

MODELO PARA LA INTEGRACIÓN ENERGÉTICA: CASO PARTICULAR DE UNA
TERMOELÉCTRICA

CRISTIAN SÁNCHEZ QUIROGA

UNIVERSIDAD PONTIFICIA BOLIVARIANA
ESCUELA DE INGENIERIAS
INGENIERÍA QUÍMICA
MAESTRÍA EN DISEÑO Y GESTIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES
MEDELLÍN
2018

MODELO PARA LA INTEGRACIÓN ENERGÉTICA: CASO PARTICULAR DE UNA
TERMOELÉCTRICA

CRISTIAN SÁNCHEZ QUIROGA
Ingeniero Químico

Trabajo de grado para optar al título de Magister en Diseño y Gestión de Procesos
Industriales

Director
ERIKA ARENAS CASTIBLANCO
Doctora en ingeniería

UNIVERSIDAD PONTIFICIA BOLIVARIANA
ESCUELA DE INGENIERIAS
INGENIERÍA QUÍMICA
MAESTRÍA EN DISEÑO Y GESTIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES
MEDELLÍN
2018

Julio 19 de 2018

Cristian Sánchez Quiroga

Declaro que este trabajo de grado no ha sido presentado para optar a un título, ya sea en igual forma o con variaciones, en esta o cualquier otra universidad” Art 82 Régimen Discente de Formación Avanzada.

Firma



AGRADECIMIENTOS

Agradezco de manera especial a Lucas Gonzalez; una gran persona que me brindo su cariño y conocimiento. Me permitió crecer de manera profesional y me enseñó a mirar la industria de una manera diferente, que en Paz descanse.

También quiero agradecer a mi directora, honestamente ella ha sido un modelo a seguir para mí y lo seguiré siendo. Es una persona franca y directa que me ha aconsejado y acompañado, no solo a nivel profesional sino también personal. Sé que soy una persona terca y relajada pero realmente agradezco que haya sido mi directora en este postgrado. Espero poder seguir trabajando de la mano con ella en el futuro, y que me permita seguir creciendo a su lado y al lado de las demás personas que respeto y admiro en la Universidad Pontificia Bolivariana.

Sinceramente agradecido

Cristian Sánchez Quiroga

CONTENIDO

RESUMEN.....	10
INTRODUCCIÓN.....	11
1. MARCO TEÓRICO	14
1.1. REDES DE INTERCAMBIADORES DE CALOR	14
1.1.1. NÚMERO MÍNIMO DE UNIDADES DE INTERCAMBIO	15
1.1.2. ÁREA TOTAL DE INTERCAMBIO	15
1.1.3. COSTOS TOTALES DE LA RED DE INTERCAMBIADORES DE CALOR.....	17
1.1.4. METODOLOGÍAS SECUENCIALES	18
1.1.4.1. MÉTODOS BASADOS EN EL USO DEL PINCH.....	18
1.1.4.2. PROGRAMACIÓN BASADA EN SOLUCIONES SECUENCIALES.....	20
1.1.5. METODOLOGÍAS SIMULTÁNEAS	21
1.2. OPTIMIZACIÓN DE REDES DE INTERCAMBIADORES DE CALOR	22
1.3. MÉTODO DE OPTIMIZACIÓN.....	24
1.3.1. ALGORITMOS EVOLUTIVOS BASADOS EN PRINCIPIOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA.....	27
1.4. SIMULACIÓN Y MODELACIÓN DE PLANTAS TERMOELÉCTRICAS	29
1.4.1. UNIDAD SEPARADORA DE AIRE.....	30
1.4.2. GASIFICADOR	31
1.4.3. REMOCIÓN DE CO _s Y H ₂ S	32
1.4.4. GENERACIÓN DE ENERGÍA	33
2. METODOLOGÍA	35
2.1. DISEÑO DEL ALGORITMO	35
2.2. VALIDACIÓN.....	43
2.3. APLICACIÓN A CASO DE ESTUDIO.....	45
2.3.1. UNIDAD SEPARADORA DE AIRE (USA)	48
2.3.2. GASIFICADOR	48
2.3.3. PROCESO SELEXOL™	53
2.3.4. GENERACIÓN DE ENERGÍA	53
2.3.5. CASO DE ESTUDIO	53
3. RESULTADOS Y ANÁLISIS.....	55
3.1. VALIDACIÓN	55

3.1.1. PROBLEMA DE NUEVE CORRIENTES.....	55
3.1.2. PROBLEMA DE DIEZ CORRIENTES	57
3.1.3. PROBLEMA DE QUINCE CORRIENTES	59
3.2. CASO DE ESTUDIO	62
3.2.1. CASO DE ESTUDIO CON 10, 20 Y 30% DE COGASIFICACIÓN	67
4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	74

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1. ESQUEMA GENERAL DE PLANTA DE GASIFICACIÓN DE CARBÓN PARA LA GENERACIÓN DE ENERGÍA ELÉCTRICA.	12
FIGURA 2. EJEMPLO DE UNA RED DE INTERCAMBIADORES DE CALOR QUE CONSTA 5 CORRIENTES.	14
FIGURA 3. EJEMPLO DEL PUNTO PINCH ENTRE CORRIENTES DE PROCESO A UN ΔT_{MIN} DE 20°C PARA LOS DATOS DE LA TABLA 1.....	19
FIGURA 4. ILUSTRACIÓN DE BUCLES EN UNA RED DE INTERCAMBIADORES.	22
FIGURA 5. ILUSTRACIÓN DE CAMINOS EN UNA RED DE INTERCAMBIADORES DE CALOR.....	23
FIGURA 6. ESQUEMA GENERAL DE UN ALGORITMO EVOLUTIVO.....	26
FIGURA 7. ESQUEMA TÍPICO DE PLANTA DE GASIFICACIÓN PARA LA GENERACIÓN DE ENERGÍA TÉRMICA.	29
FIGURA 8. ESQUEMA UNIDAD SEPARADORA DE AIRE (U.S.A.).....	30
FIGURA 9. MODELO DE SIMULACIÓN DE UN LECHO FLUIDIZADO CIRCULANTE (C. SÁNCHEZ ET AL., 2016).	32
FIGURA 10. PROCESO SELEXOL™ SIMPLIFICADO (SWENY, 1973).	33
FIGURA 11. GENERACIÓN DE LA POBLACIÓN INICIAL.....	36
FIGURA 12. PASOS QUE SE LLEVAN A CABO EN LA OPTIMIZACIÓN.....	39
FIGURA 13. CASO DE ESTUDIO. PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ENERGÍA ELÉCTRICA A PARTIR DE LA GASIFICACIÓN DE CARBÓN.	47
FIGURA 14. ESQUEMA GENERALIZADO DE LA SIMULACIÓN DEL GASIFICADOR. EN ROJO LA ZONA DE VOLATILIZACIÓN, EN VERDE LA ZONA DE REACCIÓN DEL MATERIAL VOLÁTIL Y EN AZUL LA ZONA DE GASIFICACIÓN.....	52
FIGURA 15. RED ÓPTIMA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR PARA EL PROBLEMA 1, OBTENIDA POR LOS AUTORES DEL ARTÍCULO COMPARATIVO.....	55
FIGURA 16. RED ÓPTIMA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR PARA EL PROBLEMA 1, OBTENIDA CON EL MODELO PROPUESTO EN ESTE TRABAJO.	56
FIGURA 17. RED ÓPTIMA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR PARA EL PROBLEMA 2, OBTENIDA POR LOS AUTORES DEL ARTÍCULO COMPARATIVO.....	58
FIGURA 18. RED ÓPTIMA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR PARA EL PROBLEMA 2, OBTENIDA CON EL MODELO PROPUESTO EN ESTE TRABAJO.	58

FIGURA 19. RED ÓPTIMA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR PARA EL PROBLEMA 3, OBTENIDA POR LOS AUTORES DEL ARTÍCULO COMPARATIVO.....	60
FIGURA 20. RED ÓPTIMA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR PARA EL PROBLEMA 3, OBTENIDA CON EL MODELO PROPUESTO EN ESTE TRABAJO.....	61
FIGURA 21. RED DE INTERCAMBIADOR ÓPTIMA PARA CASO DE ESTUDIO CON GASIFICACIÓN DE CARBÓN.....	66
FIGURA 22. RED DE INTERCAMBIADOR ÓPTIMA PARA CASO DE ESTUDIO CON 10% DE COGASIFICACIÓN.....	70
FIGURA 23. RED DE INTERCAMBIADOR ÓPTIMA PARA CASO DE ESTUDIO CON 20% DE COGASIFICACIÓN.....	70
FIGURA 24. RED DE INTERCAMBIADOR ÓPTIMA PARA CASO DE ESTUDIO CON 30% DE COGASIFICACIÓN.....	71

LISTA DE TABLAS

TABLA 1. DATOS DE TEMPERATURAS DE ENTRADA Y SALIDA Y CAPACIDAD CALÓRICA PARA UN PROBLEMA DE 9 CORRIENTES.....	19
TABLA 2. VENTAJAS Y DESVENTAJAS PRINCIPALES DE LA METODOLOGÍA SECUENCIAL Y SIMULTÁNEA.....	21
TABLA 3. COMPOSICIÓN DEL GAS DE SÍNTESIS EN ALGUNAS PLANTAS DE GASIFICACIÓN.....	33
TABLA 4. DATOS PARA PROBLEMA DE 9 CORRIENTES.	43
TABLA 5. DATOS PARA PROBLEMA DE 10 CORRIENTES.	44
TABLA 6. DATOS PARA EL PROBLEMA DE 15 CORRIENTES.	44
TABLA 7. CINÉTICAS Y REACCIONES CONSIDERADAS EN EL GASIFICADOR.	49
TABLA 8. RESULTADOS DEL ANÁLISIS ÚLTIMO Y PRÓXIMO DEL CARBÓN UTILIZADO (DATOS FACILITADOS POR EL GRUPO DE ENERGÍA Y TERMODINÁMICA DE LA UNIVERSIDAD PONTIFICIA BOLIVARIANA).....	52
TABLA 9. DIFERENCIA ENTRE EL VALOR DE LAS F.O. PARA 10 Y 20 GENERACIONES.	57
TABLA 10. RESULTADOS DE LAS CORRIENTES PRINCIPALES PARA LA PLANTA DE GENERACIÓN DE ENERGÍA	63
TABLA 11. DATOS UTILIZADOS EN EL DISEÑO DE LA RED ÓPTIMA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR DEL CASO DE ESTUDIO CON GASIFICACIÓN DE CARBÓN.....	64
TABLA 12. RESULTADOS DE ANÁLISIS PRÓXIMO Y ÚLTIMO PARA EL CUESCO.....	68
TABLA 13. DATOS UTILIZADOS EN EL DISEÑO DE LA RED ÓPTIMA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR DEL CASO DE ESTUDIO CON 10% DE COGASIFICACIÓN.....	68
TABLA 14. DATOS UTILIZADOS EN EL DISEÑO DE LA RED ÓPTIMA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR DEL CASO DE ESTUDIO CON 20% DE COGASIFICACIÓN.....	69
TABLA 15. DATOS UTILIZADOS EN EL DISEÑO DE LA RED ÓPTIMA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR DEL CASO DE ESTUDIO CON 30% DE COGASIFICACIÓN.....	69

RESUMEN

Las redes de intercambiadores de calor son un conjunto de corrientes de proceso y/o de servicios industriales unidas por intercambiadores de calor. Estas redes se diseñan y optimizan con el fin de distribuir de manera óptima los intercambios de flujos de calor de las corrientes de proceso en la red, minimizando los costos operativos y los costos de capital en una planta industrial. En el presente trabajo se desarrolló un modelo que permite obtener la red óptima de intercambiadores de calor para un conjunto de corrientes de un proceso que requieran de integración energética. El modelo posee una metodología secuencial de síntesis que genera inicialmente una red según criterios utilizados en la metodología Pinch, y un modelo simultáneo que genera de manera aleatoria redes de intercambiadores de calor. Para la optimización se desarrolló un algoritmo evolutivo basado en principios de la mecánica cuántica. El algoritmo integra la capacidad de un algoritmo evolutivo para no depender de valores iniciales y la robustez que posee el uso de principios cuánticos para considerar múltiples alternativas de manera simultánea.

El algoritmo propuesto se validó contra problemas reportados en la literatura por múltiples autores, encontrándose en algunos casos soluciones más cercanas al óptimo que las reportadas en la literatura. Además se llevó a cabo un caso de estudio para una planta termoeléctrica en Colombia donde se obtuvo la red de intercambiadores óptima para una gasificación a partir de carbón, y se comparó el diseño obtenido en casos en los que se utilicen mezclas de carbón y biomasa en la planta termoeléctrica. Las redes obtenidas evidencian que es necesario incluir la generación de vapor en el diseño de la red de intercambiadores de calor óptima para obtener una mejor integración energética en la planta termoeléctrica.

Los resultados de este trabajo permiten concluir que métodos heurísticos como lo son los algoritmos evolutivos basados en principios de la mecánica cuántica permiten realizar optimizaciones de sistemas complejos no lineales de variables mixtas. El modelo desarrollado permite obtener de manera satisfactoria redes óptimas de intercambiadores de calor.

INTRODUCCIÓN

Colombia como otros países se encuentra en constante crecimiento poblacional e industrial, y por tanto se esperan incrementos en su demanda energética; según proyecciones de la Unidad de Planeación Minero Energética (UPME), este incremento en los próximos 15 años puede ser de hasta un 52% (Ministerio de Minas y Energía de Colombia & Unidad de Planeación Minero Energética - UPME, 2017). Para el 2016 el sector industrial presentó una demanda energética de alrededor de 80 MBOE (millones de barriles de petróleo equivalente) en el sector industrial; siendo este uno de los principales consumidores de energía en el país junto con el sector de transporte (UPME, 2010). Para lograr un desarrollo sostenible, es importante que se obtengan ahorros energéticos y disminución en las emisiones de gases de efecto invernadero de tal forma que no se afecte la competitividad de la industria colombiana.

Para incrementar la eficiencia energética en la industria, una opción es la mejora del aprovechamiento de calor entre corrientes de proceso; y con esto lograr una disminución en el consumo de combustibles y/o electricidad (Pan, Bulatov, & Smith, 2016). Una forma de llevar a cabo este incremento es mediante la optimización de redes de intercambiadores de calor.

Los intercambiadores de calor son dispositivos utilizados para intercambiar energía en forma de calor. Estos equipos son de común uso en la industria debido a las necesidades de enfriar o calentar corrientes de proceso. Una red de intercambiadores de calor, es un conjunto de corrientes de proceso y/o de servicios industriales entrelazados por intercambiadores de calor. Estos sistemas se diseñan con el fin de reducir la demanda servicios industriales, integrar procesos, aumentar la eficiencia de procesos y reducir costos operativos y de capital (Angsutorn, Siemanond, & Chuvaree, 2014). Estos sistemas por lo general se diseñan asumiendo ciertas variables operativas que se pueden obtener a partir de simulaciones o datos experimentales; algunas de estas son: caudales, temperaturas, presiones, composiciones, coeficientes de transferencia de calor, entre otros. El problema principal de fijar dichas variables es que en ocasiones la red de intercambiadores obtenida puede no ser práctica para el caso industrial de interés (Tantimuratha, Asteris,

Antonopoulos, & Kokossis, 2001). Por ejemplo, las termoeléctricas suelen utilizar diferentes tipos de materia prima; sólida (carbón, biomasa, etc.), líquida (gasolinas, biodiesel, etc.) o gaseosa (gas natural, hidrógeno, etc.) (Electri.madpage.com, 2016).

En los últimos años con la idea de evitar seguir dependiendo del petróleo, alternativas como los combustibles sólidos han sido más llamativas. Siendo la principal la gasificación de carbón, o la cogasificación de este con biomasa (Ren, Wei, & Gao, 2017).

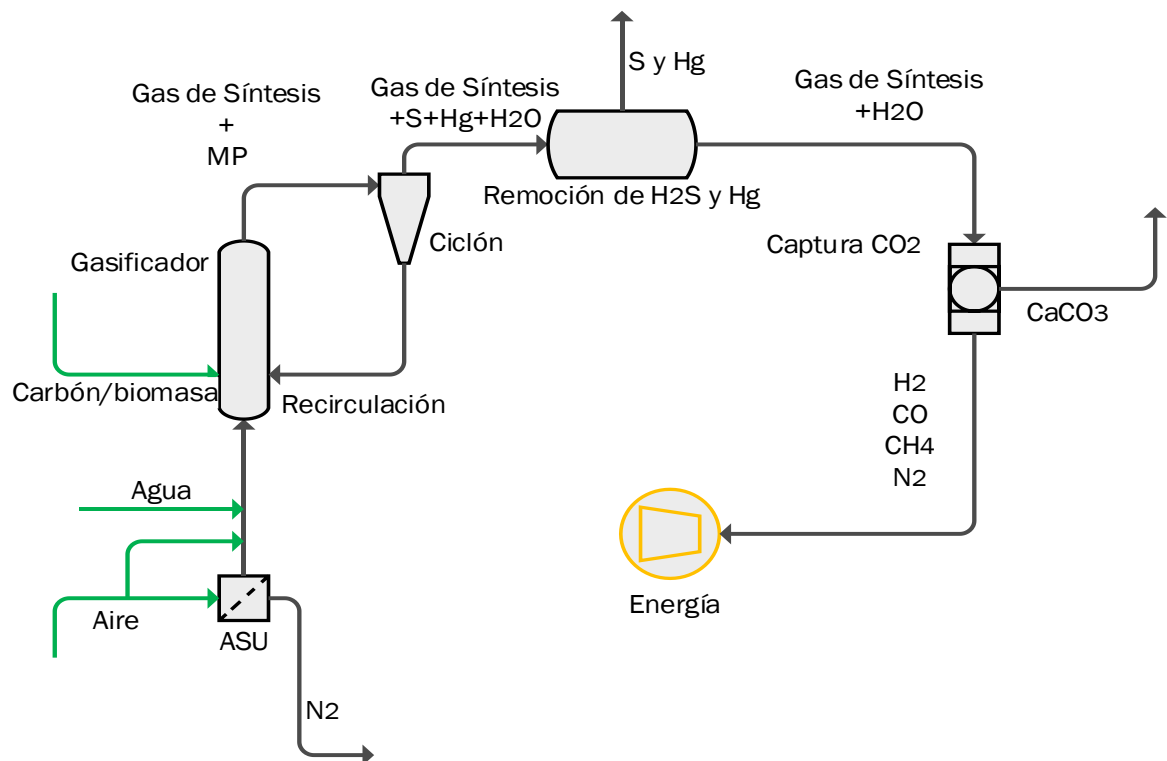


Figura 1. Esquema general de planta de gasificación de carbón para la generación de energía eléctrica.

La forma general de una planta de gasificación de carbón para la generación de energía eléctrica se presenta en la Figura 1. Esta planta cuenta con tres zonas principales, gasificación, purificación y generación de energía. Cada una de estas zonas trabaja a condiciones de temperatura diferentes, creando la necesidad de utilizar intercambiadores de calor. La optimización de estas etapas puede ser el factor diferencial que permita la rentabilidad de plantas de este tipo.

Estas plantas en su ciclo de operación pueden emplear distintos combustibles dependiendo de la disponibilidad y precio de estos. Una red de intercambiadores que fue optimizada para

su uso con un combustible como el carbón, quizás no sea la apropiada para el empleo de una mezcla como el carbón y la biomasa. Lo anterior no solo genera ineficiencias en el proceso productivo, sino que además puede causar falencias en la transferencia de calor entre corrientes de proceso, creando la necesidad de implementar nuevos servicios industriales para suplirlas. De lo anterior surge la pregunta ¿Es posible crear una red de intercambiadores de calor que genere buenos resultados partiendo de diferentes materias primas?

Para responder esta pregunta; este trabajo busca el diseño de una red de intercambiadores de calor óptima tanto en costos operativos como en costos de capital aplicada a un caso particular de una planta termoeléctrica en Colombia. Para dicha optimización se utilizará métodos estocásticos y se estudiarán las ventajas y desventajas del método propuesto con materia prima variable respecto al convencional con materia prima fija.

1. MARCO TEÓRICO

1.1. REDES DE INTERCAMBIADORES DE CALOR

Las redes de intercambiadores de calor son sistemas compuestos por corrientes de proceso y/o servicios industriales unidas por intercambiadores de calor. El diseño de estas redes es un proceso complejo, debido principalmente al alto grado de libertad inherente al arreglo de estas. Las principales causales son las posibles combinaciones entre las corrientes y la cantidad de calor que estas puedan intercambiar; esto sujeto a las restricciones físicas y termodinámicas del sistema.

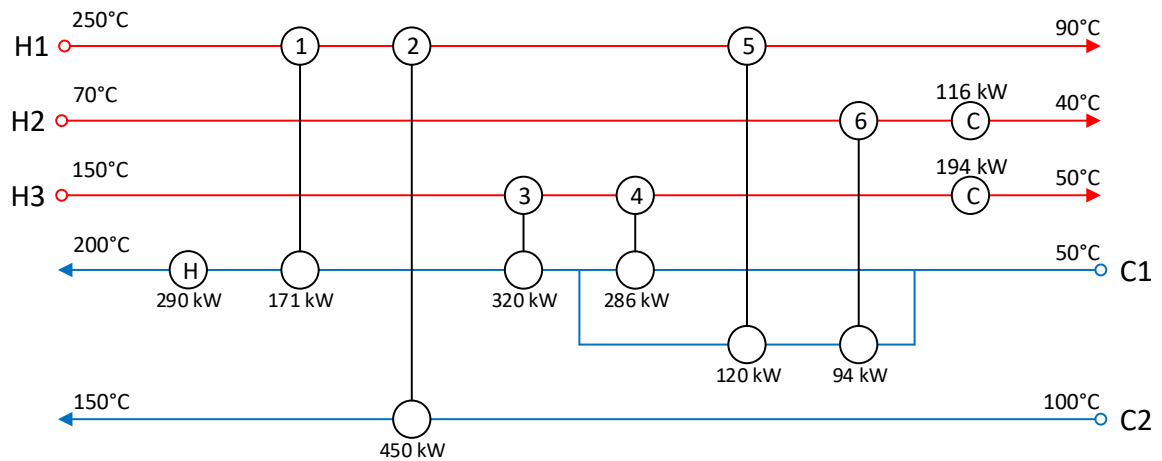


Figura 2. Ejemplo de una red de intercambiadores de calor que consta de 5 corrientes.

En la Figura 2 se presenta una red de intercambiadores de calor para un sistema de 5 corrientes de proceso, tres corrientes calientes (corrientes que deben llevarse de una temperatura superior a una inferior) y dos corrientes frías (corrientes que deben ir de una temperatura inferior a una superior); H y C representan los servicios industriales calientes y fríos respectivamente. Esta red de intercambiadores cuenta de 9 intercambiadores, 6 intercambiadores entre corrientes de proceso y 3 intercambiadores entre corrientes de

proceso y servicios industriales, además de presentar una división de flujo en la corriente C1. Un diseño como el anterior es la solución a un problema de optimización, donde el autor decide la función objetivo que desea minimizar. Para este tipo de problemas, a través de los años, varios autores han tomado diferentes enfoques hacia el problema de optimización; ya sea minimizar la cantidad de unidades de intercambio, minimizar el área total de intercambio, o una unión de las anteriores y minimizar los costos totales de la red de intercambiadores de calor (Frausto-Hernández, Rico-Ramírez, Jiménez-Gutiérrez, & Hernández-Castro, 2003; Kobayashi & Ichikawa, 1971; Linnhoff & Hindmarsh, 1983; Núñez-Serna & Zamora, 2016).

1.1.1. Número mínimo de unidades de intercambio

El número mínimo de unidades de intercambio, depende del número total de corrientes de proceso y servicios industriales que se involucran en el intercambio. Este valor se puede determinar con anticipación al diseño, utilizando la siguiente ecuación (March, 1998).

$$U_{\min} = N - 1 \quad (1)$$

Donde:

U_{\min} : Número mínimo de unidades de intercambio

N: Número total de corrientes de proceso y servicios industriales en la red de intercambiadores de calor

Esta ecuación sirve como punto de referencia para establecer qué tan lejos la solución obtenida se encuentra del número mínimo de unidades de intercambio; este valor se relaciona directamente con los costos de capital de la red de intercambiadores.

1.1.2. Área total de intercambio

El área total de intercambio se obtiene con la sumatoria de las respectivas áreas de cada una de las unidades de intercambio. El cálculo de esta área es una función del delta de

temperatura logarítmico medio (ΔT_{LM}), el calor transferido y el coeficiente de transferencia de calor de las corrientes (March, 1998).

$$A_{int} = \frac{Q}{\Delta T_{LM} U} \quad (2)$$

$$\Delta T_{LM} = \frac{(T_{H,in} - T_{C,out}) - (T_{H,out} - T_{C,in})}{\ln\left(\frac{T_{H,in} - T_{C,out}}{T_{H,out} - T_{C,in}}\right)} \quad (3)$$

$$U = (h_H^{-1} + h_C^{-1})^{-1} \quad (4)$$

Donde:

A_{int} : Área de intercambio

Q: Calor transferido en el intercambiador

ΔT_{LM} : delta de temperatura logarítmico medio

U: Coeficiente global de transferencia de calor

$T_{H,in}$, $T_{H,out}$: Temperatura de corriente caliente inicial y final respectivamente

$T_{C,in}$, $T_{C,out}$: Temperatura de corriente fría inicial y final respectivamente

h_H : Coeficiente de transferencia de calor de corriente caliente

h_C : Coeficiente de transferencia de calor de corriente fría

Sumando todas las áreas de intercambio de cada intercambiador, se obtiene el área total de la red.

$$A_{red} = \sum_{i=1}^n A_{int,i} \quad (5)$$

Las ecuaciones 2-5 son un modelo simple que ha demostrado generar resultados satisfactorios para el cálculo de áreas de intercambiadores de calor (Biyanto et al., 2016; Rev & Fonyo, 1991; Thuy, Pendyala, & Marneni, 2014).

1.1.3. Costos totales de la red de intercambiadores de calor

La red de intercambiadores final debe cumplir con tener la menor cantidad de unidades, la menor área total de intercambio y el menor uso de servicios industriales posible. Se genera un problema de optimización multiobjetivo, donde se quiere obtener un resultado que satisfaga estas tres condiciones. La forma más común de resolver este tipo de problemas es mediante el uso del método de la suma ponderada; donde se combinan las funciones objetivos en una suma, multiplicando cada término por unos pesos que varían dependiendo de cada problema. Para el caso de las redes de intercambiadores de calor, se lleva todo a términos de costos, con el fin de obtener una red que sea favorable económicamente.

$$FO = \text{minimizar}[(\sum A_i F_{HSi} + \sum B_j F_{CSj}) + \sum (CF_k + CC_k A_{int,k}^{\beta k}) + \sum C_b E_b] \quad (6)$$

Donde el primer término corresponde a los costos asociados por el uso de servicios industriales; A_i y B_j corresponden a valores para el costo de utilizar servicios industriales calientes y fríos respectivamente, y F_{CSi} y F_{HSj} son los flujos de los servicios industriales calientes y fríos. El segundo término corresponde a los costos asociados por intercambiadores de calor; donde CF , CC y β son parámetros que dependen del tipo de intercambiador. El último término en la función objetivo corresponde a las pérdidas por caída de presión; C_b es el parámetro de costo asociado al valor energético por kW de energía consumida y E_b es la energía asociada a las pérdidas energéticas por caídas de presión en la red de intercambiadores de calor. La minimización de la ecuación presentada garantiza que la red de intercambiadores de calor posea un bajo número de unidades, menos servicios industriales, y áreas de intercambio moderadas. Ecuaciones de este tipo se pueden encontrar en la literatura y son comúnmente utilizadas para este tipo de problemas (Liu, Fan, Chen, Du, & Yang, 2015; Núñez-Serna & Zamora, 2016).

Para encontrar soluciones de este tipo, en la literatura se habla de dos metodologías principales para la síntesis de redes de intercambiadores de calor, metodologías de solución secuenciales y simultáneas.

1.1.4. Metodologías secuenciales

Las metodologías secuenciales dividen las redes de intercambiadores de calor en subproblemas; lo que permite tener menores requerimientos de cómputo para obtener el diseño de una red de intercambiadores de calor con los menores costos. Para obtener estos subproblemas, el mecanismo más utilizado es la división del rango de temperaturas en intervalos. Estos intervalos permiten modelar el intercambio de calor mientras a su vez se obedecen las leyes de la termodinámica. Estos problemas se solucionan según reglas heurísticas que facilitan la simplificación de estos, es por lo anterior que una metodología de solución secuencial no garantiza el mínimo de la función (Furman & Sahinidis, 2002). Estos métodos poseen la desventaja principal de que la interacción entre los costos operativos y el costo de capital no se considera de manera simultánea, lo que no garantiza la optimalidad (Ahmad, Zhang, Jobson, & Chen, 2012).

