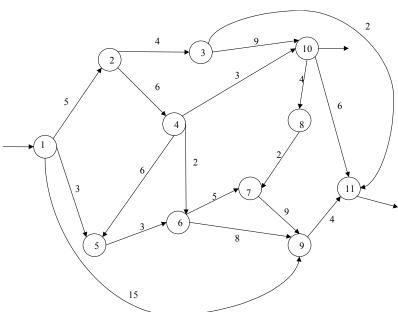


PROBLEMAS GAMS CURSO 2009-2010. SIMULACION Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

Mínimo coste de transporte de crudo en una red	1
1. Problema formulacion disyuntiva 1	2
2. Problema formulación disyuntiva 2.	3
3. Síntesis de procesos	4
4. Planificacion de la producción	5
5. Superestructura.	6
6. Separación No Total.	8
7. Extractor en contracorriente.	10
8. Síntesis de Procesos: Reacción y Separación.	12
9. Red de Reactores	15
10. Secuencia de Separación Utilizando Membranas	17

MÍNIMO COSTE DE TRANSPORTE DE CRUDO EN UNA RED

La figura siguiente representa una red de tuberías para transportar crudo. Suponga que salen 500 barriles de crudo desde el nodo 1 y que deben ser transportados a través de la red hasta los nodos 10 y 11. 200 barriles al nodo 10 y 300 al nodo 11. El coste de bombear un barril a través de cada arco (trozo de tubería entre nodos) está marcado en la figura. Plantear y resolver un problema de programación lineal que permita calcular el coste mínimo de transporte a través de la red.



¿Cómo de modificaría el resultado si el coste de transportar un barril desde el nodo 3 al nodo 11 fuese de 10 unidades en lugar de 2?.

1. PROBLEMA FORMULACION DISYUNTIVA 1

Plantee y resuelva un MINLP para el siguiente problema de optimización escrito en forma disyuntiva

$$\min z = 10 + c_1 + c_2 - x_1 + 4x_3 - 5x_2 - 4x_4$$
s.a.
$$x_2 - x_3 = 0$$

$$Y_1 \vee Y_2$$

$$Y_3 \vee Y_4 \vee Y_5$$

$$\begin{bmatrix}
Y_1 \\
-Ln(1+x_1) + x_2 \leq 0 \\
c_1 = 5
\end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix}
Y_2 \\
-Ln(2+x_1) + 3x_2 \leq 0 \\
c_1 = 2
\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}
Y_3 \\
\exp(x_4) - 2 - x_3 \leq 0 \\
c_2 = 6
\end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix}
Y_4 \\
\exp\left(\frac{x_4}{2}\right) - 1 - x_3 \leq 0 \\
c_2 = 3
\end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix}
Y_5 \\
x_4 - 0.9x_3 = 0 \\
c_2 = 10
\end{bmatrix}$$

$$x_i \geq 0 \quad i = 1, 2, 3, 4$$

$$x_i \leq 4 \quad i = 1, 2, 3, 4$$

El logaritmo natural de x (Ln(x)) se escribe: log(x)

La exponencial
$$(e^x)$$
 se escribe: $\exp(x)$



2. PROBLEMA FORMULACIÓN DISYUNTIVA 2

Resuelva el siguiente problema planteado de manera disyuntiva transformándolo a un MINLP. Utilice la formulación de envolvente convexa.

min:
$$z = e^{\left(-Ln(x_1) + x_2 Ln(x_2) - \sqrt{x_3}\right)}$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ x_1 - x_2 \le 0 \\ x_1 + x_2 - 5 \ge 0 \\ x_1 \le 10 - x_2 \end{bmatrix} \stackrel{\checkmark}{=} \begin{bmatrix} y_2 \\ x_1 \le 20 - x_2 \\ x_1 - 5 - \frac{1}{2}x_2 \le 0 \\ x_1 \ge 8 - 0.6x_2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} Y_6 \\ x_3 \le -0.5 x_2 + 7 + x_1 \end{bmatrix} \underline{\vee} \begin{bmatrix} Y_7 \\ x_1 \le x_2 - 0.5 x_3 + 6 \end{bmatrix}$$

$$1 \le x_1 \le 10$$

$$1 \leq x_2 \leq 10 \qquad Y_1, Y_2, Y_3, Y_4, Y_5, Y_6, Y_7 \in \{Verdad, Falso\}$$

$$1 \le x3 \le 10$$

En GAMS: La raíz cuadrada de x (\sqrt{x}) se escribe: sqrt(x);

