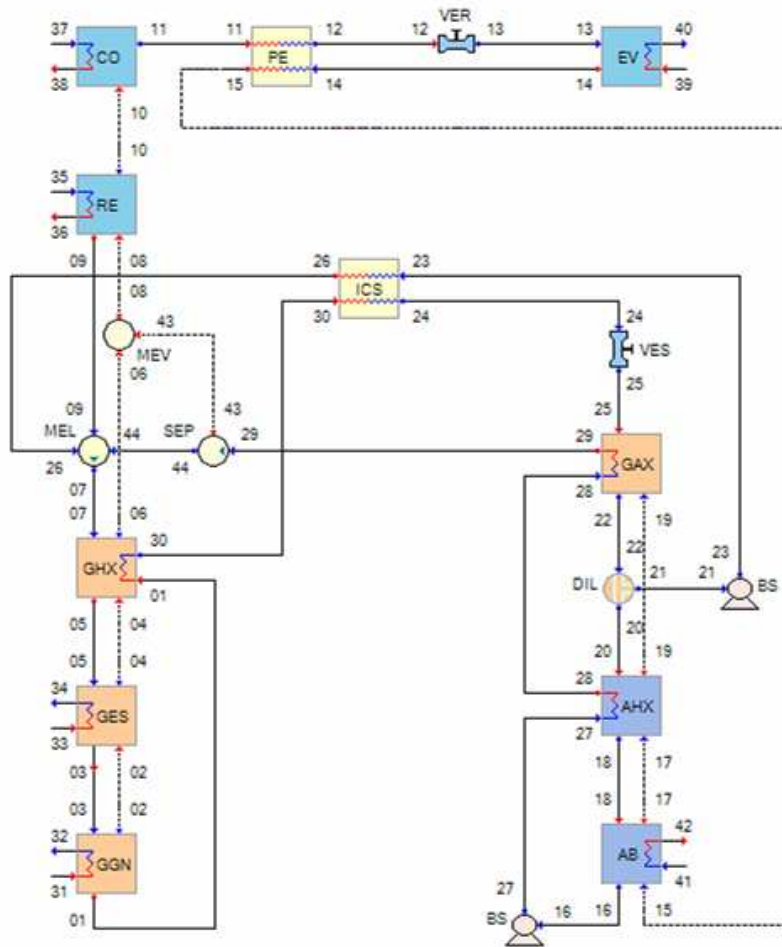


Figura 5.5: Ciclo Ramificado GAX con ICS.

5.3. Definición y resolución del modelo matemático por equipo

Una vez definidos los ciclos de absorción a estudiar, es necesario contar con la implementación de una biblioteca de equipos que contenga todos los componentes necesarios para simular dichos ciclos (generadores, absorbedores, condensadores, válvulas, entre otros).

Para cada uno de los equipos contenidos en dicha biblioteca, se requiere definir su modelo matemático, determinar los grados de libertad y obtener una secuencia de solución acíclica si es posible o con el menor número de variables iterativas internas. Llevar a cabo lo recién descrito, implica una buena cantidad de trabajo y tiempo, eso sin contar que se tienen que realizar pruebas para validar que los modelos estén resueltos correctamente y funcionen de acuerdo a lo que están representando.

Afortunadamente esta biblioteca de equipos ya fue implementada en un trabajo anterior a este [Pelayo, 2006] y solo se requirieron implementar un par de secuencias

extras de ciertos equipos para poder simular todos los ciclos contemplados para este estudio. Lo anterior debido principalmente a que en los modelos se hacen consideraciones relacionadas con el estado térmico de las corrientes, de manera que puede resultar que para un ciclo, una corriente tenga cierto estado térmico, y que para otro ciclo, la misma corriente tenga un estado térmico diferente. La Figura 5.6 muestra los equipos que contiene la biblioteca implementada, 20 en total.

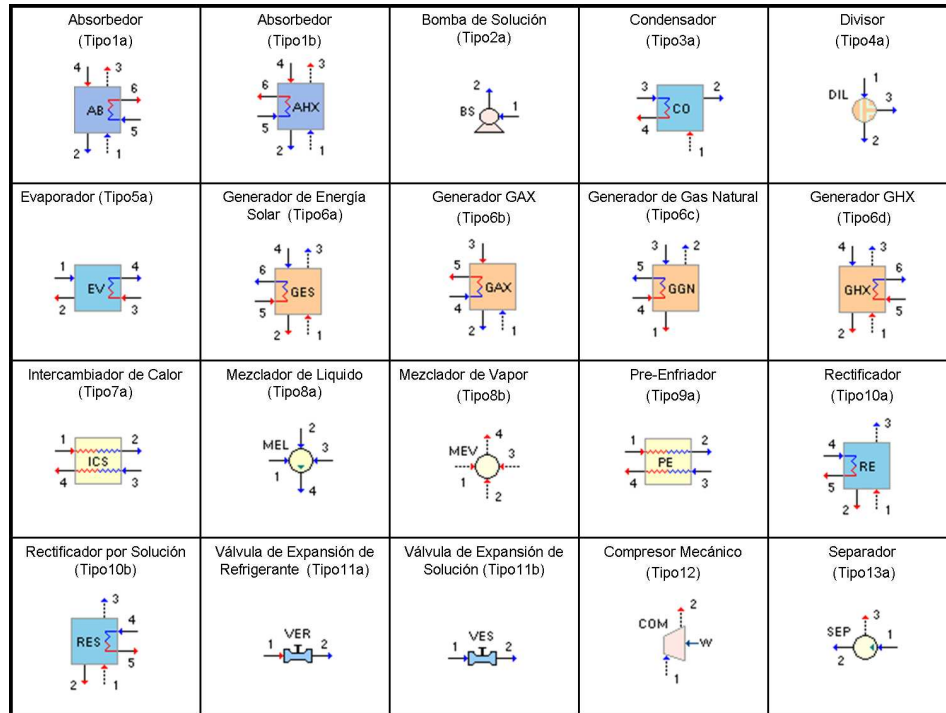


Figura 5.6: Biblioteca de equipos.

5.4. Implementación de métodos y algoritmos para resolución a nivel sistema

Como resultado de la investigación bibliográfica se implementarán los métodos de convergencia más utilizados actualmente por los simuladores comerciales. Así como, la implementación de una técnica de cómputo evolutivo, un Algoritmo Genético (AG), para la resolución numérica del modelado matemático de los CRAs.

5.4.1. Métodos convencionales de convergencia

Estos algoritmos resuelven de forma iterativa un conjunto de N ecuaciones en un vector de N incógnitas, \vec{x} :

$$f(\vec{x}) = 0 \tag{5.1}$$

Para la convergencia de las corrientes de corte, cada una de las variables que definen estas corrientes, corresponde a un elemento dentro del vector \vec{x} . De manera que una vez que el flowsheet (Diagrama de flujo del proceso) ha sido evaluado usando estos valores supuestos, un nuevo conjunto de valores para las corrientes de corte son computados. El criterio para la convergencia es que el valor supuesto sea igual al calculado. Sea $g_i(x)$ el nuevo valor para la variable i basado en el valor supuesto x . Lo anterior se puede expresar de la siguiente manera:

$$x_i - g_i(\vec{x}) = 0 \quad (5.2)$$

Cada variable desconocida en una corriente de corte involucra una ecuación de la forma anterior. Sin embargo, no todas las variables de una corriente deben ser incluidas como desconocidas. Solo aquellas variables necesarias para definir el estado de una corriente serán incluidas, ya que de otra manera quedarían sobre-especificadas. En nuestra implementación en particular, el *flujo másico* (m), *temperatura* (T), *presión* (p) y *concentración* (x) serán suficientes para determinar el estado de una corriente para la mezcla amoniaco-agua. La concentración será omitida para el caso de una corriente en saturación, ya que con temperatura y presión es posible obtener dicha variable.

De acuerdo a la investigación bibliográfica, los métodos de convergencia mas utilizados en la mayoría de los simuladores modulares secuenciales son los que se describen brevemente a continuación :

1. Sustitución Directa: Este método consiste en una simple sustitución de los valores supuestos por los valores calculados,

$$x_{k+1} = g(x_k) \quad (5.3)$$

Según se reporta, con sustitución directa la convergencia es lenta pero segura, sin embargo teóricamente la convergencia es garantizada solo si los eigen valores del Jacobiano de las funciones de residuo son en absoluto menor que uno. En general esta condición no se cumple por completo, y por lo tanto no es muy recomendado, solo se utiliza para aquellos casos en los cuales los otros métodos se comportan inestables o para generar valores iniciales para métodos más efectivos.

2. Wegstein [Wegstein, 1958]: Este es el método que usualmente es mas rápido y confiable para la convergencia de las corrientes de corte. Es una extrapolación de las iteraciones de sustitución directa. Las interacciones entre las variables son ignoradas y por tanto no funciona bien cuando las variables están fuertemente relacionadas. Wegstein es el método por omisión en la mayoría de los simuladores.
3. Broyden [Broyden, 1965]: Este método resuelve de forma directa la Ecuación 5.1, por medio de una aproximación lineal de la matriz Jacobiana. Esta aproximación hace que Broyden sea más rápido, pero ocasionalmente no tan estable como el método de Newton. Este método se utiliza para la convergencia de las corrientes de corte y las especificaciones de diseño de forma simultanea.
4. Newton: Este algoritmo es una implementación del método de Newton-Raphson

para la solución simultanea de las ecuaciones no lineales. Es más robusto que Broyden, pero está limitado a un pequeño número de variables.

De los cuatros métodos descritos previamente, se implementaron Sustitución Directa, Wegstein y Broyden, los detalles de dichas implementaciones se puede consultar en el Apéndice C. El método de Newton fue descartado principalmente porque no siempre es posible calcular el valor del Jacobiano.

5.4.2. Algoritmo genético

En esta sección se presenta el algoritmo genético propuesto, para encontrar el valor de las corrientes de corte de los sistemas en estudio.

5.4.2.1. Representación y codificación de las variables de corte

Para poder optimizar las variables de un problema con un Algoritmo Genético, es necesario implementar algún mecanismo para codificar dichas variables en genes. De acuerdo al problema que estamos atacando, en el cual se requiere encontrar el valor de todas las variables que contiene un sistema y en particular, las iterativas, la codificación que será utilizada para representar dichas variables, será la codificación real.

Se definirá un individuo como un arreglo de n genes (cromosoma), donde cada uno de estos genes g_j representa una variable iterativa.

$$C_i = [g_1, g_2, \dots, g_n] \quad (5.4)$$

A diferencia de los métodos de convergencia convencionales, que requieren de valores iniciales para arrancar, un AG requiere que se defina el intervalo de posibles valores (alelos) que puede tomar un gen. Es por ello, que cada uno de los genes g_j será acotado a un intervalo $[a_j, b_j]$ de valores físicamente posibles de acuerdo a la variable que se este representando.

5.4.2.2. Definición de los parámetros de control

El funcionamiento de los AGs es determinado en gran parte por la correcta elección de los parámetros de control: probabilidad de cruzar (P_{cruzar}), probabilidad de mutar (P_{mutar}), tamaño de la población y el máximo número de generaciones (es decir, de iteraciones del algoritmo). Además, se introdujo el parámetro de control denominado calidad mínima aceptada utilizado en [Pelayo, 2006], el cual como su nombre lo indica establece la calidad mínima que debe tener un individuo para ser considerado una solución al problema.

La selección de los parámetros de control óptimos ha sido debatida en investigaciones analíticas y empíricas por Srinivas y Lalit (1994). En los experimentos realizados en este capítulo y en el siguiente se especifican los parámetros de control que se aplicaron para realizar las corridas utilizando el algoritmo genético.

5.4.2.3. Generación de la población inicial

Una de las atractivas ventajas que tiene un algoritmo genético frente a un método convencional, es que puede o no requerir de valores iniciales para su arranque.

Esta característica, fue uno de los motivos por los cuales se pensó era viable implementar esta clase de algoritmos para encontrar los valores de las variables de corte.

Ya que para generar valores iniciales para cada una de las variables iterativas, se tendrían que recolectar datos experimentales o heurísticos, lo cual para nuestro caso requeriría de una corrida previa en otro simulador o de datos recolectados en campo.

Para generar la población inicial se siguió el siguiente procedimiento por cada gen g_j contenido en el cromosoma C_i de cada individuo:

1. Generar un número aleatorio ($rand_num$) en el intervalo de $[0, 1]$.
2. Con la siguiente expresión calcular el valor de g_j :

$$g_j = a_j + rand_num * (b_j - a_j) \quad (5.5)$$

donde a_j y b_j respectivamente, corresponden al valor mínima y máximo que puede tomar un gen j .

Analizando la expresión 5.5, se puede notar que si $rand_num$ tiene un valor igual a 0, el valor de g_j será igual al mínimo número real permitido para dicho gen. Para el caso contrario donde $rand_num$ tiene un valor igual a 1, el valor de g_j será igual al máximo número real permitido. Para cualquier otro caso, el valor de g_j será un número real comprendido entre el mínimo y máximo valor permitido.

5.4.2.4. Evaluación de la función objetivo

A cada individuo le es asignado un valor de calidad (aptitud) comprendido entre 0 y 1, a través de la siguiente expresión:

$$f = 1 - \left(\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \frac{|g_j - v_j|}{v_j} \right) \quad (5.6)$$

Donde g_j es el gen que contiene el valor supuesto de la variable iterativa j y v_j su valor calculado obtenido a partir de la evaluación del flowsheet. Si la diferencia de estos dos valores se aproxima a 0 el valor de lo que se encuentra entre paréntesis también tenderá a 0 y por tanto el valor de la función objetivo lo hará a 1.

Además la función objetivo se rige bajo los siguientes dos criterios:

1. Si el individuo no es válido, aplicar un operador de reparación para, de ser posible, convertir los cromosomas no válidos en validos, y evaluar la *función objetivo* nuevamente con el nuevo cromosoma. Se entiende como cromosoma válido, aquel que cumpla con las restricciones físicas del modelado.
2. Asignar la calidad nula al individuo que no cumpla con las restricciones físicas del modelado.

Es importante mencionar, que este paso del algoritmo es el más costoso en tiempo y recursos, ya que es ejecutado por cada individuo de la población en cada generación. Es por esta razón que se verificó que no se re-evaluaran individuos que no fueron modificados al momento de ser sometidos al cruce o la mutación.

Puesto que la forma convencional de reportar los resultado de convergencia es a través del error relativo porcentual (ERP), es importante definir la equivalencia del valor de la aptitud y el ERP. Es por ello que se utilizará la siguiente expresión para reportar el ERP en los resultados de la corridas del genético:

$$ERP = (1 - Aptitud) * 100 \quad (5.7)$$

5.4.2.5. Proceso de selección

En esta etapa es donde se lleva a cabo la selección de las parejas de individuos que se cruzarán para generar una nueva población. Para el algoritmo propuesto, se utiliza la selección por torneo, la cual básicamente consiste en escoger aleatoriamente un número T de cromosomas de la población de manera que, aquel que tenga mayor calidad será el seleccionado. Este proceso se repite hasta formar un vector de individuos seleccionados de tamaño igual al tamaño de población, en donde la pareja de cada individuo es la siguiente en el arreglo de individuos seleccionados.

5.4.2.6. Cruce

Por cada pareja se genera un número aleatorio *rand_num* entre 0 y 1 para determinar si ocurre o no el cruzamiento.

Así pues, si *rand_num* es menor a la probabilidad de cruzar, los cromosomas $C_1 = [g_1^1, g_2^1, \dots, g_n^1]$ y $C_2 = [g_1^2, g_2^2, \dots, g_n^2]$, se cruzan para generar dos hijos $C_k = [g_1^k, g_2^k, \dots, g_n^k]$ con $k = \{1, 2\}$, en donde cada gen g_j^k debe pertenecer al intervalo $[a_j, b_j]$.

Existen varios operadores de cruce para la codificación real, en este trabajo se utilizaron principalmente dos de ellos: el plano y *BLX* - α [Eshelman et al, 1993].

El primero de ellos, es el más simple de los dos y la idea de este operador es la generación de un nuevo individuo a partir de dos individuos padres, donde los valores de los genes de este nuevo individuo están comprendidos entre los valores de los genes de los padres.

Con el segundo, el cruce *BLX* - α , también se genera un nuevo individuo a partir de dos individuos padres, pero a diferencia del anterior, los valores de los genes de este nuevo individuo están comprendidos en un intervalo mayor al de los valores de los genes de los padres, con esto se pretende hacer una pequeña exploración de las regiones cercanas a las que se están explotando a través del cruzamiento de los padres e incorporar material genético que pudiera ser valioso.

A continuación se describe la implementación de cada uno de estos operadores:

Cruce real plano

Se genera un número aleatorio (*rand_num*) comprendido en el intervalo [0,1] y con la siguiente expresión se calcula el valor de cada gen:

$$g_j = g_j^1 + rand_num * (g_j^2 - g_j^1) \quad (5.8)$$

Cruce real $BLX - \alpha$

El valor de cada gen se obtiene aleatoriamente del intervalo $[g_{min} - I\alpha, g_{max} + I\alpha]$ utilizando la siguiente expresión:

$$g_j = (g_{min} - I\alpha) + rand_num * ((g_{max} + I\alpha) - (g_{min} - I\alpha)) \quad (5.9)$$

En donde $\alpha \in [0, 1]$, $g_{min} = \min(g_j^1, g_j^2)$, $g_{max} = \max(g_j^1, g_j^2)$ e $I = g_{max} - g_{min}$. El valor de α es un parámetro elegido por el usuario, en nuestro caso utilizamos el valor de 0.25. De esta manera el rango a explorar se extiende en un 25 % en ambos extremos la distancia entre los genes que se van a cruzar.

5.4.2.7. Generación de diversidad

Todo algoritmo de búsqueda necesita establecer equilibrio entre dos factores aparentemente opuestos:

- exploración del espacio de soluciones, para realizar una búsqueda en amplitud, localizando zonas más prometedoras y
- explotación del espacio de búsqueda, para hacer precisamente un búsqueda mas profunda en dichas zonas, obteniendo así mejores soluciones.

Los algoritmos genéticos son un tipo de algoritmo de búsqueda de propósito general, cuyos operadores pueden establecer un equilibrio adecuado entre exploración y explotación.

Dos factores contrapuestos influyen sobre la efectividad de un AG:

- Convergencia: Centrar la búsqueda en regiones prometedoras mediante la presión selectiva. La presión selectiva permite que los mejores individuos sean seleccionados para reproducirse. Es necesaria para que el proceso de búsqueda no sea aleatorio.
- Diversidad: Mantener individuos con material genético de distintas regiones para evitar la convergencia prematura (rápida convergencia hacia zonas que no contienen el óptimo global).

Con el fin de evitar que el algoritmo se estacione en un óptimo local de la población, se implementaron dos estrategias para propiciar la diversidad.

Una de ellas se encuentra implícita en el cruce real $BLX - \alpha$, ya que a través de este operador de cruce no solo se realiza la explotación sino que además introduce una pequeña exploración (ver Figura 5.8)

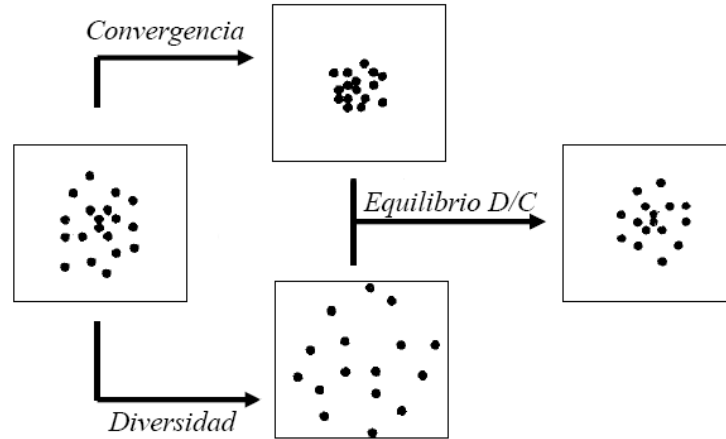


Figura 5.7: Diversidad contra convergencia.

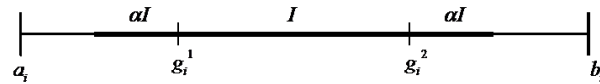


Figura 5.8: Explotación y exploración a través del cruce $BLX - \alpha$

La otra es por medio de la mutación (Figura ??, parte punteada), al momento que se detecta que un óptimo local esta dominando la población, se aumenta la probabilidad de mutar para generar diversidad y después se regresa a su valor original.

5.4.2.8. Mutación

Por cada C_i se genera un número aleatorio entre 0 y 1, el cual es comparado con la probabilidad de mutar para determinar si se ejecuta o no el operador de mutación sobre dicho cromosoma.

Si $rand_num$ es menor o igual a la probabilidad de mutar, a cada g_j^i se le asigna un número aleatorio utilizando para ello la ecuación 5.5. En caso contrario, el cromosoma no sufre alteración alguna.

5.4.2.9. Criterio de terminación

El algoritmo puede finalizar bajo cualquiera de las siguientes dos condiciones:

1. Si la calidad promedio de la población anterior es igual a la calidad promedio de la población actual.
2. Si dado un número r de generaciones la función objetivo no presenta cambio.
3. Si la generación actual es mayor que el Máximo número de Iteraciones establecidas.

5.5. Diseño de experimentos

En esta sección se presenta la definición de los experimentos para la evaluación de la metodología tradicional modular secuencial utilizando los algoritmos anteriormente mencionados.

5.5.1. Ciclos a resolver

De los cinco ciclos que se definieron previamente en la Sección 5.2, tres serán utilizados para evaluar de forma inicial el enfoque tradicional modular secuencial. Para cada uno de estos ciclos de acuerdo al enfoque modular secuencial, se deberá descomponer el flowsheet en particiones y determinar la procedencia de resolución de cada partición. Encontrar el menor número de corrientes de corte (rasgado) para cada partición y determinar la precedencia de resolución de unidades (equipos) por cada partición.

La Tabla 6.1, muestra los ciclos a resolver en este Capítulo, así com un resumen del número de particiones, corrientes de corte y variables iterativas resultantes de la ejecución de las actividades anteriormente mencionadas.

Tabla 5.2: Resumen de ciclos a resolver bajo el esquema entradas-salidas.

Ciclo	No. de Equipos	Particiones	Corrientes de Corte	Variables Iterativas
Básico	7	1	1	2
CBIE	11	3	3	8
GAX	16	3	7	18

Como se puede observar en la tabla, el orden de complejidad va aumentando desde el ciclo Básico con tan solo una corriente de corte y dos variables iterativas hasta el ciclo GAX con 7 corrientes de corte y 18 variables iterativas.

El detalle del criterio para elegir las particiones y las corrientes de corte, los equipos contenidos en cada partición y cuales son las variables iterativas se puede consultar en el Apéndice D.

5.5.2. Resolución de variables iterativas con métodos convencionales

Este experimento tiene como objetivo probar los métodos convencionales para la resolución de las variables iterativas en los CRAs. El número de variables iterativas para los ciclos Básico, CBIE y GAX son de 2, 8 y 18 respectivamente (ver Tabla 6.1).

La primer dificultad al querer probar estos métodos es la bien conocida dependencia de valores iniciales, para el ciclo Básico, proporcionar valores iniciales no representa un problema, pero para los ciclos CBIE y GAX puede resultar bastante complicado y más aún si no se cuenta con datos teóricos ni experimentales.

Es por ello, que en este primer experimento se probará la convergencia de los métodos convencionales bajo condiciones variantes, dejando la exploración con condiciones constantes para el tercer experimento con el híbrido Genético-Convencional.