Las metodologías secuenciales se subdividen en dos categorías: métodos basados en el uso del Pinch, y programación matemática basada en soluciones secuenciales.

1.1.4.1. Métodos basados en el uso del Pinch

Esta es una metodología sistemática para el ahorro de energía en procesos. La metodología se basa en principios termodinámicos y busca minimizar el uso de servicios industriales, aprovechando al máximo el uso de energía entre corrientes de proceso. Utilizando una herramienta llamada curvas compuestas y el concepto de ΔT_{\min} , la metodología Pinch determina la temperatura a la cual se puede llevar a cabo el máximo intercambio entre corrientes de un proceso (March, 1998). El ΔT_{\min} es la temperatura que determina la máxima recuperación de energía posible con una mínima diferencia de temperatura. Este término influye significativamente los costos del intercambiador, un valor que tienda a 0 de ΔT_{\min} , significa un intercambiador de área infinita, lo que generaría un costo del intercambiador que tiende a infinito. Se suelen fijar algunos valores de ΔT_{\min} según el tipo de fluido que realiza el intercambio (Smith, 2005).

Tabla 1. Datos de temperaturas de entrada y salida y capacidad calórica para un problema de 9 corrientes.

Corriente	T_{in} [°C]	T_{out} [°C]	F_{Cp} [kW/°C]
1	120	65	0.50
2	80	50	0.30
3	135	110	0.29
4	220	95	0.02
5	135	105	0.26
6	65	90	0.15
7	75	200	0.14
8	30	210	0.10
9	60	140	0.05

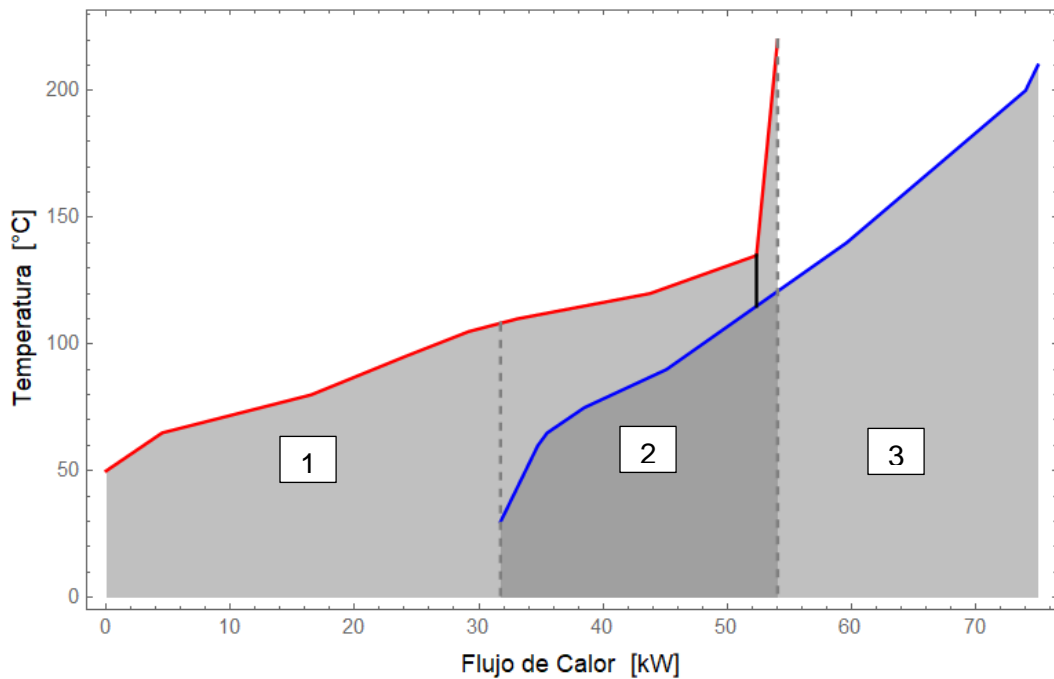


Figura 3. Ejemplo del punto Pinch entre corrientes de proceso a un ΔT_{min} de 20°C para los datos de la Tabla 1.

En la Tabla 1, se presentan los datos para un problema típico de integración energética entre corrientes de proceso, en este caso se cuenta con 5 corrientes calientes y cuatro corrientes frías. F_{Cp} en la tabla hace referencia a un calor específico total, que representa el producto del calor específico de la corriente con su respectivo flujo másico. En la Figura 3, en rojo se representa la curva compuesta para las corrientes calientes y en azul la curva compuesta para las corrientes frías. La sección dos, delimitada en un intervalo cerrado por

líneas punteadas verticales, representa la zona de máximo aprovechamiento de energía entre corrientes de proceso, para una Temperatura Pinch de 135°C para las corrientes calientes y de 115°C para las corrientes frías; denotado como una línea negra en la figura, respetando un ΔT_{\min} de 20°C entre las dos curvas. La sección uno, el eje horizontal representa el calor que se debe suplir con un servicio industrial frío, y para la sección dos, este calor sería el que suple un servicio industrial caliente.

Este tipo de metodologías, cuentan con un gran número de heurísticas que hacen posible la simplificación para así poder llevar a cabo una solución secuencial de estos problemas, el uso de curvas compuestas, gran curvas compuestas y diagramas de malla son las principales herramientas utilizadas en estas metodologías (Sreepathi & Rangaiah, 2014). La idea principal de esta metodología se puede simplificar en lo siguiente, dada una temperatura Pinch, se divide el problema en intervalos que permitan reducir los grados de libertad de intercambio entre corrientes, de una manera intuitiva según principios termodinámicos.

1.1.4.2. Programación basada en soluciones secuenciales

El uso de programación lineal, busca evitar algunas de las simplificaciones involucradas en los métodos basados en el uso del punto Pinch, además de permitir el uso de esta metodología en sistemas que cuenten con un gran número de corrientes. En este caso por ejemplo, se suele comenzar con una solución base que tenga el menor uso de servicios industriales según algunos parámetros utilizados en el método Pinch, pero la ventaja de la programación es permitir el uso de restricciones de intercambio entre corrientes. El uso de programación no lineal y programación no lineal de variables mixtas, permite incluir más restricciones y así disminuir las suposiciones iniciales.

Metodologías de este tipo cuentan con los siguientes pasos. Inicialmente se realiza un diseño base garantizando el uso de la menor cantidad de servicios industriales, luego se adicionan las restricciones y se relajan algunas limitaciones como el ΔT_{\min} en un modelo lineal simple para estructurar el conjunto de redes. Por último el problema de optimización se vuelve no lineal debido a la presencia de la red base, y se requiere del uso de métodos de programación no lineal para optimizar los calores entre las corrientes de proceso y determinar la forma final de la red de intercambiadores (Furman & Sahinidis, 2002). El uso

de superestructuras también es común en esta metodología; este tema se discutirá en la siguiente sección.

1.1.5. Metodologías simultáneas

Como su nombre lo afirma, su objetivo es encontrar la solución óptima sin subdividir el problema. Problemas de este tipo son principalmente de programación no lineal de variables mixtas sujetos a algunas simplificaciones para facilitar la solución de estos modelos. A diferencia de las metodologías secuenciales, las simultáneas son más sensibles a los valores iniciales. Para el caso de las redes de intercambiadores de calor, la cantidad de posibles intercambios es de tal magnitud, que un valor inicial inapropiado puede con facilidad entregar como resultado un óptimo local. Diferentes autores para evitar este problema y garantizar que sus valores iniciales se encuentren esparcidos en toda la región de factibilidad eligen trabajar con superestructuras. Una superestructura de redes de intercambiadores de calor sería por tanto un conjunto de redes que cuenta con todas las posibles permutaciones entre las corrientes que satisfacen los criterios de diseño del autor (Bringas, 2008).

Las metodologías Pinch buscan minimizar el área sujeta a un número mínimo de unidades, sujeta al menor consumo de servicios industriales. Para evitar este tipo de restricciones surgen las metodologías simultáneas. En la Tabla 2 se presenta un comparativo entre las dos metodologías mencionadas.

Tabla 2. Ventajas y desventajas principales de la metodología secuencial y simultánea

	Secuencial	Simultánea
Ventajas	Trabaja con facilidad problemas con mayor cantidad de corrientes	Se considera la interacción entre costos operativos y de capital de manera simultánea
	Puede incluir con facilidad funciones no lineales	
Desventajas	Costos operativos y de capital se consideran de manera separada	A medida que el número de corrientes incrementa la complejidad del problema dificulta la solución
		La inclusión de funciones no lineales dificulta de manera significativa la solución

1.2. OPTIMIZACIÓN DE REDES DE INTERCAMBIADORES DE CALOR

Una vez se crean las redes de intercambiadores iniciales, sea por métodos secuenciales o simultáneos, se procede a realizar la optimización de estas. La optimización de redes de intercambiadores de calor se lleva a cabo al redistribuir los calores dentro de la red ya creada, con fines de encontrar el tamaño ideal de los intercambiadores, sean más grandes, más pequeños, o en algunos casos removidos del sistema.

Dada una red de intercambiadores de calor, esta puede ser optimizada si presenta un bucle o un camino (Smith, 2005). Tanto los caminos como los bucles le dan grados de libertad al diseño. En la Figura 4 y 5, se presentan ejemplos de estos casos. H hace referencia a intercambiadores de servicios industriales calientes (H) como vapor, aceite, etc. C hace referencia a intercambiadores de servicios industriales fríos (C) como refrigerantes, agua de enfriamiento, etc.

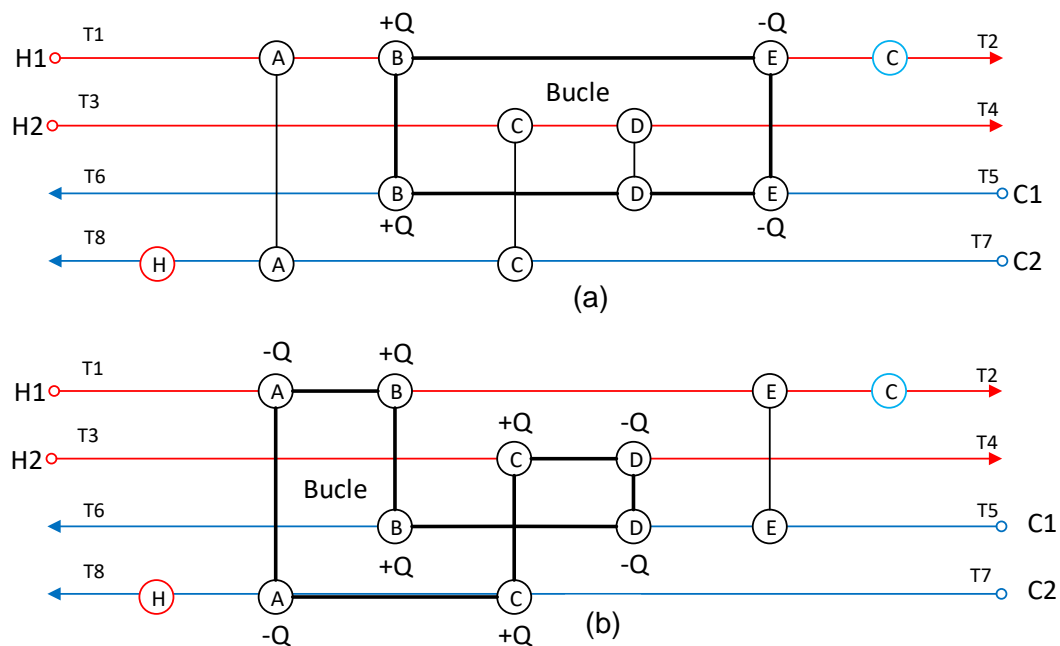


Figura 4. Ilustración de bucles en una red de intercambiadores.

En la Figura 4a, se presenta el ejemplo de un bucle, donde se puede adicionar calor al intercambiador B, lo que implicaría retirar calor al intercambiador E para mantener el balance de energía en el sistema. De la misma manera, en la Figura 4b, se retira calor en el intercambiador A, creando la necesidad de incrementar en B y en C, y a su vez para

mantener el balance energético, se debe disminuir el calor en el intercambiador D cerrando así el bucle.

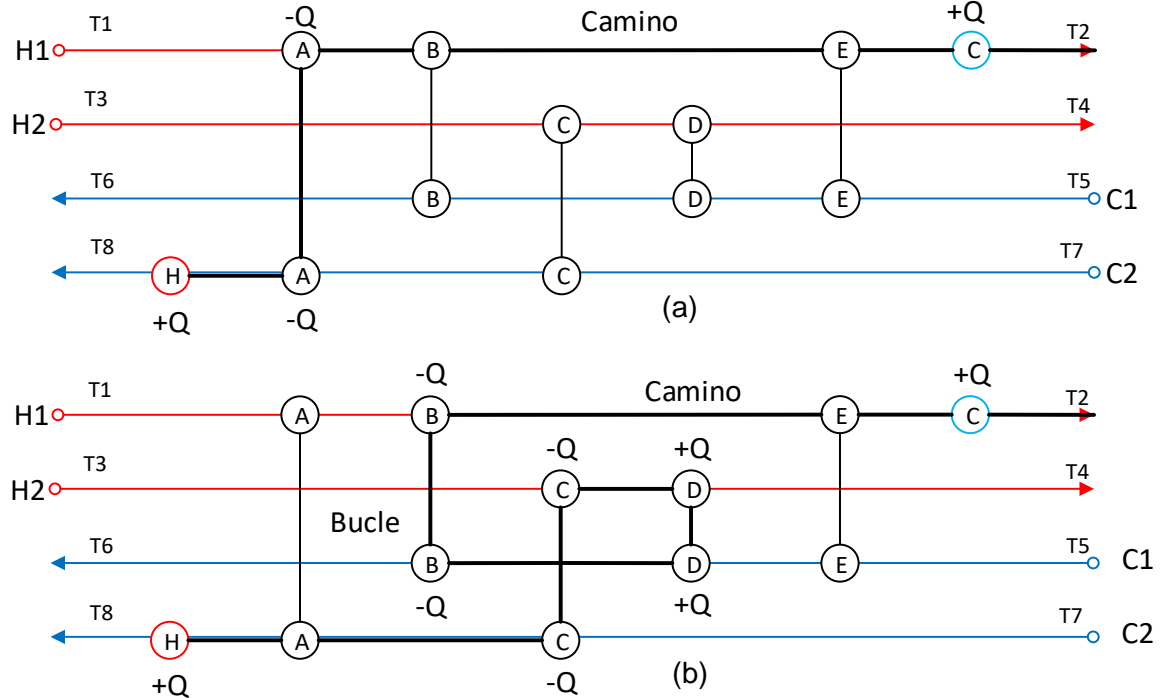


Figura 5. Ilustración de caminos en una red de intercambiadores de calor.

En la Figura 5, se tiene dos ejemplos de caminos en redes de intercambiadores de calor. En la Figura 5a, se inicia adicionando un flujo de calor en el servicio industrial caliente, luego retirando en el intercambiador A para compensar las temperaturas, y finalmente adicionando el calor restante del sistema en el servicio industrial frio. Se aclara que los caminos siempre inician y finalizan en servicios industriales para cualquier tipo de red de intercambiadores de calor. De igual forma en la Figura 5b se tiene otro camino, donde internamente se generan cambios en los flujos de calor de los intercambiadores para compensar las diferencias energéticas y mantener el balance.

El valor de los flujos de calor y el incremento o la disminución de este, son decisiones que el algoritmo de optimización debe tomar; algo que se debe aclarar es que en la zona de optimización no es necesario mantener el criterio del ΔT_{\min} con fines de permitir que la optimización tenga más grados de libertad para trabajar. El delta de temperatura mínimo se ignora, y por tanto la optimización permite que se disminuya el valor de la diferencia de

temperaturas entre corrientes, según la función objetivo, de tal forma que se trabaje dentro del rango de áreas a la cual está restringido el problema. El ΔT_{\min} resultante práctico dependerá de cada problema; es posible que una corriente con un F_{Cp} muy bajo intercambie con una de F_{Cp} alto, esta corriente tendrá un ΔT pequeño pero acorde al intercambio realizado. Para lograr lo anterior el algoritmo debe garantizar lo siguiente (Zhaoyi, Liang, Hongchao, & Jianxiong, 2013):

- Cumplimiento del balance energético para cada corriente
- No permitir que se generen calores negativos
- Eliminar soluciones cuyo ΔT_{\min} no sea práctico, áreas que estén fuera del rango de áreas permitido

El problema descrito es un problema de optimización no lineal de variables mixtas, debido a la presencia de reales y enteros en el conjunto de variables tratadas. Existen múltiples métodos de optimización y mecanismos de programación para tratar este tipo de problemas. En el presente trabajo se utilizó programación no lineal de variables mixtas con un método de optimización de algoritmos evolutivos basados en principios de la mecánica cuántica para dar solución al problema de optimización.

1.3. MÉTODO DE OPTIMIZACIÓN

La mayoría de métodos clásicos de optimización usan procedimientos deterministas para acercarse a la solución óptima. Tales algoritmos comienzan de una suposición aleatoria. Lo que quiere decir, que basándose en una regla pre-especificada de transición, el algoritmo sugiere una dirección de búsqueda, a la cual se llega considerando información local. Por lo tanto se lleva a cabo una búsqueda unidireccional para encontrar una mejor solución. Esta mejor solución se convierte en la nueva solución y se repite el procedimiento anterior por un número finito de veces. Los métodos clásicos de optimización se pueden clasificar en dos grupos distintivos: métodos de búsqueda directos y métodos basados en el gradiente. En métodos de búsqueda directos, solo la función objetivo y las restricciones son usadas para guiar la estrategia de búsqueda, mientras que en métodos basados en el gradiente utilizan la derivada de la función objetivo y/o las restricciones. Debido a que no

se usa la derivada de una función, los métodos directos de búsqueda suelen ser lentos, requiriendo varias evaluaciones de la función para alcanzar convergencia. Por la misma razón, estos pueden ser aplicados a diferentes problemas sin cambios significativos en su algoritmo. Por otra parte, los métodos basados en el gradiente convergen rápido en zonas que se encuentren cerca del óptimo, pero no son eficientes en problemas que no sean diferenciables o posean discontinuidades. Otras desventajas de estos métodos se mencionan a continuación (Deb, 2011):

- La convergencia a una solución óptima depende de la solución inicial seleccionada
- La mayoría de los algoritmos tienden a estancarse en soluciones sub-óptimas
- Los algoritmos no son eficientes al tratar con problemas que se encuentren en un espacio discreto

Esto sugiere que los métodos clásicos de optimización pueden enfrentar dificultades al resolver problemas prácticos de optimización. Estrategias de búsqueda estocásticas tales como algoritmos evolutivos, búsqueda tabú, recocido simulado y optimización de colonias de hormigas se centran en encontrar un vector de variables que no se encuentre lejos del vector óptimo. Para este trabajo el vector de variables equivaldría a una red de intercambiadores de calor. Por lo general, un método estocástico de búsqueda consiste de tres partes (Zitzler, Laumanns, & Bleuler, 2004):

- Una memoria que contenga las soluciones consideradas actualmente como candidatos viables
- Un módulo de selección
- Un módulo de variación

Una de las ventajas principales de los métodos heurísticos es que estos usan operadores estocásticos los cuales utilizan la probabilidad a su favor. Los algoritmos evolutivos son métodos de optimización estocásticos que utilizan “poblaciones” compuestas por conjuntos de posibles soluciones (Coello, 2001). El hecho que estos algoritmos no requieran información del gradiente de la función, implican que son efectivos sin importar la naturaleza de la función objetivo o sus restricciones. Un algoritmo evolutivo utiliza la probabilidad y la selección aleatoria de posibles soluciones para evaluar y mejorar una población de puntos, en lugar de un solo punto a la vez. Estos algoritmos se asemejan a la evolución biológica basada en la teoría de Darwin de selección natural. Estos algoritmos poseen las siguientes

características: una población, la generación en que se encuentra el algoritmo, la reproducción de los mejores candidatos, la mutación de algunos individuos y la selección de los mejores individuos de la población que dicta quienes sobreviven a la siguiente generación (Marler & Arora, 2004).

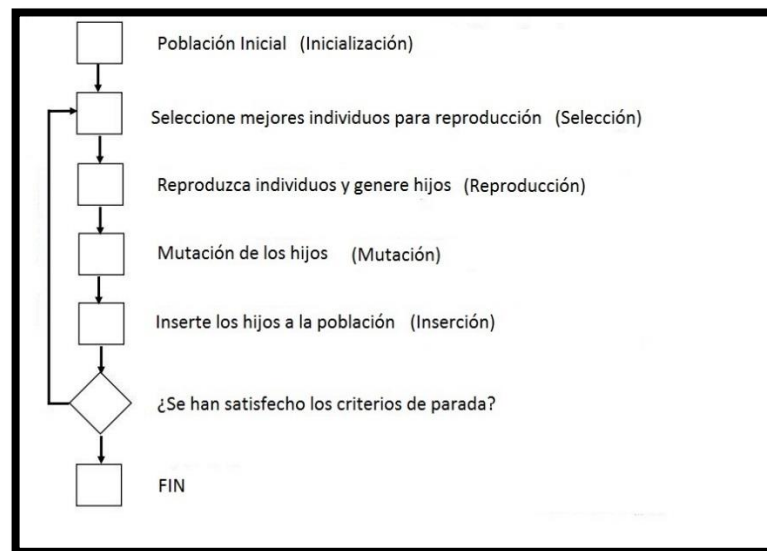


Figura 6. Esquema general de un algoritmo evolutivo.

En la Figura 6, se presenta un esquema general donde se identifica cada una de las etapas de un algoritmo evolutivo clásico. De lo dicho previamente se puede concluir lo siguiente:

- En lugar de buscar un solo punto, los algoritmos evolutivos buscan de forma paralela una población de puntos
- Usan reglas de transición probabilísticas
- No requieren información derivada o conocimiento auxiliar
- Son un método de búsqueda robusto para encontrar óptimos en sistemas discretos

Inicialmente se genera una población de individuos aleatoria con la finalidad de evitar ubicar la nube de individuos en una zona específica de la región de factibilidad; en otras palabras una serie de redes de intercambiadores se genera aleatoriamente garantizando que estas abarque la zona de factibilidad. Se procede a seleccionar un número dado de los mejores individuos de dicha población (teniendo en cuenta los costos totales que serían la función

objetivo), esto con el propósito de que la población final sea una evolución de los mejores individuos a través de las diferentes generaciones. Una vez se tienen los nuevos individuos de la población, se escogen pares de estos para realizar una reproducción de dichos datos, donde la idea es mantener las características de los padres y generar nuevos individuos; para el caso de las redes de intercambiadores de calor, se genera una nueva red la cual debe poseer características similares a la de sus padres. Finalizada la reproducción, se mutan algunos individuos de la población basado en un criterio dado con la idea de mantener la diversidad de los datos; se generan variaciones en la estructura de la red diferente a la de sus padres para diversificar aún más la población. Antes de finalizar cada generación se procede a insertar los datos reproducidos y los mutados a la población para luego seleccionar los más aptos para la supervivencia y volver a iniciar el ciclo de vida hasta que se cumpla un criterio de parada (Sánchez & Betancourt, 2015).

La selección de un algoritmo evolutivo para encontrar el óptimo de la red de intercambiadores de calor también se respalda con los estudios de múltiples autores que también aseguran la superioridad de este tipo de mecanismos de búsqueda para este tipo de problemas (Biyanto et al., 2016; Fazlali & Mohammadi, 2014; Paterson et al., 1978; Sut & Motard, 1984).

1.3.1. Algoritmos evolutivos basados en principios de la mecánica cuántica

En estos últimos 20 años la mecánica cuántica ha empezado a tener cada vez mayor impacto sobre la tecnología y la forma que vemos el universo que nos rodea. Un claro ejemplo de esto es la construcción de computadores cuánticos. A diferencia de un computador clásico que maneja dígitos binarios (*bits*), un computador cuántico utiliza *bits* cuánticos (*qubits*). En contraste con un *bit* que solo puede tomar el valor de 0 o 1, un *qubit* puede estar en superposición de estos dos estados, de tal forma que la partícula cuántica puede estar en muchos estados incompatibles al mismo tiempo (Harik, 1999).

Cada superposición, $|\psi\rangle$, se puede representar como una suma de los estados bases $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, donde α y β son números que denotan las amplitudes de probabilidad de los respectivos estados. Los valores de $|\alpha|^2$ y $|\beta|^2$ son las probabilidades que determinan si al

observar un *qubit* en el estado $|\psi\rangle$ posee un valor de 0 o 1, teniendo en cuenta que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Un sistema cuántico de estado $|\psi_n\rangle$ con n *qubits*, puede ser representado por 2^n estados simultáneamente como se describe en la siguiente ecuación:

$$|\psi_n\rangle = \sum_{j=1}^{2^n} C_j |S_j\rangle \quad (7)$$

Donde C_j es la probabilidad de amplitud del $j^{\text{ésimo}}$ estado S_j descrito por la cadena (x_1, x_2, \dots, x_n) , donde $x_i, i = 1, 2, \dots, n$ es 0 o 1. Sin embargo, el sistema sufre una decoherencia cuántica (también conocida como colapso cuántico) en donde solo un estado permanece al observar el estado cuántico. Los algoritmos evolutivos inspirados en principios de la mecánica cuántica (QIEA de sus siglas en inglés) se enfocan en generar nuevos algoritmos evolutivos utilizando conceptos y principios de la computación cuántica. QIEAs incorpora *qubits*, *qugates* (también conocidas como puertas cuánticas) y decoherencia cuántica en el algoritmo evolutivo para incrementar su robustez. Las puertas cuánticas o *qugates*, son operadores lógicos del tipo *NOT*, *AND*, *OR*, *NAND*, etc., y sirven para modificar el estado de un *qubit* (G. Zhang, 2011).

En otras palabras; para el presente trabajo, un sistema cuántico $|\psi_n\rangle$, que cuenta con n *qubits* sujetos a entrelazamiento cuántico y superposición, se altera a través de *qugates* para en este caso generar nuevas redes de intercambiadores de calor. Para determinar cuál de estos es el mejor espécimen, en la decoherencia cuántica se colapsa la probabilidad y solo un estado cuántico emerge como solución. Este proceso se lleva a cabo para los estados cuánticos generados en el proceso de optimización. El fin de implementar la modalidad cuántica al algoritmo evolutivo, es disminuir la necesidad de tener un rango amplio de valores iniciales (una superestructura es en otras palabras un conjunto que cubre toda la región de factibilidad donde se encuentra el óptimo de la solución) y así permitir que el algoritmo sea más independiente de la población inicial.

1.4. SIMULACIÓN Y MODELACIÓN DE PLANTAS TERMOELÉCTRICAS

Como se mencionó previamente, la cogasificación de carbón es una alternativa llamativa para evitar la dependencia de petróleo del país, y por tanto la planta termoeléctrica se simulará como una planta típica de gasificación, donde nos centraremos en la generación de energía.

La gasificación de carbón o biomasa es un proceso complejo en donde dependiendo de la composición del carbón o la biomasa, la temperatura de reacción, la presión de reacción, y la relación de aire/vapor que se agrega al reactor va a afectar directamente las propiedades del gas efluente. En la Figura 7 se tiene un diagrama general de una planta de gasificación para la generación de energía. La presencia de una unidad shift se debe a que en ocasiones el gas efluente también llamado gas de síntesis presenta relaciones H_2/CO muy bajas, y se hace necesaria la presencia de un reactor shift para incrementar la cantidad de hidrógeno en la mezcla. Posterior a la salida del gasificador se encuentra una zona de purificación o limpieza del gas, donde se trata de remover la parte ácida de este para evitar posibles daños en la turbina y unidades posteriores. Una vez el gas se encuentra limpio se procede a quemar este para así generar energía térmica, incrementar el movimiento del fluido y generar energía eléctrica con ayuda de las turbinas de gas (Barnes, 2013).

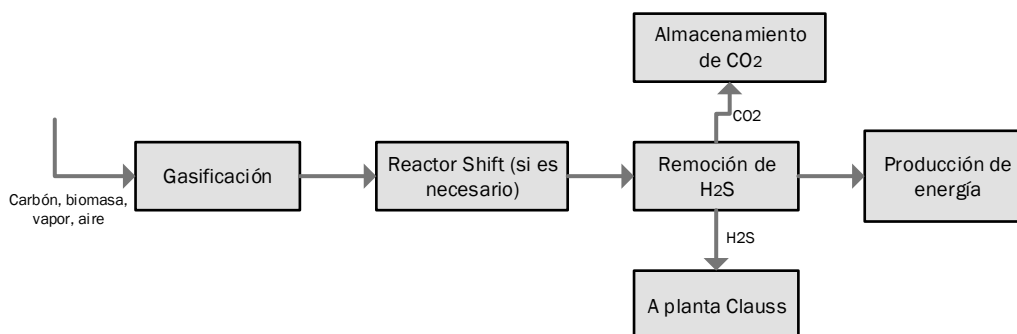


Figura 7. Esquema típico de planta de gasificación para la generación de energía térmica.