El logaritmo natural de x (Ln(x)) se escribe: log(x)

La exponencial (e^x) se escribe: $\exp(x)$



3. SÍNTESIS DE PROCESOS

Una compañía está considerando producir el producto químico C, que puede manufacturar o bien a través del proceso II o del proceso III. Ambos procesos utilizan como materia prima el reactivo B. B se puede comprar a otra compañía o bien se puede manufacturar a través del proceso I, el cual usa A como materia prima. Dadas las especificaciones de la tabla siguiente: Dibujar la superstructura de alternativas para la producción de C. formular un problema de programación matemática y resolverlo para decidir:

¿Qué proceso construir (II y III son exclusivos)

¿Cómo obtener el producto químico B?

¿Cuanto se debe producir de C?

El objetivo es maximizar beneficios.

Considere los dos casos siguientes:

- **a)** La máxima demanda de C es de 10 tons/h. con un precio de venta de 1800 Euros/ton.
- **b)** La máxima demanda de C es de 15 ton/h. el precio de venta es de de 1800 Euros/ton para las primeras 10 ton y 1500 Euros/ton para el exceso.

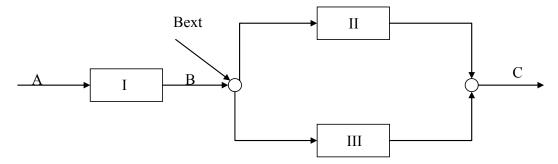
Datos	Costes de Inversion y Operacion			
		Fijo (Euros / h.)	Variable (Euors / ton de	
			materia prima introducida).)	
Proceso I		1000	250	
Proceso II		1500	400	
Proceso III		2000	550	
Precios	A	500 Euros / ton.		
	В	950 Euros / ton.		
Conversiones	Proceso I	90 % de A a B		
	Proceso II	82 % de B a C		
	Proceso III	95 % de B a C		

Disponibilidad máxima de A: 16 ton / h.

NOTAS:

Para resolver el problema considere la superestructura de la figura. Dado que es una superestructura en red, considere disyunciones de dos términos, en las que cada una

de las unidades puede existir o no. En el caso de no existir, todos las variables asociadas a dicha unidad deben ser cero.



4. PLANIFICACION DE LA PRODUCCIÓN

Una línea de fabricación de una empresa fabrica dos productos. Lo datos de costes y demanda se dan en la tablas adjuntas. Cuando la fabricación en una semana de uno de los productos excede la demanda, este exceso de producción se manda a un almacén para satisfacer la demanda de semanas posteriores. Si en una semana la cantidad producida más la almacenada no satisface la demanda tenemos una demanda no satisfecha, lo que supone un coste de penalización adicional. El inventario inicial (cantidad en almacén) es cero y debe ser cero al final de las cuatro semanas de producción. Nota: La demanda no satisfecha deberá serlo, en la medida de lo posible, en las semanas posteriores.

El tiempo total disponible (lo que incluye producción y limpieza) por semana es de 80 h. Sólo se puede producir un tipo de producto por semana. La línea de producción debe ser parada y limpiada al final de cada semana con el tiempo y los costes que se indican.

Determine cuál debe ser la política óptima de producción de la empresa para maximizar el beneficio.