Partiendo de una solución conocida para las variables iterativas para cada ciclo, se variarán las condiciones de operación de forma que la región factible así como la solución cambien. Con esto, también se pretende probar la capacidad de los métodos convencionales de moverse desde una solución conocida (que ahora será una aproximación) hacia la nueva solución.

En general, los CRAs tienen bastantes parámetros que pueden ser manipulados para cambiar las condiciones de operación de la planta, y puesto que este estudio no pretende ser exhaustivo y sólo se desea analizar la convergencia bajo condiciones variables, solo se variarán las corrientes externas tales como la temperatura del aire, agua y aceite térmico. Cada una de estas tres variables será modificada un cierta cantidad de grados centígrados, probando todas las posibles combinaciones de acuerdo a la siguiente tabla de verdad:

Tabla 5.3: Tabla de verdad para las modificaciones de las condiciones de operación.

Corrida	Taire	Taceite	Tagua
1, 8	=	=	+/-
2, 9	=	+/-	=
3, 10	=	+/-	+/-
4, 11	+/-	=	=
5, 12	+/-	=	+/-
6, 13	+/-	+/-	=
7, 14	+/-	+/-	+/-

El operador (=) implica que el valor de dicha variable tendrá el mismo valor que el de la raíz conocida, mientras que los operadores (+) y (-) incrementaran o decrementaran la variable señalada una cierta cantidad de grados centígrados de la raíz. Los valores de incremento y decremento a probar para cada unos de los ciclos se muestran la Tabla 5.4.

Tabla 5.4: Incrementos y decrementos en las temperaturas externas a probar por ciclo.

Ciclo	Incremento (+)	Decremento (-)
Básico	10	10
CBIE	10	10
GAX	5	5

Puesto que se probarán 3 métodos numéricos el número total de corridas por ciclo será de 42 (3*14) y por cada método será calculado el promedio y las desviación estándar del número de iteraciones, del tiempo de ejecución y de la calidad de las soluciones.

Finalmente, se desea probar si fijando los flujos másicos que entran o salen de las particiones se reduce la complejidad de la solución. Para ello se seleccionará el ciclo que una vez realizadas la simulaciones anteriores haya resultado con el menor número de puntos indeterminados (PI) y se realizarán nuevamente las mismas corridas para dicho ciclo. Los resultados de este último experimento son de gran importancia ya que parte de la propuesta de la metodología que se propondrá más adelante está fuertemente relacionada con los balances de materia.

5.5.3. Resolución de variables iterativas con algoritmos genéticos

La utilización de algoritmos genéticos para la resolución de variables iterativas de un CRA fue probada con éxito en [Pelayo, 2006]. En dicho trabajo se logró resolver un ciclo de complejidad GAX. Sin embargo, para lograrlo se tuvo que reducir la complejidad del modelo disminuyendo el número de las variables iterativas a través del aseguramiento de los balances de materia y la aplicación de conocimiento heurístico del sistema.

Ahora, se pretende probar el mismo algoritmo para resolver los ciclos en estudio, pero bajo el esquema tradicional Entradas-Salidas con todas las variables iterativas sin ningún tipo de ayuda. Se obtendrá para cada una de las variables iterativas el intervalo $[x_{min}, x_{max}]$ a explorar por el genético a través de las siguientes expresiones:

$$x_{min} = x_r(100 - ERP)/100 \tag{5.10}$$

$$x_{max} = x_r(100 + ERP)/100 \tag{5.11}$$

Donde x_r es la raíz conocida y ERP es el porcentaje de error. Se probarán los rangos de 1, 5 y 10 ERP en todas las variables iterativas de manera uniforme y se harán 10 corridas por cada uno de ellos. En total se realizarán 30 corridas con el Algoritmo Genético para cada uno de los ciclos a resolver, en donde los parámetros de control serán establecidos como sigue:

Tabla 5.5: Parámetros de control del Algoritmo Genético.

Tamaño de Población	32
No. Máximo de Generaciones	200
Probabilidad de Cruzar	0.8
Probabilidad de Mutar	0.01

Los operadores de cruce y mutación, la estrategia de selección y el criterio de reemplazo tentativos son los siguientes:

Tabla 5.6: Operadores del Algoritmo Genético.

Operador de Cruce	Real Plano
Operador de Mutación	Aleatorio
Estrategia de Selección	Torneo
Criterio de Reemplazo	Mejor Padre - Mejor Hijo

Finalmente, será calculado el promedio y las desviación estándar del número de iteraciones, del tiempo de ejecución y de la calidad de las soluciones.

5.5.4. Resolución de variables iterativas con el híbrido algoritmos genéticos-métodos convencionales

Este experimento tiene como objetivo probar la alternativa del híbrido Algoritmos Genéticos-Métodos Convencionales. La idea es utilizar el genético para explorar el espacio de búsqueda y obtener valores iniciales que sean alimentados posteriormente a los métodos convencionales los cuales serían los responsables de encontrar la solución del sistema.

Experimento 1

Para probar su desempeño para la exploración de manera preliminar, se utilizará el ciclo más simple, el Ciclo Básico, el cual solo tiene una corriente de corte (la corriente 1) con dos variables iterativas ($m1$ y $T1$). Puesto que este ciclo contiene solo dos variables iterativas, es posible ver su comportamiento en dos dimensiones y poder sacar conclusiones extrapolables a los ciclos restantes, cosa que sería muy difícil analizar para ciclos con número de variables mayor a tres. Antes de utilizar el genético para la exploración, se utilizarán los métodos convencionales para definir la región factible a explorar por el genético.

Partiendo de una solución conocida para la corriente 1, es decir conociendo los valores a priori de las variables iterativas $m1$ y $T1$, se irá alejando de la raíz de forma gradual a través de la siguiente expresión:

$$x_i = x_r (100 \pm ERP) / 100 \quad (5.12)$$

Donde x_i es una aproximación a la raíz x_r , ERP es el porcentaje de error. Se incrementará y decrementará el ERP uniformemente en todas las variables iterativas, hasta encontrar los límites inferior y superior de las variable (m y T) en donde los métodos convencionales no convergen o resulte ser un punto indeterminado (ver Figura 5.9).

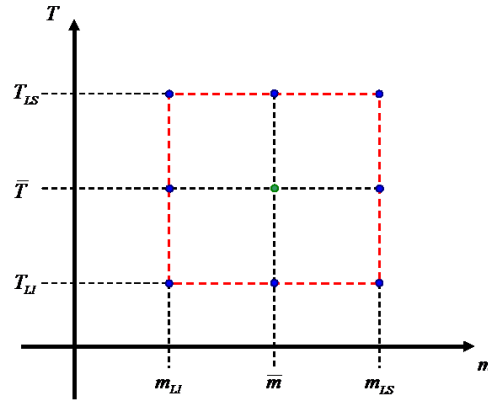


Figura 5.9: Exploración del Ciclo Básico.

Con lo anterior, obtendremos una aproximación del área factible del Ciclo Básico utilizando métodos convencionales. Con los límites inferior y superior de las variables encontrados, se definirán los intervalos de posibles valores (alelos) que puede tomar un gen para realizar la exploración con el algoritmo genético.

$$\begin{aligned} g_{i_{min}} &= x_{i_{LI}} \\ g_{i_{max}} &= x_{i_{LS}} \end{aligned} \tag{5.13}$$

Se realizarán 30 corridas con el Algoritmo Genético utilizando los mismos parámetros de control y operadores del experimento anterior. Los parámetros a medir serán nuevamente, el promedio y la desviación estándar del número de iteraciones, del tiempo de ejecución y de la calidad de las soluciones. La teoría del enfoque modular secuencial por definición supone que se especifican las variables de las corrientes de entrada, o sea las alimentaciones a los equipos, para posteriormente calcularse las corrientes de salida.

Experimento 2

La capacidad del genético para la generación de valores iniciales así como la convergencia de los métodos convencionales partiendo de los valores dados por el genético se probará con los ciclos CBIE y GAX.

Se realizarán una serie de corridas para obtener valores iniciales con diferente porcentaje de error con respecto a una raíz conocida, con el fin determinar los límites para ambos ciclos en los cuales el genético no es capaz de generar soluciones válidas. Para obtener los rangos a probar se utilizarán nuevamente las ecuaciones 5.10 y 5.11.

Posterior a esto, se seleccionarán 10 puntos en total de todas las corridas realizadas con el genético (con diferente grado de error) y serán utilizados como valores iniciales para probar los métodos convencionales.

Finalmente, será calculado el promedio y las desviación estándar del número de iteraciones, del tiempo de ejecución y de la calidad de las soluciones por cada método.

5.6. Análisis e interpretación de resultados

5.6.1. Resolución de variables iterativas con métodos convencionales

Los resultados para el Ciclo Básico se reportan en la Tabla 5.7, el número de cifras significativas fue de cuatro con un máximo de 60 iteraciones. De las catorce corridas que se hicieron, seis resultaron ser una raíz para las nuevas condiciones y el resto resultaron ser un punto indeterminado (PI), es decir un punto en el cual no es posible evaluar el flowsheet debido a la violación de alguna ley de la termodinámica o la física y por tanto no es posible arrancar la simulación. Debido a que este ciclo es bastante simple, se hubiera esperado que todas las corridas hubieran convergido, sin embargo esto no fue así. Aquí se puede notar el efecto de las especificaciones de diseño, ya que al momento de cambiar las condiciones de entrada dichas especificaciones provocaron que se violarán las leyes y restricciones impuestas.

Tabla 5.7: Resultados para el Ciclo Básico utilizando métodos convencionales.

Sustitución Directa / Wegstein / Broyden		
Corridas	Convergencia	Iteraciones
1, 4, 5, 8, 11, 12	SI	1
2, 3, 6, 7, 9, 10, 13, 14	PI	-

La convergencia, el número de iteraciones por corrida para el CBIE para cada unos de los métodos que se probaron se muestran en la Tabla 5.8 . El número de cifras significativas fue de cuatro con un máximo inicial de 60 iteraciones, el cual se tuvo que aumentar a 250 para cerciorarse de la divergencia.

Tabla 5.8: Resultados para el CBIE utilizando métodos convencionales.

Corrida	Sustitución Directa		Wegstein		Broyden	
	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.
1	SI	1	SI	1	SI	1
2	NO	250	NO - PI	12	NO - PI	3
3	NO	250	NO - PI	12	NO - PI	3
4	NO - PI	240	NO - PI	48	NO - PI	22
5	NC - PI	240	NO - PI	48	NO - PI	22
6	NO	250	NO - PI	15	NO - PI	3
7	NO	250	NO - PI	12	NO - PI	2
8	SI	1	SI	1	SI	1
9	NO - PI	174	NO	60	NO - PI	2
10	NO - PI	174	NO	60	NO - PI	2
11	PI	1	-	-	-	-
12	PI	1	-	-	-	-
13	PI	1	-	-	-	-
14	PI	1	-	-	-	-

Como se puede observar en dicha tabla, las corridas 1 y 8 convergieron en la primera iteración, esto quiere decir que el punto de inicio el cual era una solución para unas condiciones base también resultó ser una solución para las nuevas condiciones. Lo anterior se debe, a que el sistema se pudo ajustar a las variaciones realizadas a través de las corrientes externas sin modificar las corrientes internas.

Para las corridas desde la 11 a la 14 resultó que al momento de cambiar las condiciones para esas corridas el punto inicial el cual como ya se dijo era un solución para las condiciones base se convirtió en un punto indeterminado (PI). Las celdas con el signo (-) indican que la corrida no fue realizada, esto debido a que los valores iniciales para dicha corrida resultaron ser un punto indeterminado, esta notación será utilizada para el resto de las tablas.

Para las corridas restantes, ninguno de los métodos probados logró la convergencia, Sustitución Directa fue el que se comportó más estable, solo dos corridas terminaron en un punto indeterminado en la iteración 240 de las 250 que se establecieron como limite, las seis corridas restantes divergieron. Las mismas corridas con los métodos de Wegstein y Broyden terminaron todas en un punto indeterminado, siendo Broyden el más sensible a esto, cayendo en esta situación muy rápido en las primeras iteraciones. En relación con el ciclo anterior, vemos que para el CBIE el número de corridas que resultaron ser un punto indeterminado fue menor, esto debido a que las nuevas condiciones aunado a las especificaciones de diseño no provocaron violaciones.

Los resultados obtenidos para el Ciclo GAX, son los que se muestran en la Tabla 5.9. El número de cifras significativas fue de cuatro con un máximo de 60 iteraciones. Como se puede observar, 8 de las 14 corridas no pudieron siquiera arrancar debido a que el punto inicial resultó indeterminado al momento de cambiar las condiciones, aquí

se nota más marcada esta situación, lo cual tiene bastante sentido ya que el ciclo es más complejo. Las corridas 1 y 8 fueron las únicas que convergieron siendo Broyden quien más pronto lo hizo, luego le sigue Wegstein y Sustitución. De acuerdo a la literatura, se hubiera esperado que Wegstein convergiera más rápido que Sustitución, sin embargo para este caso no fue así.

Tabla 5.9: Resultados para el Ciclo GAX utilizando métodos convencionales.

Corrida	Sustitución Directa		Wegstein		Broyden	
	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.
1	SI	27	NO - PI	47	SI	7
2	NO - PI	11	NO - PI	5	NO - PI	3
3	NO - PI	11	NO - PI	5	NO - PI	3
4	PI	1	-	-	-	-
5	PI	1	-	-	-	-
6	PI	1	-	-	-	-
7	PI	1	-	-	-	-
8	SI	27	SI	47	SI	7
9	NO - PI	4	NO - PI	3	NO - PI	3
10	NO - PI	4	NO - PI	3	NO - PI	2
11	PI	1	-	-	-	-
12	PI	1	-	-	-	-
13	PI	1	-	-	-	-
14	PI	1	-	-	-	-

Para el último experimento de esta sección, en el cual se quería probar si al momento de fijar ciertas masas que nos aseguren que la convergencia se dirija hacia una sola raíz, reduce o no la complejidad de la solución. De acuerdo a los resultados obtenidos previamente, se seleccionó el CBIE ya que fue el que menos se vio afectado por los cambios de las nuevas condiciones. Para la selección de cuales masas fijar, nos apoyaremos en el diagrama de flujo de información (DFI) del CBIE mostrado en la Figura 5.10.

Como se puede observar en la parte superior de la figura, el ciclo fue descompuesto en 3 particiones nombradas arbitrariamente como A, B y C. En la parte inferior, se muestran los equipos contenidos dentro de cada partición así como las interconexiones entre ellos y entre las particiones.

El primer flujo másico que se desea fijar es el de la corriente 1, debido a que es una corriente de corte a nivel sistema de manera que en cada iteración se tiene que estar suponiendo un valor para las m_1 y T_1 . El hecho de que m_1 esté variando por cada iteración complica la convergencia ya que la partición C intenta converger al valor supuesto de m_1 el cual es un punto flotante. De manera que si se fija este flujo másico, la partición C siempre convergerá a un único valor de m_1 y la convergencia se debiera resultar beneficiada.

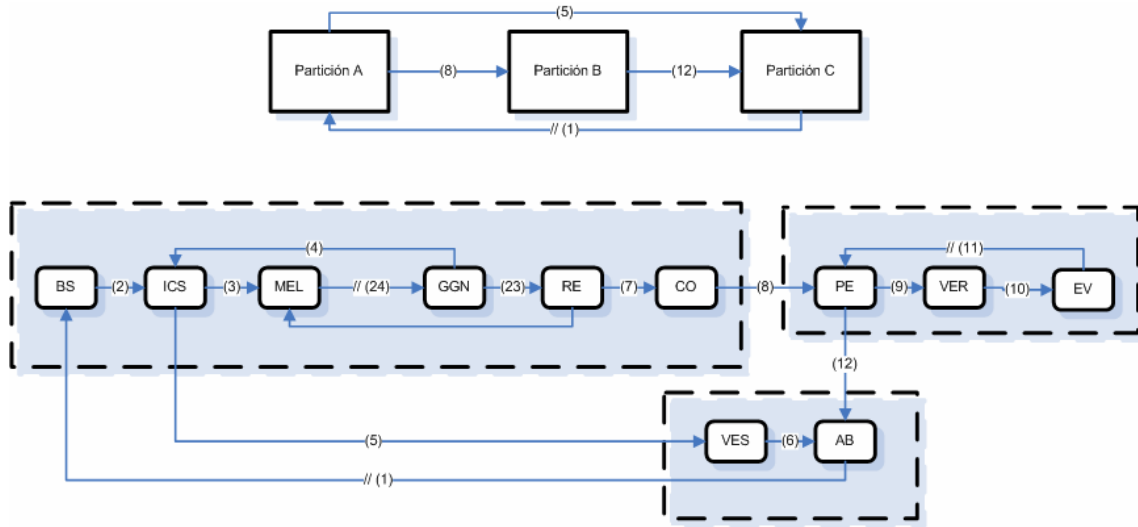


Figura 5.10: Diagrama de flujo de información del CBIE.

Fijando el valor del flujo másico (m) de la corriente (1), se obtuvieron los resultados que se reportan en la Tabla 5.10, el número de cifras significativas fue de cinco y un máximo de 250 iteraciones. Las corridas 1 y 8 así como las corridas desde la 11 a la 14 no se incluyeron ya que eran puntos raíz y puntos indeterminados respectivamente. Podemos notar ahora que para el caso de Sustitución Directa se logró convergencia de todas las corridas, mientras que para Wegstein y Broyden convergieron en solo 2 de las 8 corridas. Como se puede observar se pueden identificar tres pares de corridas requirieron el mismo número de iteraciones para converger (2, 3), (4, 5) y (9, 10). Haciendo una revisión de las raíces encontradas así como los valores generados en cada iteración por cada uno de los métodos, se encontró que las raíces por cada par de corridas eran las mismas al igual que los valores generadores por iteración por método. Lo anterior implica que las perturbaciones provocadas por el cambio de condiciones fueron las mismas por cada par de corridas. Nuevamente podemos notar que Broyden cae en la no convergencia por punto indeterminado muy rápido en las primeras iteraciones, sin embargo también fue el que convergió más rápido, en el par de corridas (4, 5), que el método de Sustitución Directa. Se inspeccionaron las raíces encontradas por los distintos métodos para los pares de corridas (2, 3) y (4, 5). Para el primer par de corridas (2,3), la raíz encontrada por Sustitución fue diferente que la encontrada por Wegstein, mientras que para el segundo par de corridas (4, 5) la raíz encontrada por Sustitución y Broyden resultó ser la misma.

Tabla 5.10: Resultados para el CBIE con m_1 fija

Corrida	Sustitución		Wegstein		Broyden	
	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.
2	SI	69	SI	235	NO-PI	2
3	SI	69	SI	235	NO-PI	2
4	SI	47	NO-PI	152	SI	17
5	SI	47	NO-PI	152	SI	17
6	SI	73	NO-PI	44	NO-PI	2
7	SI	71	NO-PI	29	NO-PI	2
9	SI	98	NO-PI	43	NO-PI	4
10	SI	98	NO-PI	43	NO-PI	4

El segundo y último flujo másico que se deseaba fijar, es el de aquella corriente de corte interna que más influencia tuviera en la convergencia. Para determinar cual sería dicha corriente de corte se requiere hacer un análisis de las corridas fijando el flujo másico de la corriente 1. De manera que se inspeccionaron cada una de las variables iterativas para determinar cuál de todas ellas o cuáles son las que tienen más influencia en la convergencia. Como resultado de dicha inspección se obtuvo, que el flujo másico de la corriente 11 (m_{11}) fue la variable que más variaciones presentó y por tanto fue la variable seleccionada para fijar en el siguiente experimento junto con m_1 , siendo el flujo másico de la corriente 24 (m_{24}) la que le siguió en orden de variación. La figura 5.11 muestra la tendencia del flujo másico de la corriente 11 (m_{11}) para las corridas 4, 6, 7 y 9. Como se puede observar, el error para dicha variable osciló entre 0 y 0.35 para últimas tres corridas, siendo en la corrida 4, donde menos variación presentó (prácticamente se mantuvo en cero).

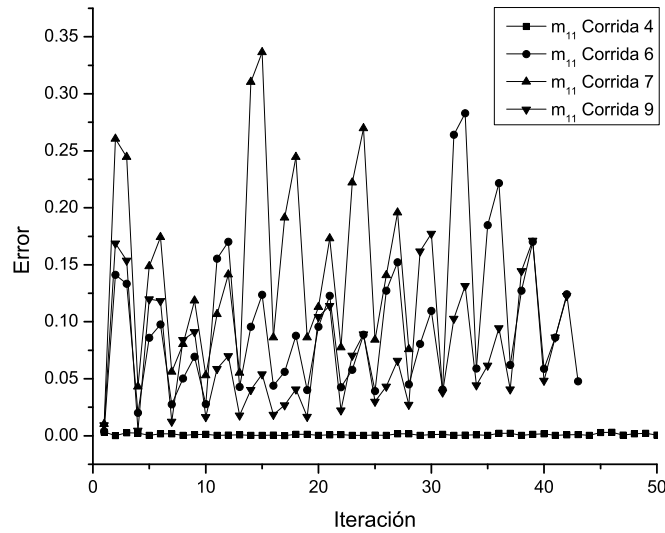


Figura 5.11: Resultado para el CBIE utilizando métodos convencionales con m_1 fija.

Finalmente, los resultados obtenidos fijando los flujos másicos de las corrientes 1 y 11 son los que se muestran en la Tabla 5.11, nuevamente no se incluyeron las corridas 1, 8 y 11 a 14 por las razones comentadas previamente.

Tabla 5.11: Resultado para el CBIE utilizando métodos convencionales con m_1 y m_{11} fijas.

Corrida	Sustitución Directa		Wegstein		Broyden	
	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.
2	SI	13	SI	14	NC-PI	3
3	SI	13	SI	14	NC-PI	3
4	SI	9	SI	10	NC-PI	30
5	SI	9	SI	10	NC-PI	30
6	SI	13	SI	12	NC-PI	3
7	SI	13	SI	16	NC-PI	3
9	SI	14	SI	13	NC-PI	5
10	SI	14	SI	13	NC-PI	5

Se puede observar ahora que también Wegstein logró convergencia en todas las corridas y que el número de iteraciones requeridas disminuyó tanto para Wegstein como para Sustitución. Se observa también que para algunas corridas Wegstein es más rápido que sustitución como se hubiera esperado que fuera en todas. Por otro lado, Broyden fue el más afectado por la fijación de las masas ya que no logró convergencia en ninguna

de la corridas cayendo rápidamente en puntos indeterminados con excepción del par de corridas (4, 5).

5.6.2. Resolución de variables iterativas con algoritmos genéticos

Los resultados de las 30 corridas para el CBIE utilizando algoritmos genéticos son los que se reportan en la Tabla 5.12. Como se puede observar se probaron los rangos con ERP de 1, 5 y 10. Como era de esperarse, los rangos con ERP más pequeños son los que alcanzaron aptitudes más altas y por ende ERPs más bajos. En cuanto al número de generaciones hasta este momento no se ve que los rangos con ERP más grandes requieran más generaciones para converger o que tarden más tiempo. En promedio, el ERP de la solución es aceptable con un valor de 0.27, se puede decir entonces que el genético para los rangos probados si resuelve el CBIE.

Tabla 5.12: Resultados de CBIE utilizando algoritmos genéticos.