1.4.1. Unidad separadora de aire

La separación criogénica del aire es un proceso popular en la industria. Se dice que es la tecnología disponible a nivel industrial más económicamente favorable en plantas con alta producción (Bogdanov, Costin, & Merte, 2009). La unidad separadora de aire se hace necesaria por dos razones principales. La primera es debido a la alta concentración de nitrógeno en el aire, este sumado al nitrógeno que generalmente se utiliza para fluidizar o presurizar los sólidos a la entrada del gasificador, perjudican la eficiencia del proceso pues este compuesto diluye todas las corrientes dificultando los enfriamientos y calentamientos además de disminuir la generación de energía al final del proceso. Un esquema típico de una unidad separadora de aire se presenta en la Figura 8, similar a un proceso Linde con una única etapa de separación criogénica (Bhunya, 2014; Bose, 2012; Frank, 2006; Van Der Ham & Kjelstrup, 2011). Este proceso cuenta con una unidad inicial que se encarga de remover el dióxido de carbono y el agua presente en el aire para evitar congelamiento en las etapas posteriores, generalmente se utilizan mallas moleculares. Posterior existe una sección de compresión e intercambiadores seguidos de una expansión súbita. La torre trabaja a presión atmosférica; el aire se comprime hasta unos 6000 kPa (Bose, 2012) y se debe tener cuidado en cada etapa de compresión de no exceder la temperatura límite recomendada de 260°C (Bloch & Godse, 2006; Staniar, 1950).

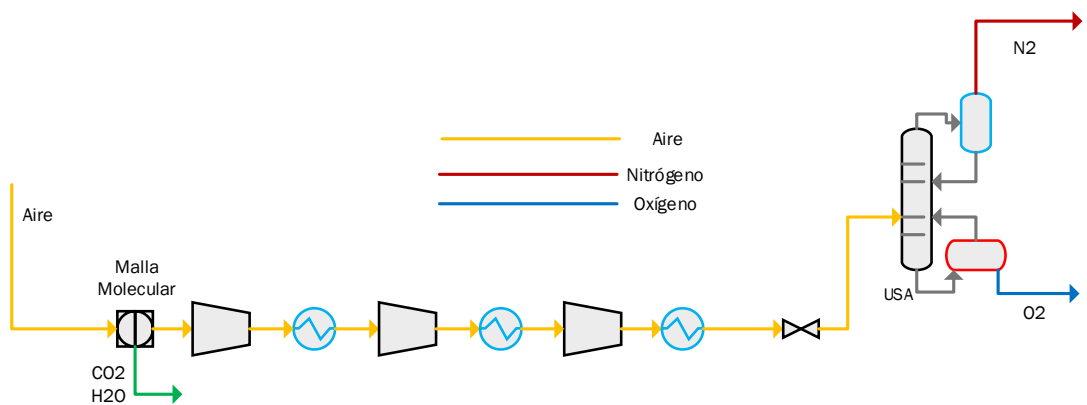


Figura 8. Esquema unidad separadora de aire (U.S.A.).

1.4.2. Gasificador

Diferentes tipos de acercamientos se han propuesto para predecir el comportamiento de gasificadores de lecho fluidizado. Si la necesidad de la simulación es entregar resultados más detallados sobre las transferencias de masa, momentum y calor y la influencia de la geometría del reactor sobre estas, la herramienta recomendada es la dinámica de fluidos computacional (CFD de sus siglas en inglés) (Adamczyk et al., 2014). Un acercamiento cuyas soluciones son aceptadas en la literatura industrial y además permiten tener una idea clara del comportamiento del gasificador, es el uso de simuladores industriales; particularmente Aspen Plus y Aspen Hysys, debido a que una vez el reactor es simulado, estos software presentan la facilidad de permitir la simulación del resto de las unidades de la planta de manera simple, teniendo así una simulación simultánea de todo el proceso (Begum, Rasul, Akbar, & Cork, 2013; Doherty, Reynolds, & Kennedy, 2013; Nayak & Mewada, 2011).

Para la simulación del gasificador diferentes autores proponen subdividir el problema en tres etapas, una etapa de volatilización, una etapa donde reaccionan los volátiles, y una etapa de combustión-gasificación (Jafari, Sotudeh-Gharebagh, & Mostoufi, 2004; Niu, Huang, Jin, & Wang, 2013; Puig-Arnavat, Hernández, Bruno, & Coronas, 2013; Sotudeh-Gharebaagh, Legros, Chaouki, & Paris, 1998). La etapa de gasificación por ser una unidad compleja y que no se encuentra definida apropiadamente en las bases de datos de Aspen Plus o Aspen Hysys, se recomienda en la literatura el modelamiento de este tipo de reactores como la unión de varios reactores ideales (del tipo CSTR, PFR, etc.) (Nieto et al., 2008). En la Figura 9 se presenta un esquema simplificando las etapas explicadas previamente para simular la unidad de gasificación.

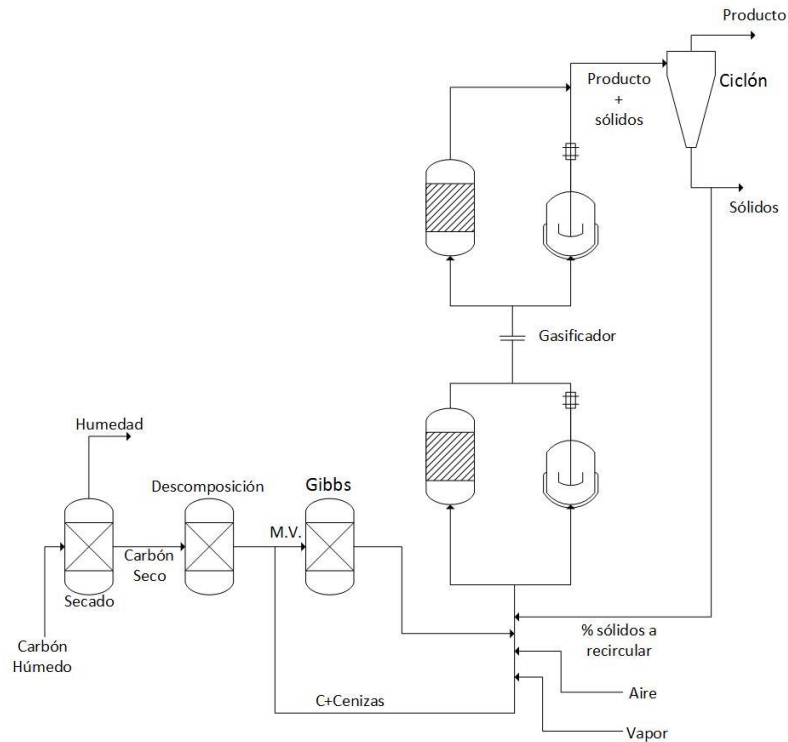


Figura 9. Modelo de simulación de un lecho fluidizado circulante (C. Sánchez et al., 2016).

1.4.3. Remoción de CO_s y H_2S

La presencia de H_2S en el gas efluente a la zona de gasificación hace necesaria una unidad para la separación de este, pues este ácido perjudica las etapas posteriores de la planta. En plantas de gasificación del tipo de las trabajadas en este trabajo, la tecnología más recomendada para separar el H_2S y tener una generación más limpia, es el proceso SELEXOL™ (Bell, Towler, & Fan, 2011; Korens, Simbeck, & Wilhelm, 2002; Rath, 2011; Yeo, Chew, Zhu, Mohamed, & Chai, 2012). Se selecciona este proceso sobre el RECTISOL®, a pesar que el proceso RECTISOL® llega a porcentajes de separación superiores al 99.5%, para el caso de una planta termoeléctrica no se necesitan porcentajes tan altos de separación, con un 99% de separación que provee el proceso SELEXOL™ es suficiente (Kubek, Polla, & Wilcher, 2005).

El esquema del proceso SELEXOL™ se presenta en la Figura 10, se compone de una etapa de absorción, y una etapa de regeneración del SELEXOL™. El H_2S removido se lleva a una planta Claus para la Producción de Azufre puro.

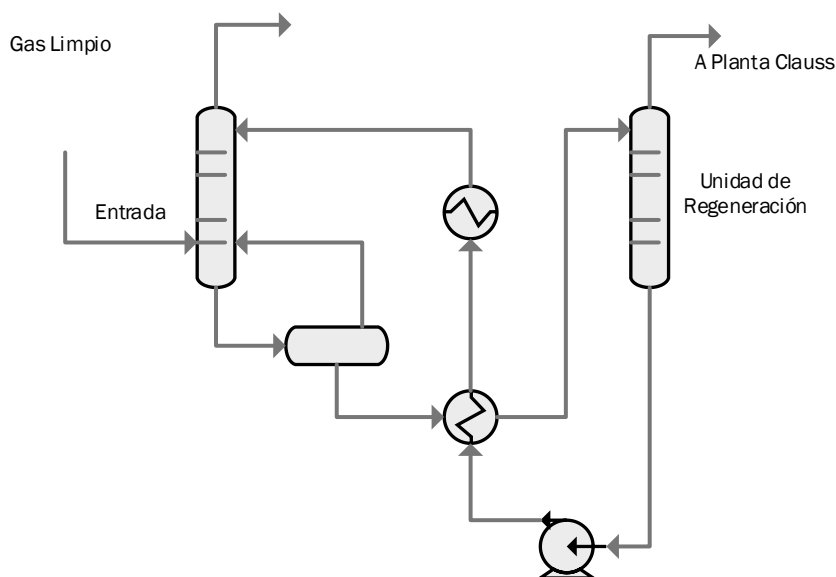


Figura 10. Proceso SELEXOL™ simplificado (Sweny, 1973).

1.4.4. Generación de energía

En plantas de gasificación se debe tener especial cuidado en la selección de la turbina. Los gases de síntesis presentan composiciones diferentes y las turbinas para este tipo de gases presentan limitaciones en la composición del gas, particularmente en la relación H_2/CO , valores menores o iguales a 1 son los más comunes (McDonell, 2000).

Tabla 3. Composición del gas de síntesis en algunas plantas de gasificación.

	PSI	Tampa	El Dorado	Sierra Pacific	ILVA	IBIL	Sarlux	Fife	Exxon Singapore	ELCOGAS	NUON	Nakoso
H ₂	24.8	27.0	35.4	14.5	8.6	12.7	22.7	34.4	44.5	10.70	12.3	10.5
CO	39.5	35.6	45.0	23.6	26.2	15.3	30.6	55.4	35.4	29.31	24.9	30.5
CH ₄	1.5	0.1	0.0	1.3	8.2	3.4	0.2	5.1	0.5	0.07	0.0	0.07
CO ₂	9.3	12.6	17.1	5.6	14.0	11.1	5.6	1.6	17.9	1.89	0.8	2.8
N ₂ +Ar	2.3	6.8	2.1	49.3	42.5	46.0	1.1	3.1	1.4	53.8	42.8	55.5
H ₂ O	22.7	18.7	0.4	5.7	0.5	11.5	39.8	0.1	0.1	4.23	19.2	0.63

	PSI	Tampa	El Dorado	Sierra Pacific	ILVA	IBIL	Sarlux	Fife	Exxon Singapore	ELCOGAS	NUON	Nakoso
H ₂ /CO	0.63	0.75	0.79	0.62	0.33	0.83	0.74	0.62	1.25	0.36	0.50	0.34

En la Tabla 3 se presentan la composición del gas efluente al reactor en algunas plantas de gasificación alrededor del mundo. La simulación de esta etapa se realiza inicialmente con la combustión del gas de síntesis, y luego se lleva este a la turbina donde se produce el trabajo para generar la energía eléctrica (Leśniak, Bieniecki, & Mining, 2014).

2. METODOLOGÍA

En esta sección se presentará la metodología llevada a cabo para el diseño del algoritmo, su validación y aplicación a un caso de estudio.

2.1. DISEÑO DEL ALGORITMO

El diseño del algoritmo inició con la generación de la población inicial. La población inicial es el conjunto de redes de intercambiadores de calor que sirven como base para la futura optimización. Por lo general, la producción de esta población se lleva a cabo de manera aleatoria, evitando así la necesidad de que el usuario deba poseer información sobre la zona en donde se encuentra el valor inicial (Marler & Arora, 2004).

Como se discutió previamente, el algoritmo consta de dos etapas; una etapa en donde la solución se lleva a cabo de manera secuencial y otra simultánea. La parte secuencial toma lugar en la generación de la población inicial, y se divide en dos partes como se observa en la Figura 11. En una de ellas se genera un individuo siguiendo algunos de los criterios de la metodología Pinch, en la otra parte se generan los demás individuos de la población inicial de manera aleatoria; generando un conjunto de redes de intercambiadores de calor, donde tanto las corrientes a intercambiar como la cantidad de calor intercambiado se deciden de manera aleatoria.

La inclusión de un individuo en la población que haya sido generado según criterios Pinch, se lleva a cabo para que este trate de influenciar la población hacia una que posea la menor cantidad de intercambiadores, uno de los principales factores que afectan los costos totales de la red (F. L. Zhang, Yu, & Shen, 2012). La heurística tomada del criterio Pinch para la generación de este individuo es la denominada heurística *tick-off*, la cual busca maximizar el intercambio entre dos corrientes, de tal forma que el calor restante luego del intercambio sea menor (Smith, 2005). Una vez se hayan realizado los intercambios posibles en la red, el algoritmo asigna a las corrientes restantes el servicio industrial adecuado y más económicamente favorable. En la Figura 11, se presenta la creación de este individuo y el resto de la población.

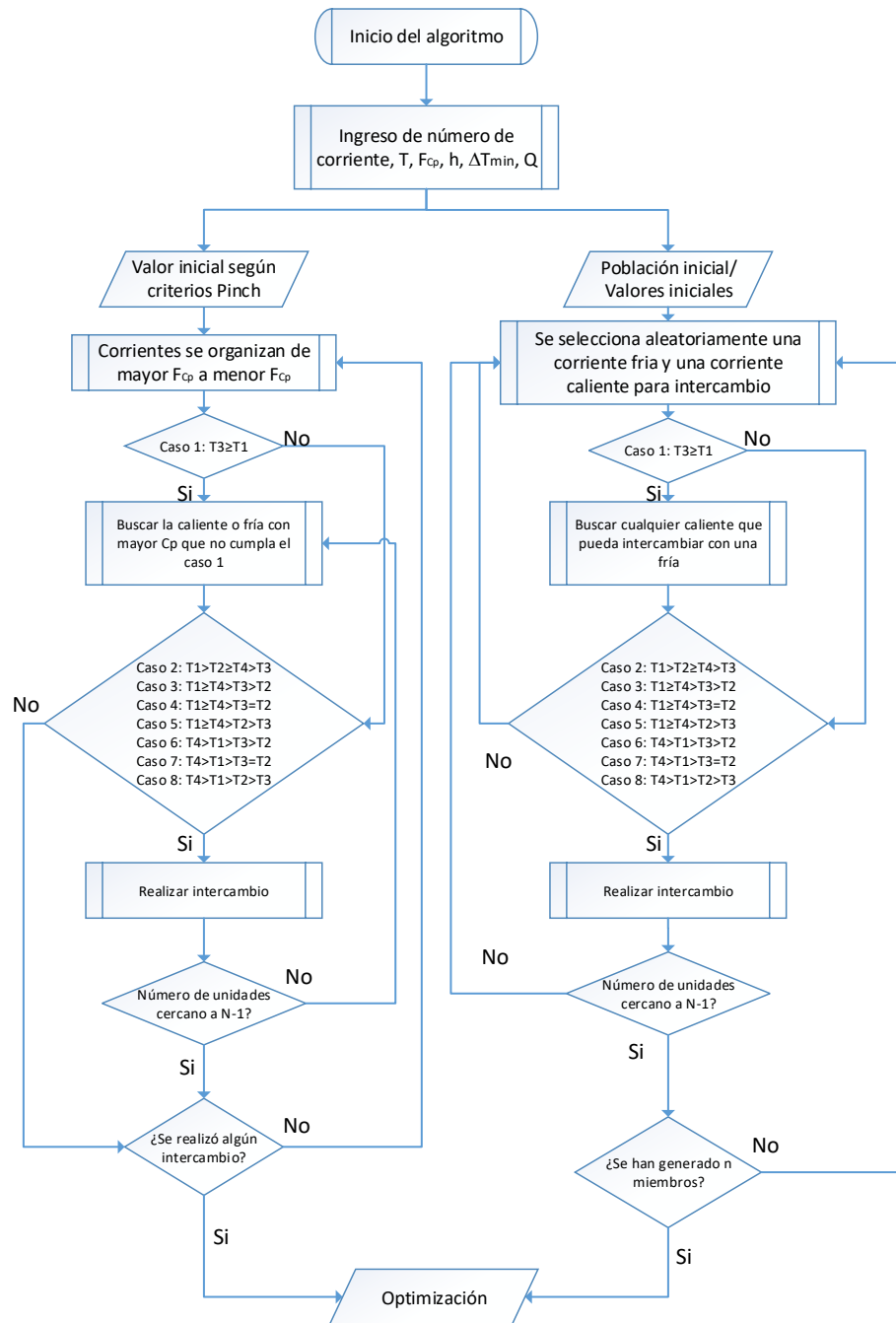


Figura 11. Generación de la población inicial.

Sean T_1 y T_2 , la temperatura de entrada y salida de la corriente caliente; y sean T_3 y T_4 la temperatura de entrada y salida de la corriente fría. Inicialmente se ordenan las corrientes calientes y frías según su F_{Cp} , de mayor a menor. Una vez se lleva a cabo lo anterior, se procede a rectificar que la corriente con mayor F_{Cp} fría y la corriente con mayor F_{Cp} caliente

puedan intercambiar energía; asegurándose que T_3 sea menor a T_1 . En caso de que el criterio anterior no sea válido, se reorganizan las corrientes de tal forma que las dos corrientes con mayor F_{Cp} que cumplan este criterio si puedan intercambiar. Una vez decididas las dos corrientes que van a intercambiar calor, el algoritmo procede a rectificar, que tipo de intercambio pueden llevar a cabo las dos corrientes. Los tipos de intercambio se presentan a continuación:

- Caso 1: $T_3 \geq T_1$
- Caso 2: $T_1 > T_2 \geq T_4 > T_3$
- Caso 3: $T_1 \geq T_4 > T_2 > T_3$
- Caso 4: $T_1 \geq T_4 > T_2 = T_3$
- Caso 5: $T_1 \geq T_4 > T_3 > T_2$
- Caso 6: $T_4 > T_1 > T_3 = T_2$
- Caso 7: $T_4 > T_1 > T_3 > T_2$
- Caso 8: $T_4 > T_1 > T_2 > T_3$

Donde para cada caso, se debe tener en cuenta las propiedades de cada corriente y así encontrar el máximo intercambio. Por ejemplo para el caso 5; el rango máximo de temperaturas en teoría que puede intercambiar la corriente caliente sería $[T_1, T_3]$ (respetando el ΔT_{\min}), a su vez, el rango máximo de temperaturas en teoría que puede intercambiar la corriente fría sería $[T_3, T_4]$ (respetando el ΔT_{\min}). Pero este rango máximo se ve limitado por las propiedades termodinámicas de cada corriente. Si para el caso 5, el producto del delta del rango máximo de la corriente caliente con su F_{Cp} es superior al producto del delta del rango máximo de la corriente fría con su F_{Cp} , entonces la corriente fría intercambiará todo su rango máximo, mientras que la corriente caliente solo podrá intercambiar lo suficiente como para suplir el calor que necesita la corriente fría.

$$\text{Sí } (T_1 - T_3)C_{p,H} > (T_4 - T_3)C_{p,c}$$

Entonces $\left\{ [T_1, T_1 - (T_4 - T_3) \frac{C_{p,c}}{C_{p,H}}] \text{Rango a intercambiar caliente}, [T_3, T_4] \text{Rango a intercambiar fría} \right\}$

Como se puede observar para garantizar que los servicios industriales se utilicen solo en las temperaturas más bajas de las corrientes calientes y las más altas de las corrientes frías, este algoritmo aparea las corrientes de tal forma que las calientes en intercambios

con corrientes de proceso suplan las demandas de sus temperaturas más altas, y las frías de esta misma manera suplan las demandas de sus temperaturas más bajas. Al final de este proceso, el algoritmo chequea que en el proceso anterior se haya realizado un intercambio, de no ser así, ya no es posible intercambiar entre corrientes de proceso y se procede a asignar servicios industriales y a finalizar la creación del individuo. De haberse realizado un intercambio el proceso continúa hasta que ya no sea posible aparear corrientes. Para la generación del resto de la población inicial, el algoritmo selecciona aleatoriamente dos corrientes para realizar el intercambio, y realiza el mismo procedimiento que con el primer individuo, hasta generar un número determinado de n individuos.

Completada la población inicial, se inicia la zona de optimización. Esta zona se ha dividido en cuatro secciones: migración, reproducción, mutación y la selección de los especímenes. La sección llamada migración tiene un objetivo en particular, y es el de ayudar al algoritmo a alejarse de los óptimos locales. En la migración se lleva a cabo el mismo procedimiento de la población inicial, se producen en cada generación del algoritmo evolutivo un conjunto de nuevos individuos. Este procedimiento es importante debido a que se quiere evitar contar con poblaciones iniciales demasiado grandes (del tipo de superestructuras), y así garantizar que en las ocasiones en las que la población inicial se encuentre lejos del óptimo global, alguna de las migraciones integre un individuo a la población objetivo que mejore la probabilidad de llegar al óptimo deseado. Para este algoritmo y el presente modelo, la diferencia entre la mutación y la migración yacen en la selección de los individuos. Para el caso de la reproducción, se debe seleccionar una pareja de corrientes (padres) que posean una similitud en su red, de tal forma que al reproducir estas dos y crear un hijo, este posea rasgos de sus padres. Para el caso de la mutación, la selección se lleva a cabo de una manera aleatoria entre la población, buscando evitar mínimos locales.

En la Figura 12 se presenta el esquema del algoritmo utilizado en la sección de optimización. Inicialmente la reproducción selecciona aleatoriamente dos redes que posean un intercambio similar entre dos corrientes, pero con calores transferidos diferentes. Seleccionadas estas corrientes se procede a determinar la cantidad de calor a adicionar o sustraer (el cual deberá llevar el hijo) en este mismo intercambio. Este proceso se lleva a cabo al tomar un porcentaje aleatorio de la diferencia de los calores de los padres, y al tomar como base el calor de uno de los padres seleccionado también de manera aleatoria.

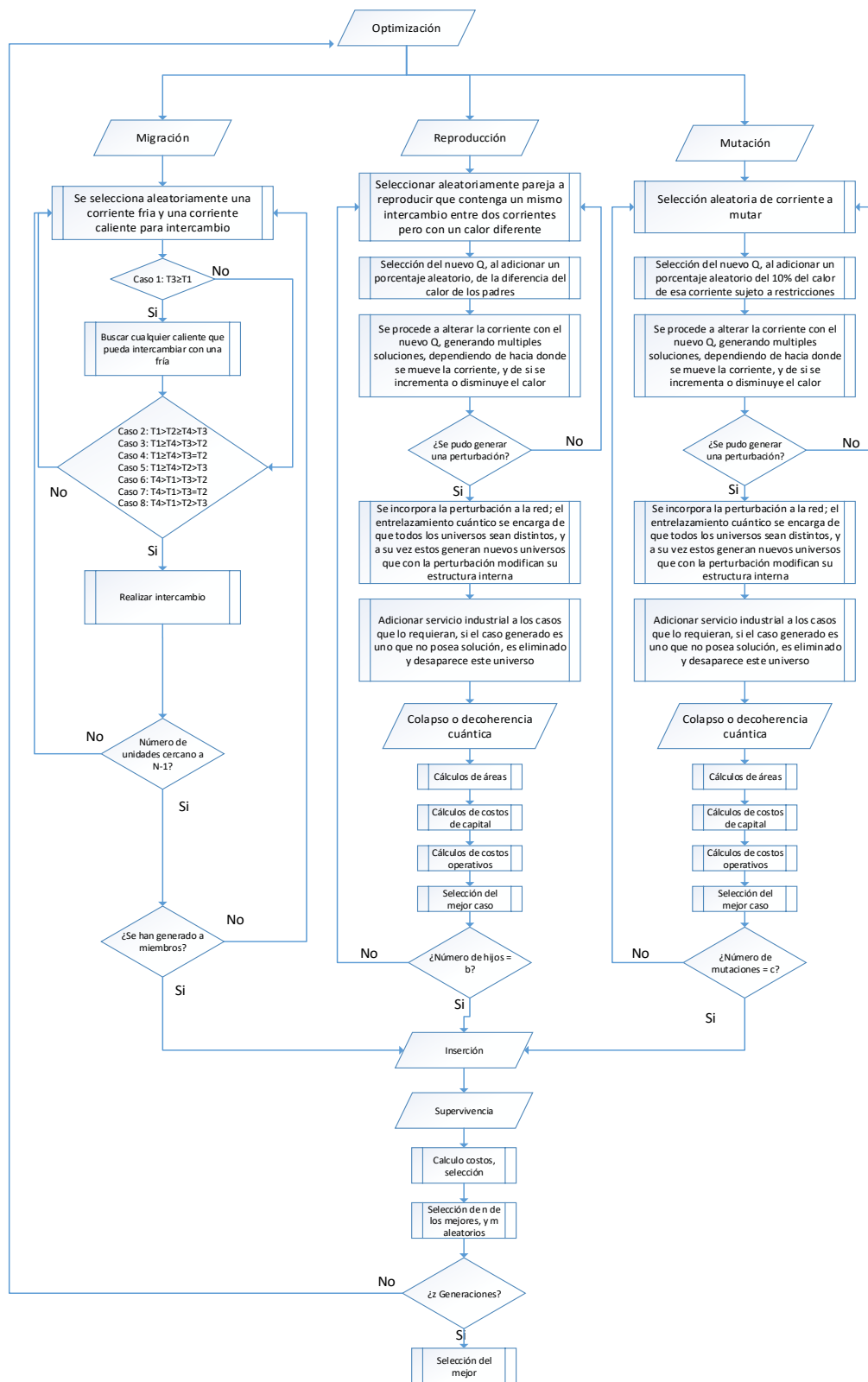


Figura 12. Pasos que se llevan a cabo en la optimización.

Determinado el valor del calor, se procede a rectificar la influencia de esta perturbación sobre el hijo, y es aquí donde inicia la parte cuántica del algoritmo evolutivo.

Inicialmente dependiendo de si es posible o no, pueden existir múltiples universos con múltiples dimensiones. Un universo en el cual se adiciona calor, y otro en el cual se retira. Estos universos además podrían contar con múltiples dimensiones cada uno, estas dimensiones surgen de la posibilidad de escoger hacia qué lado del rango de temperaturas de la corriente se desea perturbar la red. Si una corriente caliente A debe enfriarse de T_1 a T_2 , y el intercambiador de interés seleccionado para la perturbación afecta a la corriente A , en el intervalo $[t_1, t_2]$ con t_1 y $t_2 \in [T_1, T_2]$; entonces si se decide adicionar un calor, el rango $[t_1, t_2]$ puede incrementar a $[t_1', t_2]$ o a $[t_1, t_2']$, con $t_1' > t_1$ y $t_2' < t_2$. Lo mismo se puede decir para la corriente fría pareja de la corriente A . Es aquí donde un sistema cuántico nace con n *qubits* de estados $+ o -$ dependiendo de si se adiciona o se subtrae calor, cuyos múltiples estados se generan simultáneamente dependiendo del movimiento de las temperaturas en cada corriente. Estos estados se encuentran entrelazados entre sí por la función objetivo y los *qugates*, operadores lógicos que determinan la generación de dichos estados, comprobando si es posible o no moverse en las temperaturas descritas previamente. Esta sección finaliza con la creación de una red de intercambiadores de calor, que posee una perturbación en uno de sus intercambiadores, dicha perturbación presenta múltiples estados, generando así un conjunto de posibilidades que al momento de colapsar generarán un único hijo en el algoritmo evolutivo.