	Prod. 1	Prod. 2
Tiempo de limpieza (h)	6	11
Coste de limpieza (€)	250	400
Tiempo necesario de producción por unidad (h)	0.5	0.75
Coste de producción (€ / unidad)	9	14
Coste de almacén (€ / unidad semana)	3	3
Penalización unitaria por demanda no satisfecha (€ / semana)	15	20
Precio de venta (€ / unidad)	25	35



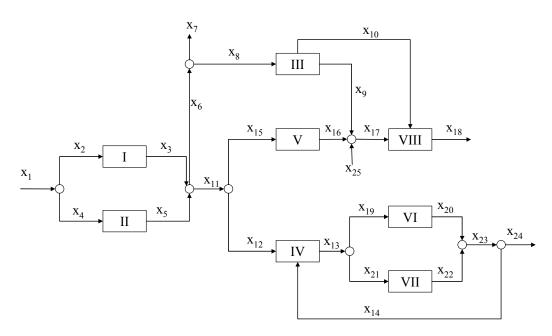
Datos de Demanda:

Producto	Semana 1	Semana 2	Semana 3	Semana 4
1	75	95	60	90
2	20	30	45	30

Modifique el problema para tener que limpiar al final de la semana sólo si a la semana siguiente se va a cambiar de producto. (Por supuesto la limpieza de la última semana habrá que llevarla a cabo).

5. SUPERESTRUCTURA.

La figura adjunta representa una superestructura de un proceso.



El coste total del proceso viene dado por la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} coste &= c_1 + c_2 + c_3 + c_4 + c_5 + c_6 + c_7 + c_8 \\ &+ x_2 - 10x_3 + x_4 - 15x_5 - 40x_9 + 15x_{10} + 15x_{14} + 80x_{17} \\ &- 65x_{18} + 25x_{19} - 60x_{20} + 35x_{21} - 80x_{22} - 35x_{25} + 122 \end{aligned}$$

Debido a ciertas restricciones se sabe que:

- El valor de la variable x_{10} debe ser como mínimo el 40% del valor de la variable x_{17} y como máximo el 80% del valor de la variable x_{17} .
- El valor de la variable x_{14} debe ser como mínimo el 20% del valor de la variable x_{12} y como máximo el 80% del valor de la variable x_{12} .

- Las unidades I y II no pueden existir simultáneamente.
- Las unidades IV y V no pueden existir simultáneamente.
- Las unidades VI y VII no pueden existir simultáneamente.

Las relaciones que deben cumplirse si una determinada unidad existe o no vienen dadas por las siguientes disyunciones

$$\begin{bmatrix} Y_{I} \\ \exp(x_{3}) - 1 - x_{2} = 0 \\ c_{1} = 5 \end{bmatrix} \underbrace{\bigvee}_{x_{2} = 0}^{\neg Y_{I}} x_{2} = 0 \\ x_{3} = 0 \\ c_{1} = 0 \end{bmatrix} \underbrace{\bigvee}_{x_{3} = 0}^{\neg Y_{II}} x_{4} = 0 \\ x_{5} = 0 \\ x_{5} = 0 \end{bmatrix} \underbrace{\bigvee}_{x_{5} = 0}^{\neg Y_{III}} x_{4} = 0 \\ x_{5} = 0 \\ x_{5} = 0 \end{bmatrix} \underbrace{\bigvee}_{x_{5} = 0}^{\neg Y_{III}} x_{5} = 0 \\ x_{10} = 0 \\ x_{10} = 0 \\ x_{10} = 0 \\ x_{10} = 0 \end{bmatrix} \underbrace{\bigvee}_{x_{10} = 0}^{\neg Y_{III}} x_{10} = 0 \\ x_{$$

$$x_i \ge 0$$
 $i = 1...25$
 $x_3 \le 2$; $x_5 \le 2$; $x_9 \le 2$; $x_{10} \le 1$; $x_{14} \le 1$; $x_{17} \le 2$; $x_{19} \le 2$; $x_{21} \le 2$; $x_{25} \le 3$
 $x_j \le 5$ $j = \{1, 2, 4, 6, 7, 8, 11, 12, 13, 15, 16, 18, 20, 22, 23, 24\}$

Escriba un modelo en GAMS para determinar cual es la configuración óptima del problema (qué unidades existen y cuales no, el valor de cada variable y el valor del coste). Use con las ecuaciones lineales la reformulación de envolvente convexa, y use sólo M grande con las ecuaciones no lineales. El modelo debe incluir además todas las relaciones lógicas que serían necesarias para generar todas las alternativas posibles del problema.