Corridas	ERP de Rangos	Generaciones	Tiempo	Aptitud	ERP de Solución
1-10	1	28.5	00:30.000	0.998812073	0.118792653
11-20	5	19.6	00:19.756	0.995735788	0.426421165
21-30	10	24.8	00:25.574	0.991379654	0.862034559

	Promedio	Desviación Estándar
Generaciones	24.05	8.299405975
Tiempo (seg)	00:24.878	00:09.237
Aptitud	0.997273931	0.00200703
ERP	0.272606909	0.373453001

La Figura 5.12 muestra la tendencia de la aptitud del mejor individuo a lo largo de las generaciones para una de las corridas de los tres rangos de ERP probados para el CBIE, dichas corridas se eligieron arbitrariamente.

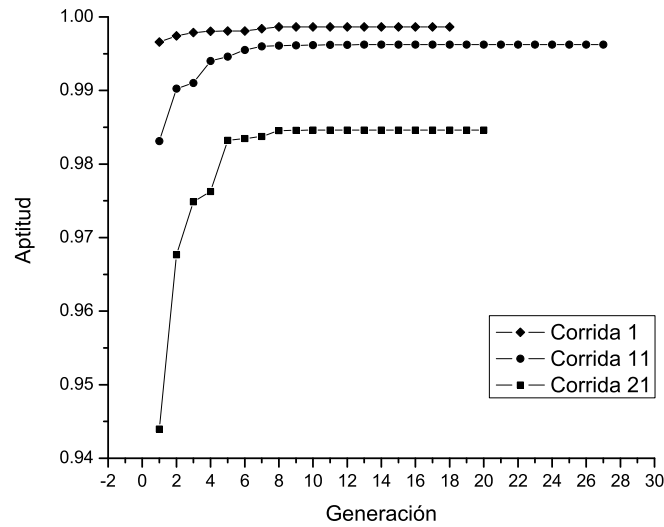


Figura 5.12: Tendencia de la aptitud del mejor individuo para el CBIE.

Se puede observar como para las corridas 1 y 11 la aptitud del mejor individuo de la primera generación son mayores que 0.98 el cual en términos de ERP es igual a 2 y que los valores de aptitud máximas alcanzadas son mayores de 0.995 (ERP de 0.5). En cambio la corrida 21, inicio con una aptitud poco mayor a 0.94 (ERP de 6) y la aptitud del mejor individuo de todas las generaciones apenas sobrepasa el mejor individuo de la primera generación de la corrida 11.

Para el ciclo GAX, los resultados de las 30 corridas son los que se reportan en la Tabla 5.13. Los rangos de ERP que se probaron fueron los mismos que para el CBIE. De igual manera que en ciclo anterior, los rangos con ERP más pequeño son los que alcanzaron aptitudes más altas y de nuevo no se ve que los rangos con ERP más grandes requieran más generaciones para converger o que tarden más tiempo. Se puede observar que las aptitudes obtenidas fueron mucho más bajas que las del ciclo anterior, disminuyendo notoriamente conforme se aumenta el ERP en los rangos. Para un ERP de 5 el ERP de la solución es de mas del 50% y el ERP promedio es de 35 aproximadamente, lo cual nos indica que el genético, bajo este esquema, no resuelve un ciclo de esta complejidad. Esto también era de esperarse ya que el número de equipos, recirculaciones y variables iterativas de este ciclo es mucho mayor que las del ciclo anterior.

Tabla 5.13: Resultados del Ciclo GAX utilizando algoritmos genéticos.

Corridas	ERP de Rangos	Generaciones	Tiempo	Aptitud	ERP de Solución
1-10	1	19.4	00:30.008	0.998292589	0.170741081
11-20	5	24.1	00:39.131	0.988141996	1.185800433
21-30	10	17.6	00:24.245	0.387549847	61.24501526

	Promedio	Desviación Estándar
Generaciones	20.36666667	20.86718559
Tiempo	00:31.128	00:13.495
Aptitud	0.791328144	0.16792069
ERP	20.86718559	34.9719092

La Figura 5.13 muestra la tendencia de la aptitud del mejor individuo a lo largo de las generaciones para una de las corridas de los tres rangos de ERP probados para el ciclo GAX, las cuales de nuevo se eligieron arbitrariamente. Cabe mencionar que las raíces encontradas en cada corrida en su mayoría fueron diferentes a la raíz con la cual se establecieron los rangos.

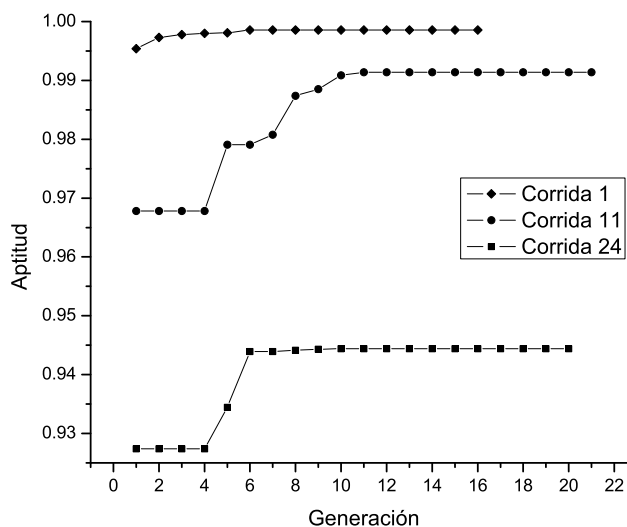


Figura 5.13: Tendencia de la aptitud del mejor individuo para el ciclo GAX.

5.6.3. Resolución de variables iterativas con el híbrido algoritmos genéticos-métodos convencionales

Experimento 1

Los resultados obtenidos para la definición de la zona factible para el Ciclo Básico utilizando métodos convencionales se pueden visualizar en las figuras 5.14 y 5.15.

La Figura 5.14, muestra los puntos (m_1, T_1) explorados, 80 en total, los cuales resultaron todos ellos ser una solución para el ciclo básico. En realidad se hicieron 240 corridas, 80 por método, pero debido a que los puntos explorados resultaron ser todos una raíz, solo se reportan los resultados obtenidos con el método de sustitución.

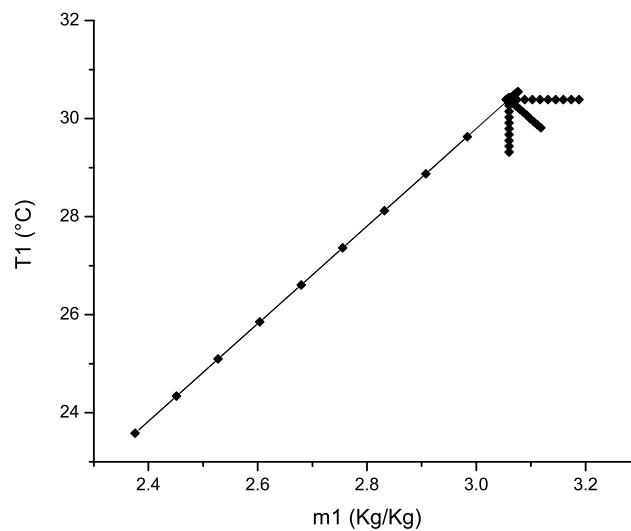


Figura 5.14: m_1 vs T_1 .

La Figura 5.15, muestra una aproximación del espacio de la región factible, donde para este ciclo en particular los puntos contenidos dentro de esta región resultaron todos ellos ser una solución.

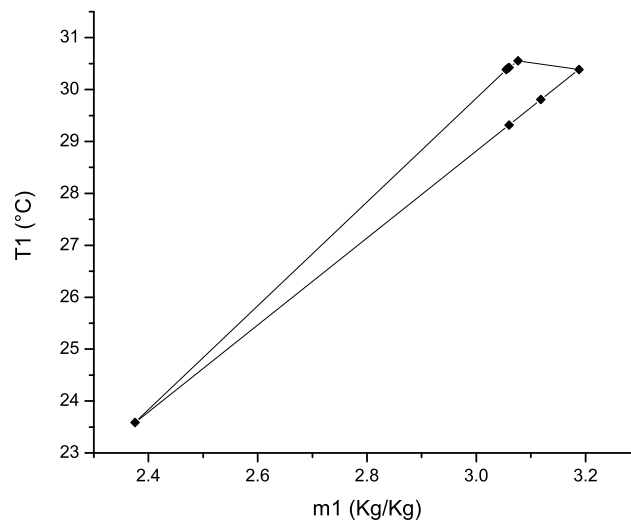


Figura 5.15: Aproximación de región factible del Ciclo Básico.

No se reporta ningún tipo de parámetro (promedio, desviación, etc) debido a que todos los puntos dados convergieron en la primera iteración y por lo tanto no aportan mayor información.

En la Figura 5.16, se muestran en color rosa, las soluciones encontradas a lo largo de las 30 corridas utilizando el algoritmo genético y en azul la aproximación del espacio de soluciones para el Ciclo Básico utilizando métodos convencionales. Como se puede apreciar, el algoritmo genético encontró soluciones fuera de la región definida por los métodos convencionales, mostrando su capacidad y superioridad para la exploración del espacio de soluciones. Esto de antemano se esperaba, ya que los métodos tradicionales implementados son de convergencia local mientras que el algoritmo genético es de convergencia global.

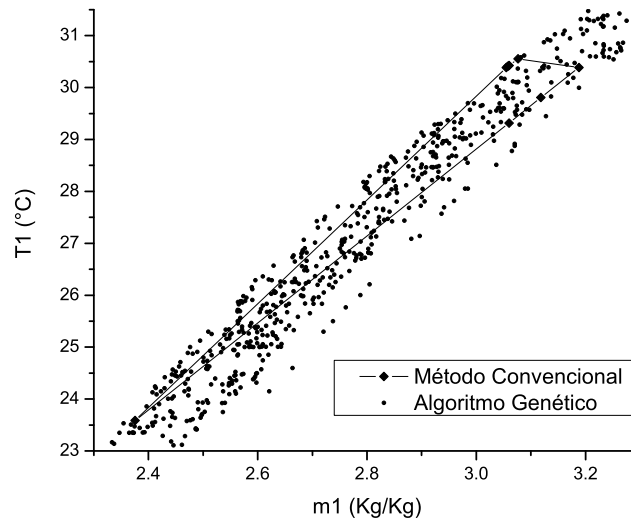


Figura 5.16: Exploración del Ciclo Básico con algoritmos genéticos.

El promedio y la desviación estándar del número de generaciones, tiempo y la aptitud (calidad) de las 30 corridas con el algoritmo genético, son los que se reportan en la Tabla 5.14.

Tabla 5.14: Parámetros calculados de las corridas con el genético.

Parámetro	Promedio	Desviación Estándar
Generaciones	4.90	1.90
Tiempo (seg)	00:02.71	00:01.67
Calidad	0.999999899	1.47794E-07

Experimento 2

El primer paso para llevar a cabo este experimento, es encontrar el ERP máximo para el cual el algoritmo genético es capaz de generar individuos válidos en la primera generación.

El número de individuos válidos promedio generados en la primera generación conforme se fue variando el ERP para los ciclos CBIE y GAX son los que se muestran en la Figura 5.17.

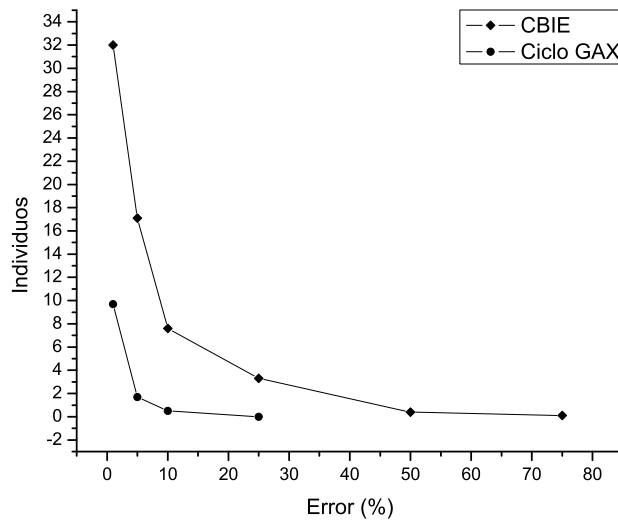


Figura 5.17: Individuos válidos en la 1ra generación vs ERP.

Como se puede observar en la figura, para el ciclo CBIE el rango de ERP para el cual el genético ya no es capaz de generar individuos válidos es bastante bueno de 75, mientras que para el ciclo GAX disminuye notablemente siendo tan solo de 25. Esto reafirma lo obtenido en los experimentos anteriores y hace evidente la complejidad del ciclo GAX.

Otro parámetro importante a medir para el genético es la mejor aptitud promedio lograda para cada ERP (ver Figura 5.18).

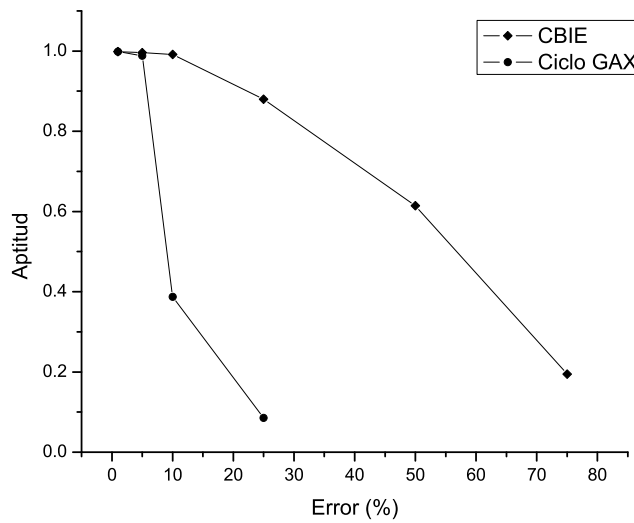


Figura 5.18: Mejor aptitud vs ERP.

De igual manera, conforme aumenta el ERP en los rangos la aptitud del mejor individuo cae drásticamente. Por cada uno de los valores ERP se hicieron 10 corridas, en total 60 para el CBIE y 40 para el Ciclo GAX, el número de cifras significativas fue de cuatro con un máximo de 60 iteraciones para ambos ciclos.

De estas corridas por cada ciclo se seleccionaron 10 individuos con diferente aptitud para ser tomados como valores iniciales para los métodos tradicionales. La aptitud y el ERP de dichas corridas para el ciclo CBIE y GAX son las que se muestran en la tabla 5.15. Nótese que para el ciclo GAX los ERP de los valores iniciales probados son más bajos que los del CBIE, esto se decidió que fuera así principalmente por la complejidad del ciclo.

Tabla 5.15: Soluciones del genético seleccionadas como valores iniciales para los métodos convencionales.

Corrida	CBIE		Ciclo GAX	
	Aptitud	ERP	Aptitud	ERP
1	0.99913919	0.086081028	0.998733938	0.126606226
2	0.998489559	0.15104413	0.997878671	0.212132931
3	0.996650696	0.33493042	0.992895424	0.710457563
4	0.99416548	0.583451986	0.991405189	0.859481096
5	0.992789805	0.721019506	0.988919795	1.108020544
6	0.972545445	2.745455503	0.9862445	1.375550032
7	0.959265411	4.07345891	0.979961634	2.003836632
8	0.792359948	20.76400518	0.964880586	3.511941433
9	0.736415386	26.35846138	0.944411755	5.558824539
10	0.512772083	48.72279167	0.856353164	14.36468363

Los resultados obtenidos de las 10 corridas por método para el CBIE son los que se reportan en la Tabla 5.16.

Tabla 5.16: Resultados para el CBIE con el híbrido Algoritmos Genéticos-Métodos Convencionales.

Corrida	Sustitución Directa		Wegstein		Broyden	
	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.
1	NO	60	NO	60	NO - PI	20
2	NO	60	NO	60	NO - PI	7
3	NO	60	NO	60	NO - PI	10
4	NO	60	NO - PI	51	NO - PI	19
5	NO	60	NO - PI	40	NO - PI	10
6	NO	60	NO	60	NO - PI	6
7	NO	60	NO - PI	11	NO - PI	6
8	NO - PI	3	NO - PI	2	NO - PI	2
9	NO - PI	2	NO - PI	1	NO - PI	1
10	NO - PI	2	NO - PI	1	NO - PI	1

Nuevamente se observa que los métodos convencionales no resuelven el ciclo CBIE, a pesar de los valores iniciales proporcionados por el genético. Sustitución Directa siguió siendo el más estable y Broyden el que más fácil cae en puntos indeterminados. Se puede observar que para las últimas corridas 8, 9 y 10 las cuales tenían un ERP más grande fueron las que terminaron casi de inmediato en un punto indeterminado en todos los métodos.

La Figura 5.20 muestra el comportamiento de la convergencia de la corrida 5 para los tres métodos. Sustitución Directa (en azul) estuvo oscilando suavemente a lo largo de las 60 iteraciones sin lograr convergencia. Para el caso de Wegstein la oscilación se presenta más marcada a partir de la corrida 10 hasta que diverge por completo en un punto indeterminado en la corrida 40. Finalmente, Broyden diverge rápidamente y cae en un punto indeterminado en la corrida 10. Hasta este momento, podemos decir que los resultados aplicando el genético son mejor opción que el híbrido Algoritmos Genéticos-Métodos Convencionales.

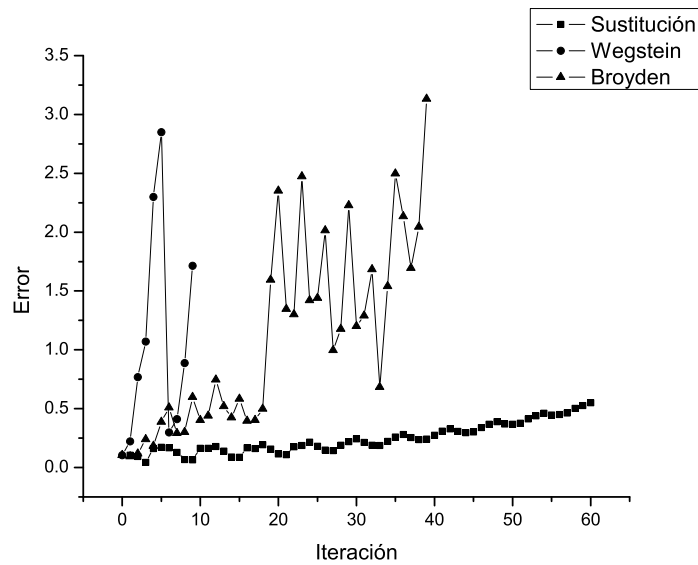


Figura 5.19: Comportamiento de convergencia del CBIE con Métodos Convencionales.

Los resultados obtenidos de las 10 corridas por método para el Ciclo GAX son los que se muestran en la Tabla 5.17. Para este ciclo, todos los métodos divergieron rápidamente en un punto indeterminado, con un número de iteraciones casi homogéneo. Definitivamente se puede ver que el híbrido Algoritmos Genéticos-Métodos Convencionales no es capaz por sí solo de resolver un ciclo de complejidad GAX.

Tabla 5.17: Resultados para el ciclo GAX con el híbrido Algoritmos Genéticos-Métodos Convencionales.

Corrida	Sustitución Directa		Wegstein		Broyden	
	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.	Convergencia	Iters.
1	NO - PI	15	NO - PI	7	NO - PI	10
2	NO - PI	15	NO - PI	13	NO - PI	19
3	NO - PI	5	NO - PI	4	NO - PI	2
4	NO - PI	5	NO - PI	4	NO - PI	4
5	NO - PI	3	NO - PI	2	NO - PI	2
6	NO - PI	3	NO - PI	2	NO - PI	2
7	NO - PI	6	NO - PI	4	NO - PI	5
8	NO - PI	6	NO - PI	5	NO - PI	3
9	NO - PI	2	NO - PI	1	NO - PI	1
10	NO - PI	2	NO - PI	1	NO - PI	1

La figura 5.20 muestra el comportamiento de la convergencia de la corrida 1 para los

tres métodos. Podemos observar claramente como a pesar de que para cada iteración el error esta por debajo de 0.25, los tres métodos terminan en un punto indeterminado rápidamente. Lo anterior da una idea de lo sensible que son las variables iterativas de un ciclo GAX a las variaciones, haciendo que el problema se vuelva intratable por los métodos convencionales.

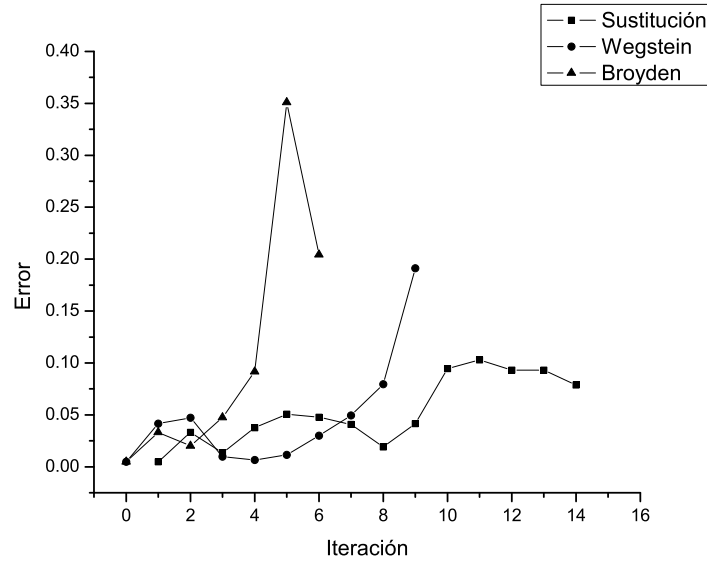


Figura 5.20: Comportamiento de convergencia del ciclo GAX con métodos convencionales.

5.7. Conclusiones

5.7.1. Conclusiones específicas

Las conclusiones para la resolución de variables iterativas con Métodos Convencionales bajo el esquema entradas-salidas son las siguientes:

1. Se puede concluir que para esta implementación en particular, ninguno de los métodos convencionales bajo el esquema tradicional entradas-salidas es capaz de resolver un ciclo CRA.
2. El método de Sustitución Directa es el método que hasta el momento resultó mejor debido a las inestabilidades de los otros métodos provocada principalmente por la sensibilidad de las variables a caer en un punto indeterminado.
3. Al momento de fijar ciertas masas estratégicas en las particiones se redujo la complejidad del problema y fue posible resolver el CBIE con los métodos de Sustitución y Wegstein.

Las conclusiones para la resolución de variables iterativas con Algoritmos Genéticos bajo el esquema entradas-salidas son las siguientes:

1. El algoritmo genético encontró soluciones fuera de la región definida por los métodos convencionales para el ciclo Básico, mostrando su capacidad y superioridad para la exploración del espacio de soluciones.
2. Bajo el esquema entradas-salidas el algoritmo genético es capaz de resolver ciclos de complejidad CBIE, pero no de complejidad GAX.
3. Existen múltiples raíces que satisfacen un mismo conjunto de condiciones de operación de un ciclo de refrigeración por absorción.

Las conclusiones para la resolución de variables iterativas con el Híbrido Algoritmos Genéticos-Métodos Convencionales bajo el esquema entradas-salidas son las siguientes:

1. El algoritmo genético es una buena opción para la generación de valores iniciales cuando el número de variables iterativas no es muy grande. Conforme se va alejando más el ERP en los rangos, el genético ya no es capaz de generar individuos válidos para un ciclo de complejidad GAX.
2. Dado los valores iniciales obtenidos con el genético, los métodos convencionales no son capaces de converger un ciclo de complejidad CBIE.
3. El híbrido para este enfoque no parece ser una buena alternativa debido al límite del genético para generar valores iniciales cuando el número de variables es grande y más aún por el bajo desempeño que mostraron los métodos convencionales.