Con la perturbación cuántica definida, se procede a estabilizar el resto de la red, se debe recordar que la red base se selecciona aleatoriamente de los dos padres, y esta red ha sido perturbada en uno de sus intercambiadores, desestabilizando el balance de energía. Para estabilizar la red, se adicionó una variable binaria que determina si dicho intercambiador ya fue actualizado o no, dicha variable toma el valor de 1, en caso afirmativo, y 0 en el caso opuesto. En otras palabras al inicio de esta etapa, solo un intercambiador poseerá el valor de 1, y es aquel que posee la perturbación inicial de la red. En esta etapa el algoritmo busca qué intercambiadores poseen el valor de 1, y para cada corriente de dicho intercambiador, chequea que a su derecha o izquierda en el rango de temperaturas, el intercambiador que sigue, posea el valor de 1, de no ser así, se procede a estabilizar estos intercambiadores *vecinos*. En la sección 1.2 se explicó cómo se optimizan las redes de intercambiadores de calor; en la Figura 5b, la perturbación empieza en un servicio industrial pero se puede ver

que no todos los intercambiadores son afectados, el intercambiador A no sufre ningún cambio, a pesar de estar vinculado al camino; también existe la posibilidad de que se remuevan intercambiadores de la red de intercambiadores de calor. Si la perturbación es positiva y el nuevo rango de temperaturas acoge a uno de sus vecinos, entonces este intercambiador vecino dejará de existir y su calor será 0.

Sea un intercambiador de corriente caliente de temperaturas $[t_1, t_2]$ vecino a un intercambiador de corriente caliente $[t_2, t_3]$; si el calor del intercambiador inicial incrementa, y las nuevas temperaturas en la corriente caliente de este son $[t_1, t_2']$ con $t_2' > t_2$ y t_3 , en este caso particular el intercambiador vecino no podrá existir, pues su rango de temperaturas ha sido satisfecho por el intercambiador inicial, y por tanto su calor se deberá volver 0. Como se mencionó previamente, existen casos en los que los intercambiadores no sufren cambios en su calor transferido, pero sus temperaturas si se ven afectadas. Lo anterior genera nuevos estados cuánticos, en los cuales se adiciona la posibilidad de que el intercambiador no compense el calor sustraído o adicionado, y este se mantenga invariante, solo modificando sus temperaturas internas. Otro caso particular a resaltar, es el hecho de que al estabilizar una corriente caliente que fue perturbada por el intercambiador vecino, la corriente fría de este intercambiador también se debe modificar, pero acá se genera un grado más de libertad, y es la posibilidad de intercambiar manteniendo la temperatura más alta o la más baja invariante. Al permitir la posibilidad de que ambas soluciones existan, genera la creación de un nuevo estado cuántico que se adiciona al sistema cuántico. Lo anterior se repite hasta que todas las corrientes que posean la variable binaria con un valor de 1 tengan todos sus vecinos satisfechos. Satisfecho el criterio anterior, en caso de existir corrientes cuyo calor no se haya podido satisfacer con corrientes de proceso, estas se emparejan con el servicio industrial adecuado.

En este momento el algoritmo cuenta con un hijo, el cual posee múltiples estados cuánticos. Para obtener un único resultado, se procede a realizar la decoherencia cuántica. La decoherencia o colapso de los estados cuánticos ocurre al comparar estos entre sí con ayuda de la función objetivo. Se calculan las áreas de las redes generadas, sus costos de capital y sus costos operacionales. Tal como se presenta en la Figura 12, el menor costo total determinará en este caso el único estado que debe permanecer, los demás se destruyen.

El proceso anterior describe la reproducción que se lleva a cabo en el algoritmo evolutivo para generar un hijo, dicho proceso se lleva a cabo un número determinado de veces hasta insertar en la población la cantidad deseada de individuos. La mutación ocurre de manera similar, pero en este caso no se necesita de padres, así que se selecciona de manera aleatoria una red e intercambiadores de calor de la población inicial, luego se selecciona aleatoriamente un intercambiador de esta red, y a este intercambiador se le altera su calor y se repite el mismo proceso que se llevó a cabo en la reproducción un número determinado de veces para generar los nuevos individuos mutados que se insertaran a la población del algoritmo evolutivo.

En este momento se cuenta con una red con $n+1$ individuos de la población inicial, a individuos agregados por migración, b individuos agregados por reproducción y c individuos agregados por mutación. A esta población total se le calcula el área, y posteriormente se determinan los costos. Con los costos se organiza la población del individuo que genere el menor gasto, al que genere el mayor. Dependiendo de las características del problema de optimización y el tamaño de la región de factibilidad (zona en la cual se encuentran todos los posibles valores que la función puede tomar en donde se encuentra el óptimo global), el autor debe decidir qué cantidad de individuos desea tomar según sus cualidades para sobrevivir (en este caso el valor de los costos de la red). Para evitar caer en mínimos locales, y debido a la cantidad tan basta de posibilidades que se pueden generar para diferentes tamaños de redes de intercambiadores de calor, se fijó un valor de 40% de un número fijo de individuos para iniciar cada generación. Si se tiene un valor de 100 individuos, entonces 40 de los individuos más aptos para la supervivencia pasarán a la siguiente población, el otro 60% se seleccionan aleatoriamente entre los individuos restantes de la generación anterior. Como método estocástico de optimización se quiere sacar provecho de la aleatoriedad del algoritmo; porcentajes altos de supervivencia de los individuos más aptos pueden guiar las futuras generaciones a soluciones locales (Deb, 2011). El valor de 40% surge de un proceso denominado *tournament selection* (Abraham, Jain, & Robert, 2005). En este proceso los individuos compiten entre sí para sobrevivir y permanecer en la siguiente generación, se recomiendan porcentajes cercanos al 50%. Valores específicos para esta selección no se reportan. Aunque existen metodologías predefinidas para llevar a cabo algoritmos evolutivos, se considera que para cada problema

de optimización existen muchas rutas evolutivas. La generalización de estas metodologías no garantiza la optimalidad (Abraham et al., 2005).

El proceso anterior se repite una cantidad de generaciones determinada. De no contar con conocimiento previo del comportamiento del problema, se puede iniciar con números grandes de generaciones del orden de 50, y este se va reduciendo hasta que los cambios en la solución sean despreciables. Concluidas las generaciones, el valor con el menor costo en la población de redes de intercambiadores de calor será la solución al problema de optimización.

2.2. VALIDACIÓN

El modelo se validó con problemas de 9 y 10 corrientes de proceso trabajados por (Núñez-Serna & Zamora, 2016), y un problema con 15 corrientes de proceso trabajado por (Fieg, Luo, & Jezowski, 2009). Los valores y los datos reportados para las funciones objetivo fueron fijados por la literatura, en algunos casos se reportan valores de U simplificando la función de costos, en otros se reporta un tiempo de estudio de 5 años. Estos cambios en la función objetivo no afectan el desempeño del algoritmo. En esta etapa inicialmente se corrió el algoritmo con los datos de las corrientes y las funciones objetivo proveídas por los autores. Obtenida la solución se procedió a comparar los resultados con los obtenidos por los autores. Para validar el algoritmo basta con garantizar que la solución obtenida sea superior, o cercana a la reportada por los autores. Los resultados obtenidos por los autores se presentarán en la sección 3.1 para facilitar la comparación de estos con los obtenidos en el presente trabajo. En las Tablas 4, 5 y 6 se presentan los datos y funciones utilizadas para la validación del modelo.

Tabla 4. Datos para problema de 9 corrientes.

Corriente	T^{in} [°C]	T^{out} [°C]	F_{cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ⁻²]
H1	327	40	100	0.50
H2	220	160	160	0.40
H3	220	60	60	0.14
H4	160	45	400	0.30

Corriente	T ⁱⁿ [°C]	T ^{out} [°C]	F _{Cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ⁻²]
C1	100	300	100	0.35
C2	35	164	70	0.70
C3	85	138	350	0.50
C4	60	170	60	0.14
C5	140	300	200	0.60
Servicio Caliente	330	250	--	0.50
Servicio Frio	15	30	--	0.50

Costo de los intercambiadores de calor = 10000 + 350A \$USD (A en m²).

Tiempo de estudio = 5 años.

Costo anual de servicio caliente = 60 \$USD kW⁻¹ año⁻¹.

Costo anual de servicio frio = 6 \$USD kW⁻¹ año⁻¹.

Tabla 5. Datos para problema de 10 corrientes.

Corriente	T ⁱⁿ [K]	T ^{out} [K]	F _{Cp} [kW K ⁻¹]
H1	433	366	8.79
H2	522	411	10.55
H3	544	422	12.56
H4	500	339	14.77
H5	472	339	17.73
C1	355	450	17.28
C2	366	478	13.90
C3	311	494	8.44
C4	333	433	7.62
C5	389	495	6.08
Servicio Caliente	509	509	--
Servicio Frio	311	355	--

U = 0.852 kW m⁻² K⁻¹ para los intercambiadores entre corrientes y enfriadores.

U = 1.136 kW m⁻² K⁻¹ para los calentadores.

Costo anual de los intercambiadores de calor = 145.63A^{0.6} \$USD año⁻¹ (A en m²).

Costo anual de servicio caliente = 37.64 \$USD kW⁻¹ año⁻¹.

Costo anual de servicio frio = 18.12 \$USD kW⁻¹ año⁻¹.

Tabla 6. Datos para el problema de 15 corrientes.

Corriente	T ⁱⁿ [°C]	T ^{out} [°C]	F _{Cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ⁻²]
H1	180	75	30	2.00
H2	280	120	60	1.00
H3	180	75	30	2.00
H4	140	40	30	1.00

Corriente	T ⁱⁿ [°C]	T ^{out} [°C]	F _{cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ⁻²]
H5	220	120	50	1.00
H6	180	55	35	2.00
H7	200	60	30	0.40
H8	120	40	100	0.50
C1	40	230	20	1.00
C2	100	220	60	1.00
C3	40	190	35	2.00
C4	50	190	30	2.00
C5	50	250	60	2.00
C6	90	190	50	1.00
C7	160	250	60	3.00
Servicio Caliente	325	325	--	1.00
Servicio Frio	25	40	--	2.00

Costo anual de los intercambiadores de calor = $8000 + 500A^{0.7}$ \$USD año⁻¹ (A en m²).

Costo anual de servicio caliente = 80 \$USD kW⁻¹ año⁻¹.

Costo anual de servicio frio = 10 \$USD kW⁻¹ año⁻¹.

2.3. APLICACIÓN A CASO DE ESTUDIO

Se tomó como base de cálculo una termoeléctrica con una capacidad de producción de 100 MW de energía a partir de la gasificación de carbón. La simulación de la planta se llevó a cabo en Microsoft Excel, utilizando los simuladores industriales ASPEN HYSYS y ASPEN PLUS con ayuda del ASPEN Simulation Workbook para unir los 3 softwares. En la Figura 13 se presenta la planta termoeléctrica. Dicha planta se divide en 4 secciones: unidad separadora de aire, gasificador, zona de remoción de H₂S y CO₂ y zona de generación de energía.

La zona de gasificación y producción de energía eléctrica, se simularon utilizando el software ASPEN PLUS, debido a la facilidad de este software para manejar sólidos (Nayak & Mewada, 2011). La unidad separadora de aire y la zona de purificación se simularon en dos archivos separados de ASPEN HYSYS; este software posee modelos con una capacidad más robusta para la simulación de unidades de destilación y purificación que ASPEN PLUS. Además ASPEN HYSYS posee un paquete termodinámico especial para la simulación del compuesto SELEXOL™. Para realizar la simulación de manera simultánea,

se unifican los 3 archivos de simulación en Microsoft Excel, con ayuda del software ASPEN Simulation Workbook.

Debido a la presencia de compuestos polares en la simulación de ASPEN PLUS se utilizó la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong con reglas de mezcla de Kabadi-Danner (SRKKD) para el cálculo de todas las propiedades termodinámicas. Este modelo termodinámico provee resultados satisfactorios en sistemas que trabajan mezclas de compuestos polares y no polares (Kabadi & Danner, 1985).

Para la unidad separadora de aire, se utilizó la ecuación de estado de Peng-Robinson en ASPEN HYSYS para el cálculo de las propiedades termodinámicas de esta etapa. En la zona de purificación, el proceso SELEXOL™ utiliza un reactivo especial cuya composición es desconocida. ASPEN HYSYS cuenta con un modelo llamado *Acid Gas Physical Solvents* el cual cuenta con el solvente DEPG del proceso SELEXOL™. Este modelo permite la simulación de este proceso en particular, por esta razón se utilizaron dos archivos separados en las simulaciones de ASPEN HYSYS. A continuación se describirá brevemente la metodología llevada a cabo para la simulación de la planta termoeléctrica.

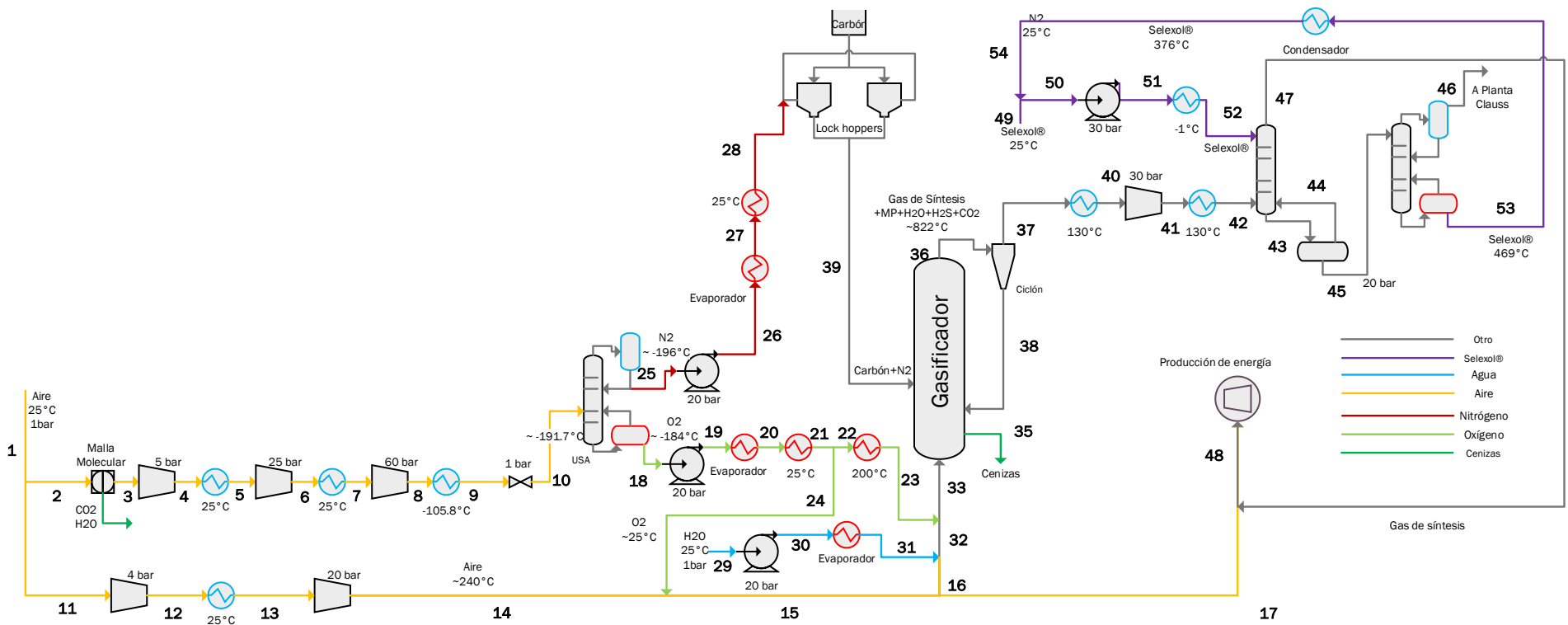


Figura 13. Caso de estudio. Planta de producción de energía eléctrica a partir de la gasificación de carbón.

2.3.1. Unidad separadora de aire (USA)

El trabajo con sólidos a alta presión, hace necesario el uso de gases inertes para la presurización. En el caso de los *lock hoppers* (unidad utilizada para la presurización y alimentación del carbón al gasificador) se suele utilizar nitrógeno para la presurización de estos (Communities, 1990). Una corriente de aire que posee 21% de oxígeno es básicamente una corriente de oxígeno diluido, el nitrógeno presente en esta corriente, más el nitrógeno que ingresa por la alimentación del carbón al gasificador se convierte en un problema energético a través de la planta. Es por esto que en plantas de este tipo se hace necesario el uso de unidades como las USA para proveer una corriente de oxígeno pura al gasificador, buscando disminuir la cantidad de gas inerte en la corriente efluente a esta unidad. La corriente de aire a la entrada se supone libre de H₂O y CO₂ para simplificar la malla molecular que no aporta ni afecta de manera significativa al resto de la planta. Como se describió en la sección 1.4.1, la USA inicia con una serie de compresores y enfriadores que buscan comprimir el aire entrante hasta una presión de alrededor de 60 bar para luego realizar una expansión súbita hasta presión atmosférica cuyo objetivo es enfriar la corriente de entrada hasta una temperatura adecuada para entrar a la torre de destilación criogénica (Bose, 2012). La torre de destilación se simuló como una unidad isobárica que busca entregar nitrógeno y oxígeno con una purezas de 99.5% y 98.5% respectivamente.

2.3.2. Gasificador

El gasificador es el corazón de la planta, y por tanto será la unidad modelada con mayor rigurosidad. El gasificador es un lecho fluidizado presurizado el cual es un reactor no ideal que será modelado como la combinación de varios reactores ideales. Para su modelación se realizaron las siguientes suposiciones:

- Estado estacionario
- La volatilización del carbón ocurre de manera instantánea
- El carbonizado se compone de carbono y cenizas
- Los gradientes de concentración radiales son despreciables
- No ocurren reacciones heterogéneas en la fase burbuja
- En la fase emulsión se consideran las reacciones homogéneas y heterogéneas

- El comportamiento fluidodinámico de ambas fases se puede describir por el modelo de dos fases propuesto por (Kunii & Levenspiel, 1969) con algunas modificaciones realizadas por (Cui, Mostoufi, & Chaouki, 2000)
- Las burbujas alcanzan su equilibrio rápidamente cerca del distribuidor.

El modelo utilizado propuesto por (C. Sánchez et al., 2016) tiene en cuenta los cambios químicos que la materia prima atraviesa dentro del reactor y a su vez modela la fluidodinámica dentro el gasificador. Las reacciones químicas consideradas y sus respectivas cinéticas se presentan en la Tabla 7.

Tabla 7. Cinéticas y reacciones consideradas en el gasificador.

#	Reacciones y cinéticas	Referencia
1	$C + \phi O_2 \rightarrow (2\phi - 1)CO_2 + (2 - 2\phi)CO$ $1.76 \times 10^6 \frac{1}{\text{bar s}} e^{\frac{-113052 \text{ kJ/kmol}}{RT}} P_{O_2}$	(Sergeant & Smith, 1973)
2	$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$ $8.83 \times 10^{11} \frac{m^3}{\text{kmol s}} e^{\frac{-99800 \text{ kJ/kmol}}{RT}} [CO][CO_2]$	(Tesner, 1960)
3	$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$ $3.09 \times 10^{11} \frac{m^3}{\text{kmol s}} e^{\frac{-99800 \text{ kJ/kmol}}{RT}} \frac{[H_2]^2 [O_2]}{[CO]}$	(Axd & Chemixtry, 1923)
4	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$ $\frac{5.552 \times 10^{14} \frac{m^3}{\text{kmol K s}}}{T} e^{\frac{-130537 \text{ kJ/kmol}}{RT}} [CH_4][O_2]$	(Vilienskii & Hezmalian, 1978)
5	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$ $370085 \frac{1}{\text{bar}^{0.57} \text{ s}} e^{\frac{-237000 \text{ kJ/kmol}}{RT}} P_{H_2O}^{0.57}$	(Barrio et al., 2008)
6	$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$ $5.06808 \times 10^{-6} \frac{1}{\text{bar}^{0.93} \text{ s}} e^{\frac{-94800 \text{ kJ/kmol}}{RT}} P_{H_2}^{0.93}$	(Babu & Sheth, 2006)
	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	

#	Reacciones y cinéticas	Referencia
7	$2780 \frac{m^3}{kmol s} e^{\frac{-12554.9 \text{ kJ/kmol}}{RT}} [CO][H_2O]$ $- 1049066 \frac{m^3}{kmol s} e^{\frac{-45546.7 \text{ kJ/kmol}}{RT}} [CO_2][H_2]$	(Bíba, Macák, Klose, & Malecha, 1978)
8	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$ $3.27321 \frac{1}{bar^{0.38} s} e^{\frac{-122000 \text{ kJ/kmol}}{RT}} P_{H_2}^{0.38}$	(Kirilowitsch, 2006)

En la figura 9 se presenta el modelo utilizado para la simulación del gasificador. A continuación se describen las tres etapas en las que se divide el reactor.

- *Volatilización del carbón.* Para llevar a cabo este proceso, se hizo uso de un reactor de rendimiento llamado RYIELD, el cual es uno de los reactores que tiene por defecto ASPEN PLUS. Dada la suposición de volatilización instantánea, en este equipo se descompone el carbón en sus componentes constituyentes (carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, azufre, cenizas y humedad). Esto se lleva a cabo especificando el rendimiento de acuerdo con los análisis próximo y último del carbón (Doherty et al., 2013; Nayak & Mewada, 2011; Sotudeh-Gharebaagh et al., 1998).
- *Reacción de volátiles.* Teniendo en cuenta que las reacciones de los volátiles ocurren a una velocidad superior respecto las reacciones del carbonizado, se utiliza un reactor de Gibbs para esta etapa. Previo a este paso se debe realizar una separación del material volátil, es aquí donde se utiliza la suposición de que el carbonizado está constituido únicamente por carbono y cenizas. La cantidad de carbono que constituye la fase gaseosa se calcula con ayuda del análisis próximo. En Aspen PLUS para llevar a cabo estas reacciones se utiliza un reactor llamado RGibbs.
- *Combustión-Gasificación.* Este es quizás el paso más importante del modelo, en esta zona la interacción entre el lecho y la fase gaseosa toma lugar. La zona de gasificación se divide en varias etapas. El número de etapas es el parámetro del modelo el cual variará dependiendo de las condiciones operacionales y debe ser determinado en la simulación; cada etapa constara de un CSTR y un PFR en paralelo. El modelo fluidodinámico determinara el volumen de dichos reactores.

Posterior a cada etapa, se realizarán cálculos de transferencia de masa para determinar cómo los componentes de los efluentes se deben mover entre la fase de burbujas y la fase de emulsión o viceversa. El volumen restante del reactor correspondiente al conocido *Freeboard* el cual se simuló como un PFR (Nieto et al., 2008), el cual estará ubicado al final de la zona de gasificación y reacción.

Se resalta que en la primera etapa se divide equitativamente los flujos de los compuestos a través de las dos fases excepto el oxígeno, esto se debe a que las reacciones exotérmicas con el oxígeno generan la energía necesaria para las reacciones endotérmicas que ocurren en el resto de la zona de gasificación. El oxígeno entonces se desvía inicialmente en su totalidad a la fase emulsión.

Debido a que el reactor es un lecho fluidizado circulante, se adiciona un ciclón. Para determinar la recirculación en el gasificador, se utilizó la siguiente ecuación tomada de (Basu, 2006).

$$W_s = \frac{2}{3} (1 - \epsilon) \rho_p C W \sqrt{2g} \times H^{3/2} \quad (8)$$

Donde:

W_s [$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$] = flujo másico a través del ducto

ϵ = porosidad del material particulado

ρ_p [kg m^{-3}] = densidad de la partícula

C = Constante entre 0.065 y 0.08

W [m] = ancho de la presa

H [m] = largo de la presa

g [m s^{-2}] = gravedad

La Figura 14, presenta la estructura del modelo simulado y en la Tabla 8 el análisis último y próximo del carbón utilizado, dato proveído por el Grupo de Energía y Termodinámica de la Universidad Pontificia Bolivariana.

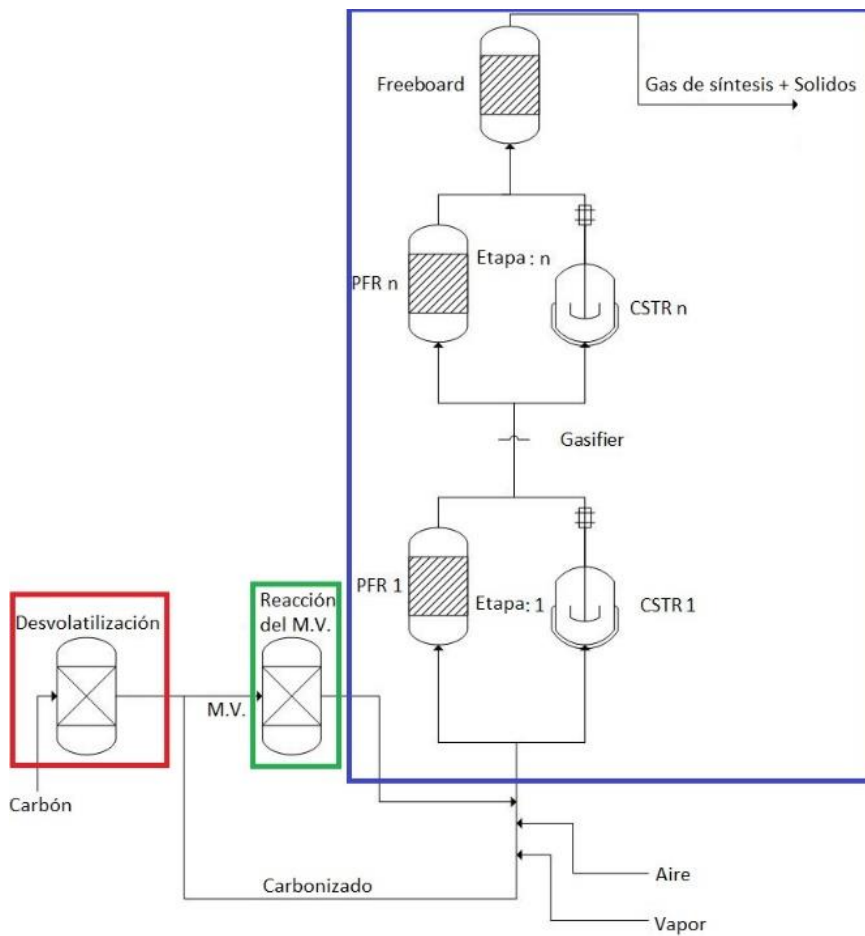


Figura 14. Esquema generalizado de la simulación del gasificador. En rojo la zona de volatilización, en verde la zona de reacción del material volátil y en azul la zona de gasificación.

Tabla 8. Resultados del análisis último y próximo del carbón utilizado (datos facilitados por el Grupo de Energía y Termodinámica de la Universidad Pontificia Bolivariana).

Análisis Último	% st. as rec'd	Análisis Próximo	% wt. as rec'd
C	69.30	Humedad	6.70
H	5.50	Volátiles	47.60
N	1.10	Carbono fijo	48.60
O	19.80	Cenizas	3.80
S	0.50	--	--
Cenizas	3.80	--	--

2.3.3. Proceso SELEXOL™

Como se discutió en la sección 1.4.3, esta zona se compone de dos unidades principales, una torre de absorción en la cual el solvente absorbe el H₂S y parte del CO₂, y una torre de destilación donde se regenera el solvente. Las torres de absorción y destilación trabajan a 30 y 20 bar respectivamente (HISE et al., 1983). La temperatura de entrada del solvente a la torre de absorción es -1°C (Yeo et al., 2012). El gas efluente a la torre de destilación, se lleva posteriormente a una planta Claus en donde se produce azufre puro. Este proceso no es de interés para la planta trabajada y por tanto se omite de los cálculos.

2.3.4. Generación de energía

La corriente gaseosa que sale de la torre de absorción del proceso SELEXOL™, se lleva directamente a un quemador, en este caso a un reactor RGIBBS en ASPEN PLUS para realizar la combustión de este con aire enriquecido para producir la energía necesaria en la turbina y generar trabajo.

2.3.5. Caso de estudio

Obtenidos los datos de las corrientes frías y calientes de la simulación, se procede a utilizar el algoritmo desarrollado en el presente trabajo para encontrar la red de intercambiadores de calor óptima. Tomando como referencia la Figura 13, aparece una restricción importante que se debe considerar. Todas las corrientes que posean oxígeno no deben intercambiar con corrientes que posean gas de síntesis para evitar posibles explosiones en caso de alguna fuga en el intercambiador. Para las caídas de presión, en caso de que sea un condensador o un evaporador, se suponen de 1.5 psi, 3 psi para una corriente de gas y 5 psi para líquidos de baja viscosidad (Walas, 2012). En Colombia existen restricciones de transporte debido a la infraestructura vial y a las condiciones geográficas del país, es por esto que se fijan además valores que restringen el rango de áreas que los intercambiadores pueden tomar. Los costos en el consumo de energía y agua como servicio industrial se obtuvieron a partir de datos tomados de una empresa colombiana, y estos son 434.57 \$COP kWh⁻¹ para la energía, y 1775.64 \$COP m⁻³ para el agua a una temperatura de 20°C. Vapor

de media presión como servicio industrial a una temperatura de 218°C con un valor de 7328.95 \$COP kWh⁻¹ (FIBERGLASS, 2008). Etileno como servicio industrial a una temperatura de -111°C con un costo de 21 \$ USD GJ⁻¹ (Randgaiah, 2016). Por último para los costos fijos por intercambiadores de calor se utilizó la siguiente ecuación (Walas, 2012):

$$C = 0.002855 \times 1.218 f_d f_m f_\rho C_b$$

$$C_b = e^{8.821 - 0.30863 \ln(A) + 0.0681 \ln(A)^2}$$

$$f_d = e^{-1.1156 + 0.09006 \ln(A)}$$

$$f_\rho = 1.14 + 0.12088 \ln(A)$$

$$f_m = 0.8603 + 0.23296 \ln(A)$$

Donde C son los costos fijos debido a los intercambiadores de calor en millones de pesos colombianos (M\$COP) y A es el área en m², para un tiempo de 1 año. El caso anterior corresponde a una planta que genera alrededor de 100 MW de energía a partir de la gasificación de carbón. Para observar los efectos de la cogasificación sobre la integración energética final, se procede a realizar otros tres diseños reemplazando en un 10, 20 y 30% la energía suministrada por el carbón con biomasa. La conversión de USD a COP se llevó a cabo con un valor de 2855 COP/USD.