NOTA: Llame a su modelo examen (no al archivo, sólo al modelo) y añada las siguientes líneas entre la orden model y la orden solve:



6. SEPARACIÓN NO TOTAL.

La siguiente superestructura representa una red de columnas de destilación para separar una mezcla de tres componentes A B C, que no forman azeótropos, y donde A es el componente más volátil y C el menos volátil.

El coste de cada una de las columnas se puede calcular como un coste fijo más un coste variable. El coste variable se puede calcular como un coeficiente multiplicado por el flujo total (en kmol/h) que sale por la cabeza de la columna.

	Coste fijo (miles de € año-1)	Coeficiente Coste variable (miles de € h kmol-1 año-
Columna 1	100	20
Columna 2	100	10
Columna 3	100	15
Columna 4	75	8
Columna 5	30	5

La separación que lleva a cabo cada columna viene dada en la siguiente tabla. (Por ejemplo, para la columna 1 el 98% de A alimentado sale en la corriente de destilado, el 2% del B alimentado sale con el destilado y el 0% del C alimentado sale por el destilado):



	Fracción de componente	Fracción de componente que sale con el destilado en cada columna			
	Componente	Componente			
	A	В	C		
Columna 1	0.98	0.02	0		
Columna 2	0.98	0.5	0.02		
Columna 3	0.98	0.98	0.02		
Columna 4	1	0.98	0.02		
Columna 5	0.98	0.02	0		

Datos de la alimentación:

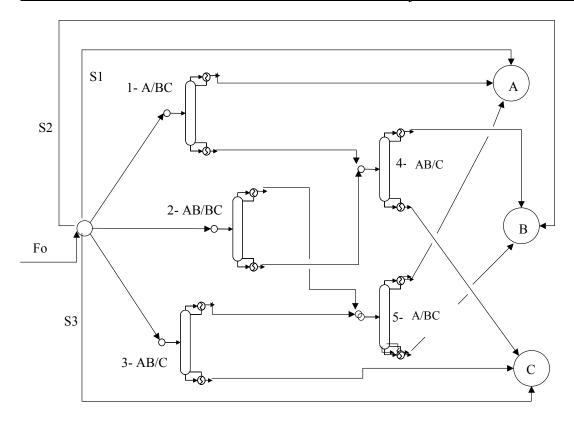
Caudal molar total = 100 kmol/h

Composición – fracción molar-: A = 0.2; B = 0.3; C = 0.5;

El problema, además, debe cumplir las siguientes especificaciones:

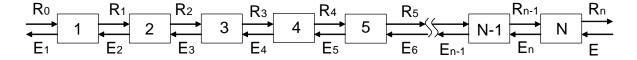
- Al nodo final A debe llegar como mínimo el 80% del A alimentado, no más del 15% del B alimentado y no más del 5% del C alimentado.
- Al nodo final B debe llegar como mínimo el 80% del B alimentado, no más del 10% del A alimentado y no más del 10 % del C alimentado.
- Al nodo final C debe llegar como mínimo el 80% del C alimentado, no más del 10% del B alimentado y no más del 5% del A alimentado.
- Tenga en cuenta que de las columna 1,2,3 sólo puede aparecer una en el resultado final.

Plantee y resuelva un programa de optimización, utilizando variables binarias si lo considera oportuno, que minimice el coste total del proceso.



7. EXTRACTOR EN CONTRACORRIENTE.

Se desea diseñar un extractor multi-etapas en contracorriente como el que se muestra en la figura para eliminar un contaminante de una corriente de agua (Ro).



La corriente de agua está formada por **100 kmoles/h de agua y 1 kmol/h de soluto**. El extractante E es un disolvente orgánico totalmente inmiscible con el agua.