5.7.2. Conclusiones generales

1. Para esta implementación en particular, utilizando el enfoque modular secuencial con el esquema tradicional entradas-salidas, los métodos convencionales ni el algoritmo genético ni la propuesta del Híbrido son capaces de resolver numéricamente un ciclo de refrigeración por absorción de complejidad GAX.
2. Para los ciclos con complejidad menor al GAX, el algoritmo genético aplicado de forma individual es mejor opción que los métodos convencionales y que la propuesta del Híbrido.

Capítulo 6

Definición y evaluación de metodología propuesta

6.1. Definición de metodología propuesta

De la evaluación del enfoque modular secuencial bajo el esquema entradas-salidas, se obtuvo que ninguno de los métodos probados fue capaz de resolver los tres ciclos planteados. El ciclo con mayor complejidad que se resolvió fue el CBIE, y fue resuelto de dos formas distintas y con dos distintos métodos. La primera forma fue utilizando el algoritmo genético para resolver todas las variables iterativas y la segunda forma fue utilizando métodos convencionales pero fijando ciertos flujos másicos. También se pudo haber probado el algoritmo genético de la misma forma que el convencional con la reducción de masas, pero lo que se pretendía era probar precisamente si al fijar las masas la complejidad del problema disminuye.

Para un ciclo como el CBIE, el cual no tiene tantas corrientes de recirculación fue fácil establecer qué masas resultaban convenientes fijar de forma que la solución se dirigiera a una raíz con un cierto flujo másico total de operación del sistema. Para un ciclo como el GAX esta parte no es tan sencilla, sin embargo, es posible a través de la asignación de los grados de libertad.

La ventaja del esquema tradicional E-S, es que el flujo de información del flowsheet coincide con el flujo de información del proceso real. Sin embargo, el precio a pagar es que se impone cierta rigidez que sacrifica, según sea el caso, la posibilidad de encontrar asignaciones tales que minimicen el tiempo de cómputo (secuencias acíclicas de resolución del sistema de ecuaciones asociado, menor número de variables iterativas).

Con el fin de dejar claro lo anteriormente explicado, se tomará como ejemplo el diagrama de flujo de información (DFI) de la columna Generador-Rectificar del Ciclo GAX compuesta por los equipos GGN, GEN, GHX, MEL, MEV, SEP y RE (ver Figura 6.1). Los equipos MEL y MEV se representaron como un solo equipo llamado MZ, esto con el propósito de hacer más legible el flujo de información a través de la columna.

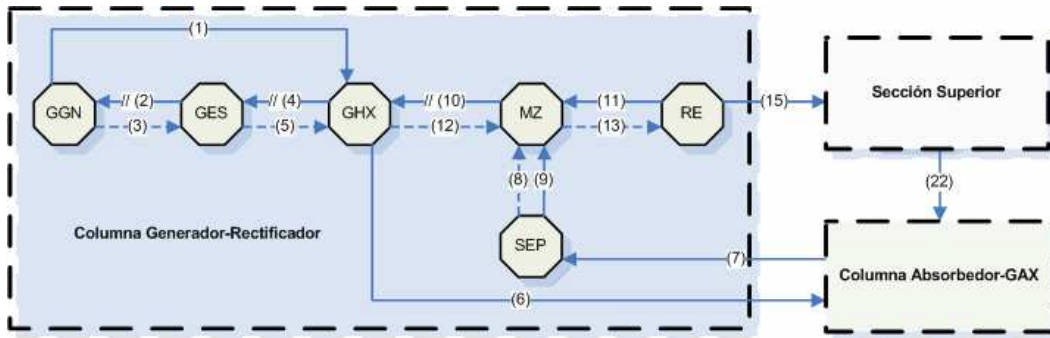


Figura 6.1: DFI columna generador-rectificador del ciclo GAX.

Bajo el esquema tradicional entradas-salidas como ya se dijo, la secuencia de cálculo coincide con el flujo de información del proceso. Podemos observar en la Figura 6.1, que la columna Generador-Rectificador contiene tres corrientes de corte, el criterio para establecer dichas corriente de corte no es importante en este momento. La secuencia para la columna Generador-Rectificador convergiendo simultáneamente las corriente de corte y con la suposición que todas la corrientes son saturadas con excepción de la corriente (7) y (10), sería como sigue:

1. Suponer los valores de las variables iterativas de las corriente (2), (4) y (10) .
 $(m_{2Sup}, T_{2Sup}, m_{4Sup}, T_{4Sup}, m_{10Sup} \text{ y } T_{10Sup})$
2. Partiendo del GGN y dados los valores supuestos de m_{2Sup} y T_{2Sup} , calcular los valores de las variables de las corrientes (1) y (3).
 $(m_1, T_1, m_3 \text{ y } T_3)$
3. Siguiendo con el GES y dados los valores calculados de m_3 y T_3 así como los valores supuestos de m_{4Sup} y T_{4Sup} , calcular los valores de las variables de las corrientes (2) y (5).
 $(m_2, T_2, m_5 \text{ y } T_5)$
4. Siguiendo con el GHX y dados lo valores calculados de m_1, T_1, m_5 y T_5 así como los valores supuestos de m_{10Sup} y T_{10Sup} , calcular los valores de las variables de las corrientes (4) , (6) y (12).
 $(m_4, T_4, m_6, x_6, T_6, m_{12} \text{ y } T_{12})$
5. Siguiendo con el SEP y dados los valores de m_7, z_7 y T_7 , calcular los valores de la variables de las corrientes (8) y (9).
 $(m_8, T_8, m_9 \text{ y } T_9)$
6. Continuando con el MZ y dados los valores calculados de m_8, T_8, m_{12} y T_{12} , calcular los valores de la variables de la corriente (13).
 $(m_{13} \text{ y } T_{13})$
 Nótese que para este paso se está utilizando el MZ solo para calcular las corrientes de vapor (punteadas), internamente es el MEV quien las calcula.

- Utilizando el RE y dados los valores calculados de m_{13} y T_{13} , calcular los valores de la variables de las corrientes (11) y (15).

$$(m_{11}, T_{11}, m_{15} \text{ y } T_{15})$$

- Utilizando de nuevo el MZ y dados los valores calculados de m_9 , T_9 , m_{11} y T_{11} , obtener los valores de la variables de la corriente (10) calculadas internamente por el MEL.

$$(m_{10} \text{ y } T_{10})$$

- Evaluar si se cumplen las siguiente expresiones:

$$\begin{aligned} (m_2 - m_{2Sup})/m_2 &= 0 \\ (T_2 - T_{2Sup})/T_2 &= 0 \\ (m_4 - m_{4Sup})/m_4 &= 0 \\ (T_4 - T_{4Sup})/T_4 &= 0 \\ (m_{10} - m_{10Sup})/m_{10} &= 0 \\ (T_{10} - T_{10Sup})/T_{10} &= 0 \end{aligned}$$

En caso de que si se cumplan continuar al paso 10, caso contrario volver al paso 1.

- Fin de los cálculos.

Ahora considérese, la secuencia acíclica para la misma columna mostrada en la Figura 6.2, la cual como se puede apreciar no coincide con el flujo de información del proceso real.

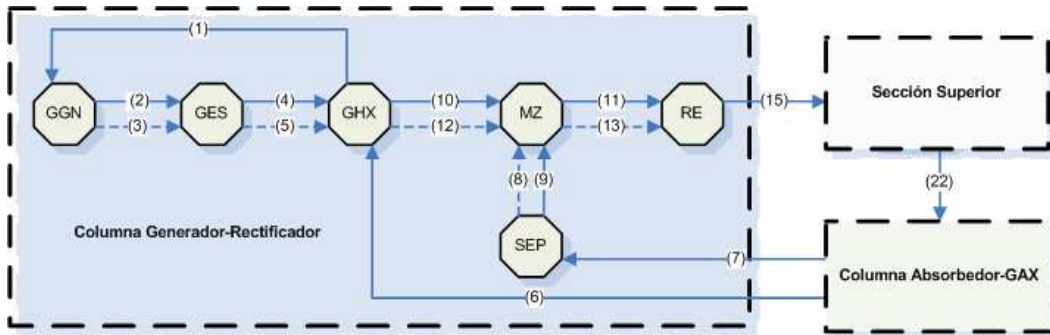


Figura 6.2: Secuencia acíclica de la columna generador-rectificador del ciclo GAX.

La obtención de esta secuencia de cálculo fue posible gracias a la libre asignación de los grados de libertad sin la rigidez que impone el esquema E-S. Para esta secuencia de cálculo el conjunto de pasos a seguir son los siguientes:

- Proporcionar el valor de las variables de las corrientes de entrada (6) y (7) .

$$(m_6, x_6, T_6, m_7, z_7 \text{ y } T_7)$$

2. Calcular el valor de las variables de la corriente (1) a través de las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} m_1 &= m_6 \\ x_1 &= x_6 \\ T_1 &= f(x_1, p_1) \end{aligned}$$

Nota: p_1 es conocida, es la presión con la cual opera la columna.

3. Partiendo del GGN y conocidos los valores supuestos de m_1 y T_1 , calcular los valores de las variables de las corrientes (2) y (3).
(m_2, T_2, m_3 y T_3)
4. Siguiendo con el GES y dados los valores calculados de m_2, T_2, m_3 y T_3 , calcular los valores de las variables de las corrientes (4) y (5).
(m_4, T_4, m_5 y T_5)
5. Siguiendo con el GHX y dados los valores calculados de m_1, T_1, m_4, T_4, m_5 y T_5 , calcular los valores de las variables de las corrientes (10) y (12).
(m_{10}, T_{10}, m_{12} y T_{12})
6. Siguiendo con el SEP y dados los valores de m_7, z_7 y T_7 , calcular los valores de las variables de las corrientes (8) y (9).
(m_8, T_8, m_9 y T_9)
7. Continuando con el MZ y dados los valores calculados de $m_8, T_8, m_9, T_9, m_{10}, T_{10}, m_{12}$ y T_{12} , calcular los valores de las variables de la corriente (11) y (13).
(m_{11}, T_{11}, m_{13} y T_{13})
8. Utilizando el RE y dados los valores calculados de m_{11}, T_{11}, m_{13} y T_{13} , calcular los valores de las variables de la corriente (15).
(m_{15} y T_{15})
9. Fin de los cálculos.

A primera vista, la segunda secuencia resulta más atractiva, sin embargo la flexibilidad ganada tiene su precio. El problema surge al modificar el flujo de la información del proceso a través de la libre asignación de los grados de libertad en los equipos.

Haciendo un análisis de los grados de libertad, las combinaciones posibles de especificación de variables son enormes, incrementándose en forma dramática la cantidad de módulos a disponer si se quisiera cubrir todas las posibilidades. Es por ello que la propuesta consiste en fijar sólo aquellos grados de libertad relacionados con el cumplimiento de los balances de materia en las corrientes de entrada y salida de las particiones. Esto con el fin de disminuir el número de variables iterativas, asegurar los balances de materia y dejar como única responsabilidad al método de convergencia el cumplimiento de los balances de energía.

Los balances de energía por su lado, se resolverían siguiendo el esquema entradas-salidas. Esto se decidió así, debido a que un cambio en un grado de libertad de un

flujo másico no representa un gran cambio en la secuencia de cálculo que ya se tenía programada, caso contrario con los grados de libertad relacionados con los balances de energía.

Podemos decir entonces, que la propuesta consiste en la utilización de un esquema híbrido (entradas-salidas, salidas-entradas) para el aseguramiento de los balances de materia de las particiones y la resolución de los balances de energía con algún método de convergencia. Los métodos a probar serán en primer lugar el algoritmo genético y en segundo el híbrido genético-convencional, de manera que los métodos convencionales serán probados automáticamente con el segundo método.

Otra parte de la propuesta está relacionada con las especificaciones de diseño. La literatura, nos dice que las especificaciones de diseño deben manejarse como otro nivel de iteración más del flowsheet [Dimian, 2003], convergiendo secuencial o simultáneamente con las variables iterativas. La biblioteca de equipos como ya se dijo, no se implementó de esta manera, de forma que las especificaciones de diseño se encuentran dentro del modelo de cada equipo como un grado de libertad más a especificar. Quiere decir entonces, que el problema no solo es encontrar el valor de las variables iterativas sino que también se deben cumplir las restricciones de las especificaciones de diseño contenidas dentro de los módulos, lo que provoca que la convergencia se complique. Los resultados de la evaluación anterior muestran que si la especificaciones de diseño no están correctamente dadas, provoca que los métodos convencionales terminen en puntos indeterminados y que para el caso del algoritmo genético se vuelva bastante difícil la generación de soluciones válidas contenidas en la región factible impidiendo en algunos casos que el algoritmo arranque y complicando seriamente la convergencia.

Como ya se explicó anteriormente, ya se tenía implementado un buen número de unidades de la biblioteca de equipos y el hecho de querer sacar todas las especificaciones de diseño de los modelos implicaba volver a hacer todo de nuevo. De manera que solo un número pequeño de equipos serán los que serán implementados de nuevo, libres de las especificaciones de diseño quedando como trabajo futuro la implementación de la misma forma del resto de los equipos.

6.1.1. Modificación de algoritmo genético

La metodología propuesta en esta sección, agrega un requerimiento más en la evaluación de la función objetivo, el cumplimiento de las especificaciones de diseño. Estas especificaciones de diseño como se dijo anteriormente, se encuentran dentro del modelo de cada equipo, forzando a que el algoritmo genético opere sobre la región no factible. Es bien sabido, que en muchos problemas de optimización, las soluciones que se encuentran dentro de la región no factible proveen información más valiosa acerca de la solución óptima que las soluciones que se encuentran dentro de la región factible [Mitsuo and Runwei, 2000].

De manera que las especificaciones se evaluarán dentro de la función objetivo, transformando el problema sin restricciones hasta ahora tratado así por el algoritmo genético en lo que en realidad es, un problema con restricciones.

Varias técnicas han sido propuestas para manejar restricciones con algoritmos genéticos [Gen et al, 2000]. Estas técnicas pueden ser clasificadas básicamente en

métodos de rechazo, reparación y penalización. De entre estas técnicas, la técnica de penalización es quizás la más comúnmente utilizada. En esencia, esta técnica transforma un problema con restricciones en un problema sin restricciones a través de la penalización de las soluciones no factibles, es decir, si un individuo viola una restricción será agregado un término de penalización a la función objetivo, haciendo al individuo en cuestión menos apto.

En general, hay dos maneras de crear una función de evaluación con términos de penalización. Una de ellas, es tomando la forma de la adición, expresada de la siguiente manera:

$$eval(C) = f(C) + p(C) \tag{6.1}$$

donde C representa un cromosoma, $f(C)$ la función objetivo del problema y $p(C)$ la función de penalización, la cual puede manejar múltiples restricciones.

La segunda manera es tomando la forma de la multiplicación la cual se expresa como sigue:

$$eval(C) = f(C)p(C) \tag{6.2}$$

De acuerdo a cómo está implementada la función objetivo para este problema en particular, la segunda forma es la que mejor se adapta, debido a que se está normalizando el valor de la calidad. Tomar la segunda forma trae consigo la siguiente dificultad:

¿Cómo ponderar un valor para $p(x)$ si el número de restricciones varía tanto en número como en tipo?

Por otro lado, dado que la naturaleza del problema es minimizar el valor de $f(x)$ no maximizarlo, la primera forma resulta más conveniente. Tomando en cuenta todo lo anterior, la función objetivo quedaría redefinida como sigue:

$$f = \sum_{j=1}^m (g_j - v_j) + p(C) \tag{6.3}$$

donde además se requiere que

$$\begin{aligned} p(C) &= 0, & \text{si } C \text{ es factible} \\ p(C) &> 0, & \text{en cualquier otro caso} \end{aligned} \tag{6.4}$$

6.2. Diseño de Experimentos

6.2.1. Ciclos a resolver

Para probar el enfoque tradicional modular secuencial para la resolución numérica de los Sistemas de Enfriamiento Termosolar por Absorción bajo el esquema híbrido propuesto, se pretende resolver los últimos ciclos que se definieron en la Sección 5.2. Dichos ciclos son: Ciclo GAX, Ramificado GAX y Ramificado GAX con intercambio de calor en la solución (ICS). Nótese que se resolverán aquellos ciclos a partir del Ciclo

GAX, esto debido a que el GAX fue el ciclo que no pudo ser resuelto con el esquema tradicional E-S bajo ninguno de los métodos probados.

Para cada uno de estos ciclos de acuerdo al enfoque modular secuencial, se deberá descomponer el flowsheet en particiones y determinar la precedencia de resolución de cada partición. Encontrar el menor número de corrientes de corte (rasgado) para cada partición y determinar la procedencia de resolución de unidades (equipos) por cada partición.

La Tabla 6.1 muestra un resumen del número de particiones, corrientes de corte y variables iterativas resultantes de la ejecución de las actividades anteriormente mencionadas, y con el fin de mostrar la reducción de la complejidad de un esquema E-S a uno Híbrido, se reportan las variables iterativas utilizando ambos enfoques.

Tabla 6.1: Resumen de ciclos a resolver bajo el esquema entradas-salidas.

Ciclo	No. de Equipos	Particiones	Corrientes de Corte	Variables Iterativas	
				Esquema E-S	Esquema H
GAX	16	3	7	18	7
Ramificado GAX	18	3	8	21	11
Ramificado GAX con ICS	19	3	8	24	11

Como se puede observar en la tabla, el número de variables iterativas utilizando el esquema híbrido es alrededor del 50 % con respecto al esquema E-S. Se espera que con esta reducción la complejidad del problema disminuya lo suficiente para ser tratado por los métodos de convergencia que se desean probar.

El detalle del criterio para elegir las particiones y las corrientes de corte, los equipos contenidos en cada partición y cuáles son las variables iterativas se puede consultar en el Apéndice D.

6.2.2. Resolución de variables iterativas con algoritmos genéticos

Parte de la propuesta como ya se mencionó anteriormente, consiste en extraer las especificaciones de diseño de los modelos y manejarlas por fuera como restricciones del sistema. Dado que la mayoría de los equipos que componen los ciclos a resolver contiene al menos una especificación de diseño y el hecho de querer sacar dichas especificaciones de los equipos implica volver a implementarlos de nuevo, solo se probará con un equipo. La especificación de diseño que fue seleccionada para sacar del modelo es el delta de aproximación de corrientes del GAX, la cual se expresa como sigue:

$$dt_{GAX} = T_{31} - T_7 \tag{6.5}$$

La Figura 6.3 muestra el contexto donde se encuentra el delta de aproximación de corrientes del GAX. Cabe señalar que los tres ciclos GAX, Ramificado GAX y Ramificado GAX con ICS contienen dicho delta de aproximación de corrientes, solo que las numeraciones de las corrientes son diferentes, de manera que basta con probar la convergencia de uno de ellos con el delta de aproximación de corrientes.

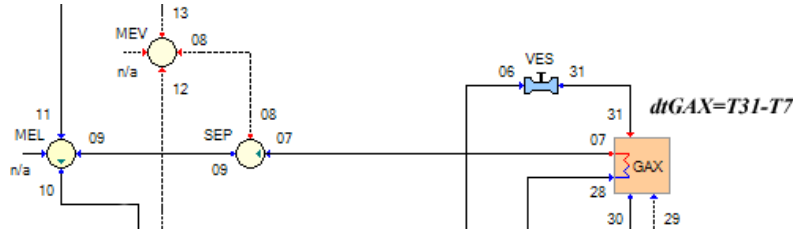


Figura 6.3: Delta de aproximación de corrientes del GAX.

Se realizarán entonces, 30 corridas con el algoritmo genético para cada uno de los ciclos correspondientes a este experimento sin el delta de aproximación del GAX, bajo los siguientes parámetros de control:

Tabla 6.2: Parámetros de control del Algoritmo Genético.

Tamaño de Población	30
No. Máximo de Generaciones	200
Probabilidad de Cruzar	0.8
Probabilidad de Mutar	0.01

Los operadores de cruce y mutación, la estrategia de selección y el criterio de reemplazo tentativos son los siguientes:

Tabla 6.3: Operadores del Algoritmo Genético.

Operador de Cruce	Real Plano
Operador de Mutación	Aleatorio
Estrategia de Selección	Torneo
Criterio de Reemplazo	Mejor Padre - Mejor Hijo

Posteriormente se realizaran otras 30 corridas con el Genético para el ciclo GAX agregando como restricción del sistema el delta de aproximación de corrientes del GAX.

Finalmente, será calculado el promedio y las desviación estándar del número de iteraciones, del tiempo de ejecución y de la calidad de las soluciones.

6.2.3. Resolución de variables iterativas con el híbrido algoritmos genéticos-métodos convencionales

De las 30 corridas realizadas para el ciclo GAX sin el delta de aproximación de corrientes del GAX Algoritmo Genético, se tomarán todas aquellas soluciones generadas durante la primera iteración de cada corrida y se alimentarán como valores iniciales para los métodos convencionales.

En caso de que los resultados obtenidos utilizando el híbrido genético-convencional resulten satisfactorios al menos para el ciclo GAX, se realizará lo mismo que en el experimento anterior con las 30 corridas hechas para el ciclo GAX con el delta de aproximación de corrientes y se probará su convergencia con los métodos tradicionales.

Finalmente, será calculado el promedio y las desviación estándar del número de iteraciones y el tiempo de ejecución.

6.3. Análisis e interpretación de resultados

6.3.1. Resolución de variables iterativas con algoritmos genéticos

Los resultados de las 30 corridas para los tres ciclos planteados anteriormente utilizando algoritmos genéticos sin el delta de aproximación del GAX son los que se reportan en la Tabla 6.4.

Tabla 6.4: Resultados de las corridas utilizando algoritmos genéticos sin el delta de aproximación del GAX.

	GAX		Ramificado GAX		Ramificado GAX con ICS	
	Promedio	Desviación Estándar	Promedio	Desviación Estándar	Promedio	Desviación Estándar
Generaciones	68.36	22.83144	33.96	9.53571	40.56	16.05955
Tiempo (seg)	02:12.570	00:51.198	01:11.113	00:23.924	01:24.602	00:38.398
Aptitud	0.18943	0.44155	416.37811	184.80678	242.63978	238.70447
ERP	0.32510	0.73540	2.84848	4.01645	5.22224	5.50853

Como se puede observar, el número de generaciones y el tiempo total para la resolución del ciclo GAX es mayor que para los ciclos Ramificado GAX y Ramificado GAX con ICS. Ésto se debe a que las corridas que se hicieron con los ciclos Ramificado GAX con y sin ICS, se dejó fija una de las variables iterativas correspondiente a la sección superior (ver Apéndice D, en la Sección D.1), ésto debido a que los resultados obtenidos con el ciclo GAX se observó que dicha variable se mantenía fija para distintas condiciones de las otras columnas. De manera que se decidió dejar fija dicha variable para las simulaciones de los ciclos restantes.

También se puede observar que los valores de aptitud son mejores para el ciclo GAX, luego le sigue el ciclo Ramificado GAX con ICS y finalmente el ciclo Ramificado GAX sin ICS. Lo anterior debido a que las soluciones encontradas para los dos últimos ciclos, no cumplieron al 100 % las restricciones impuestas en su respectiva función objetivo y por tanto fueron levemente penalizadas.

En cuanto al ERP promedio obtenido para los tres ciclos, se observa que fue aumentando precisamente conforme se aumentaba la complejidad del ciclo. La Figura 6.4 muestra el error relativo obtenido de las 30 corridas sin el delta de aproximaciones del GAX para cada uno de los ciclos. La escala de valores para los ciclos GAX y Ramificado GAX (azul y rosa) es la del lado izquierdo y la del ciclo Ramificado GAX con ICS la del lado derecho, esto debido a que el último ciclo fue el que tuvo las soluciones con mayor porcentaje de error. Se puede observar como las 30 corridas resuelven satisfactoriamente cada caso con un error bastante aceptable.