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

3.1. VALIDACIÓN

3.1.1. Problema de nueve corrientes

Teniendo en cuenta los datos presentados en la Tabla 4, se creó inicialmente un conjunto de 100 individuos para la población inicial. 99 individuos generados aleatoriamente, y un individuo según el criterio *tick-off*. El costo anual de servicio caliente con un valor de 60 \$USD kW⁻¹ año⁻¹, el costo anual de servicio frío con un valor de 6 \$USD kW⁻¹ año⁻¹, costos para intercambiadores de calor = 10000 + 350A \$USD (A en m²) y un tiempo de estudio de 5 años. Lo anterior se puede simplificar llevándolo a términos de la Ecuación 6:

$$FO = \text{minimizar} \left[(\Sigma 60F_{HSi} + \Sigma 6F_{CSi}) + \frac{\Sigma(10000 + 350A)}{5} \right]$$

En la Figura 15 se presentan los resultados obtenidos por Núñez-Serna & Zamora, 2016. Los autores obtienen un óptimo con un costo total para el valor de los intercambiadores y los servicios industriales de 2932910 \$USD, 15 intercambiadores, dos que utilizan servicio industrial caliente y dos que utilizan servicios industrial frío. Un flujo de calor provisto por servicio caliente de 23411.400 kW y un flujo de calor provisto por servicio frío de 31131.400 kW.

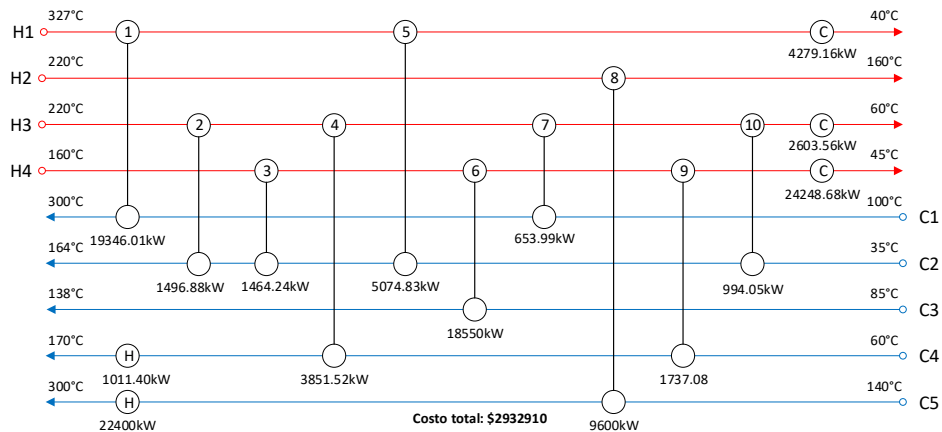


Figura 15. Red óptima de intercambiadores de calor para el problema 1, obtenida por los autores del artículo comparativo.

En la Figura 16, se presentan los resultados obtenidos en el presente trabajo. Se obtuvo un óptimo con un costo total de intercambiadores y servicios industriales de 2932170 \$USD,

12 intercambiadores, dos que utilizan servicio industrial caliente y tres que utilizan servicio industrial frío. Un flujo de calor provisto por servicio caliente de 23452.097 kW y un flujo de calor provisto por servicio frío de 31172.097 kW.

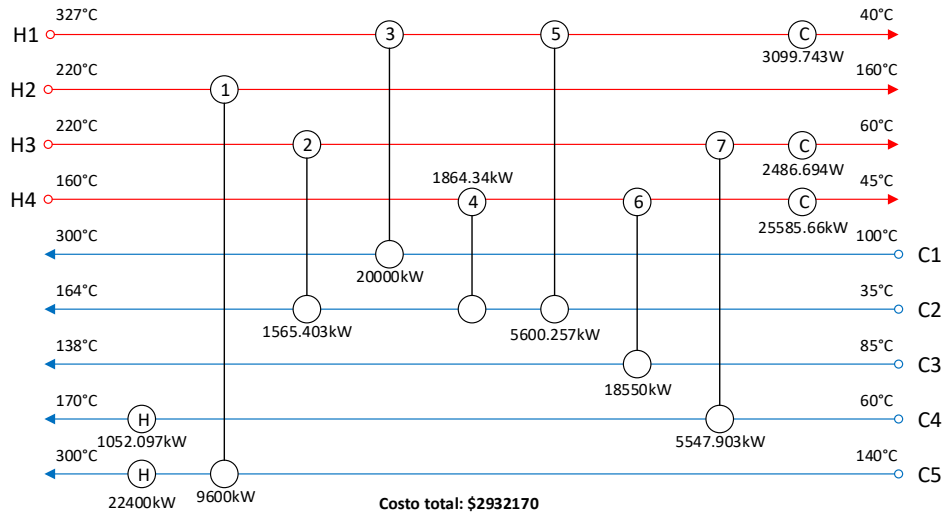


Figura 16. Red óptima de intercambiadores de calor para el problema 1, obtenida con el modelo propuesto en este trabajo.

Para el primer problema la red propuesta obtenida por el modelo utilizado en este trabajo genera menores costos totales que los obtenidos en el artículo comparativo además de una red con un número menor de intercambiadores; 15 intercambiadores que obtuvieron los autores frente a 12 intercambiadores obtenidos en el presente trabajo. La red obtenida presenta una reducción en su costo total frente al óptimo previo de 0.025%. La diferencia en el valor final de la red, se atribuye a que en el resultado obtenido en el presente trabajo, se aprovecha de mejor manera el calor entre corrientes de proceso, reduciendo el uso de servicios industriales. El tiempo total de solución promedio fue de 14 minutos. Se trabajó un valor constante de 100 individuos al inicio de cada generación. En cada generación se decidió reproducir y mutar 20% de la población según lo reportado en la literatura (Coello, 2001), y a su vez generar el mismo número de migraciones. Es decir, se fijó un número máximo de 20 migraciones, 20 reproducciones y 20 mutaciones. El número máximo de generaciones se encontró cuando la diferencia entre las funciones objetivo entre generaciones tenían un valor menor o igual a 10^{-4} . En la Tabla 9 se evidencia que el valor correspondiente al número máximo de generaciones debe ser 20, este valor se fijó para el resto del trabajo.

Tabla 9. Diferencia entre el valor de las F.O. para 10 y 20 generaciones.

Generación	Función Objetivo	Diferencia
10	2932298	0.00013
20	2932170	

3.1.2. Problema de diez corrientes

Con los datos presentados en la Tabla 5, se crea una población inicial con las mismas características discutidas en el problema anterior. El costo anual de servicio caliente con un valor de 37.640 \$USD kW⁻¹ año⁻¹, el costo anual de servicio frío con un valor de 18.120 \$USD kW⁻¹ año⁻¹, costos para intercambiadores de calor = 145.63A^{0.6} \$USD (A en m²) y un tiempo de estudio de 1 año. En términos de la Ecuación 6 se tiene:

$$FO = \text{minimizar} \left[(\Sigma 37.64 F_{HSi} + \Sigma 18.12 F_{CSi}) + \frac{\Sigma (145.63 A^{0.6})}{1} \right]$$

En la Figura 17 se presentan los resultados obtenidos por Núñez-Serna & Zamora, 2016. Los autores obtienen un óptimo con un costo total de 43647 \$USD, 10 intercambiadores, donde tres de estos utilizan servicio industrial frío con un flujo de calor total provisto por servicio frío de 1878.960 kW. Además los autores incluyen división de corrientes en la red obtenida.

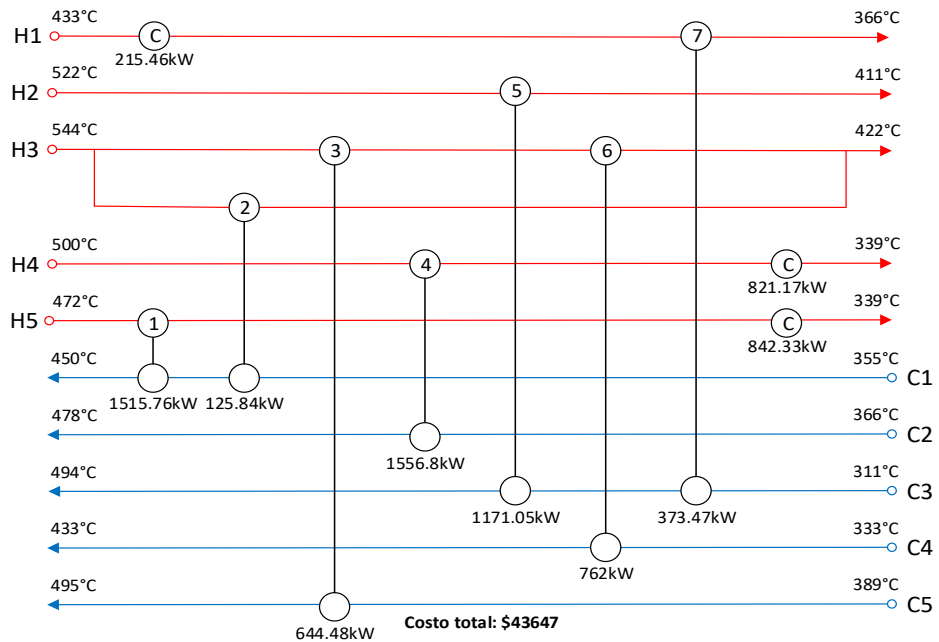


Figura 17. Red óptima de intercambiadores de calor para el problema 2, obtenida por los autores del artículo comparativo.

En la Figura 18, se presentan los resultados obtenidos en el presente trabajo. Se obtuvo un óptimo con un costo total de 43452 \$USD, 10 intercambiadores, donde dos de estos utilizan servicio industrial frío y un flujo total de calor provisto por el servicio industrial frío de 1878.96 kW.

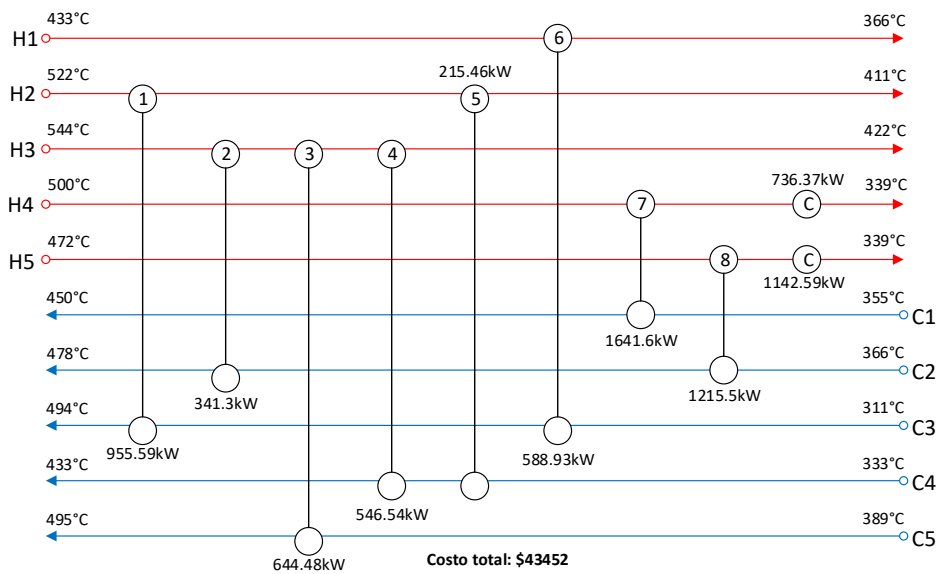


Figura 18. Red óptima de intercambiadores de calor para el problema 2, obtenida con el modelo propuesto en este trabajo.

Para el segundo problema la red propuesta obtenida por el modelo utilizado en este trabajo genera menores costos totales que los obtenidos en el artículo comparativo además de una red con un número menor de intercambiadores y no existe división en las corrientes de proceso. La red obtenida presenta una reducción en su costo total frente al óptimo previo de 0.45%. El tiempo total de solución promedio fue de 100 minutos. Se utilizaron los mismos parámetros fijados en el problema anterior incluyendo el número de generaciones. Se observa un incremento en el tiempo de solución, este incremento es esperado debido al aumento en el número de corrientes, generando así una mayor posibilidad de combinaciones en la parte cuántica del algoritmo.

3.1.3. Problema de quince corrientes

Con los datos presentados en la Tabla 6, se crea una población inicial con las mismas características discutidas en los problemas anteriores. El costo anual de servicio caliente con un valor de 80 \$USD kW⁻¹ año⁻¹, el costo anual de servicio frío con un valor de 10 \$USD kW⁻¹ año⁻¹, costos para intercambiadores de calor = 8000 + 500A^{0.7} \$USD (A en m²) y un tiempo de estudio de 1 año. En términos de la Ecuación 6 se tiene:

$$FO = \text{minimizar} \left[(\Sigma 80F_{HSi} + \Sigma 10F_{CSi}) + \frac{\Sigma (8000 + 500A^{0.7})}{1} \right]$$

En la Figura 19 se presentan los resultados obtenidos por Fieg et al., 2009. Los autores obtienen un óptimo con un costo total de 1510891 \$USD, 15 intercambiadores, cuatro intercambiadores de servicio industrial caliente con un flujo de calor total provisto de 10615.800 kW y dos intercambiadores de servicio industrial frío con un flujo de calor total provisto de 8240.600 kW. Además los autores incluyen división de corrientes en la red obtenida.

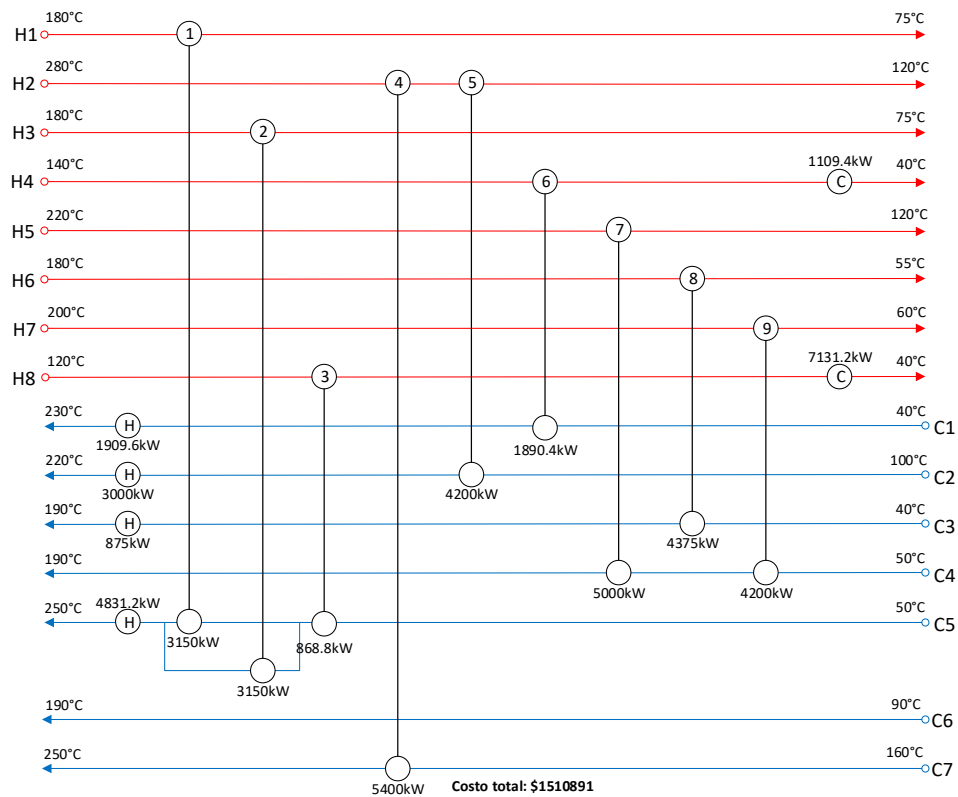


Figura 19. Red óptima de intercambiadores de calor para el problema 3, obtenida por los autores del artículo comparativo.

En la Figura 20, se presentan los resultados obtenidos en el presente trabajo. Se obtuvo un óptimo con un costo total de 1547344 \$USD, 17 intercambiadores, tres intercambiadores de servicio industrial caliente con un flujo de calor total provisto de 10583.865 kW y tres intercambiadores de servicio industrial frío con un flujo de calor total provisto de 8208.865 kW.

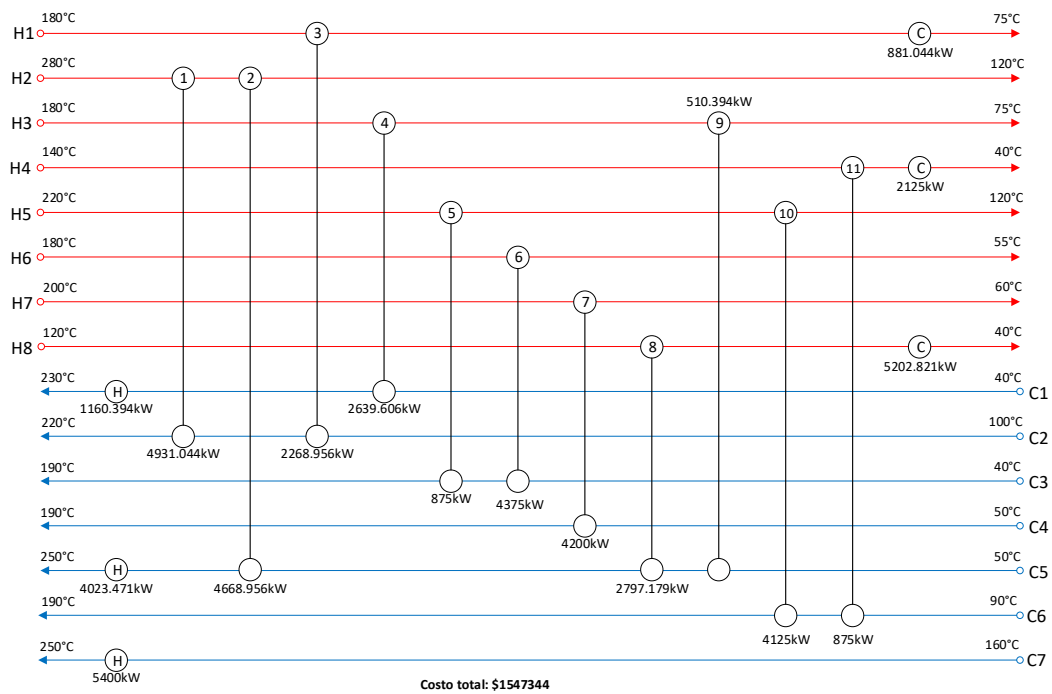


Figura 20. Red óptima de intercambiadores de calor para el problema 3, obtenida con el modelo propuesto en este trabajo.

Para el tercer problema, la red propuesta obtenida por el modelo utilizado en este trabajo presenta una diferencia del 2.41% frente al valor del costo total de la red propuesta por los autores del artículo comparativo. La solución presentada por estos autores para este problema de 15 corrientes se considera la mejor solución en la literatura (Peng & Cui, 2015) con división de corrientes. La diferencia en la solución obtenida se puede atribuir a la existencia de división de corrientes en la red del artículo comparativo. El presente trabajo no utiliza división de corrientes en su algoritmo debido a la falta de información referente a los criterios que se deben utilizar para tomar este tipo de decisiones en la literatura. Buscando evitar el uso de decisiones o restricciones de diseño que no garanticen la presencia del óptimo global en la región de factibilidad, no se incluye la división de corrientes en este trabajo. El tiempo total de solución promedio fue de 1470 minutos. Se utilizaron los mismos parámetros fijados en el problema anterior incluyendo el número de generaciones. El incremento en el tiempo de solución se atribuye principalmente a la parte cuántica, para este problema en particular, se observaron valores que oscilaban entre 1 y 8000 individuos pertenecientes a un mismo sistema cuántico para generar un hijo o una mutación. Este

valor sirve para respaldar la inclusión cuántica a los algoritmos evolutivos, es evidente que gracias a esto se evalúan un número amplio de posibilidades obteniendo valores para la red de intercambiadores de calor cercanos al óptimo, y con tiempos de cómputo razonables.

Los resultados obtenidos para los tres problemas analizados permiten concluir que el algoritmo ha sido correctamente validado. Se obtuvo un algoritmo que genera soluciones con costos totales bajos, números adecuados de intercambiadores de calor (10 intercambiadores contra 9 mínimos para el problema uno, 10 intercambiadores contra 10 mínimos del problema dos y 17 intercambiadores contra 15 mínimos del problema tres) y bajo uso de servicios industriales.

3.2. CASO DE ESTUDIO

Se simuló una planta de gasificación según la metodología descrita en la sección 2.3. Los resultados de las corrientes principales se presentan en la Tabla 10. Se utilizaron relaciones de O/C y de H₂O/C del 10% para el gasificador, y un 50% de oxígeno en exceso para la combustión. Generando una potencia total de 115 MW para el caso en el que se alimenta solo carbón a la planta con una temperatura a la salida del gasificador acorde a la de un proceso de gasificación. Los enfriadores y calentadores en la Figura 13 de color azul y rojo respectivamente son las corrientes de proceso a las cuales se le realizó el diseño de la red de intercambiadores de calor óptima. Las corrientes se denotarán por la entrada y salida a la unidad de transferencia de calor, sea por ejemplo la corriente uno de nombre 4-5, corriente que entra al enfriador en 4 y sale en 5.

Tabla 10. Resultados de las corrientes principales para la planta de generación de energía

Flujo [kg/h]	USA			GASIFICADOR				PURIFICACIÓN				REGENERACIÓN		TURBINA
	Corr. 10	Corr. 25	Corr. 18	Corr. 39	Corr. 33	Corr. 37	Corr. 35	Corr. 42	Corr. 52	Corr. 47	Corr. 45	Corr. 46	Corr. 53	Corr. 48
O ₂	13933.70	262.36	13671.34	9499.05	8616.24	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	100964.00
N ₂	45886.39	45704.14	182.25	45704.92	25555.58	71260.50	0.00	71260.50	0.00	71234.24	26.26	26.26	0.00	361689.00
CO	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	17308.81	0.00	17308.81	0.00	17297.27	11.53	11.53	0.00	17297.27
CO ₂	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	33833.96	0.00	33833.96	0.00	21145.38	12688.6	12688.55	0.03	21145.38
CH ₄	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	13003.31	0.00	13003.31	0.00	12970.96	32.35	32.35	0.00	12970.96
H ₂ O	0.00	0.00	0.00	3350.00	29120.30	14036.20	0.00	14036.20	0.00	0.00	14036.2	14035.12	1.08	0.00
H ₂	0.00	0.00	0.00	2460.15	0.00	1254.99	0.00	1254.99	0.00	1254.83	0.16	0.16	0.00	1254.83
NH ₃	0.00	0.00	0.00	530.34	0.00	530.34	0.00	530.34	0.00	0.00	530.34	530.32	0.02	0.00
H ₂ S	0.00	0.00	0.00	193.37	0.00	193.37	0.00	193.37	0.00	15.66	177.71	177.68	0.03	15.66
C	0.00	0.00	0.00	32328.45	0.00	0.00	5937.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
DEPG	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	140000	0.00	140000	7016.35	132983.65	0.00
Cenizas	0.00	0.00	0.00	1772.70	0.00	0.00	1772.70	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Temperatura [°C]	-191.73	-195.88	-183.74	40.75	239.63	821.59	821.59	35.00	-1.00	1.81	28 .24	469.10	469.10	165.50
Presión [bar]	1.00	1.00	1.00	20.00	20.00	20.00	20.00	30.00	30.00	30.00	20.00	20.00	20.00	20.00

Las corrientes 4-5, 6,7 y 8-9 son corrientes pertenecientes a las etapas de compresión enfriamiento en la USA. La presión en cada etapa se llevó hasta alcanzar una temperatura máxima de compresión de aproximadamente 250°C. La corriente 12-13 cumple la misma función que las anteriores pero el de esta va para la unidad de gasificación y la turbina. Las corrientes 26-27 y 27-28 son la corriente de nitrógeno efluente a la USA, estas poseen la función de evaporador y calentador. Las corrientes 19-20, 20-21 y 22-23 son las corrientes de oxígeno efluentes a la USA, la corriente 19-20 es el evaporador inicial, luego se calienta esta corriente hasta temperatura ambiente y se divide para mezclarse con la corriente de aire que se dirige a la turbina. Se aclara que la cantidad de aire que entra a la USA se calcula en base a la cantidad de nitrógeno necesario para fluidizar los sólidos al gasificador. El oxígeno separado se utiliza para enriquecer la corriente de aire entrante al gasificador, y para ayudar a disminuir la cantidad de aire necesario en la combustión que toma lugar en la turbina. Por último en la unidad separadora de aire esta la corriente 22-23 que lleva la corriente de oxígeno a una temperatura adecuada para ingresar al gasificador. La corriente 30-31 hace el papel de evaporador que busca generar vapor de media presión que se utiliza en el gasificador. La sección SELEXOL™ cuenta con 4 corrientes, 37-40, 41-42, 53-54 y 51-52. Estas corrientes adecuan la temperatura de los fluidos a la necesaria en cada una de las unidades pertenecientes a esta sección. En la Tabla 11 se presentan las propiedades necesarias para llevar a cabo el diseño de la red óptima de estas corrientes.

Tabla 11. Datos utilizados en el diseño de la red óptima de intercambiadores de calor del caso de estudio con gasificación de carbón.

n°	Corriente	T _{in} [°C]	T _{out} [°C]	F _{Cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ⁻²]	Fluido
1	12-13	204.04	25.00	117.40	3.26	Aire
2	4-5	250.64	25.00	17.29	5.57	Aire
3	6-7	250.90	25.00	17.68	5.71	Aire
4	8-9	214.28	-105.80	29.00	6.61	Aire
5	37-40	821.61	130.00	66.29	13.30	Gas de Síntesis
6	41-42	187.90	35.00	63.01	7.19	Gas de Síntesis
7	53-54	469.14	376.00	132.22	11.75	Solvente SELEXOL
8	51-52	371.14	-1.00	120.28	11.35	Solvente SELEXOL
9	26-27	-194.81	-157.52	26.570	18.50	Nitrógeno
10	27-28	-157.52	25.00	21.43	3.51	Nitrógeno
11	19-20	-182.88	-140.79	5.62	17.50	Oxígeno
12	20-21	-140.79	25.00	4.46	3.52	Oxígeno

n°	Corriente	T _{in} [°C]	T _{out} [°C]	F _{Cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ⁻²]	Fluido
13	22-23	25.00	200.00	0.23	5.58	Oxígeno
14	30-31	25.17	212.84	26.17	54.26	Agua

La función objetivo para este caso, según los datos presentados en la sección 2.3.5, en términos de la ecuación 6, se presenta a continuación:

$$FO = \text{minimizar}[(\sum 64.2016 F_{HSi} + \sum 1.33856 F_{CSj} + \sum 1.86484 F_{CSj}) + \sum C_k + \sum 3.806833 E_b]$$

Donde. F_{HSi} y F_{CSj} hacen referencia al flujo de calor transferido en un intercambiador que utiliza un servicio industrial caliente y frío respectivamente, C_k es la función de costos para el cálculo de los costos fijos descrita en la sección 2.3.5, y E_b es la potencia requerida para suplir las caídas por pérdidas de presión. El valor de E_b se determinó con ayuda de Aspen PLUS y Aspen HYSYS; dependiendo del tipo de fluido y la caída de presión que este tenga en el intercambiador según los criterios descritos en la sección 2.3.5, se calculó la potencia requerida para suplir dicha caída de presión en cada intercambiador para cada corriente. Para el cálculo de los límites de las áreas que los intercambiadores de calor pueden tomar dentro de la red, se realizaron las siguientes suposiciones:

- Intercambiador de coraza y tubos.
- Disposición triangular de los tubos.
- El diámetro interno de tubo más pequeño posible según restricciones de limpieza, que permita tener una mayor área de intercambio sin importar la caída de presión. Se fijó un valor de 3/4 de pulgada.
- Un diámetro máximo para el intercambiador de 3 metros. Este valor hace referencia al límite máximo de transporte transversal en carretera en Colombia.
- Una longitud máxima para el intercambiador de 12 metros. Este valor se debe restringir vialmente por la geografía del país, que hace que camiones de máximo 12 metros de longitud sean viables para transporte de mercancía de carga larga en el país.