El extractante se puede adquirir a un precio de **10 €kmol**. El coste total de utilizar una etapa se ha estimado en **50 €h**.

Plantee y resuelva un MINLP para determine el caudal de extractante (E) que debe utilizarse, así como el número de etapas que minimice el coste por hora, teniendo en cuenta que por restricciones medioambientales la concentración del contaminante en agua a la salida del sistema debe ser menor que 0.0001 (fracción molar).

DATOS y NOTAS:



Considere cada una de las etapas existentes como etapas de equilibrio donde la relación de equilibrio viene dada por:

$$x_i^E = K x_i^R$$

Donde:

 x_i^E = fracción molar de contaminante en el disolvente que sale de la etapa i

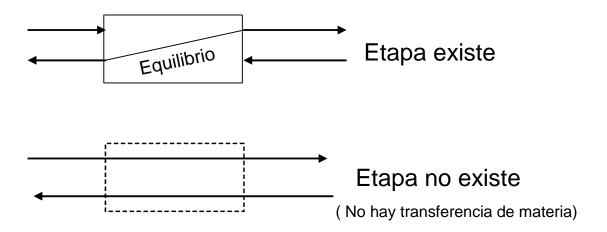
 x_i^R = fracción molar de contaminante en la corriente acuosa que sale de la etapa i

K = constante de equilibrio = 0.8

<u>La solución deberá ser tal que las etapas existentes sean consecutivas</u>, es decir, si existe, por ejemplo, la etapa 4 deberán también existir la uno, la dos y la tres. (La etapa 1 existirá siempre).

Considere un máximo de 15 etapas.

IMPORTANTE: A efectos de modelo, si una etapa no existe considérela como un simple 'bypass' de flujos como se indica en al siguiente figura. Por supuesto si una etapa no existe no debe contribuir al coste total.



En la definición de las variables indique claramente a qué hace referencia cada una de ellas.

Opcional: Repetir el ejercicio utilizando la formulación de envolvente convexa en lugar de una formulación de M grande.



8. SÍNTESIS DE PROCESOS: REACCIÓN Y SEPARACIÓN.

Una empresa desea fabricar un producto químico B. Dicho producto se obtiene a partir de un reactivo A. A su vez, el producto B puede descomponer de acuerdo con el siguiente esquema de reacción (el disolvente D se comporta como un inerte y no reacciona):

$$A \xrightarrow{k1} B \xrightarrow{k2} C$$

La empresa recibe una corriente de una mezcla de A con un disolvente (D), (100 kmol/h de A y 100 kmol/h de C). Dicha mezcla junto con una recirculación de A+D (ver figura) se introduce en un reactor de flujo en pistón. A la salida se separan los compuestos utilizando columnas de destilación que producen la separación total de los componentes de acuerdo a como muestra la figura.

Plantee un problema de optimización que maximice el beneficio total anual y determine las condiciones óptimas de operación.

El coste de las columnas se puede expresar como un coste fijo más un coste variable. El coste variable consta de 2 términos el primero es proporcional al flujo total y el segundo al flujo molar de componente clave ligero que entra en la columna, de tal manera que:

Coste columna total anual = CF + flujo molar alimento * (CV1) + flujo molar de clave ligero en el alimento *(CV2)

Columna	Coste fijo (€)	CV1 (€ h/ kmol)	CV2 (€ h /kmol)
1	2000	5	6
2	2000	5	1
3	2000	5	1
4	2000	5	6

El producto químico A se compra a 0.125 € /kmol.

El producto químico B se vende a 0.625 €/kmol

El producto químico C y el disolvente D no tienen valor comercial alguno.

La planta opera 8000 horas al año.



NOTAS:

Para el reactor tenga en cuenta lo siguiente:

Dado que no hay cambio en el número total de moles el caudal molar total de la corriente E será el mismo que el de la corriente S.