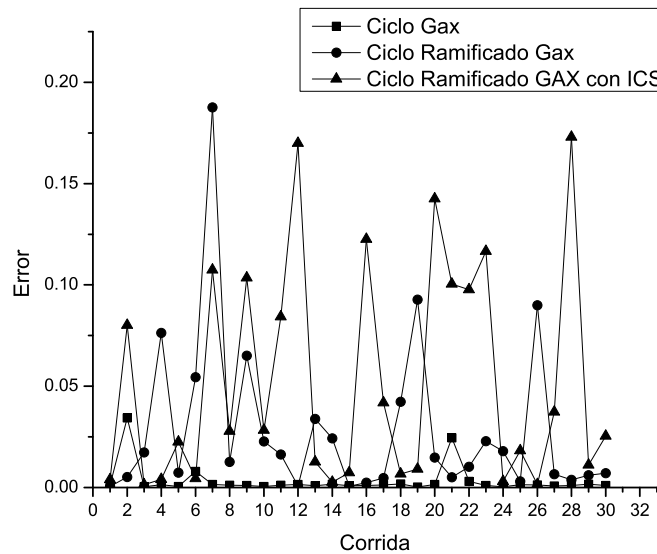


Figura 6.4: Error por corrida utilizando algoritmos genéticos sin el delta de aproximación del GAX.

En la Figura 6.5, se reporta el error a lo largo de las generaciones de tres corridas seleccionadas, una por cada ciclo. El criterio para seleccionarlas fue que el número total de generaciones para dichas corridas fuera igual al promedio del número de generaciones de todas las corridas de su respectivo ciclo.

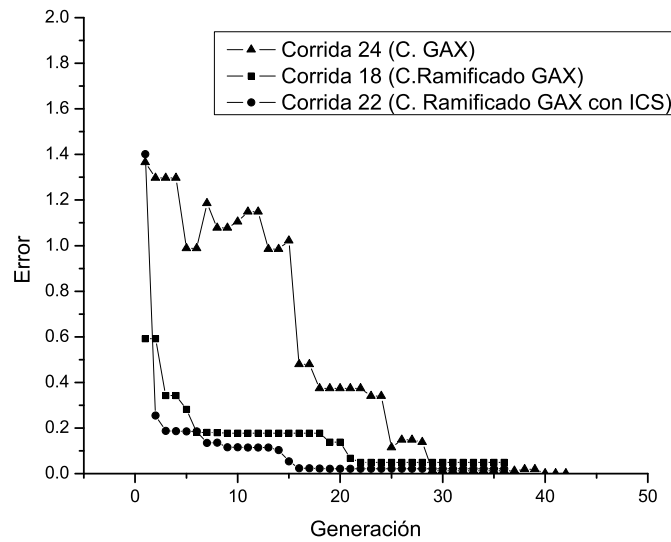


Figura 6.5: Corridas utilizando algoritmos genéticos sin el delta de aproximación del GAX.

La escala para los valores de error de las corrida 18 y 24 (en azul) es la del lado izquierda y para la corrida 22 (en rosa) la del lado derecho. Se decidió poner una segunda escala para mayor claridad debido a que para estas corridas en particular el error con el cual inició el ciclo Ramificado GAX con ICS fue 50% menor que el de los otros ciclos.

Los resultados de las 30 corridas para el ciclo GAX utilizando algoritmos genéticos con el delta de aproximación del GAX son los que se reportan en la Tabla 6.5. Dichas corridas fueron hechas con un delta de aproximación de corrientes del GAX igual a seis, el cual es un buen valor desde el punto de vista del diseño del equipo.

Tabla 6.5: Resultados de las corridas del ciclo GAX utilizando algoritmos genéticos con el delta de aproximación del GAX.

	Promedio	Desviación Estándar
Generaciones	56.9	18.0961988
Tiempo (seg)	01:35.516	00:33.495
Aptitud	6.3263865	0.6336271
ERP	1.1277924	1.8527808
dTGAX	6.3263865	0.63362711

Haciendo una comparación de los resultado obtenidos del ciclo GAX sin el delta de aproximación, el ERP para estas corridas es un poco mayor, más sin embargo aceptable. Este incremento en el ERP se debe al delta de aproximación que se estableció como restricción y podemos ver que el promedio de dicho delta en todos las corridas fue de

6.32 con lo cual podemos decir que los resultados son aceptables. La Figura 6.6 muestra el valor del delta de aproximación de corriente del GAX que se obtuvo en las 30 corridas.

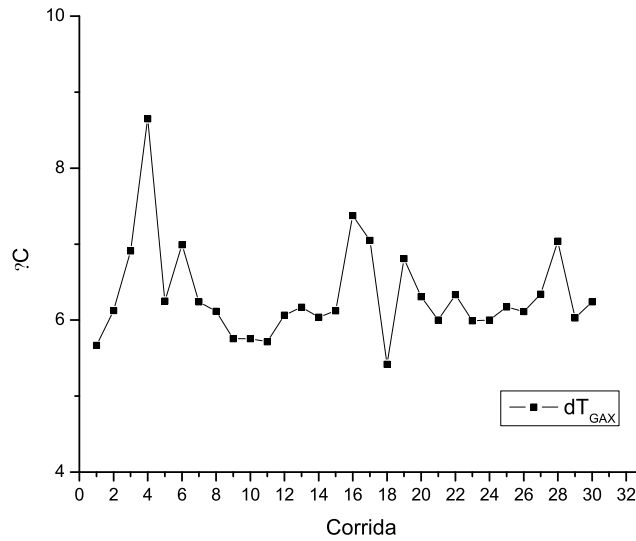


Figura 6.6: Corridas del ciclo GAX utilizando algoritmos genéticos con el delta de aproximación del GAX.

6.3.2. Resolución de variables iterativas con el híbrido algoritmos genéticos-métodos convencionales

De las 30 corridas realizadas para el ciclo GAX sin el delta de aproximación de corrientes del GAX Algoritmo Genético, se tomaron las soluciones obtenidas en la primera generación. Para un tamaño de población de 30, el número de soluciones obtenidas en total para la primera generación por las 30 corridas es igual a 900, de las cuales solo 95 de ellas resultaron ser factibles. Lo anterior nos indica que a pesar de la reducción de variables iterativas, sigue siendo difícil para el genético generar soluciones factibles al inicio.

La Tabla 6.6 muestra las 95 corridas realizadas con los métodos convencionales con el esquema híbrido propuesto con los valores iniciales proporcionados por el algoritmo genético. Cabe mencionar que para aumentar el número de corridas con convergencia, se tuvo que disminuir el número de cifras significativas de 4 a 3. Como se observa en dicha tabla, el número de corridas que convergieron es para todos los métodos menor al 30%, siendo Wegstein y Sustitución quienes mejor convergieron con 23 y 24 corridas, respectivamente. De nuevo el índice de convergencia de Broyden es bastante bajo, esto debido, como ya se dijo, a que este método es el más sensible a caer en puntos indeterminados (PI).

Tabla 6.6: Resultados de las 95 corridas con los métodos convencionales con el esquema híbrido.

Convergencia	Sustitución	Wegstein	Broyden
SI	24	23	8
NO - PI	71	72	87

De las corridas que lograron converger, algunas de ellas convergieron en menos de 4 corridas, lo anterior debido a que para el número de cifras significativas los valores iniciales eran prácticamente una raíz. La Tabla 6.7 muestra las iteraciones y el tiempo de las corridas que convergieron de las 95 y que no convergieron en las primeras iteraciones. De las corridas reportadas en dicha tabla, Broyden no logró convergencia en ninguna de ellas.

Tabla 6.7: Resultados del ciclo GAX utilizando métodos convencionales con el esquema híbrido.

Corrida	Sustitución Directa			Wegstein			Broyden		
	Conv.	Iters.	Tiempo	Conv.	Iters.	Tiempo	Conv.	Iters.	Tiempo
3	SI	63	00:04.688	SI	23	00:02.141	NO - PI	5	00:00.563
5	SI	31	00:02.547	SI	13	00:01.453	NO - PI	12	00:01.313
7	SI	57	00:04.328	SI	27	00:02.359	NO - PI	3	00:00.375
27	SI	50	00:03.734	SI	25	00:02.203	NO - PI	3	00:00.391
35	SI	34	00:02.766	SI	15	00:01.609	NO - PI	5	00:00.641
36	SI	49	00:03.719	SI	16	00:01.672	NO - PI	12	00:01.344
42	SI	58	00:04.500	SI	26	00:02.313	NO - PI	5	00:00.625
48	SI	29	00:02.000	SI	13	00:01.234	NO - PI	7	00:00.734
50	SI	49	00:03.813	SI	29	00:02.484	NO - PI	3	00:00.406
56	SI	51	00:04.016	SI	33	00:02.922	NO - PI	7	00:00.813
76	SI	59	00:04.438	SI	28	00:02.469	NO - PI	3	00:00.406
84	SI	64	00:04.672	SI	27	00:02.391	NO - PI	4	00:00.484
94	SI	53	00:04.000	SI	22	00:02.141	NO - PI	4	00:00.531

Se puede observar en dicha tabla como para estos experimentos, utilizando el esquema híbrido propuesto, el número de iteraciones y el tiempo total de convergencia de Wegstein fue alrededor del 50% menor de lo que le tomo al de Sustitución. Estos resultados, van mas de acuerdo con lo reportado en la literatura, lo cual nos dice que para el esquema propuesto los métodos convencionales realizan mejor su función. La Figura 6.7 muestra el número de iteraciones de las corridas de la tabla anterior para los métodos de Sustitución y Wegstein.

Como se acaba de mencionar, los métodos convencionales para el esquema propuesto se comportaron de acuerdo a la literatura, sin embargo, el índice de convergencia sigue

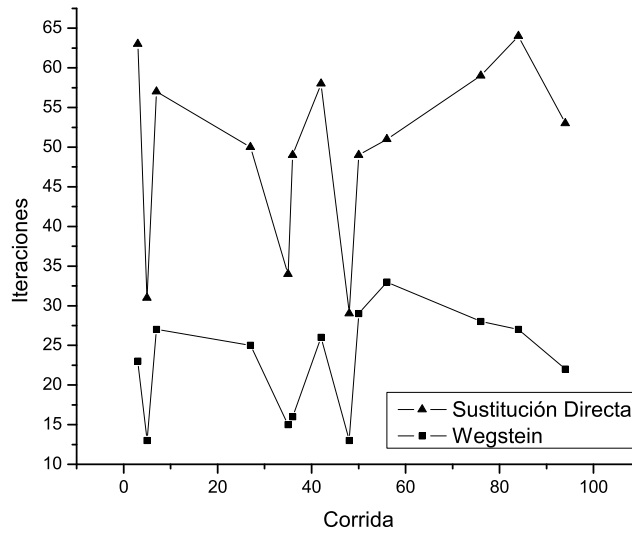


Figura 6.7: Corridas del ciclo GAX utilizando métodos convencionales con el esquema híbrido.

siendo muy bajo. Es por ello, que se seleccionó una de las corridas que convergieron y se realizó un análisis de las variables iterativas con el fin de detectar la causa del bajo índice de convergencia. Las figuras 6.8 y 6.9 en la página siguiente muestran el error de las variables iterativas del ciclo GAX por iteración de la corrida 3 con los métodos de Sustitución y Wegstein, respectivamente. Se puede observar que para ambos métodos las variables T_4 , T_{10} , T_{21} y T_{30} tiene un error prácticamente de cero desde el inicio y por lo tanto ninguno de los métodos modifica su valor. De manera que se puede decir que las únicas variables que convergen son T_7 y T_{10} , sin olvidar el hecho de que los valores iniciales de todas las variables fueron generados por la búsqueda realizada para el algoritmo genético.

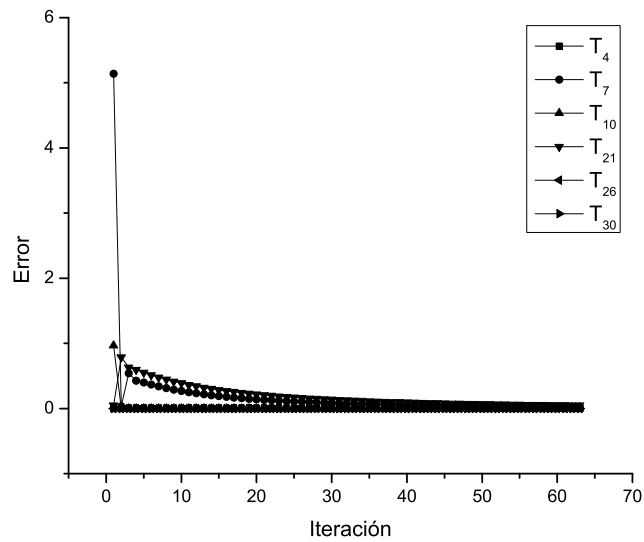


Figura 6.8: Error en las variables de la corrida 3 del Ciclo GAX utilizando sustitución directa con el esquema híbrido.

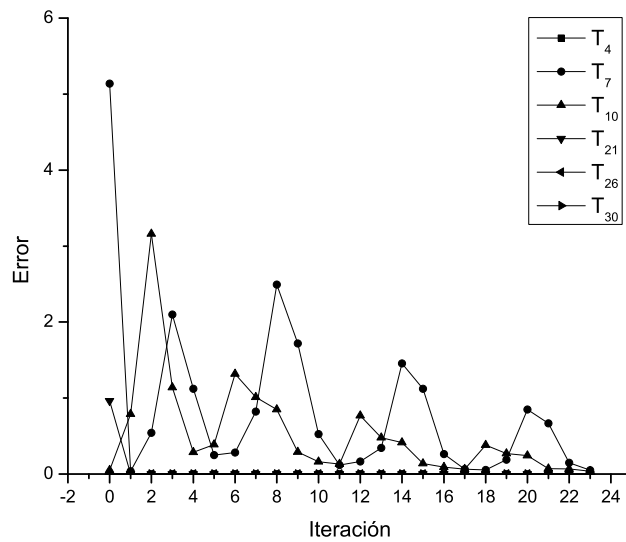


Figura 6.9: Error en las variables de la corrida 3 del ciclo GAX utilizando Wegstein con el esquema híbrido.

Lo que provoca que las variables T_4 , T_{10} , T_{21} y T_{30} no cambien durante las iteraciones, se debe a que los equipos que contienen dichas corrientes, tienen un delta de

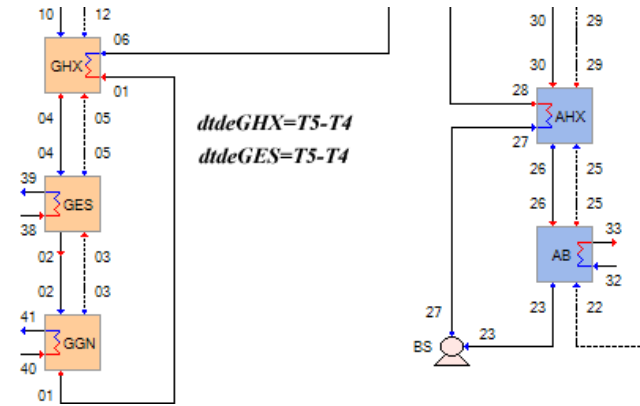


Figura 6.10: Delta de desequilibrio de los equipos GES y GHX del ciclo GAX.

desequilibrio o aproximación de corrientes relacionado con ellas. Con el fin de dejar claro de qué se trata el delta de desequilibrio se procede a explicar los deltas de aproximación de desequilibrio relacionados con la variable T_4 . La Figura 6.10 muestra el contexto de la variable T_4 , así como los deltas de desequilibrio relacionados con ella.

Como se observa en la figura, los equipos GES y GHX tienen en común un delta de desequilibrio relacionado con la temperatura de las corrientes 4 y 5. De forma que dado un valor de entrada para la temperatura de la corriente 4 y especificado el delta de desequilibrio del GES, se calcula el valor de la temperatura de la corriente 5. Para las corridas que se realizaron dicho delta fue establecido como cero, lo cual implica que el valor de la temperatura de la corriente 5 es igual al valor de la temperatura de la corriente 4 especificada ($T_5 = T_4$). Siguiendo la secuencia de cálculo al momento de querer resolver el GHX, el valor de T_5 calculado en el GES es dado como entrada, y puesto que este equipo tiene el mismo delta de desequilibrio, el valor de salida de la temperatura de la corriente 4 es igual al de la corriente 5 ($T_4 = T_5$). De manera que para un valor supuesto de T_4 , el valor calculado resulta ser igual y cuando los métodos convencionales evalúan la diferencia del valor supuesto y el calculado da como resultado cero y en la siguiente iteración no requieren mover dicha variable (esto no ocurre con Broyden). Quiere decir entonces que la convergencia del ciclo GAX está restringida a los valores de T_4 , T_{10} , T_{21} y T_{30} impuestos por los valores iniciales y los deltas de aproximaciones de desequilibrio, esta es la razón por la cual el índice de convergencia es tan bajo para los métodos convencionales. Lo anterior reafirma lo que se ha dicho de las especificaciones de diseño acerca de que complican la convergencia y más aún si dichas especificaciones se encuentran dentro de los modelos de los equipos.

Finalmente, la figura 6.11 muestra como se comportó el error de la corrida 3 a lo largo de las iteraciones con los métodos de Sustitución y Wegstein. Se puede observar que el error en sustitución oscila más suavemente que en Wegstein, siendo esa la principal razón de que requiera un mayor número de iteraciones para lograr la convergencia.

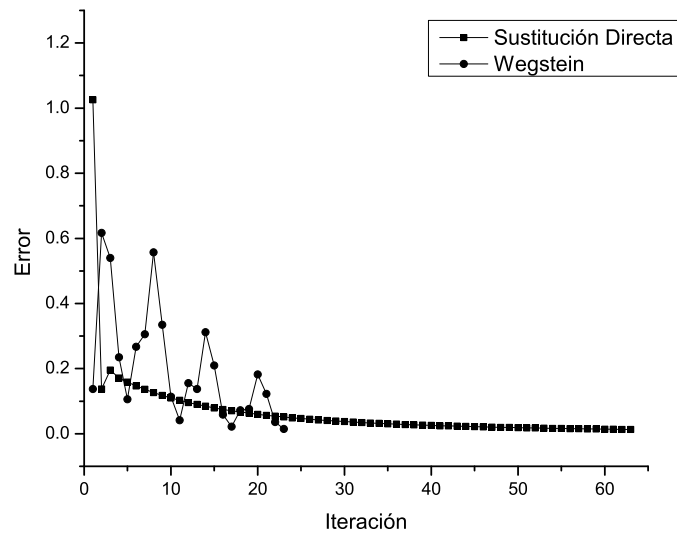


Figura 6.11: Error de la corrida 3 del ciclo GAX utilizando métodos convencionales con el esquema híbrido.

6.4. Conclusiones

6.4.1. Conclusiones específicas

Las conclusiones para la resolución de variables iterativas con Algoritmos Genéticos bajo el esquema híbrido propuesto son las siguientes:

1. Utilizando el esquema híbrido propuesto, el algoritmo genético implementado es capaz de resolver el ciclo GAX, el cual no pudo ser resuelto con el mismo algoritmo bajo el esquema tradicional entradas-salidas.
2. Utilizando el esquema híbrido propuesto, el algoritmo genético implementado resuelve satisfactoriamente los ciclos de complejidad Ramificado GAX y Ramificado GAX con ICS.
3. La restricción del delta de aproximación de corrientes del GAX a nivel sistema puede ser cumplida de forma satisfactoria por el algoritmo genético.

Las conclusiones para la resolución de variables iterativas con el Híbrido Genético-Convencional bajo el esquema híbrido propuesto son las siguientes:

1. La generación de valores iniciales sigue siendo un problema, ya que el índice de soluciones válidas generadas en las primeras iteraciones para un ciclo GAX con 8 variables iterativas no fue mayor al 10%.

2. Utilizando el esquema híbrido propuesto, los métodos convencionales de Sustitución y Wegstein se comportaron de acuerdo a lo indicado en la literatura [Clark et al, 1994], logrando resolver en algunas de las corridas probadas un ciclo de complejidad GAX. La convergencia depende en gran medida de los valores iniciales dados por el genético y las especificaciones de diseño establecidas. El método de Broyden sigue teniendo problemas de convergencia al caer en puntos indeterminados.

6.4.2. Conclusiones generales

1. El esquema híbrido propuesto efectivamente reduce la complejidad del problema y es posible resolver ciclos de mayor complejidad que con el esquema tradicional entradas-salidas.
2. Bajo este esquema híbrido el algoritmo genético resulta ser una opción atractiva para la resolución de los Ciclos de refrigeración por absorción.
3. Las especificaciones de diseño manejadas dentro de los equipos, son la principal causa de la no convergencia de los métodos convencionales al ser utilizados para resolver los ciclos de refrigeración por absorción.

Capítulo 7

Conclusiones y trabajo futuro

En el objetivo general de la presente tesis, se planteo la definición de una metodología para la solución numérica del modelo matemático de los sistemas de enfriamiento termosolar por absorción. Para lograr este objetivo, se definieron los ciclos de refrigeración por absorción con los cuales se probaría la validez de la metodología propuesta. Se actualizó la biblioteca de equipos desarrollada inicialmente en el trabajo previo a este (Tesis de Licenciatura), de manera que se tuviera los equipos necesarios para poder representar los ciclos definidos para el estudio.

De acuerdo a la investigación bibliográfica, se implementaron los métodos de convergencia más utilizados por los simuladores comerciales (Sustitución Directa, Wegstein y Broyden) , además de la implementación de una técnica de cómputo evolutivo, un Algoritmo Genético, todos ellos con el fin de ser utilizados para la resolución del modelo matemático.

Se evaluaron dos metodologías basadas en el enfoque modular secuencial para la solución numérica del modelo matemático de los sistemas de enfriamiento por absorción, utilizando todos los métodos implementados en el punto anterior en forma individual e híbrida.

La primer diferencia de estas metodologías con la tradicional está en la manera en la fueron resueltos los modelos matemáticos de los equipos y la forma en que fueron tratadas las especificaciones de diseño. La metodología tradicional sugiere que los modelos matemáticos solo deben contener las ecuaciones relacionadas con los balances de materia y energía, así como los parámetros de equipo y que las especificaciones de diseño deben ser aplicadas como restricciones que deben cumplir el sistema. De manera que estas especificaciones se hacen converger de forma simultánea con las variables iterativas. Para nuestra implementación en particular, dichas especificaciones de diseño se encuentran dentro de los modelos de los equipos.

La segunda diferencia, está relacionada con los métodos de convergencia utilizados para resolver las variables iterativas, ya que no solo se probaron los métodos convencionales (Sustitución, Wegstein y Broyden) si no que también se probó un algoritmo genético en forma individual e híbrida con los métodos convencionales.

En la primera metodología probada, el esquema para la asignación de los grados de libertad fue el tradicional entradas-salidas, en el cual se especifican las corrientes de entradas y los parámetros de equipo mientras que deben calcularse las salidas. Para

esta primer metodología ninguno de los métodos que se probaron logró resolver todos los sistemas definidos para el estudio.