- Una relación del diámetro externo de los tubos y la separación entre sus centros de 0.7.
- Una longitud mínima de un intercambiador de 10 cm por practicidad.

Dadas las suposiciones anteriores y haciendo uso de las ecuaciones y reglas de diseño presentadas en (Henaó, 2006), se obtuvo un rango para las áreas de los intercambiadores de $[0.006, 17810] \text{ m}^2$. En la Figura 21 se presenta la red de intercambiadores óptima teniendo en cuenta la función objetivo, y las restricciones descritas para este caso de estudio.

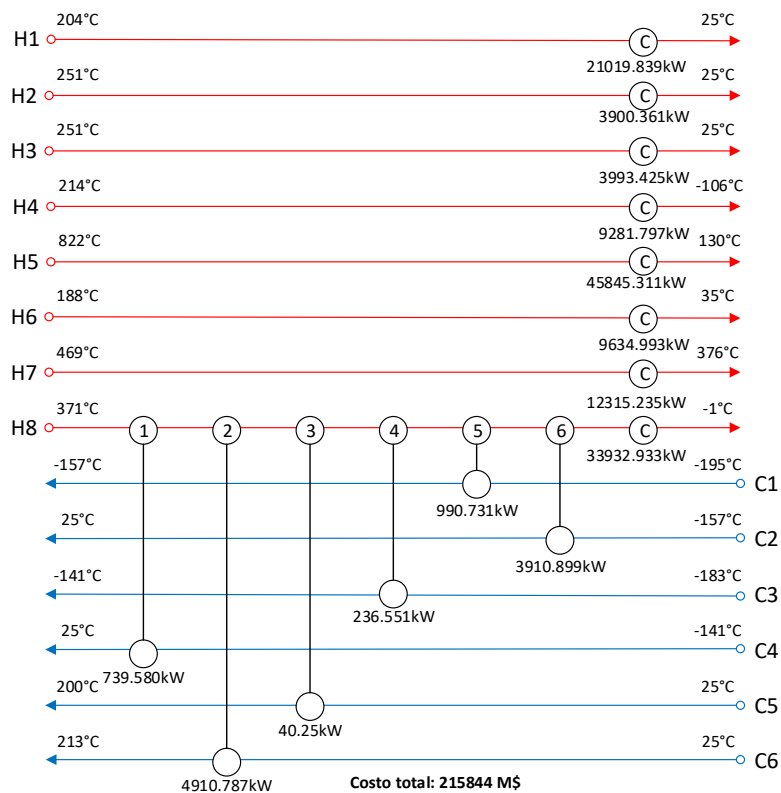


Figura 21. Red de intercambiador óptima para caso de estudio con gasificación de carbón.

Para la planta de gasificación de carbón trabajada se propuso el diseño presentado en la Figura 21 para la red de intercambiadores de calor con un costo total de esta de 215844 M\$COP. Este valor se encuentra dentro de los esperados para costos de operación anual

en plantas de este tipo (EIA, 2018). Esta red de intercambiadores de calor cuenta con 14 intercambiadores; las corrientes calientes suplen toda la energía requerida por las corrientes frías por tanto no es necesario utilizar vapor de media como servicio industrial. Adicionalmente se suple la energía requerida por las corrientes calientes con un calor transferido total de 139923.894 kW. El tiempo total de solución fue de 14.1 minutos.

Aunque la implementación de las restricciones mencionadas incrementa la no linealidad del problema, la creación de individuos cuánticos en la optimización disminuye de manera significativa. Estas restricciones limitan la creación de estos y por tanto reducen el tiempo de cómputo. Comparando el tiempo de cómputo en la sección 3.1.3 de 1470 minutos para un problema de 15 corrientes de proceso contra el caso de estudio con 14 minutos para un problema de 14 corrientes, se evidencia el efecto significativo de las restricciones sobre el tiempo de cómputo, y por tanto sobre la parte cuántica de la optimización. El alto valor del flujo de calor requerido para suplir la energía demandada por las corrientes calientes es típico en una planta de este tipo. El calor restante suele ser aprovechado en procesos de generación de vapor para producir más energía en el denominado ciclo combinado de generación de energía. El modelo presente en este trabajo no cuenta con criterios que permitan decidir que corrientes poseen flujos de calor apropiados para la generación de vapor y en qué orden estos deben ser utilizados; pero permite crear una red que aprovecha de manera económica los flujos de calor en las corrientes de proceso, con un uso adecuado de los servicios industriales disponibles y evitando la división de corrientes.

3.2.1. Caso de estudio con 10, 20 y 30% de cogasificación

Para la implementación de cogasificación en la planta de gasificación se tomó como base la simulación anterior, y se redujo en un 10, 20 y 30% respectivamente la energía generada con carbón. Esta cogasificación se logra adicionando hueso de palma africana a la corriente de entrada al gasificador. Las propiedades del hueso se presentan en la Tabla 12 (datos entregados por el Grupo de Energía y Termodinámica de la Universidad Pontificia Bolivariana), y de manera similar a la sección anterior, se llevó a cabo la obtención de la red de intercambiadores de calor óptima para cada caso. Las tablas 13, 14 y 15 exponen los resultados de la simulación que sirven como datos iniciales para el diseño de las redes de intercambiadores de calor óptimas. En las Figuras 22, 23 y 24 se presentan los

resultados para 10, 20 y 30% de cogasificación respectivamente y en la Tabla 16 se presenta un resumen de los datos más importantes obtenidos para los 4 casos.

Tabla 12. Resultados de análisis próximo y último para el cuesco.

Propiedad	Valor
C (% w/w)	47.39
H (% w/w)	5.09
N (% w/w)	0.64
S (% w/w)	0.11
O (% w/w)	43.79
Humedad (% w/w)	8.26
Cenizas (% w/w)	2.98
Material Volátil (% w/w)	69.57
Carbono Fijo (% w/w)	19.19

Tabla 13. Datos utilizados en el diseño de la red óptima de intercambiadores de calor del caso de estudio con 10% de cogasificación.

n°	Intercambiador	T _{in} [°C]	T _{out} [°C]	F _{cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ⁻²]	Fluido
H1	12-13	204.04	25.00	121.18	5.56	Aire
H2	4-5	250.64	25.00	15.56	5.57	Aire
H3	6-7	250.90	25.00	15.91	5.71	Aire
H4	8-9	214.28	-105.80	26.10	6.61	Aire
H5	37-40	844.18	130.00	64.65	13.70	Gas de Síntesis
H6	41-42	187.98	35.00	61.12	7.33	Gas de Síntesis
H7	53-54	469.10	376.00	132.21	11.75	Solvente SELEXOL
H8	51-52	371.14	-1.00	120.28	11.35	Solvente SELEXOL
C1	26-27	-194.81	-157.52	23.91	18.50	Nitrógeno
C2	27-28	-157.52	25.00	19.28	3.51	Nitrógeno
C3	19-20	-182.88	-140.79	5.06	17.50	Oxígeno
C4	20-21	-140.79	25.00	4.01	3.52	Oxígeno
C5	22-23	25.00	200.00	0.22	5.58	Oxígeno
C6	30-31	25.17	212.84	25.30	54.26	Agua

Tabla 14. Datos utilizados en el diseño de la red óptima de intercambiadores de calor del caso de estudio con 20% de cogasificación.

n°	Intercambiador	T _{in} [°C]	T _{out} [°C]	F _{cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ⁻²]	Fluido
H1	12-13	204.04	25.00	119.26	5.56	Aire
H2	4-5	250.64	25.00	13.83	5.57	Aire
H3	6-7	250.90	25.00	14.14	5.71	Aire
H4	8-9	214.28	-105.80	23.20	6.61	Aire
H5	37-40	872.47	130.00	60.64	14.15	Gas de Síntesis
H6	41-42	188.14	35.00	56.98	7.48	Gas de Síntesis
H7	53-54	469.10	376.00	132.23	11.75	Solvente SELEXOL
H8	51-52	371.15	-1.00	120.29	11.35	Solvente SELEXOL
C1	26-27	-194.81	-157.52	21.26	18.50	Nitrógeno
C2	27-28	-157.52	25.00	17.14	3.51	Nitrógeno
C3	19-20	-182.88	-140.79	4.50	17.50	Oxígeno
C4	20-21	-140.79	25.00	3.57	3.52	Oxígeno
C5	22-23	25.00	200.00	0.20	5.58	Oxígeno
C6	30-31	25.17	212.84	22.69	54.26	Agua

Tabla 15. Datos utilizados en el diseño de la red óptima de intercambiadores de calor del caso de estudio con 30% de cogasificación.

n°	Intercambiador	T _{in} [°C]	T _{out} [°C]	F _{cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ⁻²]	Fluido
H1	12-13	204.04	25.00	117.22	5.56	Aire
H2	4-5	250.64	25.00	12.10	5.57	Aire
H3	6-7	250.90	25.00	12.37	5.71	Aire
H4	8-9	214.28	-105.80	20.30	6.61	Aire
H5	37-40	905.14	130.00	56.61	14.66	Gas de Síntesis
H6	41-42	188.33	35.00	52.87	7.65	Gas de Síntesis
H7	53-54	469.09	376.00	132.23	11.75	Solvente SELEXOL
H8	51-52	371.15	-1.00	120.29	11.35	Solvente SELEXOL
C1	26-27	-194.81	-157.52	18.60	18.50	Nitrógeno
C2	27-28	-157.52	25.00	15.00	3.51	Nitrógeno
C3	19-20	-182.88	-140.79	3.93	17.50	Oxígeno
C4	20-21	-140.79	25.00	3.12	3.52	Oxígeno
C5	22-23	25.00	200.00	0.18	5.58	Oxígeno
C6	30-31	25.17	212.84	20.07	54.26	Agua

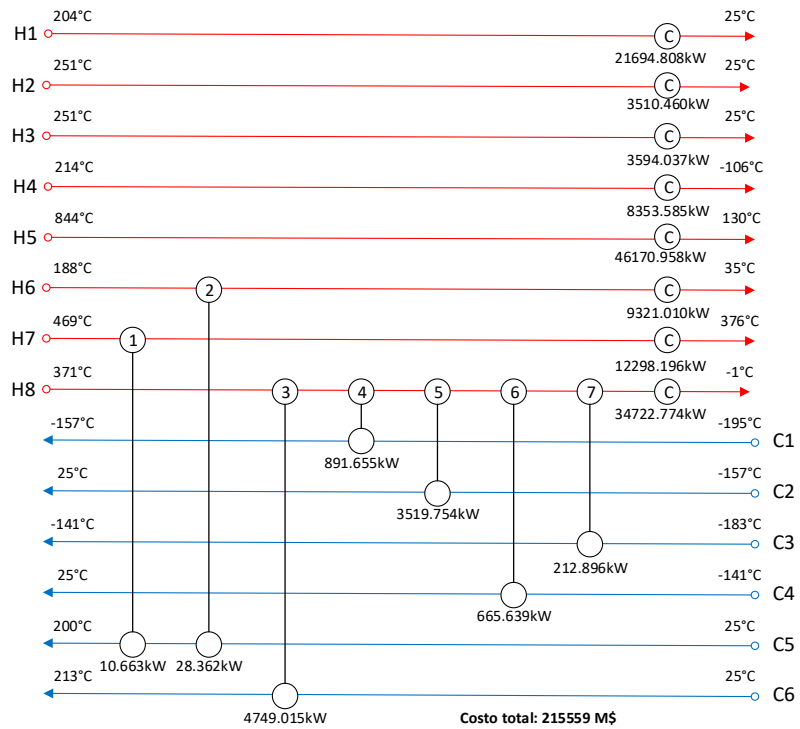


Figura 22. Red de intercambiador óptima para caso de estudio con 10% de cogasificación.

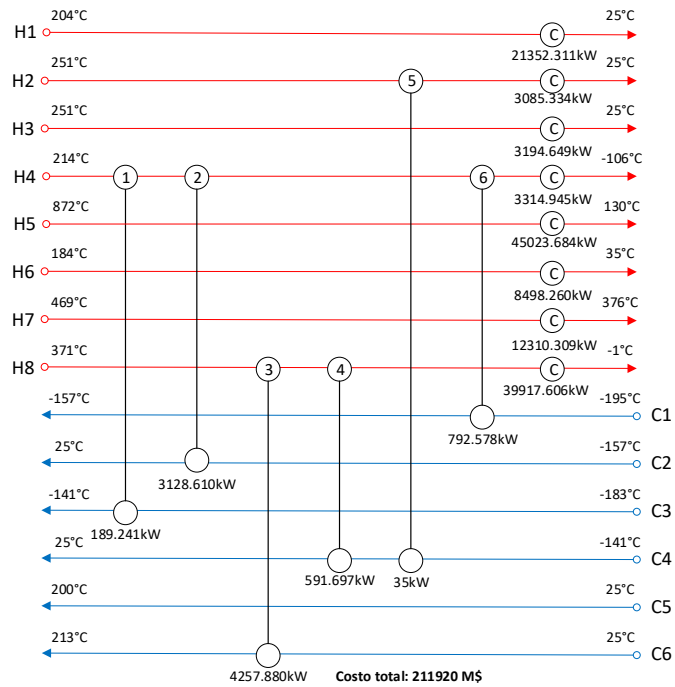


Figura 23. Red de intercambiador óptima para caso de estudio con 20% de cogasificación.

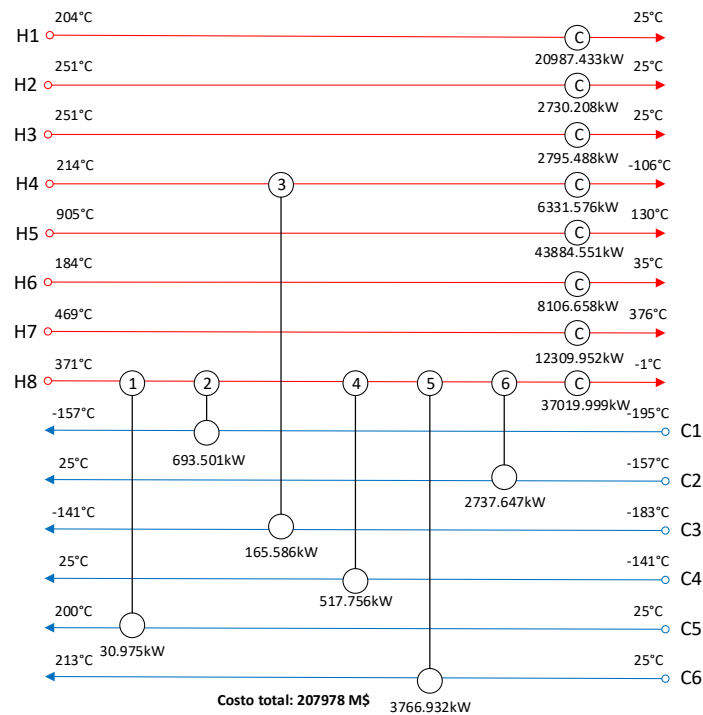


Figura 24. Red de intercambiador óptima para caso de estudio con 30% de cogasificación.

Tabla 16. Resultados principales obtenidos de los casos con diferentes porcentajes de cogasificación.

% Cogasificación	# Intercambiadores	$Q_{\text{Servicios Fríos}}$ [kW]	$Q_{\text{Servicios Calientes}}$ [kW]	Costo de la red [Millones de COP]
0	14	139923.894	0	\$ 215844
10	15	139665.828	0	\$ 215559
20	14	136697.098	0	\$ 211920
30	14	134165.865	0	\$ 207978

De los resultados obtenidos en la simulación y utilizados en el diseño de la red de intercambiadores de calor, Tablas 13, 14 y 15, se debe resaltar que el porcentaje de cuesco incrementa en la planta, la temperatura a la salida del gasificador incrementa (corriente 37-40). La composición de la biomasa por lo general tiene una mayor proporción de oxígeno frente al carbón, para el caso del cuesco este cuenta con 43.79% de oxígeno frente al carbón que posee un porcentaje de 19.8% de este. Este oxígeno adicional que provee el cuesco al descomponerse en sus componentes constituyentes en la etapa inicial del gasificador reacciona en ausencia de oxígeno exterior en la etapa de pirólisis para producir una pequeña combustión que incrementa la temperatura en la base del reactor a la entrada.

Este incremento en el flujo de calor al inicio del reactor sumado con la combustión inicial que toma lugar al inicio del reactor cuando el sólido entra en contacto con el aire entrante, son los causantes del aumento de la temperatura del gas efluente a esta unidad. Lo anterior se puede corroborar con los F_{Cp} totales descritos en las Tablas 13, 14 y 15 para las corrientes de aire de toda la planta (12-13, 4-5, 6-7, 8-9). A medida que la cantidad de cuesco incrementa, el valor de estos F_{Cp} disminuye, lo que indica que el flujo de aire ha disminuido, teniendo en cuenta que las demás propiedades del fluido como temperatura y presión permanecen relativamente constantes. La disminución del flujo de aire en la planta se debe a la relación inicial que se fijó en la alimentación del gasificador de O/C. Con esta relación fija y una adición de oxígeno con el ingreso de biomasa a la planta, la cantidad de aire necesaria disminuye.

Los resultados de las Figuras 22, 23 y 24 son coherentes con la información descrita previamente. A medida que el cuesco incrementa y el flujo de aire disminuye, el calor sobrante en estas corrientes disminuye, reduciendo la posibilidad de generar servicios industriales y por tanto disminuyendo los costos totales. El costo total para un 10, 20 y 30% de cogasificación fue de 215559, 211920 y 207978 M\$COP respectivamente. El número de intercambiadores para los casos de 20 y 30% corresponden al mínimo, con un número de 14 intercambiadores cada uno; mientras que el 10% entregó un óptimo con 15 intercambiadores, una de las razones que explica el alto valor de los costos totales de esta red, además del alto valor del flujo de calor requerido para suplir las corrientes calientes. Al variar la materia prima y comparar los resultados obtenidos en las Figuras 22, 23 y 24 contra los obtenidos con materia prima convencional, como es el carbón en la Figura 21; el caso con materia prima convencional posee la ventaja de tener un mayor flujo de calor sobrante en sus corrientes calientes. Este flujo de calor se puede utilizar en una planta de ciclo combinado para generar vapor y así producir energía e incrementar la eficiencia de la planta. Mientras que con el incremento del porcentaje de cogasificación, este flujo disminuye, castigando la cantidad de energía generada en el ciclo combinado. Sin embargo una planta que utilice cogasificación, tendrá menores costos en su red de intercambiadores de calor además de utilizar biomasa, una materia prima más amigable con el medio ambiente, pues sus emisiones de CO_2 son menores respecto al carbón.

Observando estos resultados es claro que se deben realizar estudios posteriores, donde el algoritmo acople la posibilidad de generar vapor para producir energía en plantas

termoeléctricas, creando una red que aproveche de mejor forma el flujo de calor a transferir. Además, realizar una optimización multiobjetivo, donde se busca optimizar la función de costos, y una función que determine las emisiones de CO₂ involucradas en cada red generada. Con estas dos funciones se puede crear un frente de Pareto, donde el lector pueda decidir libremente si prefiere una red que le genere los menores costos totales, una red con las menores emisiones de CO₂, o una red intermedio que satisfaga hasta cierto nivel ambos criterios.

4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En este trabajo se presenta un modelo que permite obtener la red óptima de intercambiadores de calor para un conjunto de corrientes de proceso que requiera de integración energética. El modelo posee una mezcla de metodologías secuenciales y simultáneas para generar redes de intercambiadores de calor además de poseer una metodología de optimización heurística para las redes de intercambiadores de calor. La validación del modelo se llevó a cabo con problemas reportados en la literatura de 9, 10 y 15 corrientes de proceso. De esta validación se concluye que el modelo de manera satisfactoria obtiene redes de intercambiador óptimas respecto a los costos totales que involucran los costos operativos y de capital. Un número de 20 generaciones fue encontrado como el valor deseado para este algoritmo, con un total de 100 individuos al inicio de cada generación. El algoritmo debido al uso de principios de la mecánica cuántica trabaja de manera simultánea múltiples soluciones; lo anterior permite evitar el uso de superestructuras como valor inicial, pero como principal desventaja se encontró que a medida que el número de corrientes incrementa, el tiempo de cómputo se ve afectado significativamente. Además se omitió el uso de partición de corrientes en el diseño de las redes de intercambiadores de calor. La partición de corrientes permite al algoritmo tener una mayor libertad para seleccionar la solución más adecuada; se omitió el uso de partición de corrientes debido a la falta de información en la literatura sobre metodologías adecuadas insertar este criterio en el diseño.

Para el caso de estudio se reporta una red de intercambiadores de calor con un costo de 215844 M\$ que cuenta con 14 intercambiadores, de los cuales 8 de estos utilizan servicio industrial frío. La diferencia en tiempos de cómputo entre este caso y la validación con 15 corrientes permite concluir que la adición de restricciones en la optimización disminuye la creación de múltiples soluciones en la parte cuántica del algoritmo. Para la cogasificación se concluye que es necesario implementar la generación de vapor dentro del diseño de la red de intercambiadores de calor para poder comparar los diseños sin y con cogasificación. La generación de vapor sirve para producir energía en una turbina de vapor, incrementando eficiencias de proceso y reduciendo la necesidad de utilizar servicio industrial caliente. A medida que más biomasa se adicionaba al reactor, los costos totales de la planta disminuían junto con el flujo de calor que se debía suplir con un servicio industrial frío. Pero lo anterior

puede ser no beneficioso para una planta termoeléctrica que usualmente utiliza cogeneración con una turbina de vapor para incrementar la cantidad de energía eléctrica producida y así aumentarla eficiencia de la planta. Para el caso Colombiano las limitaciones encontradas fueron de transporte, y por tanto de área de intercambiadores de calor. Se recomienda incluir en el algoritmo reglas que permitan la partición de corrientes y la posibilidad de generar vapor en el caso de plantas termoeléctricas.

El presente trabajo cumple con los objetivos propuestos de entregar un modelo para la integración energética; utilizando métodos de optimización estocásticos, validando dicho modelo y aplicándolo a un caso particular de una termoeléctrica y comparando los resultados de dicho caso de estudio con diferentes tipos de materia prima.

BIBLIOGRAFÍA

- Abraham, A., Jain, L., & Robert, G. (Eds). (2005). *Evolutionary Multiobjective Optimization*. *Evolutionary Multiobjective Optimization*. <https://doi.org/10.1007/1-84628-137-7>
- Adamczyk, W. P., Klimanek, A., Białecki, R. a., Węcel, G., Kozołub, P., & Czakiert, T. (2014). Comparison of the standard Euler-Euler and hybrid Euler-Lagrange approaches for modeling particle transport in a pilot-scale circulating fluidized bed. *Particuology*, *15*, 129–137. <https://doi.org/10.1016/j.partic.2013.06.008>
- Ahmad, M. I., Zhang, N., Jobson, M., & Chen, L. (2012). Multi-period design of heat exchanger networks. *Chemical Engineering Research and Design*, *90*(11), 1883–1895. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2012.03.020>
- Angsutorn, N., Siemanond, K., & Chuvaree, R. (2014). *Heat exchanger network synthesis using MINLP Stage-wise model with pinch analysis and relaxation*. *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 33). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63456-6.50024-7>
- Axd, I., & Chemixtry, E. (1923). The Simultaneous Combustion of Hydrogen and Carbon Monoxide, 679–681.
- Babu, B. V., & Sheth, P. N. (2006). Modeling and simulation of reduction zone of downdraft biomass gasifier: Effect of char reactivity factor. *Energy Conversion and Management*, *47*(15–16), 2602–2611. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2005.10.032>
- Barnes, I. (2013). *Recent operating experience and improvement of commercial IGCC*.
- Barrio, M., Gøbel, B., Rimes, H., Henriksen, U., Hustad, J. E., & Sørensen, L. H. (2008). Steam Gasification of Wood Char and the Effect of Hydrogen Inhibition on the Chemical Kinetics. *Progress in Thermochemical Biomass Conversion*, 32–46. <https://doi.org/10.1002/9780470694954.ch2>
- Basu, P. (2006). *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*. <https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004>
- Begum, S., Rasul, M., Akbar, D., & Cork, D. (2013). An Experimental and Numerical

- Investigation of Fluidized Bed Gasification of Solid Waste. *Energies*, 7(1), 43–61. <https://doi.org/10.3390/en7010043>
- Bell, D. A., Towler, B. F., & Fan, M. (2011). *Coal Gasification and Its Applications*. *Coal Gasification and Its Applications*. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-8155-2049-8.10011-7>
- Bhunya, D. K. (2014). Simulation Study of Cryogenic Air Separation Unit Using Aspen Hysys At Rourkela Steel Plant, (212).
- Bíba, V., Macák, J., Klose, E., & Malecha, J. (1978). Mathematical model for the gasification of coal under pressure. *Ind. Eng. Chem. Process. Des. Dev.*, 17(1), 92–98.
- Biyanto, T. R., Gonawan, E. K., Nugroho, G., Hantoro, R., Cordova, H., & Indrawati, K. (2016). Heat exchanger network retrofit throughout overall heat transfer coefficient by using genetic algorithm. *Applied Thermal Engineering*, 94, 274–281. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.10.146>
- Bloch, H. P., & Godse, A. (2006). *Compressors and Modern Process Applications*. Wiley.
- Bogdanov, I., Costin, A., & Merte, R. (2009). *Air Separation*. *Diploma*.
- Bose, A. (2012). Simulation of Air Liquefaction Using Aspen Plus Fulfillment of the Requirement for the.
- Bringas, E. (2008). *Contribución al Diseño de Procesos de Separación con Membranas Líquidas Selectivas . Tratamiento de Aguas Subterráneas Contaminadas con Cr (VI)*. *Universidad de Cantabria*. Universidad de Cantabria.
- Coello, C. (2001). A Short Tutorial on Evolutionary Multiobjective Optimization. *Evolutionary Multi-Criterion Optimization*, 1993, 21–40. https://doi.org/10.1007/3-540-44719-9_2
- Communities, C. of the E. (1990). *Technical Coal Research. Development of coal-feed systems for pressurized fluidized bed processes to eliminate the use of lock hoppers*.
- Cui, H., Mostoufi, N., & Chaouki, J. (2000). Characterization of dynamic gas – solid distribution in fluidized beds, 79, 133–143.
- Deb, K. (2011). Multi-objective optimization using evolutionary algorithms: an introduction. *Multi-Objective Evolutionary Optimisation for Product Design and Manufacturing*, 1–24.