Para el reactor puede usar las siguientes ecuaciones integradas función de los flujos molares individuales y del tiempo de residencia

$$n_S^A = n_E^A \exp(-k_1 \tau)$$

$$n_{S}^{B} = \frac{k_{1}}{k_{1} - k_{2}} \left[exp(-k_{2}\tau)n_{E}^{A} - n_{S}^{A} \right]$$

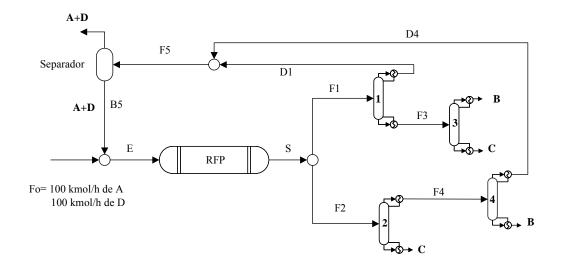
$$n_{S}^{C} = n_{E}^{A} - n_{S}^{A} - n_{S}^{B}$$

$$k1 = 2 h-1$$
 $k2 = 3 h-1;$

 n_E^i = flujo molar de componente i en la corriente E

 n_S^i = flujo molar de componente i en la corriente S

El flujo molar máximo que puede entrar en cualquiera de las columnas es de 20000 kmol/h.



1.- DA/BC

2.- DAB/C

3.- B/C

4.- DA/B



9. RED DE REACTORES

Una empresa quiere producir un producto químico B. Para ello dispone de una disposición de reactores diferentes como la que se muestra en la figura.

El producto B se puede obtener mediante el siguiente esquema de reacción:

$$A \longrightarrow B \longrightarrow C$$

Las cantidades en kmol/h de A y B a la salida de cada reactor dependen de la cantidad a la entrada y del tiempo de residencia de acuerdo a la expresión:

$$A_S = A_E e^{-\tau}$$

$$B_S = (A_E \tau + B_E) e^{-\tau}$$

Donde el subíndice $'_E$ ' hace referencia a la cantidad en kmol/h a la entrada del reactor y el subíndice $'_S$ ' hace referencia a la cantidad en kmol/h a la salida del reactor. τ es el tiempo de residencia (h).

Al sistema se **introducen 10 kmol/h de A** (corriente F de la Figura). Los tiempos de residencia de cada reactor se conocen y vienen dados en la Tabla adjunta.

El coste de operar cada reactor se puede calcular como:

$$Coste = \begin{cases} Cf_1 + CV_1 A_E & Si \quad 0 \le A_E \le 7 \\ Cf_2 + CV_2 A_E & Si \quad 7 \le A_E \le 10 \end{cases}$$

Donde A_E es la cantidad en (kmol/h de A a la entrada de cada reactor), los valores de las constantes Cf_1 , Cf_2 , CV_1 y CV_2 vienen en la Tabla adjunta.

Se obtiene un beneficio de **100 um** (um = unidades monetarias) por cada **kmol de B** en la corriente de producto P. Pero al mismo tiempo hay una penalización de **10 um por cada kmol de A y de 20 um por cada kmol de C** presentes en la corriente de producto (P).

Teniendo en cuenta que:

Los reactores 1, 2 y el bypass B1 no pueden seleccionarse simultáneamente.

Los reactores 3, 4, 5 y el bypass B2 no pueden seleccionarse simultáneamente.

Los reactores 6, 7 y el bypass B3 no pueden seleccionarse simultáneamente.

El reactor 8 y el bypass B4 no pueden seleccionarse simultáneamente.

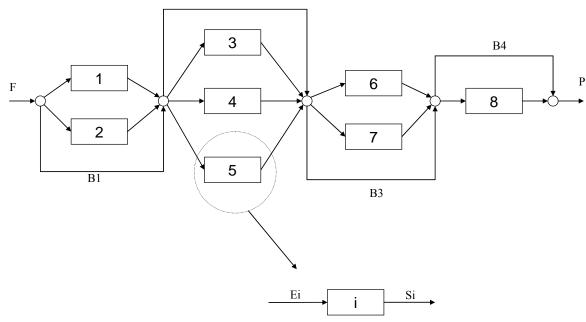
<u>Plantee y resuelva un problema lineal</u> que permita determinar cuál es la configuración de reactores que permite un máximo beneficio por unidad de tiempo.