En la segunda metodología probada, el esquema para la asignación de los grados de libertad fue un híbrido entradas-salidas y salidas-entradas. Para este esquema propuesto, el flujo de información de los balances de materia, se modificó de tal manera que se lograra una secuencia acíclica, con lo cual se redujo el número de variables iterativas. Y para el caso de los balances de energía el flujo de información coincide con el del esquema entradas-salidas. De esta forma se aseguraron los balances de materia dejando como una responsabilidad para los métodos la convergencia de los balances de energía. También se hizo una pequeña prueba en la cual una especificación de diseño fue sacada del modelo de uno de los métodos y fue impuesta como una restricción del sistema de acuerdo a como lo establece la literatura. Los ciclos probados para esta metodología fueron a partir del ultimo ciclo para el cual la metodología anterior no logró convergencia, esto se debió principalmente a que con este esquema se redujo la complejidad del problema y por tanto se esperaba poder resolver ciclos más complejos que con el otro. En esta metodología no se probaron los métodos convencionales de forma individual, solo de forma híbrida con el genético, esto debido al problema de los valores iniciales, los cuales eran difícil establecer para los ciclos que se probaron ya que para la mayoría de ellos se desconocía los valores de sus condiciones.

7.1. Conclusiones

Los resultados obtenidos para la primera metodología probado con los métodos convencionales no fueron los esperados de acuerdo a la literatura, Sustitución directa fue el que se comportó mas estable y de las pocas corridas donde logró convergencia (para uno de los ciclo más básicos y fijando algunas variables) fue más rápido que Wegstein. Broyden por su parte fue el que peor desempeño tuvo, siendo el más sensible a caer en puntos indeterminados. Los resultados obtenidos aplicando el algoritmo genético fueron mejores que los obtenidos con los métodos convencionales incluso que el híbrido genético-convencional. Con este algoritmo, se logró buena convergencia para los primeros dos ciclos de lo tres que se probaron. Para el tercer ciclo cuando los rangos definidos para las variables iterativas se ampliaban en un 10 %, el número de soluciones factibles disminuyó casi a cero, además de que la aptitud de las mejores soluciones fue muy baja. Los resultados para el híbrido genético-convencional, en el cual los valores iniciales eran generados por el algoritmo genético para posteriormente ser alimentados como valores iniciales para los métodos convencionales, los cuales finalmente eran los encargados de buscar la solución, tampoco fueron los esperados ya que ninguno de los ciclos probados logró convergencia. En cuanto al desempeño del algoritmo genético para la generación de valores iniciales bajo este esquema, solo es una buena opción cuando el número de variables iterativas no es muy grande (menor de 8).

Los resultados obtenidos para la segunda metodología propuesta aplicando el algoritmo genético de forma individual fueron aceptables, se logró convergencia de todos los ciclos probados. Los resultados obtenidos para el experimento con la especificación de diseño aplicada como restricción del sistema también fueron satisfactorios. Finalmente,

para el híbrido genético-convencional se logró convergencia de menos de 20 % de las corridas realizadas. Se demostró que este bajo índice de convergencia fue causado principalmente por las especificaciones de diseño contenidas dentro de los modelos de los equipos. Para este esquema, los métodos convencionales se comportaron de acuerdo a la literatura, siendo Wegstein el que mejor desempeño tuvo, de nuevo Broyden fue el que presentó mas problemas de convergencia terminando en todas las corridas en puntos indeterminados en las primeras iteraciones.

De todo lo anterior y para esta implementación en particular se puede concluir lo siguiente:

- Utilizando el enfoque modular secuencial con el esquema tradicional entradas-salidas, ni los métodos convencionales, ni el algoritmo genético, ni la propuesta del híbrido genético-convencional son capaces de resolver numéricamente los sistemas de enfriamiento por absorción.
- El esquema híbrido propuesto efectivamente reduce la complejidad del problema y es una buena opción para la solución numérica de los sistemas de enfriamiento por absorción, siendo el algoritmo genético utilizado en forma individual el único método que logró resolver todos los ciclos planteados.
- Cuando se plantea un ciclo de refrigeración por absorción para el cual se desconocen sus condiciones, el algoritmo genético es una buena alternativa para su solución.
- Las especificaciones de diseño manejadas dentro de los equipos, son la principal causa de la no convergencia de los métodos convencionales al ser utilizados para resolver los ciclos de refrigeración por absorción.
- En cuanto a su posible implementación en un simulador de propósito general, los usuarios finales requieren del conocimiento de cómo fueron resueltos los modelos de los equipos así como el sistema global, y el conocimiento de la manipulación de los parámetros de control y operadores del algoritmo genético.

Se concluye en forma general, que el enfoque modular secuencial bajo el esquema híbrido propuesto y utilizando algoritmos genéticos es una metodología viable para resolución numérica del modelo matemático de los sistemas de refrigeración por absorción. Sin embargo, es posible que la misma metodología utilizando el híbrido genético-convencional sea una mejor opción una vez que las especificaciones de diseño se saquen de los modelos de los equipos y se apliquen como restricciones del sistema global.

7.2. Aportaciones

- El desarrollo de una metodología para resolución numérica del modelo matemático de los sistemas de refrigeración por absorción, la cual utiliza un esquema híbrido para la asignación de los grados de libertad con lo cual se reduce la complejidad del problema.

- La utilización de un algoritmo genético en forma individual e híbrida con los métodos convencionales para la solución de las variables iterativas, causadas por las recirculaciones en los sistemas de enfriamiento termosolar.
- La resolución de los ciclos Ramificado GAX y Ramificado GAX con ICS.
- El simulador desarrollado en [Pelayo, 2006], fue mejorado en los siguientes aspectos:
 - Actualización de la biblioteca de equipos.
 - Actualización y depuración de los métodos para la solución de ecuaciones no lineales.
 - Implementación de los métodos convencionales Sustitución Directa, Wegstein y Broyden.
 - Mejora del sistema de control de errores.
 - Actualización del archivo XML de entrada, para que pudiera manejar diferentes IU por equipo, soporte para la definición de la secuencia de cálculo, corrientes de corte y las variables iterativas.
 - entre otros.

7.3. Trabajo futuro

Se tiene como trabajo futuro la re-implementación de la biblioteca de equipos, de manera que los modelos matemáticos solo contengan las ecuaciones relacionadas con los balances de materia y energía, así como los parámetros de equipo. Para posteriormente, probar la metodología que utiliza el esquema híbrido para la asignación de los grados de libertad, utilizando como método de convergencia el híbrido genético-convencional y aplicando las especificaciones de diseño como restricciones que debe cumplir el sistema.

También se requiere buscar un mecanismo para la corrección de las soluciones que resulten puntos indeterminados, de manera que el índice de soluciones válidas del algoritmo genético aumenten y que los métodos convencionales tales como Broyden no se detengan a causa de un punto indeterminado.

Todo lo anterior con el fin de obtener una metodología que sea más factible implementar en un simulador general de sistemas de enfriamiento termosolar que sea construido en un futuro por esta institución. El cual contribuiría en la creación de nuevos sistemas que cubran las necesidades de enfriamiento sin dañar el medio ambiente, con una inversión razonable y con bajo costo de operación y mantenimiento, mejorando la calidad de vida de la sociedad así como su economía. Y por otro lado, promovería el desarrollo de sistemas de simulación y tecnologías de información creadas por la propia institución, mejorando así el nivel académico de alumnos, docentes e investigadores, haciéndonos más competitivos ante otras instituciones tanto nacionales como internacionales y permitiéndonos dar servicios de mejor calidad a nuestra sociedad.

Bibliografía

- [Assilzadeh et al, 2005] Assilzadeh, F., Kalogirou, S. A., Ali, Y., Sopian, K. (2005) Simulation and optimization of a Libr solar absorption cooling system with evacuated tube collectors. Renewable energy Vol. 30, pp. 1143-1159.
- [Balamuru et al, 2000] Balamuru, V. G., Ibrahim, O. M., Barnett, S. M. (2000). Simulation of ternary ammonia-water-salt absorption refrigeration cycles. Int. Journal of refrigeration, Vol. 23, pp. 31-42.
- [Braunschweig et al, 2000] Braunschweig, B. L., Pantelides, C. C., Britt, H. I., Sama, S. (2000). Open Software Architectures for Process Modeling: Current Status and Future Perspectives. In Proc. of Conf. on Foundations of Computer-Aided Process Design, AIChE Symposium Series, 96 (323), 220-235.
- [Brindle, 1981] Brindle, A. (1981). Genetic algorithms for function optimization. Unpublished doctoral dissertation, University of Alberta, Edmonton.
- [Broyden, 1965] Broyden, C. G. (1965). A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. Math. Comp. 19, 577.
- [Carlson, 1996] Carlson, E. C. (1996). "Don't gamble with physical properties for simulation", Chemical engineering progress, October, pp.35-46.
- [Cerezo, 2001] Cerezo, J. (2001). Simulación de transformadores de calor acoplados a procesos industriales y evaluación experimental de un transformador térmico de 2 kW de potencia. Tesis de Maestría, CIE-UNAM, Temixco, Mor.
- [Clark et al, 1994] Clark, S.M and Reklatis G.V (1994). Investigation of strategies for executing sequential modular simulations, Computers & Chemical Engineering, 8, 205.
- [Darwin, 1859] Darwin, C. (1859). *"The Origin of Species by Means of Natural Selection"*, first edn, John Murray, London.

- [Davis, 1991] Davis, L. D. (1992). *"Hand Book of Genetic Algorithms"*. Van Nostrand Reinhold.
- [De Jong, 1975] De Jong, K. (1975). *"An analysis of the behavior of a class of genetic adaptive systems"*. PhD thesis, Univ. Michigan, Ann Arbor, 1975.
- [De Jong et al,1990] De Jong, K.A. and Spears, W.M. (1990). *"An Analysis of the Interacting Roles of Population Size and Crossover in Genetic Algorithms."* Proc. First Workshop Parallel Problem Solving from Nature, Springer-Verlag, Berlín, pp. 38-47.
- [De Vries, 1906] De Vries, H. (1906). *"Species and Varieties: Their Origin by Mutation"*. Open Court, Chicago.
- [Dimian, 2003] Dimian A.C. (2003). *Integrated Design and Simulation of Chemical Processes?*, Computer-Aided Chemical Engineering, 13, Elsevier.
- [Engler et al, 1997] Engler, M., Grossman, G., Hellman, H. M. (1997). Comparative simulation and investigation of ammonia-water: absorption cycle for heat pump applications. Int. Journal of refrigeration, Vol. 20, No. 7, pp. 504-516.
- [Eshelman et al, 1993] Eshelman L.J., and Schaffer J. D. (1993). Real-coded Genetic Algorithms and Interval-schema. In *Foundation of Genetic Algorithms 2*, Morgan Kaufmann Publishers, pp: 187-202.
- [Evans et al, 1979] Evans, L. B., Boston J. F., BRITT H.I., Gallier, P.W., Gupta P.K., Joseph B., Mahalec V, Seider W. and Yagi H. (1979) ASPEN: An Advanced System for Process Engineering, Computers & Chemical Engineering, 3, 319.
- [García, 2005] García, X. (2005). Solar absorption cooling in Spain: Perspectives and outcomes from the simulation of recent installations. *Renewable energy*, en imprenta, pp. 1-19.
- [Gen et al, 2000] Gen M. and Cheng R. (2000). *Genetic Algorithms and Engineering Optimization*, John Wiley & Sons, New York.
- [Goldberg, 1985] Goldberg, D. E. (1989). *"Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning"*. Reading, MA: Addison-Wesley
- [Gómez, 2002] Gómez, V. (2002). *"Modelado, Simulación y Diseño de dos intercambiadores de calor con cambio de fase, empleando*

- superficies extendidas.*". Tesis de Maestría. Universidad Autónoma de México, Temixco Morelos, México.
- [Grossman et al, 1994] Grossman, G. y Wilk, M. (1994). Advanced modular simulation of absorption systems. Int. Journal of refrigeration, Vol. 17, No. 4, pp. 231-244.
- [Grossman, 2001] Grossman, G. (2001). *"Modular simulation of advanced absorption systems"*, Elsevier, Internal journal of refrigeration 24, pp.531-543.
- [Holland, 1975] Holland, J. H. (1975). *"Adaptation in natural and artificial systems"*. Ann Arbor: The University of Michigan Press.
- [Jarmo, 1992] Jarmo, T. A. (1992). *"On optimal population size of genetic algorithms"*. In Patrick Dewilde and Joos Vandewalle, editors, CompEuro 1992 Proceedings, Computer Systems and SoftwareEngineering, 6th Annual European Computer Conference, pages 65-70, The Hague, 4.-8. May 1992. IEEE Computer Society, IEEE Computer Society Press.
- [Kaushick et al, 1988] Kaushick, S. C., Gadhi, S. M. B., Agarwal, R. S., Kumari, R. (1988). Modeling and simulation studies on single/double effect absorption cycle using water-multicomponent salt (MCS) mixture. Solar Energy, Vol. 40, No. 5, pp. 431-441.
- [Kaushick et al, 1991] Kaushick, S. C., Rao, S. K., Kumari, R. (1991). Dynamic simulation of an aqua-ammonia absorption cooling system with refrigerant storage. Energy Conversion & Management, Vol. 32, No. 3, pp. 197-206.
- [Kouremenos et al, 1987] Kouremenos, D. A., Antonopoulos, K. A. (1987). Rogdakis, E. Performance of solar NH₃/H₂O absorption cycles in the Athens area. Solar Energy, Vol. 39, No. 3, pp. 187-195.
- [Lamarck, 1984] Lamarck, J. B. (1984). *"Zoological Philosophy: An Exposition with Regard to the Natural History of Animals"*. Chicago University Press, Chicago.
- [Lee et al., 1966] Lee, W., J. H. Christensen y D. F. Rudd. (1966). AICHE J., 12, 6, 1104
- [Lozano, 1996] Lozano, M. (1996). *"Aplicacion de Tecnicas Basadas En Logica Difusa Para la Mejora Del Comportamiento de Los Algoritmos Geneticos con Codicacion Real"*. PhD thesis, Universidad de Granada, Granada.

- [Luna et al, 2005] Luna, A., Velázquez, N., Bojórquez, G. (2005). Simulación dinámica de sistema de enfriamiento por absorción BrLi-H₂O, operado con energía solar térmica. Memoria de la XXIX Semana Nacional de Energía Solar, 3-7 de octubre, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, pp. 311-316.
- [Luyben, 1990] Luyben, W. L. (1990). *Process modeling, simulation and control for chemical engineering*, McGraw-Hill.
- [Maria, 1997] Maria, A. (1997). Introduction to modeling a simulation. Proceedings of the 1997 Winter Simulation Conference, S. Andradóttir, K. J. Healy, D. H. Withers, and B. L. Nelson eds.
- [Mendel,1901] Mendel, G J. (1901). "*Experiment in plant hybridisation*". Journal of the Royal Horticultural Society, (26):1-32.
- [Mitsuo and Runwei, 2000] Mitsuo, G and Runwei C. (2000). *Genetic Algorithms & Engineering Optimization*. Wiley-InterScience.
- [Montagna, 1987] Montagna, J.M. (1987). Estrategias para la simulación de procesos con el enfoque modular secuencial; Tesis doctoral, Universidad Nacional del Litoral
- [Patek and Klomfar, 1995] Pátek, J. and Klomfar, J. (1995), Simple Functions for Fast Calculations of Selected Thermodynamic Properties of the Ammonia-Water System, Int. J. Refrig., Vol.18, No. 4 pp. 228-234.
- [Pelayo, 2006] Pelayo R (2006). Implementación de un Algoritmo Genético en la Simulación de un Sistema de Enfriamiento por Absorción (Ciclo Solar Gax). Tesis de Licenciatura. Universidad Autónoma de Baja California, México.
- [Pelayo et al, 2005] Pelayo, R., Villa N., Velásquez L. (2005). Aplicación de la inteligencia artificial en el modelado matemático de los sistemas de enfriamiento solar, ANES, 3-7 octubre 2005, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas.
- [Reyes, 2002] Reyes S. M. (2002). Estudio de Algunos Aspectos Teóricos de los Algoritmos Genéticos. Tesis de Maestría. Universidad Veracruzana, Mexico.
- [Rosen, 1980] Rosen E.M. (1980). Steady state chemical process simulation a state-of-the-art review, from Computer Applications to Chemical Engineering (Edited by R. G. Quirens & G. V. Reklaitis), ACS 124.

- [Seyla, 1995] Seyla, A.F. (1995). *Introduction to Simulation*. Proceedings of the 1995 Winter Simulation Conference, ed. C. Alexopoulos, K. Kang, W. R. Lilegdon, and D. Goldsman.
- [Seider et al, 1991] Seider W., Brengel David, Widagdo S. (1991). Nonlinear Analysis in Process Design. AICHE J., 37, 1- 38.
- [Shanon, 1975] Shanon, R.E. (1975). *"Systems Simulation, The Art and Science"*, Prentice Hall.
- [Shanon, 1998] Shanon, R.E. (1998). *Introduction to the art and science of simulation*. Proceedings of the 1998 Winter Simulation Conference, D.J. Medeiros, E.F. Watson, J.S. Carson and M.S. Manivannan, eds.
- [Scenna et al, 1999] Scenna, N. et al. Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos. Libro electrónico: http://www.modeladoingenieria.edu.ar/libros/modeinge/modinge_f.htm.
- [Sencan, 2006] Sencan, A. (2006). Artificial intelligent methods for thermodynamic evaluation of ammonia?water refrigeration systems. Energy Conversion and Management, 47, 3319-3332.
- [Schaffer et al, 1989] Schaffer, J.D. et al., "A Study of Control Parameters Affecting On-line Performance of Genetic Algorithms for Function Optimization." Proc. Third Int'l Conf. Genetic Algorithms, Morgan Kaufmann. San Mateo, Calif., 1989, pp. 51-60.
- [Schildt, 2002] Schildt, H. 2002. C#: The Complete Reference. Osborne Complete Reference Series, Osborne/McGraw-Hill.
- [Shopova et al, 2006] Shopova, E., Vaklieva-Bancheva, N. (2006). BASIC.A genetic algorithm for engineering problems solution. Computers and Chemical Engineering, 30, 1293?1309.
- [Sommerfeld, 1986] Sommerfeld, J. (1986). "Degrees of freedom and precedence orders in engineering calculations", Chemical engineering education, Summer, p. 138.
- [Sowa, 1997] Sowa, D. (1997). *"Make the move to dynamic simulation"*. Chemical engineering progress, August, pp. 44-47.
- [Steward, 1962] Steward, D. (1962). *"On an Approach to Techniques for the Analysis of the Structure of Large Systems of Equations"*, SIAM Review, 4, 321-342.

- [Tae et al, 2004] Tae, Y., Hong, H. and Suk, P. (2004). Performance analysis of advanced hybrid GAX cycles: HGAX . International Journal of Refrigeration. Volume 27, Issue 4, June 2004, Pages 442-448.
- [Tayal et al, 1999] Tayal, M., Fu Yan. (1999). Optimal Design of Heat Exchangers: A Genetic Algorithm Framework. Ind. Eng. Chem. Res. 38, 456-467.
- [Vázquez y Seara, 2004] Vázquez, M. y Seara J. F. (2004). *"El programa de referencia para la simulación de sistemas de energías renovables y arquitectura solar pasiva"*. XII Congreso Ibérico y VII Congreso ibero Americano de Energía Solar Vigo, España, 14-18 Septiembre, pp. 289-294.
- [Velázquez, 2002] Velázquez, N. (2002). *"Estudio de Sistemas de Absorción Avanzados para operar con Gas Natural y Energía Solar"*. Tesis Doctoral. Universidad Autónoma de México, DF, México.
- [Velázquez and Best, 2002] Velázquez, N and Best, R. (2002). *"Methodology for the energy analysis of an air cooled GAX absorption heat pump operated by natural gas and solar energy"*. Pergamon, Applied Thermal Engineering, 22, 1089-1103.
- [Velázquez et al., 2005] Velázquez, N. et al. (2005). *"Enfriamiento TermoSolar: Revisión de la Tecnología"*. Memorias de la XXIX Semana Nacional de Energía Solar, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, pp. 295-301
- [Villa, 2004] Villa, R. (2004). Softcomputing, Apuntes de clases. Programa Maestría y Doctorado en Ciencias e Ingeniería. Universidad Autónoma de Baja California, Mexico.
- [Wang et al, 1998] Wang, K., Qian, Y., Yuan, Y., Yao, P. (1998). Synthesis and optimization of heat integrated distillation systems using an improved genetic algorithm. Computers and Chemical Engineering, 23, 125-136
- [Weismann, 1983] Weismann, A. (1893). *"The Germ Plasm: A Theory of Heredity"*. August Weismann editos.Scott, London, UK.
- [Wegstein, 1958] Wegstein, J. H. (1958). Accelerating convergence of iterative processes. Commun. Assoc. Comput. Mach. 1(6), 9.
- [Westerberg et al,1979] Westerberg A. et al (1979). *Process flowsheeting*.Cambridge University Press, England.

- [Westerberg et al, 2005] Westerberg A. (2005). A retrospective on design and process synthesis, *Computers & Chemical Engineering*, 28, 447.
- [Zheng et al, 2002] Zheng, D., Chen, B., Qi, Y. (2002). Thermodynamic analysis of a novel absorption power/cooling combined cycle. In: *Proceeding international Sorption Heat Pump Conference*, 24-27 de septiembre, Shanghai, China, pp. 204-209.
- [Ziegler and Trepp, 1984] Ziegler, B. and Trepp, C. (1984). *Equation of state for ammonia-water mixtures*, *Int. J. Refrig.* 7(2), pp. 101-106

Apéndice A

Formulación del modelo matemático a nivel equipo

A.1. Propiedades termodinámicas

En un simulador de procesos tanto de alcance general como específico, la sección de estimación de propiedades termodinámicas es prioritario. En esta sección se mostrarán las ecuaciones que se utilizaron para obtener las distintas propiedades termodinámicas (temperatura, presión, concentración, entalpia, etc.) del sistema en estudio durante la simulación.

Como se mencionó en el capítulo 4, el fluido de trabajo con el cual trabaja el sistema en estudio es la mezcla amoníaco-agua. Por lo que todas las ecuaciones que aquí se presentan, son para calcular las propiedades tanto de la mezcla amoníaco-agua, como de los fluidos puros agua, amoníaco y aire.

A.1.1. Ecuaciones de Pátek y Klomfar

Las propiedades termodinámicas de la mezcla amoníaco-agua ($NH_3 - H_2O$) en fase líquido y vapor en saturación, fueron obtenidas utilizando las correlaciones de Patek y Klomfar (1995), dichas ecuaciones se muestran a continuación:

$$T(p, \bar{x}) = T_0 \sum_i a_i (1 - \bar{x})^{mi} \left[\ln \left(\frac{P_0}{p} \right) \right]^{ni} \quad (\text{A.1.1})$$

$$T(p, \bar{y}) = T_0 \sum_i a_i (1 - \bar{y})^{\frac{mi}{4}} \left[\ln \left(\frac{P_0}{p} \right) \right]^{ni} \quad (\text{A.1.2})$$

$$\bar{y}(p, \bar{x}) = 1 - \exp \left[\ln(1 - \bar{x}) \sum_i a_i \left(\frac{p}{P_0} \right)^{mi} \bar{x}^{\frac{ni}{3}} \right] \quad (\text{A.1.3})$$

$$h_L(T, \bar{x}) = h_0 \sum_i a_i \left(\frac{T}{T_0} - 1 \right)^{mi} \bar{x}^{ni} \quad (\text{A.1.4})$$

$$h_V(T, \bar{y}) = h_0 \sum_i a_i \left(1 - \frac{T}{T_0}\right)^{m_i} (1 - \bar{y})^{\frac{n_i}{4}} \quad (\text{A.1.5})$$

Los coeficientes respectivos a_i , los exponentes n_i y m_i , así como las condiciones de referencia de las ecuaciones (A.1.1) a (A.1.5), son dadas en el Apéndice B.