- Doherty, W., Reynolds, a, & Kennedy, D. (2013). Aspen plus simulation of biomass gasification in a steam blown dual fluidised bed, 212–220.
- EIA. (2018). *Cost and Performance Characteristics of New Generating Technologies , Annual Energy Outlook 2018*. Retrieved from http://www.eia.gov/forecasts/aeo/assumptions/pdf/table_8.2.pdf
- Electri.madpage.com. (2016). FUENTE TERMOELÉCTRICA. Retrieved May 20, 2016, from http://electri.madpage.com/energia_termoelectrica.htm
- Fazlali, A., & Mohammadi, A. H. (2014). Optimization of Heat Exchanger Networks Using an Evolutionary Method. *Advances in Energy Research*, 18(March), 19.
- FIBERGLASS. (2008). *Consejos para ahorrar energía*.
- Fieg, G., Luo, X., & Jezowski, J. (2009). A monogenetic algorithm for optimal design of large-scale heat exchanger networks. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 48(11–12), 1506–1516. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2009.10.003>
- Frank, D. (2006). *Feasibility Study for In-situ Oxygen Separation for Hospitals : Technical Report and Market Analysis*.
- Frausto-Hernández, S., Rico-Ramírez, V., Jiménez-Gutiérrez, A., & Hernández-Castro, S. (2003). MINLP synthesis of heat exchanger networks considering pressure drop effects. *Computers and Chemical Engineering*, 27(8–9), 1143–1152. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(03\)00042-5](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(03)00042-5)
- Furman, K. C., & Sahinidis, N. V. (2002). A Critical Review and Annotated Bibliography for Heat Exchanger Network Synthesis in the 20th Century. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 41(10), 2335–2370. <https://doi.org/10.1021/ie010389e>
- Harik, G. (1999). Linkage Learning via Probabilistic Modeling in the ECGA. *Scalable Optimization via Probabilistic Modeling From Algorithms to Applications*, 61(99010), 39–61. Retrieved from <http://www.springerlink.com/index/m64637n8m5m32263.pdf>
- Henao, C. A. (2006). *Simulación y Evaluación de Procesos Químicos. Herramientas básicas para la síntesis de procesos* (Juan José). Medellín, Colombia.
- HISE, R. E., MASSEY, L. G., ADLER, R. J., BROSILOW, C. B., GARDNER, N. C.,

- AUYANG, L., ... LIU, Y. C. (1983). A Low-Temperature Energy-Efficient Acid Gas Removal Process, (2), 27–45. <https://doi.org/10.1021/bk-1983-0223.ch002>
- Jafari, R., Sotudeh-Gharebagh, R., & Mostoufi, N. (2004). Modular simulation of fluidized bed reactors. *Chemical Engineering and Technology*, 27(2), 123–129. <https://doi.org/10.1002/ceat.200401908>
- Kabadi, V. N., & Danner, R. P. (1985). A modified Soave-Redlich-Kwong equation of state for water-hydrocarbon phase equilibria. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 24(3), 537–541. <https://doi.org/10.1021/i200030a004>
- Kirilowitsch, C. (2006). *Reduktion von holzgas aus biomasse über glühender kohle*. TU Graz.
- Kobayashi, S., & Ichikawa, A. (1971). Synthesis of Optimal Heat Exchange Systems - An Approach by the Optimal Assignment Problem in Linear Programming. *Chemical Engineering Science*, 26(9), 1367–1380.
- Korens, N., Simbeck, D. R., & Wilhelm, D. J. (2002). *Process Screening Analysis of Alternative Gas Treating and Sulfur Removal for Gasification. Options*.
- Kubek, D. I., Polla, E., & Wilcher, F. P. (2005). *Purification and Recovery Options for Gasification*.
- Kunii, D., & Levenspiel, O. (1969). Fluidization Engineering. *Powder Technology*, 3(1), 255–256. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(69\)80087-2](https://doi.org/10.1016/0032-5910(69)80087-2)
- Leśniak, A., Bieniecki, M., & Mining, C. (2014). Energy production in selected integrated gas-steam IGCC systems powered by gas from coal gasification processes. *CHEMIK*, (12).
- Linnhoff, B., & Hindmarsh, E. (1983). The Pinch Design Method for Heat Exchanger Networks. *Chemical Engineering Science*, 38(5), 745–763. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(83\)80185-7](https://doi.org/10.1016/0009-2509(83)80185-7)
- Liu, L. L., Fan, J., Chen, P. P., Du, J., & Yang, F. L. (2015). Synthesis of heat exchanger networks considering fouling, aging, and cleaning. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 54(1), 296–306. <https://doi.org/10.1021/ie5027524>

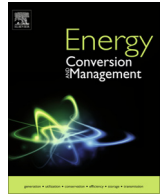
- March, L. (1998). *Introduction to Pinch Technology. Introduction to Pinch Technology.*
- Marler, R. T., & Arora, J. S. (2004). Survey of multi-objective optimization methods for engineering. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 26(6), 369–395. <https://doi.org/10.1007/s00158-003-0368-6>
- McDonell, V. G. (2000). *Key Combustion Issues Associated with Syngas and high-Hydrogen Fuels. National Energy Technology Laboratory.*
- Ministerio de Minas y Energía de Colombia, & Unidad de Planeación Minero Energética - UPME. (2017). *Plan De Acción Indicativo De Eficiencia Energética 2017 - 2022.* Retrieved from http://www1.upme.gov.co/DemandaEnergetica/MarcoNormatividad/PAI_PROURE_2017-2022.pdf
- Nayak, R., & Mewada, R. K. (2011). Simulation of Coal Gasification Process using ASPEN PLUS. *Institute of Technology, Nirma University, Ahmedabad* –, 8–10.
- Nieto, C., Arenas, E., Arrieta, A., Zapata, Z., Londoño, C., Valdés, C., & Chejne, F. (2008). SIMULATION OF IGCC TECHNOLOGIES: INFLUENCE OF OPERATIONAL CONDITIONS (ENVIRONMENTAL AND FUEL GAS PRODUCTION). *Energética*, 40, 39–52.
- Niu, M., Huang, Y., Jin, B., & Wang, X. (2013). Simulation of Syngas Production from Municipal Solid Waste Gasification in a Bubbling Fluidized Bed Using Aspen Plus. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52, 14768–14775. <https://doi.org/dx.doi.org/10.1021/ie400026b>
- Núñez-Serna, R. I., & Zamora, J. M. (2016). NLP model and stochastic multi-start optimization approach for heat exchanger networks. *Applied Thermal Engineering*, 94, 458–471. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.10.128>
- Pan, M., Bulatov, I., & Smith, R. (2016). Improving heat recovery in retrofitting heat exchanger networks with heat transfer intensification, pressure drop constraint and fouling mitigation. *Applied Energy*, 161, 611–626. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.09.073>
- Paterson, W. R., Rudd, D. F., Seader, J. D., Processes, C., Plants, C., Vary, K., ...

- Generation, E. (1978). Synthesis of Heat Exchanger Networks: II. Evolutionary Generation of Networks with Various Criteria of Optimality. *AIChE*, 24(4), 642–654.
- Peng, F., & Cui, G. (2015). Efficient simultaneous synthesis for heat exchanger network with simulated annealing algorithm. *Applied Thermal Engineering*, 78, 136–149. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2014.12.031>
- Puig-Arnavat, M., Hernández, J. A., Bruno, J. C., & Coronas, A. (2013). Artificial neural network models for biomass gasification in fluidized bed gasifiers. *Biomass and Bioenergy*, 49, 279–289. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2012.12.012>
- Randgaiah, G. P. (2016). *Chemical Process Retrofitting and Revamping. Techniques and Applications*. (WILEY, Ed.).
- Rath, L. (2011). *Cost and Performance Baseline for Fossil Energy Plants Volume 2: Coal to Synthetic Natural Gas and Ammonia* (Vol. 2). <https://doi.org/DOE/NETL-2010/1402>
- Ren, L., Wei, R., & Gao, Y. (2017). Co-gasification reactivity of petcoke and coal at high temperature. *Fuel*, 190, 245–252. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.11.020>
- Rev, E., & Fonyo, Z. (1991). Diverse pinch concept for heat exchange network synthesis: the case of different heat transfer conditions. *Chemical Engineering Science*, 46(7), 1623–1634. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(91\)87010-A](https://doi.org/10.1016/0009-2509(91)87010-A)
- Sánchez, C., Arenas, E., Chejne, F., Londoño, C. A., Cisneros, S., & Quintana, J. C. (2016). A new model for coal gasification on pressurized bubbling fluidized bed gasifiers. *Energy Conversion and Management*, 126. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2016.08.066>
- Sánchez, C., & Betancourt, V. (2015). *OPTIMIZACIÓN DE PARÁMETROS GEOMÉTRICOS EN CICLONES INDUSTRIALES SIMPLES*. Universidad Pontificia Bolivariana.
- Sergeant, G. D., & Smith, I. W. (1973). Combustion rate of bituminous coal char in the temperature range 800 to 1700 K. *Fuel*, 52(1), 52–57. [https://doi.org/10.1016/0016-2361\(73\)90012-4](https://doi.org/10.1016/0016-2361(73)90012-4)
- Smith, R. M. (2005). *Chemical Process: Design and Integration*. John Wiley & Sons, Ltd.

Retrieved from <https://books.google.com/books?id=cdyiWR0d1o8C&pgis=1>

- Sotudeh-Gharebaagh, R., Legros, R., Chaouki, J., & Paris, J. (1998). Simulation of circulating fluidized bed reactors using ASPEN PLUS. *Fuel*, 77(4), 327–337. [https://doi.org/10.1016/S0016-2361\(97\)00211-1](https://doi.org/10.1016/S0016-2361(97)00211-1)
- Sreepathi, B. K., & Rangaiah, G. P. (2014). Review of Heat Exchanger Network Retrofitting Methodologies and their Applications Review of Heat Exchanger Network Retrofitting Methodologies and their Applications.
- Staniar, W. (1950). *Plant Engineering Handbook* (Vol. 1 2 impr).
- Sut, J., & Motard, R. L. (1984). Evolutionary Synthesis of Heat-Exchanger Networks. *Computer and Chemical Engineering*, 8(2), 67–80.
- Sweny, J. W. (1973). *Synthetic Fuel Gas Purification by the SELEXOL Process*. Dallas, Texas.
- Tantimuratha, L., Asteris, G., Antonopoulos, D. K., & Kokossis, a. C. (2001). A conceptual programming approach for the design of flexible HENs. *Computers & Chemical Engineering*, 25, 887–892. [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(01\)00653-6](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(01)00653-6)
- Tesner, P. A. (1960). No Title. In *Proceedings of the English Symposium on Combustion* (p. 807).
- Thuy, N. T. P., Pendyala, R., & Marneni, N. (2014). Heat exchanger network optimization using differential evolution with stream splitting. *Applied Mechanics and Materials*, 625, 373–377. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.625.373>
- UPME. (2010). *Proyección de Demanda de Energía en Colombia*.
- Van Der Ham, L. V., & Kjelstrup, S. (2011). Improving the heat integration of distillation columns in a cryogenic air separation unit. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 50(15), 9324–9338. <https://doi.org/10.1021/ie200383s>
- Vilienskii, T. V., & Hezmalian, D. M. (1978). Dinamika Gorenia Prilevidnovo Tolpliva. *Energia*, 146.
- Walas, S. M. (2012). *Chemical Process Equipment Selection and Design*. (G. K. Suppes, Ed.).

- Yeo, Z. Y., Chew, T. L., Zhu, P. W., Mohamed, A. R., & Chai, S. P. (2012). Conventional processes and membrane technology for carbon dioxide removal from natural gas: A review. *Journal of Natural Gas Chemistry*, 21(3), 282–298. [https://doi.org/10.1016/S1003-9953\(11\)60366-6](https://doi.org/10.1016/S1003-9953(11)60366-6)
- Zhang, F. L., Yu, S. R., & Shen, L. (2012). The Pinch Design Method for Heat Exchanger Networks Considering the Heat Capacity Flowrate of a Stream with Variation in Temperature. *Advanced Materials Research*, 396–398, 1048–1054. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.396-398.1048>
- Zhang, G. (2011). Quantum-inspired evolutionary algorithms: A survey and empirical study. *Journal of Heuristics*, 17(3), 303–351. <https://doi.org/10.1007/s10732-010-9136-0>
- Zhaoyi, H., Liang, Z., Hongchao, Y., & Jianxiong, Y. (2013). Simultaneous synthesis of structural-constrained heat exchanger networks with and without stream splits. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 91(5), 830–842. <https://doi.org/10.1002/cjce.21702>
- Zitzler, E., Laumanns, M., & Bleuler, S. (2004). A Tutorial on Evolutionary Multiobjective Optimization. *Evolutionary Computation*, 535, 3–37. https://doi.org/10.1007/978-3-642-17144-4_1



A new model for coal gasification on pressurized bubbling fluidized bed gasifiers



Cristian Sánchez^{a,*}, Erika Arenas^a, Farid Chejne^b, Carlos A. Londoño^b, Sebastian Cisneros^b, Juan C. Quintana^b

^a Universidad Pontificia Bolivariana, Facultad de Ingeniería Química, Grupo de Energía y Termodinámica, Circular 1ra #70-01, Medellín 56006, Colombia

^b Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Minas, Grupo TAYEA, Carrera 80 No 65-223, Medellín 50041, Colombia

ARTICLE INFO

Article history:

Received 12 May 2016

Received in revised form 21 August 2016

Accepted 22 August 2016

Keywords:

Pressurized fluidized bed

Coal gasification

Gasifier simulation

Modeling

ABSTRACT

Many industries have taken interest in the use of coal gasification for the production of chemicals and fuels. This gasification can be carried out inside a fluidized bed reactor. This non-ideal reactor is difficult to predict due to the complex physical phenomena and the different chemical changes that the feedstock undergoes. The lack of a good model to simulate the reactor's behavior produces less efficient processes and plant designs. Various approaches to the proper simulation of such reactor have been proposed. In this paper, a new model is developed for the simulation of a pressurized bubbling fluidized bed (PBFB) gasifier that rigorously models the physical phenomena and the chemical changes of the feedstock inside the reactor. In the model, the reactor is divided into three sections; devolatilization, volatile reactions and combustion-gasification. The simulation is validated against experimental data reported in the literature and compared with other models proposed by different authors; once the model is validated, the dependence of the syngas composition on operational pressure, temperature, steam/coal and air/coal ratios are studied. The results of this article show how this model satisfactorily predicts the performance of PBFB gasifiers.

© 2016 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

Polygeneration is born from the necessity to generate cleaner and more efficient processes. In such plants, process integration is needed in order to maximize products and minimize residues. Some of the benefits of polygeneration are the higher overall value creation, higher overall efficiency and feedstock utilization, synergistic usage of low grade steam and waste streams, enhanced reliability with potential to store syngas as a liquid fuel, among others [1]. The finite nature of worldwide petroleum reserves leads to the use of other technologies for the generation of fuels, energy and chemicals, like in the case of coal gasification. Coal gasification can be used to produce energy, ammonia, methanol, synthetic natural gas, Fischer-Tropsch products, among others [2].

Gasification is about converting a carbonaceous material into a combustible synthetic gas with the help of a gasifying agent. In contrast to combustion, gasification allows a more efficient removal of pollutants from the raw gas when the operation is at

high pressure. The gasifiers used are generally classified according to the fluidization regime in the gasifier; moving bed, fluidized bed, and entrained flow. Thanks to the mixing of the different phases inside the reactor that facilitates the heat and mass transfer, the fluidized bed processes tend to have high efficiencies [3]. These kinds of reactors are complex to model because of the turbulent regime in which they operate. The implementation of new models to help predict the behavior of these gasifiers are of relevant importance since they ensure a better understanding of the phenomena taking place and also predict with precision the composition of the flue gas. These results lead to a better plant and process design.

Different kinds of approaches have been proposed to predict the behavior of fluidized bed gasifiers. When there is a need for simulations that yield a more detailed result about the heat, mass transfer, dynamic behavior or the influence of the geometry of the gasifier in the gasification process, the recommended tool is the use of computational fluid dynamics (CFD). Adamczyk et al. [4] used CFD to compare a hybrid Euler-Lagrange with a standard Euler-Euler approach for modeling particle transport in a circulating fluidized bed. By doing so, the authors realized that they needed to implement several user-defined functions (UDFs) to be

* Corresponding author.

E-mail address: cristian.sanchezqu@upb.edu.co (C. Sánchez).

able to get the results they were seeking; but, by doing so the simulation became more complex and thus increasing the amount of computational time needed. The same authors, in other work, simulated the particle transport and combustion phenomena in a circulating fluidized bed boiler [5]. These authors indicated that many numerical simulations were focused on gathering experience on the proper use of the numerical techniques, the selection of the appropriate mesh size and distribution, as well as the time step size due to the introduction of all complexities involved in the model at one stage is not likely to result in a stable solution process. In the same way, several authors [6–9] have validated their models with experimental data to have better predictions and understandings of the system worked, but the computational cost, limitations of the software, and the complexity of the simulations are the disadvantages of CFD.

In order to predict the syngas composition, Arnavat et al. [10] used two different artificial neural networks (ANNs), one for modeling circulating fluidized bed gasifiers, and the other one for bubbling fluidized bed gasifiers. The ANNs were trained with published experimental data and the results obtained by the networks showed good approximations ($R^2 > 0.98$). Models like this are valid only for a certain range of operational conditions and are very dependent on how well the ANNs are trained.

Industrial process simulators such as Aspen Plus or Aspen Hysys have also been used to model gasifiers; since once the reactor is properly modeled, the users can continue with simulations of other plant operations allowing them to have an easier integration of the results, predict operational conditions and have better decision-making criteria. To be able to model a complex reactor such as this one, the use of several ideal reactors is recommended [11].

Emun et al. [12] demonstrated the advantages of working with these kinds of simulators by improving the performance of an integrated gasification combined cycle (IGCC) plant. Aspen Plus was used and RGIBBS reactors were implemented for the simulation of the combustion and gasification zones. Since the coupling of other units is possible in this process simulators, pinch analysis and process integration insights were employed to make topological changes minimizing operational costs. Nayak and Mewada [13] simulated a fluidized bed reactor using Aspen Plus. In their simulation, the model was based on the different chemical changes that the coal undergoes inside the reactor; these changes are: devolatilization, volatile reactions and combustion-gasification. The authors modeled the devolatilization with an RYIELD reactor, the volatiles reaction with an RGIBBS reactor and the combustion-gasification zone with a stoichiometric reactor. Bassyouni et al. [14] simulated a date palm waste gasifier using Aspen Hysys. The authors also used a model based on the different chemical changes that the biomass undergoes, but in their simulation they modeled the combustion and gasification zones with equilibrium and Gibbs reactors. The results were validated against experimental data from a lab scale gasifier. Same principle was applied by Niu et al. [15]. Aspen Plus was implemented to simulate the gasification process of municipal solid waste in a bubbling fluidized bed. In the simulation, the raw material was first dried in a stoichiometric reactor, then the devolatilization was carried out on a RYIELD reactor and lastly the combustion and gasification sections were done using RGIBBS reactors.

A similar approach was carried out by Doherty et al. [16] involving several reactors to model the different reactions that take place inside the fluidized bed gasifier, and a second gasifier to adjust the composition of the syngas to match the reported data in the literature. Another similar model was proposed by Nieto et al. [11], the fluidized bed was portrayed as a series of pairs of PFRs in series in Aspen Hysys. These models may explain the chemical changes that the coal undergoes, but do not take into account the physical phe-

nomena that takes place inside the reactor, leading to less accurate results.

Jafari et al. [17] proposed a different approach to model the gasifier. The model considers the fluid dynamic behavior by taking into account the coexistence of the bubble and the emulsion phase inside the reactor. The movement of gas through bubbles in the fluidized bed was considered as plug flow while the movement of gas through the emulsion phase was considered as completely mixed. These assumptions and the selection of proper fluid dynamic and mass transfer equations, allowed this sequential modular approach to predict satisfactorily the flue gas concentration of fluidized bed gasifiers over a wide range of superficial gas velocities.

Sotudeh-Charebagh et al. [18] tried to combine the two approaches, considering the reactions inside the gasifier and the hydrodynamics in Aspen Plus. Their model was based on a combination of yield, stoichiometric, CSTR and Equilibrium reactors in series with some calculator blocks including a block called HYDRO, which calculated the mean void fraction in each section of the upper region and in the dense bed of the riser. By trying to combine the two approaches, the authors got results that satisfied their needs; but their hydrodynamic model still missed the mass transfer phenomena that takes place inside the reactor and the lack of robustness.

In the present article, a PBFB gasifier will be modeled in Aspen Plus. The proposed method will model the chemical changes that the coal undergoes, and the fluid dynamic behavior of the gasifier in order to have more realistic predictions with respect to other models available in the literature. Experimental data from the literature will be used to validate the model.

2. Methodology

2.1. Model assumptions and equations

A PBFB gasifier is a non-ideal reactor that will be modeled as a combination of several ideal reactors. The assumptions made in the present model are summarized below:

- Steady state.
- Isothermal process.
- Coal devolatilization takes place instantaneously.
- Char is composed of carbon and ash.
- Radial concentration gradients are negligible.
- No heterogeneous reactions take place in the bubble phase.
- In the emulsion phase both heterogeneous and homogeneous reactions are considered.
- The fluid dynamic behavior of both phases can be described by the two phase model proposed by Kunii and Levenspiel [19] with some modifications made by Cui et al. [20].
- Reactants and effluents mixing take place at the end of each section.
- Bubbles reach the equilibrium size quickly above the distributor. Meaning that their diameter is assumed constant.

The modifications made by Cui et al. [20] use a probability distribution model of the local voidage to describe and simulate the dynamic gas-solid distribution in the turbulent regimen of the gasifier. This helps the model from Kunii and Levenspiel have a better approximation to the actual phenomena happening inside pressurized bubbled fluidized bed gasifiers. The two-phase model (bubble-emulsion) was chosen over a three-phase model (bubble-cloud/wake-emulsion) because in the latter the mass transfer coefficient of bubble-emulsion has a contribution in a mass transfer bubble-cloud and cloud-emulsion phases, also there are heterogeneous chemical reactions taking place in the emulsion

and cloud phase, which means that the computational cost associated with this model is much greater than the two-phase model [21]. Thus the two-phase model was selected.

The chemical reactions and their respective kinetics are shown in Table 1, and the equations used in the hydrodynamics model which includes the mass transfer equations will be the same as the ones used in [17].

2.2. Model description

The simulation is carried out in Aspen Plus; the reactor is divided into three sections: coal devolatilization, volatile reactions and combustion-gasification. The feedstock used is coal and its proximate and ultimate analysis are shown in Table 2. The gasifying agents are air and steam, the operational conditions of the reactor are the following: temperature 1043 K, pressure 3000 kPa, coal and steam mass flows 31.8 and 27.2 kg/h respectively, and airflow 70.4 N m³/h.

2.2.1. Coal devolatilization

A yield reactor (RYIELD) is used to devolatilize the coal into its constituting components (carbon, hydrogen, oxygen, nitrogen, sulfur, ash and moisture). This is done by specifying the yield according to the ultimate and proximate analysis provided for the coal. Others authors have used the same principle [15,18,30,31].

2.2.2. Volatile reactions

Since volatile reactions occur faster than those of char, an Aspen Plus RGIBBS reactor is used to model this step. To be able to perform this operation, the volatile matter and the amount of carbon that constitute part of the gas phase can be calculated from the coal proximate analysis by considering the fixed carbon as a solid residue that appears after the devolatilization process [13].

2.2.3. Combustion-gasification

This is the most important section of the present model, and thus it is rigorously modeled. The combustion-gasification section has several stages. The number of stages is a parameter that depends on the operational conditions and has to be determined in the simulation; each stage is composed of a CSTR (emulsion phase) and a PFR (bubble phase) in parallel. The fluid dynamic

Table 2
Proximate and ultimate coal analysis.

Ultimate analysis	(% st, as rec'd)	Proximate analysis	(% wt, as rec'd)
Moisture	3.46	Moisture	3.46
C	64.27	Volatile	38.59
H	4.51	Fixed carbon	49.02
N	0.95	Ash	8.93
O	15.95	–	–
S	1.93	–	–
Ash	8.93	–	–

model determines the volume of the phases in each stage, and since the PFBF reactor is assumed isothermal, these volumes remain constant throughout the different stages of the simulation. After each stage, calculations are made using the mass transfer equations to determine how the components move from the emulsion to the bubble phase or vice versa. To account for the missing volume in the reactor, the freeboard is simulated as a PFR at the end of the gasifier section.

The Peng-Robinson equation of state is selected as the property method for this model in Aspen Plus. The experimental set up parameters are taken from [32]. It is worth mentioning that on the first stage, the flows for the different components are divided equitably through the two phases except for the flow of oxygen and solids. The flow of oxygen is sent in its entirety to the emulsion phase of the first stage since it is at the beginning of the gasification section that the combustion reactions take place generating enough energy for the endothermic reactions to occur. Due to the assumption that heterogeneous reactions take place in the emulsion phase, the solids are handled by the CSTRs.

3. Results and discussions

3.1. Model validation

The model (Fig. 1) was validated against experimental data from [32] and it was contrasted with the original sequential modular approach from [17] and the model proposed in [11]. All three simulations were carried out under the same operational conditions and using the same kinetic models so that the difference in

Table 1
Chemical reactions considered and their respective rate laws.

#	Enthalpy or type of reaction	Feedstock	Reaction and kinetics	Ref.
1	Exothermic	Bituminous coal	$C + \phi O_2 \rightarrow (2\phi - 1)CO_2 + (2 - 2\phi)CO$ $1.76 \times 10^6 \frac{1}{\text{bar} \cdot \text{s}} e^{-\frac{113,052 \text{ kJ/kmol}}{RT}} P_{O_2}$	[22]
2	$\Delta H_f = -565.94 \text{ kJ}$	Biomass	$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$ $8.83 \times 10^{11} \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{s}} e^{-\frac{99,800 \text{ kJ/kmol}}{RT}} [CO][CO_2]$	[23]
3	$\Delta H_f = -187.78 \text{ kJ}$	Lignite, subbituminous and bituminous coal	$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$ $3.09 \times 10^{11} \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{s}} e^{-\frac{99,800 \text{ kJ/kmol}}{RT}} \frac{[H_2]^2 [O_2]}{[CO]}$	[24]
4	$\Delta H_f = -802.30 \text{ kJ}$	Coal and biomass	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$ $\frac{5.552 \times 10^{14}}{T} \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{s}} e^{-\frac{130,537 \text{ kJ/kmol}}{RT}} [CH_4][O_2]$	[25]
5	$\Delta H_f = 131.28 \text{ kJ}$	Charcoal	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$ $370,085 \frac{1}{\text{bar}^{0.57} \cdot \text{s}} e^{-\frac{237,000 \text{ kJ/kmol}}{RT}} P_{H_2O}^{0.57}$	[26]
6	$\Delta H_f = -74.85 \text{ kJ}$	Biomass	$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$ $5.06808 \times 10^{-6} \frac{1}{\text{bar}^{0.93} \cdot \text{s}} e^{-\frac{94,800 \text{ kJ/kmol}}{RT}} P_{H_2}^{0.93}$	[27]
7	$\Delta H_f = -41.15 \text{ kJ}$	Coal	$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$ $2780 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{s}} e^{-\frac{12,554.9 \text{ kJ/kmol}}{RT}} [CO][H_2O] - 1,049,066 \frac{\text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{s}} e^{-\frac{45,546.7 \text{ kJ/kmol}}{RT}} [CO_2][H_2]$	[28]
8	$\Delta H_f = 172.43 \text{ kJ}$	Biomass	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$ $3.27321 \frac{1}{\text{bar}^{0.38} \cdot \text{s}} e^{-\frac{122,000 \text{ kJ/kmol}}{RT}} P_{H_2}^{0.38}$	[29]

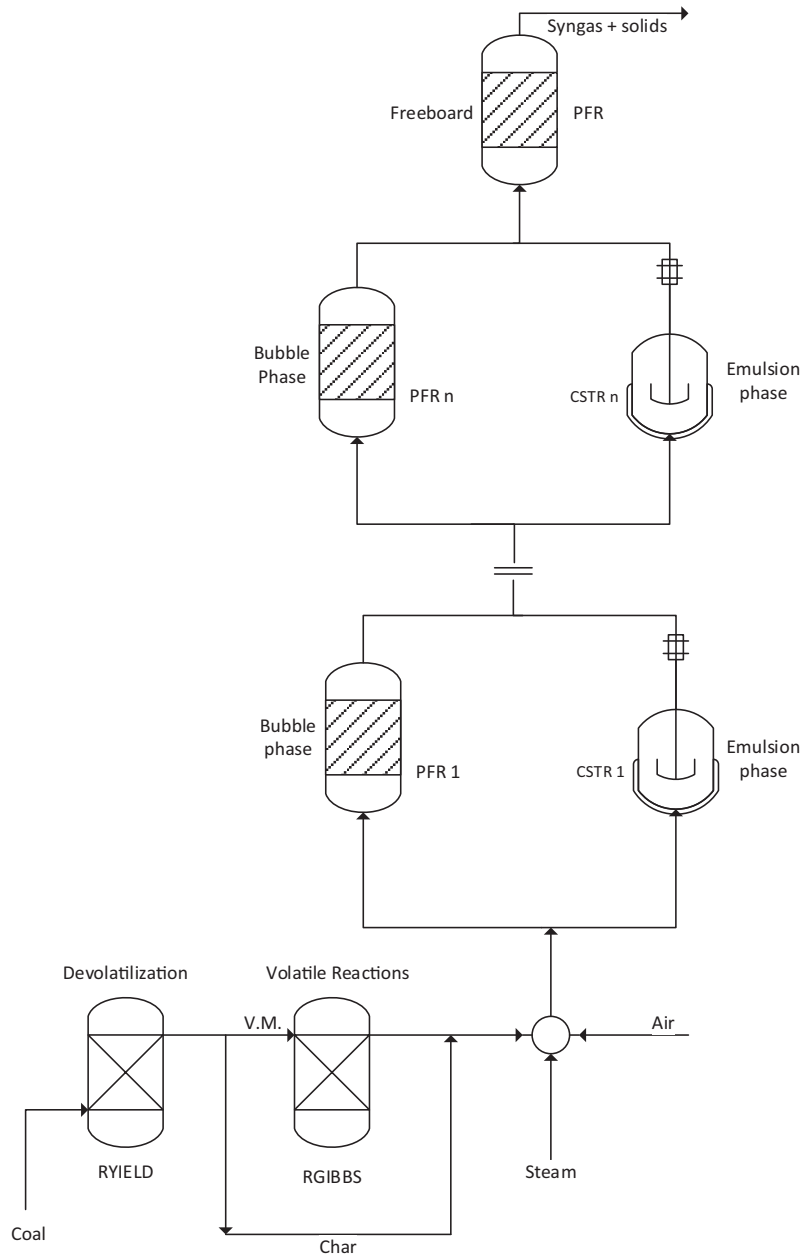


Fig. 1. Fluidized bed gasifier simulation model.

the results is due to the model used. These results are presented in Table 3. The number of stages for the model was found to be 4. There was no need to use calculator blocks or Fortran codes since the simulations were carried out with the help of Microsoft Excel using the Aspen Simulation Workbook™.