Nota: Utilice una formulación de envolvente convexa.

	τ	Cf_{I}	Cf_2	CV_1	CV_2
	(h)	(um/h)	(um/h)	(um/kmol)	(um/kmol)
Reactor 1	0.1	10	5	1	8
Reactor 2	0.4	20	10	2	10
Reactor 3	0.1	50	25	1	9
Reactor 4	0.2	20	10	1	50
Reactor 5	0.7	60	30	2	70
Reactor 6	0.2	10	20	1	10
Reactor 7	0.9	50	25	3	15
Reactor 8	0.5	100	50	5	10

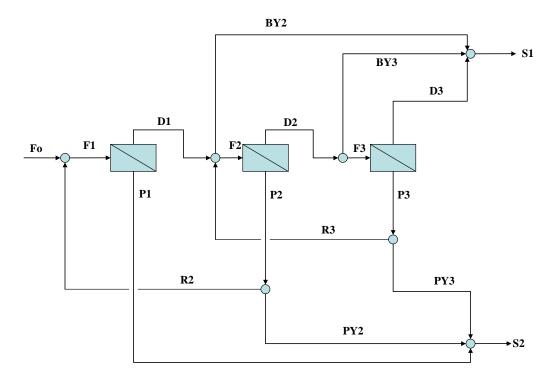
B2





10. SECUENCIA DE SEPARACIÓN UTILIZANDO MEMBRANAS

Una empresa decide implantar un sistema de separación mediante membranas para separar una mezcla 100 kmo/h de dos componentes A y B (fracción molar 0.4, 0.6 respectivamente). El ingeniero de la empresa, decidió utilizar la superestructura que se muestra a continuación.



La superestructura está formada por tres módulos de membrana y varios mezcladores y divisores.

Los siguientes divisores (o mezclador divisor) pueden tener como máximo una salida:

- Divisor del que salen las corrientes F2 y BY2.
- Divisor del que salen las corrientes F3 y BY3
- Divisor del que salen las corrientes R2 y PY2
- Divisor del que salen las corrientes R3 y PY3

Un modulo viene caracterizado por dos parámetros (α_A , α_B) de forma que:

$$D_{m,A} = \alpha_A F_{m,A}$$

$$D_{m,B} = \alpha_B F_{m,B}$$
 $A, B \in Componentes; m = modulos membrana$



El coste de una membrana se puede calcular como un coste fijo más un coste variable que es proporcional al flujo total de componente A que sale por el permeado (corriente D)

$$Coste_m = CF_m + CV_m D_{m,A}$$

Para cada modulo de membrana que finalmente se instale se puede elegir entre cuatro configuraciones cuyos parámetros se dan a continuación.

TIPO	CF	CV	$lpha_A$	α_B
1	100	30	0.95	0.3
2	90	15	0.90	0.4
3	80	9	0.85	0.5
4	70	9	0.80	0.6

El objetivo es maximizar el beneficio. Que se puede calcular a través de la siguiente expresión:

$$Beneficio = 100 \left(S1_A + S2_B\right) - 50 \left(S1_B + S2_A\right) - Coste \ membranas$$

Tenga en cuenta que **la máxima cantidad** que puede entrar a un módulo de componente A o de B es **de 200 kmol/h**

Plantee y resuelva un **MILP** que permita decidir que membranas usar, de que tipo, que caudal circula por cada corriente y cuál sería el beneficio esperado.

NOTAS:

Si es necesario use la formulación de envolvente convexa y no la de M grande.

Use la nomenclatura lo más parecida posible a la mostrada en la figura y definala claramente en su problema.

Existen diferentes formas de resolver el problema. Quizá lo más sencillo, en este caso, es definir un set para componentes, otro para módulos y otro para cada tipo de membrana. Así como variables binarias para decidir que tipo de membrana se instala en cada módulo y por donde debe ir el flujo en cada divisor