La temperatura de saturación T esta dada en $^{\circ}\text{C}$, la presión en bars y la entalpia en kJ/kg. La concentración para la fase líquido y vapor de la mezcla, están expresadas en fracción molar (\bar{x} e \bar{y}), se utilizó la siguiente expresión para convertirlas a fracción masa (x e y) (aplica tanto para x como para y):

$$x = \frac{PM_{NH_3}\bar{x}}{PM_{NH_3}\bar{x} + PM_{H_2O}(1 - \bar{x})} \quad (\text{A.1.6})$$

Como se puede apreciar, las correlaciones de Pátek y Klomfar corresponden a ecuaciones de la forma $f(x, y) = 0$ donde no se puede despejar x o y de forma univoca. De manera que para conocer el valor de x o y conociendo una de ellas y el valor de la función f , se tuvo que utilizar métodos numéricos.

De forma iterativa se pueden obtener las propiedades de concentración de la fase líquido y vapor (x e y) a partir de las ecuaciones (A.1.1) y(A.1.2) empleando el método numérico de Bisección conociendo a priori el valor de la temperatura de saturación T y el valor de la presión p .

De la misma forma, se pueden obtener las propiedades de concentración de la fase líquido y vapor (x e y) a partir de las ecuaciones (A.1.4) y(A.1.5) , solo que esta vez conociendo los valores de la temperatura de saturación T y la entalpia de la fase líquido h_L ó vapor h_V según sea el caso.

Finalmente, para obtener el valor de la temperatura de saturación T a partir de las ecuaciones (A.1.4 y A.1.5) conociendo a priori el valor de la concentración y entalpia de la fase líquido ó vapor, se empleó el método numérico de regla falsa.

A.1.2. Ecuaciones de Ziegler y Trepp

Para obtener las propiedades de entalpia de la mezcla amoniaco-agua ($NH_3 - H_2O$) en fase liquido y vapor bajo condiciones de no saturación, se utilizaron las ecuaciones (A.1.7 a A.1.11) de Ziegler y Trepp (1985), que se describirán a continuación.

Para obtener la entalpia especifica molar del agua y el amoniaco como fluidos puros se utilizó la siguiente ecuación:

$$h = -RT_B T_R^2 \left[\frac{\partial}{\partial T_r} \left(\frac{G_r}{T_r} \right) \right]_{P_r} \quad (\text{A.1.7})$$

Donde para la fase liquida:

$$\left[\frac{\partial}{\partial T_r} \left(\frac{G_r}{T_r} \right) \right]_{P_r} = \frac{h_{r_0}^L}{T_r} + \frac{B_1}{T_r} \left(\frac{T_{r_0}}{T_r^2} \right) + \frac{B_2}{2} \left(\frac{T_{r_0}}{T_r} - 1 \right) - \frac{B_3}{3} \left(T_r - \frac{T_{r_0}^3}{T_r^2} \right) + (A_4 - \frac{A_1}{T_r})(P_r - P_{r_0}) - \left[\frac{A_2(P_r^2 - P_{r_0}^2)}{2T_r^2} \right] \quad (\text{A.1.8})$$

Y para la fase vapor:

$$\left[\frac{\partial}{\partial T_r} \left(\frac{G_r}{T_r} \right) \right]_{p_r} = \frac{1}{T_r^2} \left\{ h_{r_0}^V + C_1(P_r - P_{r_0}) + 4C_2 \left(\frac{P_r}{T_r^3} - \frac{P_{r_0}}{T_{r_0}^3} \right) + 12C_3 \left(\frac{P_r}{T_r^{11}} - \frac{P_{r_0}}{T_{r_0}^{11}} \right) + 3C_4 \left(\frac{P_r^3}{T_r^{11}} - \frac{P_{r_0}^3}{T_{r_0}^{11}} \right) + D_1(T_r - T_{r_0}) + D_2 \left(\frac{T_r^2}{2} - T_{r_0}^2 + \frac{T_{r_0}^2}{2} \right) + D_3 \left(\frac{T_r^3}{3} - \frac{T_{r_0}^3}{2} + \frac{T_{r_0}^3}{6} \right) \right\} \quad (\text{A.1.9})$$

Sustituyendo una de las ecuaciones (A.1.8) o (A.1.9) se puede obtener el valor de la entalpia para alguna de las fases (liquido o vapor) tanto del agua como del amoniaco como fluidos puros. Los coeficientes y las condiciones de referencias para dichas ecuaciones se encuentran en el apéndice B.

Una vez obtenidas las entalpias del agua y del amoniaco como fluidos puros para alguna de las fases (líquido o vapor) se obtiene el valor de la entalpia de la mezcla con alguna de las siguientes ecuaciones según sea el caso.

Para la fase liquido:

$$h_m^L = \bar{x}h_a^L + (1 - \bar{x})h_w^L + h^E \quad (\text{A.1.10})$$

Para la fase vapor:

$$h_m^V = \bar{y}h_a^V + (1 - \bar{y})h_w^V \quad (\text{A.1.11})$$

Donde h^E esta representada por la siguiente ecuación:

$$h^E = -RT_B T_R^2 \left[\frac{\partial}{\partial T_r} \left(\frac{G_r^E}{T_r} \right) \right]_{p_r, \bar{x}} \quad (\text{A.1.12})$$

y a su vez

$$\left[\frac{\partial}{\partial T_r} \left(\frac{G_r^E}{T_r} \right) \right]_{p_r} = \frac{[-\bar{x}(1-\bar{x})]}{T_r^2} \left\{ E_1 + E_2 P_r + 2 \frac{E_5}{T_r} + 3 \frac{E_6}{T_r} + (2\bar{x} - 1) (E_7 + E_8 P_r + 2 \frac{E_{11}}{T_r} + 3 \frac{E_{12}}{T_r^2}) + (2\bar{x} - 1)^2 (E_{13} + E_{14} P_r + 2 \frac{E_{15}}{T_r} + 3 \frac{E_{16}}{T_r^2}) \right\} \quad (\text{A.1.13})$$

Como se puede apreciar, al igual que con las correlaciones de Pátek y Klomfa, las ecuaciones anteriores son de la forma $f(x,y)=0$ donde no se puede despejar x o y de forma univoca. De manera que para obtener el valor de la temperatura T_r conociendo a priori el valor de la entalpia y la concentración, se utilizó el método de regla falsa.

De nuevo, las concentraciones de la fase liquido y vapor (x e y) están dadas en fracción molar, por lo que se utilizó la ecuación A.1.6 para convertirlas a fracción masa.

A.1.3. Polinomio de Ashrae

Para obtener las propiedades volumen específico y calor específico para los fluidos puros agua y amoniaco así como para el aire como gas estándar, se utilizó el polinomio de la forma B.3.1, el cual fue obtenido a partir de datos experimentales publicados en ASHRAE HANDBOOK (1997) por Gómez, 2002.

$$f(T) = AT^6 + BT^5 + CT^4 + DT^3 + ET^2 + FT^1 + GT^0 \quad (\text{A.1.14})$$

Donde T esta dada en °C y los coeficientes correspondientes A; B; C; D; E; F; y G se encuentran listados en las tablas (B.5 - B.9) del apéndice.

A.2. Definición del modelo matemático

El modelo matemático del sistema en estudio, no es otra cosa que los balances correspondientes aplicando las leyes de conservación de la materia, energía o cantidad de movimiento, así como las ecuaciones de propiedades, restricciones de diseño e hipótesis sobre las cuales se plantea el modelo.

A continuación se mostrará la metodología seguida para el establecimiento del modelo matemático del generador GHX, se sobreentiende que la misma metodología se aplicó para obtener el modelo de los equipos restantes.

A.2.1. Esquema

El esquema de un modulo o equipo, es una presentación gráfica y simbólica del mismo, en la cual se enumeran las corrientes que entran o salen o de él así como cualquier convención o característica que el modelador quiera plasmar.

Representación esquemática del generador GHX

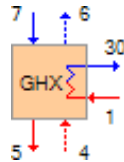


Figura A.1: Esquema del generador GHX.

A.2.2. Descripción operativa

En esta parte, se hace una breve descripción de la forma en que opera el módulo o equipo que se esté modelando. Dicha descripción debe seguir las mismas enumeraciones y convenciones que el esquema haya plasmado.

Descripción operativa del generador GHX:

Una corriente de solución líquida entra en el estado 7, posiblemente saturada o subenfriada y sale en el estado 5. Está interactúa con un flujo de vapor que entra en el estado 4 y sale en el estado 6, en contra flujo con el liquido. Se le agrega calor para terminar de extraer el amoniaco de la solución líquida, a través del contacto indirecto con la corriente 1 - 30.

A.2.3. Consideraciones del modelo

Consideraciones del modelo del generador GHX:

- El equipo opera en el estado estable.
- Las soluciones amoniaco agua se encuentran en equilibrio.
- No se considera caída de presiones.

A.2.4. Balances de materia

En cualquier proceso químico debe hacerse una cuenta exacta de todos los materiales que entran y salen del sistema. Esta contabilidad de material es llamada balance de materia, ya que la cantidad de materia que entra a un sistema es igual a la cantidad que sale más la acumulación.

Dado que el sistema en estudio es continuo y se considera que opera en condiciones estáticas, no hay acumulación, y por lo tanto la entrada es igual a la salida.

$$\textit{masa entrada} = \textit{masa salida} \quad (\text{A.2.15})$$

Balance de materia total del generador GHX

Por la parte interna

$$m_4 + m_7 = m_5 + m_6 \quad (\text{A.2.16})$$

Por la parte externa

$$m_1 = m_{30} \quad (\text{A.2.17})$$

Balance de materia por componente del generador GHX

Por la parte interna

$$m_4 y_4 + m_7 x_7 = m_5 x_5 + m_6 y_6 \quad (\text{A.2.18})$$

Por la parte externa

$$m_1 x_1 = m_{30} x_{30} \quad (\text{A.2.19})$$

A.2.5. Balances de energía

Al igual que en el caso de los balances de materia, es esencial llevar una contabilidad exacta de toda la energía que entra y sale del sistema.

La base para la escritura de los balances de energía es la *ley de la conservación de la energía*. Dejando a un lado las reacciones nucleares está se define simplemente así:

$$\text{energía entrada} = \text{energía salida} \quad (\text{A.2.20})$$

si no tiene lugar acumulación.

Balance de energía del generador GHX

Para la parte interna

$$Q_{ghx} + m_4 h_4 + m_7 h_7 = m_5 h_5 + m_6 h_6 \quad (\text{A.2.21})$$

Para la parte externa

$$m_1 h_1 = m_{30} h_{30} + Q_{ghx} \quad (\text{A.2.22})$$

A.2.6. Balances de cantidad de movimiento

Este balance tiene en cuenta fundamentalmente la pérdida de presión de los fluidos.

Balance de energía del generador GHX

En este modelo se ha supuesto que la presión de entrada y de salida no varía, por lo tanto las presiones tanto de la parte interna como de la externa son iguales.

$$p_5 = p_4 \quad (\text{A.2.23})$$

$$p_4 = p_7 \quad (\text{A.2.24})$$

$$p_7 = p_6 \quad (\text{A.2.25})$$

$$p_6 = p_1 \quad (\text{A.2.26})$$

$$p_1 = p_{30} \quad (\text{A.2.27})$$

A.2.7. Ecuaciones de propiedades

Las propiedades termodinámicas descritas en la sección A.1, se expresan en el modelo matemático solo en función de las variables dependientes.

Ecuaciones de propiedades del generador GHX

Temperaturas en Saturación (ecuaciones A.1.1 y A.1.2)

$$T_1 = f(p_1, x_1) \quad (\text{A.2.28})$$

$$T_5 = f(p_5, x_5) \quad (\text{A.2.29})$$

$$T_4 = f(p_4, y_4) \quad (\text{A.2.30})$$

$$T_6 = f(p_6, y_6) \quad (\text{A.2.31})$$

$$T_{sat7} = f(p_7, x_7) \quad (\text{A.2.32})$$

Entalpias en Saturación(ecuaciones A.1.4 y A.1.5)

$$h_1 = f(T_1, x_1) \quad (\text{A.2.33})$$

$$h_5 = f(T_5, y_5) \quad (\text{A.2.34})$$

$$h_4 = f(T_4, x_4) \quad (\text{A.2.35})$$

$$h_6 = f(T_6, y_6) \quad (\text{A.2.36})$$

$$h_7 = f(T_7, p_7, x_7) \quad (\text{A.2.37})$$

Entalpias en estado no saturado (ecuación A.1.7)

$$h_{30} = f(T_{30}, p_{30}, x_{30}) \quad (\text{A.2.38})$$

A.2.8. Ecuaciones especiales

Al resto de las ecuaciones del modelo, que no caen en alguna de las clasificaciones anteriores, se consideraron como ecuaciones especiales.

Ecuaciones especiales del generador GHX

$$T_6 = T_{sat7} \quad (\text{A.2.39})$$

$$dT_{sub} = T_{sat7} - T_7 \quad (\text{A.2.40})$$

$$dT_{de} = T_4 - T_5 \quad (\text{A.2.41})$$

A.2.9. Restricciones

Las restricciones de diseño son características que debe cumplir el sistema para que esté tenga solución matemática y para que los valores obtenidos de las variables sean factibles con el proceso real. Una temperatura absoluta negativa, por ejemplo sería "imposible".

Las restricciones de diseño pueden ser explícitas o implícitas.

- Explícitas: son las ecuaciones de diseño.
- Implícitas: son limitaciones a las que están sujetas algunas variables de las ecuaciones de diseño. Ejemplo: La concentración de una mezcla esta comprendida entre 0 y 1.

Restricciones del generador GHX

Por temperatura

$$T_1 \geq T_{30}$$

$$T_{30} \geq T_7$$

$$T_1 > T_5$$

$$T_5 > T_7$$

$$T_4 > T_6$$

Por masa

$$m_5 > m_7$$

$$m_4 > m_6$$

Por concentración

$$0 \leq y_4 \leq 1$$

$$0 \leq x_7 \leq 1$$

$$0 \leq x_5 \leq 1$$

$$0 \leq y_6 \leq 1$$

$$0 \leq x_1 \leq 1$$

$$0 \leq x_{30} \leq 1$$

Deltas

$$dT_{de} \geq 0$$

Apéndice B

Tablas de coeficientes de propiedades termodinámicas

En esta sección se presentan los coeficientes de las ecuaciones utilizadas para el cálculo de propiedades termodinámicas descritas en el apéndice A.

B.1. Ecuaciones de Pátek y Klomfar

Los valores de los coeficientes a_i , y los exponentes n_i y m_i de la ecuaciones A.1.1 a la A.1.5 descritas en el capítulo ?? en la sección de propiedades termodinámicas, se presentan en las tablas B.1 y B.2, y las condiciones de referencia son: $T_0 = 100\text{K}$, $P_0 = 2\text{MPa}$, $h_{0,l} = 100\text{kJ/kg}$, y $h_{0,v} = 1000\text{kJ/kg}$.

Tabla B.1: Coeficientes de las ecuaciones de Pátek para Líquido.

i	m_i	n_i	a_i
1	0	0	3.22302
2	0	1	-0.384206
3	0	2	0.0460965
4	0	3	-0.00378945
5	0	4	0.00013561
6	1	0	0.487755
7	1	1	-0.120108
8	1	2	0.0106154
9	2	3	-0.00053359
10	4	0	7.85041
11	5	0	-11.5941
12	5	1	-0.052315
13	6	0	4.89596
14	13	1	0.0421059

Tabla B.2: Coeficientes de las ecuaciones de Pátek para Vapor.

i	m_i	n_i	a_i
1	0	0	3.24004
2	0	1	-0.39592
3	0	2	0.0435624
4	0	3	-0.00218943
5	1	0	-1.43526
6	1	1	1.05256
7	1	2	-0.0719281
8	2	0	12.2362
9	2	1	-2.24368
10	3	0	-20.178
11	3	1	1.10834
12	4	0	14.5399
13	4	2	0.644312
14	5	0	-2.21246
15	5	2	-0.756266
16	6	0	-1.35529
17	7	2	0.183541

B.2. Ecuaciones de Ziegler y Trepp

Los valores de los coeficientes de las ecuaciones A.1.8 y A.1.9 de Ziegler y Trepp, así como de la ecuación de energía en exceso de Gibbs descritas en el capítulo ?? en la sección de propiedades termodinámicas, se presentan en las tablas B.3 y B.4 respectivamente.

Tabla B.3: Coeficientes de las ecuaciones de Ziegler y Trepp (Amoniaco y Agua como fluidos puros).

Coeficientes	Amoniaco	Agua
A ₁	3.971423E-02	2.748796E-02
A ₂	-1.790557E-05	-1.016665E-05
A ₃	-1.308905E-02	-4.452025E-03
A ₄	3.752836E-03	8.389246E-04
B ₁	1.634519E+01	1.214557E+01
B ₂	-6.508119	-1.898065
B ₃	1.448937	2.911966E-01
C ₁	-1.049377E-02	2.136131E-02
C ₂	-8.288224	-3.169291E+01
C ₃	-6.647257E+02	-4.634611E+04
C ₄	-3.045352E+03	0
D ₁	3.673647	4.019170
D ₂	9.989629E-02	-5.175550E-02
D ₃	3.617622E-02	1.951939E-02
$h_{r,0}^L$	4.878573	21.821141
$h_{r,0}^V$	26.468873	60.965058
$T_{r,0}$	3.2252	5.0705
$P_{r,0}$	2	3

Tabla B.4: Coeficientes para la ecuación de energía en exceso de Gibbs.

E1	-41.733398	E9	0.387983
E2	0.02414	E10	-0.004772
E3	6.702285	E11	-4.648107
E4	-0.011475	E12	0.836376
E5	63.608967	E13	-3.553627
E6	-62.490768	E14	0.000904
E7	1.761064	E15	24.361723
E8	0.008626	E16	-20.736547

B.3. Polinomio de Ashrae

A partir de los datos publicados en (ASHRAE HANDBOOK, 1997), Gómez, (2002) obtuvo ecuaciones en forma de polinomios, los cuales están en función de la temperatura, tal como se muestra a continuación:

$$f(T) = AT^6 + BT^5 + CT^4 + DT^3 + ET^2 + FT^1 + GT^0 \quad (\text{B.3.1})$$

Donde T esta dada en °C y los coeficientes correspondientes A; B; C; D; E; F; y G varían de acuerdo al fluido que sea utilizado.

B.3.1. Amoniac como fluido puro

Las tablas B.5 y B.6 listan los valores de los coeficiente A; B; C; D; E; F y G para obtener las propiedades del amoniaco como fluido puro en fase vapor y fase liquido respectivamente. Los valores que se obtienen de estas ecuaciones son validos para un rango de temperaturas de -10 a 120 °C.

Tabla B.5: Coeficientes para el amoniaco como fluido puro en fase vapor.

	Entalpia	Entropia	Viscosidad	Conductividad Térmica	Calor Especifico	Volumen Especifico
A			1.00E-11		2.40E-11	4.79E-13
B			-2.53E-09		-5.41E-09	-1.95E-10
C	3.00E-08	-2.00E-09	2.40E-07	2.11E-07	5.59E-07	3.34E-08
D	-5.00E-06	-2.00E-08	-8.96E-06	-2.04E-05	-1.49E-05	-3.30E-06
E	6.00E-04	4.00E-05	1.31E-04	0.001153	2.54E-04	0.000218
F	-1.43E-01	-0.0132	0.03078	0.161607	0.017122	-0.010297
G	7.295	5.6212	9.08386	21.8169	2.651	0.28942

Tabla B.6: Coeficientes para el amoniaco como fluido puro en fase líquido.

	Entalpia	Entropia	Viscosidad	Conductividad Térmica	Calor Especifico	Densidad
A			9.52E-12		2.17E-11	
B			-4.14E-09		-5.30E-09	
C	-3.28E-07	1.78E-09	6.85E-07	-2.42E-07	4.80E-07	-7.16E-07
D	2.22E-05	-1.42E-07	-9.22E-05	2.16E-05	-1.74E-05	8.82E-05
E	-0.00515	-1.44E-05	0.0137	-1.83E-03	2.28E-04	-0.006756
F	0.9148	0.016896	-1.9485	-2.02702	0.0075	-1.317
G	0.0915	0.998807	175.73	520.299	4.6052	638.891

B.3.2. Agua como fluido puro

Las tablas B.7 y B.8 listan los valores de los coeficiente A; B; C; D; E; F y G para obtener las propiedades del agua como fluido puro en fase vapor y fase liquido respectivamente. Los valores que se obtienen de estas ecuaciones son validos para un rango de temperaturas de 0 a 300 °C.

Tabla B.7: Coeficientes para el agua como fluido puro en fase vapor.

	Entalpia	Entropia	Viscosidad	Conductividad Térmica	Calor Especifico	Volumen Especifico
A	-6.26E-13	5.19E-16	1.83E-14	3.34E-13	3.71E-14	1.43E-09
B	4.79E-10	-1.22E-12	-1.41E-11	-2.44E-10	-2.67E-11	-5.84E-07
C	-1.57E-07	9.45E-10	4.86E-09	6.70E-08	7.68E-09	9.79E-05
D	1.40E-05	-4.22E-07	-1.01E-06	-8.19E-06	9.75E-07	-0.008724
E	0.001362	1.20E-04	1.37E-04	7.36E-04	6.94E-05	0.451019
F	1.86547	-0.026695	0.0234528	0.041973	8.99E-04	-13.6444
G	2500.39	9.15404	9.19931	17.1184	1.87466	205.707

Tabla B.8: Coeficientes para el agua como fluido puro en fase líquido.

	Entalpia	Entropia	Viscosidad	Conductividad Térmica	Calor Especifico	Densidad
A			1.56E-10	2.06E-12	1.68E-14	-4.79E-13
B			-1.38E-07	-1.93E-09	-1.26E-11	4.36E-10
C	2.09E-10		4.86E-05	6.28E-07	3.99E-09	-1.78E-07
D	-5.13E-06	3.05E-08	-0.00885	-7.39E-05	-6.29E-07	3.98E-05
E	0.000771	-2.32E-05	9.01E-01	-0.00602	6.05E-05	-0.00714
F	4.14103	0.015064	-5.28E+01	2.08	-0.00265	0.0403
G	0.579001	0.00333	1770	60	4.22	1000

B.3.3. Aire como gas estándar

La tabla B.9 lista los valores de los A; B; C; D; E; F y G para obtener las propiedades del aire como gas estándar. Los valores que se obtienen de estas ecuaciones son validos en un rango de temperaturas de -73 a 1000 °C.

Tabla B.9: Coeficientes para el aire como gas estándar.

	Entalpía	Entropía	Viscosidad	Conductividad Térmica	Calor Específico	Densidad
A						4.43E-17
B						-1.07E-13
C			4.34E-12		1.34E-10	1.04E-10
D		8.95E-09	1.79E-08		5.14E-07	-5.33E-08
E		-6.34E-06	0.000029	6.25E-09	0.000586	1.76E-05
F	1.01857	0.003696	0.046618	6.28E-05	0.033721	0.004805
G	272.269	6.77452	17.133	0.024943	1005.96	1.29647

Como es sabido las propiedades del aire varían de acuerdo al porcentaje de humedad relativa (w) que este tenga, así que para corregir la capacidad calorífica (C_p) y la densidad ρ se incluyen los siguiente factores de corrección:

$$\text{Para}(C_p) \quad \text{F.C.} = (0.8725 + w) + 0.999496$$

$$\text{Para}(\rho) \quad \text{F.C.} = (-0.55556 + w) + 1.00056$$

Apéndice C

Implementación de métodos convencionales

En esta sección se presentan la implementación de los métodos convencionales utilizados en la realización de este estudio.

C.1. Sustitución directa

Este método consiste en una simple sustitución de los valores supuestos por los valores calculados,

$$x_{k+1} = g(x_k)$$

Según se reporta, con sustitución directa la convergencia es lenta pero segura, sin embargo teóricamente la convergencia es garantizada solo si los valores eigen del Jacobiano de las funciones de residuo son en absoluto menor que uno. En general esta condición no se cumple por completo, y por lo tanto no es muy recomendado, solo se utiliza para aquellos casos en los cuales los otros métodos se comportan inestables o para generar valores iniciales para métodos más efectivos.

C.2. Wegstein

Este es el método que usualmente es mas rápido y confiable para la convergencia de las corrientes de corte. Es una extrapolación de las iteraciones de sustitución directa. Las interacciones entre las variables son ignoradas y por tanto no funciona bien cuando las variables están fuertemente relacionadas. Wegstein es el método por defecto en la mayoría de los simuladores.

Este método es definido como sigue:

$$x_i^{k+1} = (1 - q_i) f_i^k(x^k) + q_i^k x_i^k \tag{C.2.1}$$

donde los parámetros q_i^k es dado por

$$q_i^k = \frac{s_i^k}{s_i^k - 1} \quad (\text{C.2.2})$$

y s_i^k por

$$s_i^k = \frac{f_i^k(x^k) - f_i^{k-1}(x^{k-1})}{x_i^k - x_i^{k-1}} \quad (\text{C.2.3})$$

En la práctica es necesario subir y bajar los límites de q_i^k para inducir estabilidad

$$q_i^{\min} \leq q_i^k \leq q_i^{\max}$$

Típicamente los valores para q_i^{\max} y q_i^{\min} son cero y cinco respectivamente. Estos valores fueron utilizados para el presente trabajo.

C.3. Broyden

Este método fue sugerido para el uso de los problemas de flowsheet por Rosen (1966). Este método resuelve de forma directa la ecuación $f(x) = 0$, por medio de una aproximación lineal de la matriz Jacobiana.

Dados los valores de x^0, W^0

$$x^{k+1} = x^k + W^k f(x^k) \quad (\text{C.3.4})$$

$$W^{k+1} = W^k - \frac{(p^k + W^k y^k) p^{kT} W^k}{p^{kT} W^k y^k} \quad (\text{C.3.5})$$

donde

?

$$\begin{aligned} p^k &= x^{k+1} - x^k \\ y^k &= f(x^{k+1}) - f(x^k) \end{aligned} \quad (\text{C.3.6})$$

En adición a la regla en la cual se genera un nuevo valor supuesto x^{k+1} del último valor x^k . La matriz *través* W^k es una aproximación de la matriz Jacobiana de la función $f(x)$. El problema principal a ser considerado en la implementación de este método es la selección de un valor conveniente para W^0 .

Dado W^k es la una aproximación de la inversa negativa de la matriz Jacobiana de $f(x)$, una manera obvia de establecer W^0 es a través de la aproximación de la Jacobiana en x^0 por el método de diferencias finitas y después la inversión de la matriz resultante. Este procedimiento fue recomendado por el mismo Broyden, pero este tiene una gran desventaja: La evaluación por diferencia finitas y la inversión de la matriz trae consigo la incorporación de código extra en la implementación del método de Broyden. Para resolver este problema existen algunos enfoques. El enfoque más utilizado y más simple de implementar consiste en establecer que $W^0 = -I$, donde I es la matriz identidad, dicho enfoque fue el utilizado en el presente trabajo.

Apéndice D

Secuencias de solución de los ciclos

Para llevar a cabo los experimentos descritos en las secciones 5.5 y 6.2, se utilizaran cinco ciclos de Sistemas de Enfriamiento por Absorción, los cuales según a nuestro juicio son suficientes para llevar a cabo el presente estudio. Dichos ciclos, son los que se muestran en la siguiente tabla:

Tabla D.1: Ciclos

Ciclo	No. de Equipos
Básico	7
Simple Efecto	11
GAX	16
GAX Ramificado	18
GAX Ramificado con ICS	19

Para cada uno de estos ciclos de acuerdo a la estrategia modular secuencial, se deberá descomponer el flowsheet en particiones y determinar la procedencia de resolución de cada partición. Encontrar el menor número de corrientes de corte (rasgado) para cada partición y determinar la procedencia de resolución de unidades (equipos) por cada partición.

En este apéndice, se describe la secuencia, las particiones, las corrientes de corte y las variables iterativas de cada uno de los ciclos de la tabla anterior. Los nombres de los equipos y las numeraciones de las corrientes de cada ciclo corresponden a los diagramas de flujo mostrados el capítulo 5 en la sección 5.2.

D.1. Particiones

Es ciclo básico es prácticamente lineal, solo contiene una recirculación y por tanto no se requirieron hacer particiones. Las particiones hechas a los ciclos CBIE, GAX, Ramificado GAX con y sin ICS se muestran en las tablas D.2 a D.5.

Tabla D.2: Particiones para el Ciclo Básico con Integración Energética (CBIE).

Partición	Equipos
1	RE, MEL, GGN, ICS, BS
2	CO, PE, VER, EV
3	VES, AB
Total = 3	Total = 11

Tabla D.3: Particiones para el Ciclo GAX.

Partición	Equipos
1	GGN, GES, GHX, SEP, MEV, RE, MEL
2	CO-PE-VER-EV
3	AB-BS-AHX-VES-GAX
Total = 3	Total = 16

Tabla D.4: Particiones para el Ciclo Ramificado GAX.

Partición	Equipos
1	GGN, GES, GHX, SEP, MEV, RE, MEL
2	CO-PE-VER-EV
3	AB-BS1-AHX-VES-GAX,DIL,BS2
Total = 3	Total = 18

Tabla D.5: Particiones para el Ciclo Ramificado GAX con ICS.

Partición	Equipos
1	GGN, GES, GHX, SEP, MEV, RE, MEL, ICS
2	CO-PE-VER-EV
3	AB-BS1-AHX-VES-GAX,DIL,BS2
Total = 3	Total = 19

D.2. Secuencia de cálculo

En esta sección se reportan las secuencias de cálculo, corrientes de corte y variables iterativas para cada una de los ciclos definidos, de acuerdo a los experimentos que

se realizaron. Las secuencias de cálculo, las corrientes de corte y demás están en función del esquema que haya utilizado para la asignación de los grados de libertad. Los esquemas probados en el presente trabajo, fueron el tradicional entradas-salidas y un híbrido propuesto. El ciclo GAX fue el único ciclo que se probó con los dos esquemas mencionados.

D.2.1. Esquema entradas-salidas

La secuencia de cálculo, corrientes de corte y las variables definidas para el Ciclo Básico son las que se muestran en la tabla D.6.

Tabla D.6: Secuencia de Cálculo para el Ciclo Básico.

Secuencia de Cálculo	
BS(1)-GEN-CO-VER-EV-VER-AB	
Corrientes de Corte	Variables Iterativas
1	m1, T1
Total = 1	Total = 2

La secuencia de cálculo, corrientes de corte y las variables definidas para el Ciclo Básico con Integración Energética son las que se muestran en la tabla D.7.

Tabla D.7: Secuencia de Cálculo para el Ciclo Básico con Integración Energética (CBIE).

Secuencia de Cálculo	
(GGN(24)-BS(1)-ICS-RE-MEL)-(CO-PE(11)-VER-EV)-(VES-AB)	
Corrientes de Corte	<i>Variables Iterativas</i>
1	m1, T1
11	m11, T11, z11
21	m24, T24, x24
Total = 3	Total = 8

La secuencia de cálculo, corrientes de corte y las variables definidas para el Ciclo GAX son las que se muestran en la tabla D.8.

Tabla D.8: Secuencia de Cálculo para el Ciclo GAX.

Secuencia de Cálculo	
(GGN(2)-GES(4)-GHX(10)-SEP(7)-MEV-RE-MEL)-	
(CO-PE(21)-VER-EV)-(AB(26)-BS-AHX(30)-VES-GAX)	
Corrientes de Corte	Variables Iterativas
2	m2, T2
4	m4, T4
7	m7, T7, z7
10	m10, T10, x10
21	m21, T21, z21
26	m26, T26
30	m30, T30, x30
Total = 7	Total = 18

D.2.2. Esquema híbrido

La secuencia de cálculo, corrientes de corte y las variables definidas para el Ciclo GAX con el esquema híbrido son las que se muestran en la tabla D.9.

Tabla D.9: Secuencia de Cálculo para el Ciclo GAX.

Secuencia de Cálculo	
(GGN(m1, 2)-GES(4)-GHX(10)-SEP(m7,z7,7)-MEV-RE(m15,x15)-MEL)-	
(CO-PE(m21,21)-VER-EV)-(AB(m23,26)-BS-AHX(30)-VES-GAX)	
Corrientes de Corte	Variables Iterativas
2	T2
4	T4
7	T7
10	T10
21	T21
26	T26
30	T30
Total = 7	Total = 7

La secuencia de cálculo, corrientes de corte y las variables definidas para el Ciclo Ramificado GAX con el esquema híbrido son las que se muestran en la tabla D.10.

Tabla D.10: Secuencia de Cálculo para el Ciclo Ramificado GAX.

Secuencia de Cálculo	
(GGN(m1, 3)-GES(5)-GHX(7)-SEP(m29,z29,29)-MEV-RE(m10,x10)- MEL(m23,x23,23))-(CO-PE(m14,14)-VER-EV)-	
(AB(m16,18)-BS2-AHX(20)-VES-GAX-DIL(m21)-BS1)	
Corrientes de Corte	Variables Iterativas
3	T3
5	T5
7	T7, x7
14	T14, z14
18	T18
20	T20, X20
23	T23
29	T29
Total = 8	Total = 11

La secuencia de cálculo, corrientes de corte y las variables definidas para el Ciclo Ramificado GAX con ICS con el esquema híbrido son las que se muestran en la tabla D.11.

Tabla D.11: Secuencia de Cálculo para el Ciclo Ramificado GAX con ICS.

Secuencia de Cálculo	
(GGN(m1, 3)-GES(5)-GHX(7)-SEP(m29,z29,29)-MEV-RE(m10,x10) ICS(m23,x23,23)-MEL)-(CO-PE(m14,14)-VER-EV)-	
(AB(m16,18)-BS2-AHX(20)-VES-GAX-DIL(m21)-BS1)	
Corrientes de Corte	Variables Iterativas
3	T3
5	T5
7	T7, x7
14	T14, z14
18	T18
20	T20, X20
23	T23
29	T29
Total = 8	Total = 11

Apéndice E

Condiciones de operación

Las condiciones de operación para llevar a cabo los experimentos utilizando el ciclo Básico son los que se muestran en la tabla E.1.

Tabla E.1: Condiciones de Operación de Ciclo Básico.

Equipo	Parámetro	Valor	Unidad
AB	CambiodeTempdelAire	6	° C
AB	PresiondeEntradadeAire	1	bars
AB	TemperaturadeEntradaDeAire	20	° C
BS	DiferencialdePresion	8.8	bars
BS	EficienciadelaBomba	0.75	-
CO	CalorTransferidoenelEquipo	5.360489	KW
CO	CambiodeTempdelAire	7	° C
CO	FlujoMasicodeEntradadeAire	45.27905	kg/min
CO	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
CO	PresiondeEntradadeAire	1	bars
CO	TempdeAproxdeCorrientes	8.3	° C
CO	TemperaturadeEntradadeAire	20	° C
EV	cambiodeTempdelaSolucion	18.86	° C
EV	FlujoMasicodeEntradadeAgua	1.6417	kg/min
EV	PresiondeEntradadeAgua	1	bars
EV	TempdeAproxdeCorrientes	6	° C
EV	TemperaturadeEntradadeAgua	16	° C
GEN	CambiodeTempdelAceite	28.26498	° C
GEN	FlujoMasicodeEntradadeAceite	21.80322	kg/min
GEN	PresiondeEntradadeAceite	1	bars
GEN	TempdeAproxdeCorrientes	8.1	° C
GEN	TempdeDeseqdeCorrientes	67.5	° C
GEN	TemperaturadeEntradadeAceite	107	° C
VER	DiferencialdePresion	8.8	bars
VES	DiferencialdePresion	8.8	bars

Las condiciones de operación para llevar a cabo los experimentos utilizando el ciclo Básico con Integración Energética son los que se muestran en la tabla E.2.

Tabla E.2: Condiciones de Operación de Ciclo Básico con Integración Energética.

Equipo	Parámetro	Valor	Unidad
AB	CambiodeTempdelAire	6	° C
AB	PresiondeEntradadeAire	1.5	bars
AB	TemperaturadeEntradaDeAire	20	° C
BS	DiferencialdePresion	11.7	bars
BS	EficienciadelaBomba	0.75	-
CO	CalorTransferidoenelEquipo	11.00774	KW
CO	CambiodeTempdelAire	7	° C
CO	FlujoMasicodeEntradadeAire	92.98032	kg/min
CO	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
CO	PresiondeEntradadeAire	1.5	bars
CO	TempdeAproxdeCorrientes	15.1	° C
CO	TemperaturadeEntradadeAire	20	° C
EV	cambiodeTempdelaSolucion	22.1	° C
EV	FlujoMasicodeEntradadeAgua	5.51168251	kg/min
EV	PresiondeEntradadeAgua	1	bars
EV	TempdeAproxdeCorrientes	6	° C
EV	TemperaturadeEntradadeAgua	16	° C
GEN	FlujoMasicodeEntradadeAceite	5.803223	kg/min
GEN	PresiondeEntradadeAceite	1	bars
GEN	TempdeAproxdeCorrientes	40	° C
GEN	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
GEN	TemperaturadeEntradadeAceite	155.5	° C
ICS	TempdeAproxdeCorrientes	11	° C
PE	CalorTransferidoenelEquipo	0.6564015	KW
PE	TempdeAproxDeCorrientes	17.3	° C
RE	FlujoMasicodeEntradadeAire	17.49442	kg/min
RE	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
RE	PresiondeEntradadeAire	1	bars
RE	TempdeAproxDeCorrientes	34.5	° C
RE	TempdeDeseqdeCorrientes	34	° C
RE	TemperaturadeEntradadeAire	20	° C
VER	DiferencialdePresion	11.7	bars
VES	DiferencialdePresion	11.7	bars

Las condiciones de operación para llevar a cabo los experimentos utilizando el ciclo GAX son los que se muestran en las tablas E.3 en la página siguiente y E.4 en la página 126.

Tabla E.3: Condiciones de Operación de Ciclo GAX.

Equipo	Parámetro	Valor	Unidad
AB	CambiodeTempdelAire	6	° C
AB	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
AB	PresiondeEntradadeAire	1	bars
AB	TempdeAproxdeCorrientes	10	° C
AB	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
AB	TemperaturadeEntradaDeAire	40	° C
AHX	TempdeAproxDeCorrientes	10	° C
AHX	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
AHX	TempdeSubenfriamiento	3.145027	° C
BS	DiferencialdePresion	15	bars
BS	EficienciadelaBomba	0.75	-
CO	CalorTransferidoenelEquipo	10.54481	KW
CO	CambiodeTempdelAire	7	° C
CO	FlujoMasicodeEntradadeAire	88.93796	kg/min
CO	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
CO	PresiondeEntradadeAire	1	bars
CO	TempdeAproxdeCorrientes	8	° C
CO	TemperaturadeEntradadeAire	40	° C
EV	cambiodeTempdelaSolucion	4	° C
EV	FlujoMasicodeEntradadeAgua	25.34644	kg/min
EV	PresiondeEntradadeAgua	1	bars
EV	TempdeAproxdeCorrientes	6	° C
EV	TemperaturadeEntradadeAgua	16	° C
GAX	TempdeAproxdeCorrientes	6	° C
GAX	TempdeSubenfriamiento	3.145004	° C
GES	PresiondeEntradadeAceite	1	bars
GES	TempdeAproxdeCorrientes1	11	° C
GES	TempdeAproxdeCorrientes2	8	° C
GES	TempdeDeseqdeCorrientes1	0	° C
GES	TempdeDeseqdeCorrientes2	0	° C
GES	TemperaturadeEntradadeAceite	160	° C
GGN	FlujoMasicodeEntradadeAceite	5.803223	kg/min
GGN	PresiondeEntradadeAceite	1	bars
GGN	TempdeAproxdeCorrientes	40	° C
GGN	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
GGN	TemperaturadeEntradadeAceite	240	° C

Tabla E.4: Condiciones de Operación de Ciclo GAX (cont.).

Equipo	Parámetro	Valor	Unidad
GHX	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
GHX	TempdeSubenfriamiento	0	° C
PE	CalorTransferidoenelEquipo	1.402753	KW
PE	TempdeAproxDeCorrientes	7	° C
RE	FlujoMasicodeEntradadeAire	17.49442	kg/min
RE	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
RE	PresiondeEntradadeAire	1	bars
RE	TempdeAproxDeCorrientes	30	° C
RE	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
RE	TemperaturadeEntradadeAire	40	° C
VER	DiferencialdePresion	15	bars
VES	DiferencialdePresion	15	bars

Las condiciones de operación para llevar a cabo los experimentos utilizando el ciclo Ramificado GAX son los que se muestran en la tablas E.5 en la página siguiente y E.6 en la página 128.

Tabla E.5: Condiciones de Operación de Ciclo Ramificado GAX.

Equipo	Parámetro	Valor	Unidad
AB	CambiodeTempdelAire	6	° C
AB	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
AB	PresiondeEntradadeAire	1	bars
AB	TempdeAproxdeCorrientes	7.52188	° C
AB	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
AB	TemperaturadeEntradaDeAire	40	° C
AHX	TempdeAproxDeCorrientes	10	° C
AHX	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
AHX	TempdeSubenfriamiento	3.145027	° C
BS1	DiferencialdePresion	15	bars
BS1	EficienciadelaBomba	0.75	-
BS2	DiferencialdePresion	15	bars
BS2	EficienciadelaBomba	0.75	-
CO	CalorTransferidoenelEquipo	10.54481	KW
CO	CambiodeTempdelAire	7	° C
CO	FlujoMasicodeEntradadeAire	88.93796	kg/min
CO	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
CO	PresiondeEntradadeAire	1	bars
CO	TempdeAproxdeCorrientes	8	° C
CO	TemperaturadeEntradadeAire	40	° C
DIL	RelaciondeDivision	0.01	-

Tabla E.6: Condiciones de Operación de Ciclo Ramificado GAX (Cont.).

Equipo	Parámetro	Valor	Unidad
EV	cambiodeTempdelaSolucion	4	° C
EV	FlujoMasicodeEntradadeAgua	25.14	kg/min
EV	PresiondeEntradadeAgua	1	bars
EV	TempdeAproxdeCorrientes	6	° C
EV	TemperaturadeEntradadeAgua	16	° C
GAX	TempdeAproxdeCorrientes	6	° C
GAX	TempdeSubenfriamiento	4.692802	° C
GES	PresiondeEntradadeAceite	1	bars
GES	TempdeAproxdeCorrientes1	11	° C
GES	TempdeAproxdeCorrientes2	8	° C
GES	TempdeDeseqdeCorrientes1	0	° C
GES	TempdeDeseqdeCorrientes2	0	° C
GES	TemperaturadeEntradadeAceite	160	° C
GGN	FlujoMasicodeEntradadeAceite	5.803223	kg/min
GGN	PresiondeEntradadeAceite	1	bars
GGN	TempdeAproxdeCorrientes	40	° C
GGN	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
GGN	TemperaturadeEntradadeAceite	240	° C
GHX	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
GHX	TempdeSubenfriamiento	0	° C
PE	CalorTransferidoenelEquipo	1.37906	KW
PE	TempdeAproxDeCorrientes	7	° C
RE	FlujoMasicodeEntradadeAire	17.49442	kg/min
RE	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
RE	PresiondeEntradadeAire	1	bars
RE	TempdeAproxDeCorrientes	30	° C
RE	TempdeDeseqdeCorrientes	6.220512	° C
RE	TemperaturadeEntradadeAire	40	° C
VER	DiferencialdePresion	15	bars
VES	DiferencialdePresion	15	bars

Las condiciones de operación para llevar a cabo los experimentos utilizando el ciclo Ramificado GAX con ICS son los que se muestran en la tablas E.7 en la página siguiente y E.8 en la página 130.

Tabla E.7: Condiciones de Operación de Ciclo Ramificado GAX con ICS.

Equipo	Parámetro	Valor	Unidad
AB	CambiodeTempdelAire	6	° C
AB	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
AB	PresiondeEntradadeAire	1	bars
AB	TempdeAproxdeCorrientes	6.89331	° C
AB	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
AB	TemperaturadeEntradaDeAire	40	° C
AHX	TempdeAproxDeCorrientes	10	° C
AHX	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
AHX	TempdeSubenfriamiento	3.145027	° C
BS1	DiferencialdePresion	15	bars
BS1	EficienciadelaBomba	0.75	-
BS2	DiferencialdePresion	15	bars
BS2	EficienciadelaBomba	0.75	-
CO	CalorTransferidoenelEquipo	10.54481	KW
CO	CambiodeTempdelAire	7	° C
CO	FlujoMasicodeEntradadeAire	88.93796	kg/min
CO	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
CO	PresiondeEntradadeAire	1	bars
CO	TempdeAproxdeCorrientes	8	° C
CO	TemperaturadeEntradadeAire	40	° C
DIL	RelaciondeDivision	0.01	-
EV	cambiodeTempdelaSolucion	4	° C
EV	FlujoMasicodeEntradadeAgua	25.14	kg/min
EV	PresiondeEntradadeAgua	1	bars
EV	TempdeAproxdeCorrientes	6	° C
EV	TemperaturadeEntradadeAgua	16	° C
GAX	TempdeAproxdeCorrientes	6	° C
GAX	TempdeSubenfriamiento	0	° C
GES	PresiondeEntradadeAceite	1	bars
GES	TempdeAproxdeCorrientes1	11	° C
GES	TempdeAproxdeCorrientes2	8	° C
GES	TempdeDeseqdeCorrientes1	0	° C
GES	TempdeDeseqdeCorrientes2	0	° C
GES	TemperaturadeEntradadeAceite	160	° C
GGN	FlujoMasicodeEntradadeAceite	5.803223	kg/min
GGN	PresiondeEntradadeAceite	1	bars
GGN	TempdeAproxdeCorrientes	40	° C
GGN	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C
GGN	TemperaturadeEntradadeAceite	240	° C
GHX	TempdeDeseqdeCorrientes	0	° C

Tabla E.8: Condiciones de Operación de Ciclo Ramificado GAX con ICS (Cont.).

Equipo	Parámetro	Valor	Unidad
GHX	TempdeSubenfriamiento	0	° C
ICS	CalorTransferidoenelEquipo	0.255	KW
PE	CalorTransferidoenelEquipo	1.37906	KW
PE	TempdeAproxDeCorrientes	7	° C
RE	FlujoMasicodeEntradadeAire	17.49442	kg/min
RE	HumedadRelativadelAire	0.0186	kgH2O/kgAireSeco
RE	PresiondeEntradadeAire	1	bars
RE	TempdeAproxDeCorrientes	30	° C
RE	TempdeDeseqdeCorrientes	6.220512	° C
RE	TemperaturadeEntradadeAire	40	° C
VER	DiferencialdePresion	15	bars
VES	DiferencialdePresion	15	bars