Table 3
Model results compared to literature.

	Model proposed	Model from [17]	Model from [11]	Exp [32]
H ₂ (% v/v)	20.02%	20.16%	26.01%	19.32%
CO ₂ (% v/v)	15.60%	8.01%	11.66%	11.76%
CO (% v/v)	12.47%	22.13%	18.93%	12.94%
HHV (MJ/m ³)	4.13	5.37	5.71	4.10
Carbon conversion (%)	83.37%	83.99%	99.28%	84%

All three simulations were carried out under the same operational conditions. As it can be seen in Table 3, the model proposed predicts the experimental data more satisfactorily compared to the other two models indicating its superiority. Results in Table 3 show that hydrogen, carbon monoxide, the high heating value (HHV) and carbon conversion match very well the experimental data. As for carbon dioxide, although the composition obtained with the proposed model is not that different from the experimental data, the difference can be attributed to the reactions kinetics used in the simulation; this is due to the fact that most of them are for coals or feedstock that have different properties compared with the ones of the coal used in [32], also the assumptions made on Section 2.1 can lead to some errors. The experimental data is given in a dry basis by the authors, so results in Table 3 are presented in the same way. Also the composition of methane is not given in the experimental data, so no comparison can be made for this compound. This also means that when calculating the HHVs in Table 3,

methane composition was not taken into account. Although no validation was carried out for this compound, the composition of methane at this conditions tends to be around 4% [33], which is in agreement with the results yielded by the simulations on Sections 3.6 of this paper. As nitrogen is an inert gas and its composition has no effect on the flue gas HHV it is not presented in the results.

After validating the model, to show its flexibility when handling different kinds of coals, another comparison was carried out with the results reported by Huang et al. [34] in another pressurized fluidized bed gasifier. The simulation was carried out with the same operational conditions given by the authors in their paper. Table 4 shows the results.

From the data in the previous table we can conclude that although there are some differences, in practice, these deviations are not that significant and the results give a pretty good idea of the flue gas composition. Which is the main goal of this model. The lower concentration of methane and higher concentration of CO₂ compared to the experimental data may be attributed to the kinetic model used for reaction 4 or to the lack of a methanation reaction in the reactions considered in Table 1.

After validating the model, a series of simulations were carried out in order to observe the effects of parameters like temperature, pressure, steam to coal and air to coal ratio on the flue gas composition and its HHV.

3.2. Effect of temperature on product syngas composition

Fig. 2 shows a strong dependence on operating temperature. Hydrogen and carbon monoxide concentrations increase as the temperature in the reactor is raised; whereas carbon dioxide and methane concentrations decreased. These results can be associated to the endothermic reactions that take place inside the gasifier; reactions 5, and 8 are favored with the increase of temperature, producing more hydrogen and carbon monoxide; this increase does not favor the formation of CH₄ since reaction 6 is exothermic. Similar results have been obtained by other authors [14,15,35,36]. The dotted line represents the high heating value of the syngas; this value increases as the concentration of hydrogen and carbon monoxide increment, as it is expected. It is very important to note that it is recommended to work at high temperatures since they yield high concentrations of H₂ and CO, and reduce CO₂, which are usually the most important compounds for the subsequent processes to gasification such as the production of methanol, synthetic natural gas, and ammonia among others [37]; this should be done without exceeding the initial deformation temperature of the ash, which is usually one of the factors that limits the operational conditions in these kind of reactors [19].

3.3. Effect of the variation of the steam to coal ratio on syngas composition

As it can be observed in Fig. 3, by raising the steam to coal ratio, the concentrations of hydrogen and carbon dioxide incremented and the ones for carbon monoxide and methane decreased. This can be attributed to reactions 5 and 7. The heterogeneous reaction

Table 4

Comparison of model results with a different coal.

	Model proposed (%)	Exp [34] (%)
N ₂ (% v/v)	50.31	51.44
H ₂ (% v/v)	22.01	18.56
CO ₂ (% v/v)	15.83	14.74
CO (% v/v)	10.65	12.54
CH ₄ (% v/v)	1.20	2.73

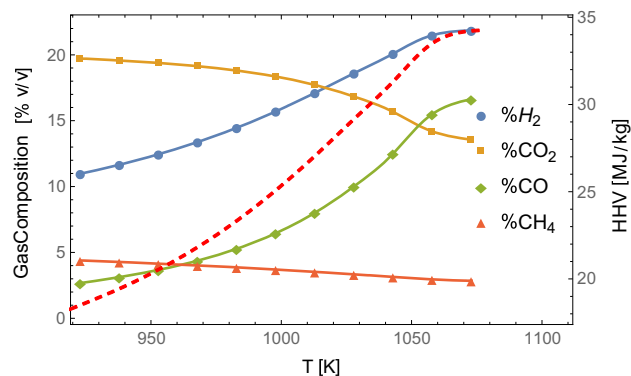


Fig. 2. Effect of temperature on syngas composition (same operational conditions as in the model validation section), dotted line represents the high heating value of the syngas.

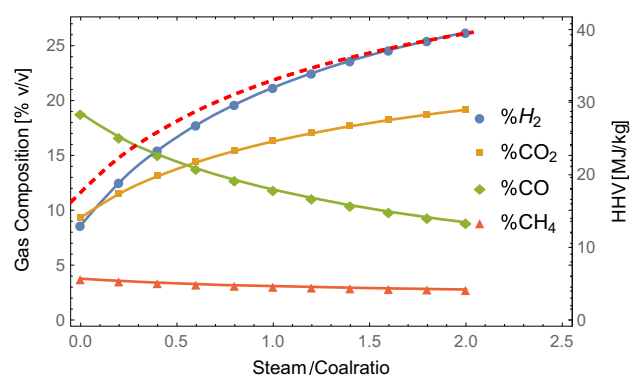


Fig. 3. Effect of steam to coal ratio on syngas composition (same operational conditions as in the model validation section), dotted line represents the high heating value of the syngas.

(reaction 5) is favored producing more hydrogen and carbon monoxide, then the carbon monoxide produced and the water present in the reactor favor the homogeneous reaction (reaction 7) to produce carbon dioxide and more hydrogen. Under these conditions as more steam is added, reaction 5 is preferred over reaction 6, explaining the behavior of methane. The results are in agreement with those reported in the literature [33,38,39].

3.4. Effect of the variation of the air to coal ratio on syngas composition

As air is added to the reactor, it is rapidly consumed by the combustion that takes place at the beginning of the gasifier. In Fig. 4, it can be seen how as the ratio increases, carbon dioxide concentration increases while hydrogen, carbon monoxide and methane decrease. This can be attributed to the combustion reactions (reactions 1 through 4) in which char, carbon monoxide, hydrogen and methane are consumed to produce CO₂ and water. Other authors [30,36] have found similar behaviors; it can also be stated that at a ratio of 0, the gasifying agent is steam, explaining the high yields of H₂ in the flue gas. Although to be able to carry out a gasification without air, heat would have to be provided to the gasifier in order to account for the energy that the endothermic reactions require.

3.5. Effect of pressure on syngas composition

Pressure has also a significant effect on the syngas composition. Fig. 5 shows the impact that varying this variable has at 973 and at 1043 K with a 1:1 steam to air ratio. At 973 K hydrogen and carbon

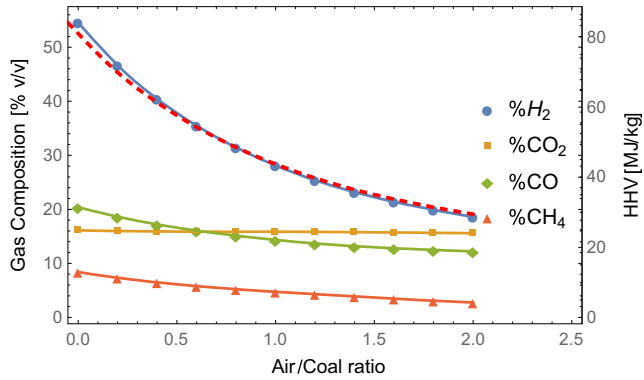


Fig. 4. Effect of air to coal ratio on syngas composition (same operational conditions as in the model validation section), dotted line represents the high heating value of the syngas.

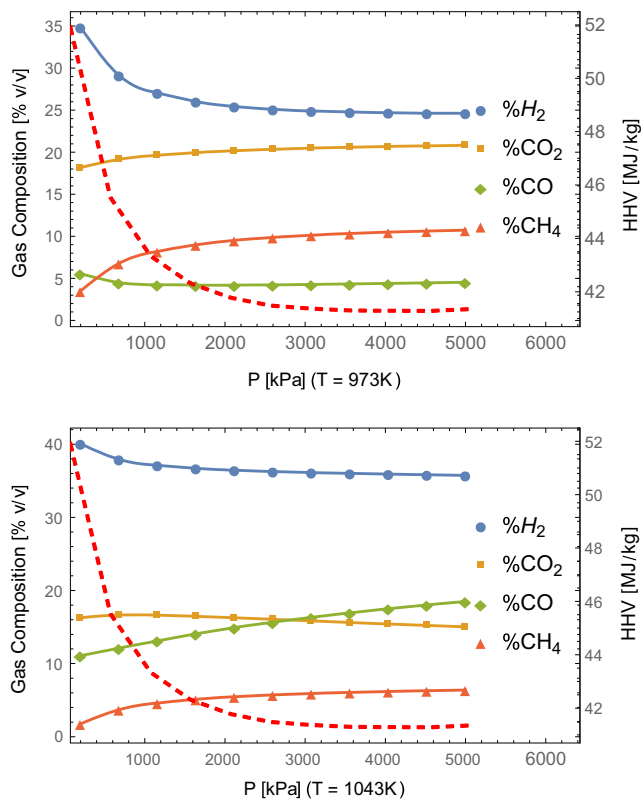


Fig. 5. Effect of pressure on syngas composition at 700 and 770 °C. Steam to air ratio of 1:1, other operational conditions are the same as in the model validation section. Dotted lines represent the high heating value of the syngas.

monoxide compositions decrease whereas CO_2 and CH_4 increase; these results are similar to those reported in [40]. By varying the temperature from 973 to 1043 K, as the pressure increases, carbon monoxide exhibits an opposite behavior to the one shown at 973 K, the same happens to carbon dioxide while for hydrogen and methane the variation is not as significant. This behavior is due to the equilibrium in reaction 7; since the reaction is endothermic, an increase from 973 to 1043 K would favor the formation of carbon monoxide while consuming carbon dioxide. The latter implies that in order to examine the effects of the syngas composition by changing the temperature and pressure of the reactor, these two variables have to be examined together. In all figures, it can be concluded that the high heating value (dotted line) of the syngas is

strongly dependent on the shape of the line for the concentration of hydrogen.

3.6. Effect of temperature and pressure on syngas composition

As it was mentioned in Sections 3.5, it is important to see the effects of varying both the temperature and pressure on the syngas composition. In Fig. 6 these effects can be seen; it is noticeable for example, how the concentration of carbon monoxide changes in the region denoted by 1073 K and 1–4000 kPa, while for 923 K the changes in pressure do not have a strong effect over the composition of CO. The chemical equilibria, the endothermic and exothermic reactions, and the molecularity are parameters that are affected by the variations of the temperature and pressure; causing the behaviors shown in Fig. 6. These results can be used to select adequate operational conditions in order to obtain a syngas with a specified composition.

4. Conclusions

A new model has been proposed for the simulation of pressurized bubbling fluidized bed gasifiers. The model includes the chemical and physical changes that the coal undergoes in gasification and the hydrodynamics that take place inside a PBFB reactor based on the sequential modular approach. According to this model, the gasifier is divided into three stages; devolatilization, volatile reactions and combustion-gasification. The model was validated against experimental data and compared with other simulation approaches reported in the literature; results showed the superiority of the model with better predictions of the experimental data. Simulation trials were conducted by varying pressure, temperature, steam to coal and air to coal ratios of the simulation. The results presented similar behaviors to what is reported in the liter-

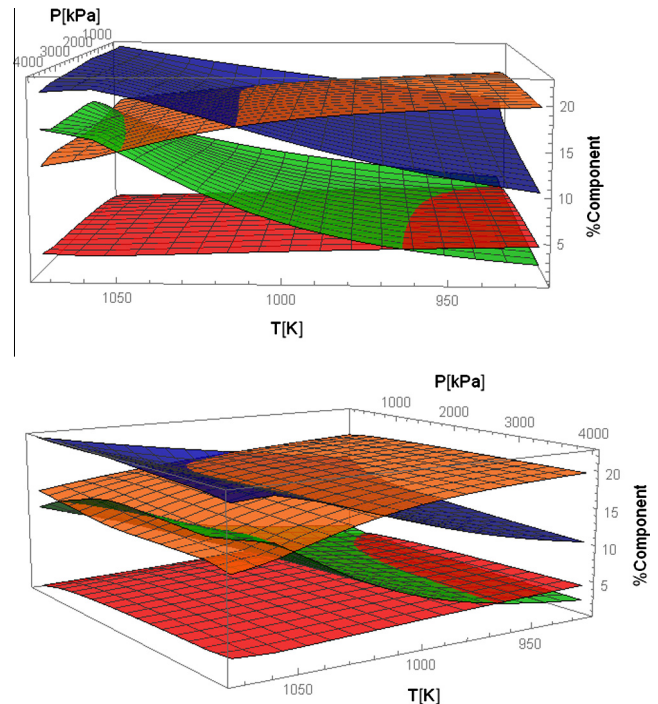


Fig. 6. Effect of pressure and temperature on syngas composition. Other operational conditions are the same as in the model validation section. Blue, orange, green and red surfaces correspond to H_2 , CO_2 , CO and CH_4 respectively. (For interpretation of the references to colour in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

ature. Industrial process simulators such as Aspen Plus make easier the simulation of complex reactors like PFBF gasifiers with the help of models such as the one proposed in this paper. For future studies, it is recommended to use kinetics for the devolatilization process that the coal undergoes, in order to consider the effect of temperature on the amount of volatiles that are produced.

Acknowledgments

The authors thank ISAGEN for their support under the project Gasificación de Carbón en Lecho Fluidizado Presurizado a Alta Presión.

References

- [1] Eastman. Eastman gasification overview; 2005. <http://dx.doi.org/10.1111/j.2048-416X.2005.tb00082.x>.
- [2] Williams RH, Larson ED. A comparison of direct and indirect liquefaction technologies for making fluid fuels from coal. *Energy Sustain Dev* 2003;7:103–29. [http://dx.doi.org/10.1016/S0973-0826\(08\)60382-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0973-0826(08)60382-8).
- [3] Petr A, Nikrityuk BM. *Gasification processes: modeling and simulation*. Wiley; 2014.
- [4] Adamczyk WP, Klimanek A, Bialecki Ra, Węcel G, Kozolub P, Czakiert T. Comparison of the standard Euler-Euler and hybrid Euler-Lagrange approaches for modeling particle transport in a pilot-scale circulating fluidized bed. *Particuology* 2014;15:129–37. <http://dx.doi.org/10.1016/j.partic.2013.06.008>.
- [5] Adamczyk WP, Węcel G, Klajny M, Kozolub P, Klimanek A, Bialecki Ra. Modeling of particle transport and combustion phenomena in a large-scale circulating fluidized bed boiler using a hybrid Euler-Lagrange approach. *Particuology* 2014;16:29–40. <http://dx.doi.org/10.1016/j.partic.2013.10.007>.
- [6] Hartge EU, Ratschow L, Wischniewski R, Werther J. CFD-simulation of a circulating fluidized bed riser. *Particuology* 2009;7:283–96. <http://dx.doi.org/10.1016/j.partic.2009.04.005>.
- [7] Couto N, Silva V, Monteiro E, Brito PSD, Rouboua A. Experimental and numerical analysis of coffee husks biomass gasification in a fluidized bed reactor. *Energy Proc* 2013;36:591–5. <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2013.07.067>.
- [8] Sharma A, Wang S, Pareek V, Yang H, Zhang D. Multi-fluid reactive modeling of fluidized bed pyrolysis process. *Chem Eng Sci* 2015;123:311–21. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ces.2014.11.019>.
- [9] Klimanek A, Adamczyk W, Katelbach-Woźniak A, Węcel G, Szłęk A. Towards a hybrid Eulerian-Lagrangian CFD modeling of coal gasification in a circulating fluidized bed reactor. *Fuel* 2015;152:131–7. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2014.10.058>.
- [10] Puig-Arnavat M, Hernández JA, Bruno JC, Coronas A. Artificial neural network models for biomass gasification in fluidized bed gasifiers. *Biomass Bioenergy* 2013;49:279–89. <http://dx.doi.org/10.1016/j.biombioe.2012.12.012>.
- [11] Nieto C, Arenas E, Arrieta A, Zapata Z, Londoño C, Valdés C, et al. Simulation of IGCC technologies: influence of operational conditions (environmental and fuel gas production). *Energética* 2008;40:39–52.
- [12] Emun F, Gadalla M, Majozi T, Boer D. Integrated gasification combined cycle (IGCC) process simulation and optimization. *Comput Chem Eng* 2010;34:331–8. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2009.04.007>.
- [13] Nayak R, Mewada RK. Simulation of coal gasification process using ASPEN plus. In: *Inst technol Nirma Univ, Ahmedabad*; 2011. p. 8–10.
- [14] Bassyouni M, ul Hasan SW, Abdel-Aziz MH, Abdel-hamid SM-S, Naveed S, Hussain A, et al. Date palm waste gasification in downdraft gasifier and simulation using ASPEN HYSYS. *Energy Convers Manage* 2014;88:693–9. <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2014.08.061>.
- [15] Niu M, Huang Y, Jin B, Wang X. Simulation of syngas production from municipal solid waste gasification in a bubbling fluidized bed using Aspen plus. *Ind Eng Chem Res* 2013;52:14768–75. <http://dx.doi.org/10.1021/ie400026b>.
- [16] Doherty W, Reynolds A, Kennedy D. Simulation of a circulating fluidised bed biomass gasifier using ASPEN plus: a performance. *Analysis* 2008;1241–8.
- [17] Jafari R, Sotudeh-Gharebagh R, Mostoufi N. Modular simulation of fluidized bed reactors. *Chem Eng Technol* 2004;27:123–9. <http://dx.doi.org/10.1002/ceat.200401908>.
- [18] Sotudeh-Gharebaagh R, Legros R, Chaouki J, Paris J. Simulation of circulating fluidized bed reactors using ASPEN PLUS. *Fuel* 1998;77:327–37. [http://dx.doi.org/10.1016/S0016-2361\(97\)00211-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0016-2361(97)00211-1).
- [19] Kunii D, Levenspiel O. Fluidization engineering. *Powder Technol* 1969;3:255–6. [http://dx.doi.org/10.1016/0032-5910\(69\)80087-2](http://dx.doi.org/10.1016/0032-5910(69)80087-2).
- [20] Cui H, Mostoufi N, Chaouki J. Characterization of dynamic gas – solid distribution in fluidized beds. *Chem Eng J* 2000;79:133–43.
- [21] Goncalves C, Faria AC, Dalla L. Fluidized bed modeling applied to the analysis of processes: review and state of the art. *J Mater Res Technol* 2015;4:208–16. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmrt.2014.10.018>.
- [22] Sergeant GD, Smith IW. Combustion rate of bituminous coal char in the temperature range 800–1700 K. *Fuel* 1973;52:52–7. [http://dx.doi.org/10.1016/0016-2361\(73\)90012-4](http://dx.doi.org/10.1016/0016-2361(73)90012-4).
- [23] Tesner PA. No title. In: *Proc English symp combust*; 1960. p. 807.
- [24] Axd I, Chemixtry E. The simultaneous combustion of hydrogen and carbon monoxide 1923:679–81.
- [25] Vilienskii TV, Hezmalian DM. *Dinamika Gorenia Prilevidnovo Tolpliva*. *Energia* 1978:146.
- [26] Barrio M, Gøbel B, Rimes H, Henriksen U, Hustad JE, Sørensen LH. Steam Gasification of wood char and the effect of hydrogen inhibition on the chemical kinetics. *Prog Thermochem Biomass Convers* 2008;32–46. <http://dx.doi.org/10.1002/9780470694954.ch2>.
- [27] Babu BV, Sheth PN. Modeling and simulation of reduction zone of downdraft biomass gasifier: effect of char reactivity factor. *Energy Convers Manage* 2006;47:2602–11. <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2005.10.032>.
- [28] Bība V, Macák J, Klose E, Malecha J. Mathematical model for the gasification of coal under pressure. *Ind Eng Chem Process Des Dev* 1978;17:92–8.
- [29] Kirilowitsch C. Reduktion von holzgas aus biomasse über glühender kohle. *TU Graz*; 2006.
- [30] Liu Z, Fang Y, Deng S, Huang J, Zhao J, Cheng Z. Simulation of pressurized ash agglomerating fluidized bed gasifier using ASPEN plus. *Energy Fuels* 2012;26:1237–45.
- [31] Duan W, Yu Q, Wang K, Qin Q, Hou L, Yao X, et al. ASPEN Plus simulation of coal integrated gasification combined blast furnace slag waste heat recovery system. *Energy Convers Manage* 2015;100:30–6. <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2015.04.066>.
- [32] McLendon TR, Lui ap, Pineault RL, Beer SK, Richardson SW. High-pressure co-gasification of coal and biomass in a fluidized bed. *Biomass Bioenergy* 2004;26:377–88. <http://dx.doi.org/10.1016/j.biombioe.2003.08.003>.
- [33] Duan F, Jin B, Huang Y, Li B, Wu Y, Zhang M. Results of bituminous coal gasification upon exposure to a pressurized pilot-plant circulating fluidized-bed (CFB) reactor. *Energy Fuels* 2010;24:3150–8. <http://dx.doi.org/10.1021/ef901596n>.
- [34] Huang J, Fang Y, Chen H, Wang Y. Coal gasification characteristic in a pressurized fluidized bed. *Energy Fuels* 2003;29:1474–9.
- [35] Tursun Y, Xu S, Wang C, Xiao Y, Wang G. Steam co-gasification of biomass and coal in decoupled reactors. *Fuel Process Technol* 2016;141:61–7. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuproc.2015.06.046>.
- [36] Begum S, Rasul M, Akbar D, Cork D. An experimental and numerical investigation of fluidized bed gasification of solid waste. *Energies* 2013;7:43–61. <http://dx.doi.org/10.3390/en7010043>.
- [37] Rath L. Cost and performance baseline for fossil energy plants: coal to synthetic natural gas and ammonia, vol. 2; 2011. DOE/NETL-2010/1402.
- [38] Masnadi MS, Grace JR, Bi XT, Lim CJ, Ellis N, Li YH, et al. Single-fuel steam gasification of switchgrass and coal in a bubbling fluidized bed: a comprehensive parametric reference for co-gasification study. *Energy* 2015;80:133–47. <http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2014.11.054>.
- [39] Seo MW, Goo JH, Kim SD, Lee SH, Choi YC. Gasification characteristics of coal/biomass blend in a dual circulating fluidized bed reactor. *Energy Fuels* 2010;24:3108–18. <http://dx.doi.org/10.1021/ef100204s>.
- [40] Zogała A. Equilibrium simulations of coal gasification – factors affecting syngas composition; 2014. <http://dx.doi.org/10.7424/jsm140205>.

Manuscript Number:

Title: Optimization of heat exchanger networks using quantum inspired evolutionary algorithms

Article Type: Original research paper

Section/Category: 4. Thermodynamics and Thermofluid Processes

Keywords: Heat exchanger network (HEN); Evolutionary algorithm; Quantum inspired evolutionary algorithms (QIEA); Stochastic optimization

Corresponding Author: Mr. Cristian Sánchez, Chemical Engineer

Corresponding Author's Institution:

First Author: Cristian Sánchez, Chemical Engineer

Order of Authors: Cristian Sánchez, Chemical Engineer; Erika Arenas, PhD

Abstract: The synthesis of heat exchanger networks is regarded as a mixed integer nonlinear programming problem that can easily lead to suboptimal solutions, and the complexity of the variables involved make necessary the inclusion of assumptions that lead the optimization to a local optima. In this work a model is proposed for the synthesis of heat exchanger networks requiring as little information as possible to carry out the optimization. The model has a sequential synthesis methodology that after generating the initial population, optimizes with a quantum inspired evolutionary algorithm that was validated with data and results reported in the literature. The model has the ability to integrate an evolutionary algorithm's ability not to depend on initial values and the robustness that the use of quantum principles has to offer regarding the consideration of multiple alternatives simultaneously. Results show that the validation of the model was successful, since the networks obtained where either better or close to results yielded by other authors. The optimization of heat exchanger networks leads to structural simplifications, a lower number of units and heat exchanger areas, producing new topologies that were not considered at the initial point of the network design.

Suggested Reviewers: Nasibeh Pouransari PhD
nasibeh.pouransari@epfl.ch

Has worked on synthesis of heat recovery networks and published works on this matter before

Juan M Zamora
jmzm@xanum.uam.mx

Has worked on the matter before, their work is referenced in the article and even compared with their data

Alireza Fazlali
a-fazlali@araku.ac.ir

Has work on the optimization of Hens with evolutionary algorithms before

Cover Letter

Dr. Mohammad Ahmad Al-Nimr

Jordan University of Science and Technology, Irbid, Jordan

Dear professor.

We are sending the paper "Optimization of heat exchanger networks using quantum inspired evolutionary algorithms" for submission to your journal. In this paper, a model is proposed for the synthesis of heat exchanger networks requiring as little information as possible to carry out the optimization by aiding the generation of information with the use of quantum inspired evolutionary algorithms (QIEA). This is the first time that QIEA have been used in this types of problems, the model is validated with experimental data found in the literature and it shows very good results compared to the results obtained by other authors.

The specific major contributions of this paper are the application of QIEA in the optimization of heat exchanger networks and the model proposed for such optimization.

The suggested reviewers for this article were selected according to the work they've done regarding this paper's topic. The reviewers proposed are:

- Nasibeh Pouransari, nasibeh.pouransari@epfl.ch
- Juan M. Zamora, jmzm@xanum.uam.mx
- Alireza Fazlali, a-fazlali@araku.ac.ir

Sincerely,

Cristian Sánchez

Universidad Pontificia Bolivariana, Facultad de Ingeniería Química, Grupo de Energía y Termodinámica. Circular 1ra #70-01, Medellín 56006, Colombia.

cristian.sanchezqu@upb.edu.co

Highlights (for review)

- A new model was proposed for the synthesis of heat exchanger networks using quantum inspired evolutionary algorithms as the optimization scheme.
- The model was validated against experimental data found in the literature.
- The model was compared and found to have similar and sometimes even better results than the ones reported in the literature.
- The use of the quantum part in the evolutionary algorithm removed the necessity of the user to input data that could lead to local optima.

1 **Optimization of heat exchanger networks using quantum inspired evolutionary algorithms**

2 **Cristian Sánchez***, Erika Arenas

3 **Universidad Pontificia Bolivariana, Facultad de Ingeniería Química, Grupo de Energía y**
4 **Termodinámica. Circular 1^{ra} #70-01, Medellín 56006, Colombia.**

5 *Corresponding author at: Universidad Pontificia Bolivariana, Facultad de Ingeniería Química, Grupo de
6 Energía y Termodinámica. Circular 1ra #70-01, Medellín 56006, Colombia. E-mail address:

7 cristian.sanchezqu@upb.edu.co

8 **Abstract**

9 The synthesis of heat exchanger networks is regarded as a mixed integer nonlinear programming problem that
10 can easily lead to suboptimal solutions, and the complexity of the variables involved make necessary the
11 inclusion of assumptions that lead the optimization to a local optima. In this work a model is proposed for the
12 synthesis of heat exchanger networks requiring as little information as possible to carry out the optimization.
13 The model has a sequential synthesis methodology that after generating the initial population, optimizes with
14 a quantum inspired evolutionary algorithm that was validated with data and results reported in the literature.
15 The model has the ability to integrate an evolutionary algorithm's ability not to depend on initial values and
16 the robustness that the use of quantum principles has to offer regarding the consideration of multiple
17 alternatives simultaneously. Results show that the validation of the model was successful, since the networks
18 obtained were either better or close to results yielded by other authors. The optimization of heat exchanger
19 networks leads to structural simplifications, a lower number of units and heat exchanger areas, producing new
20 topologies that were not considered at the initial point of the network design.

21 **Keywords:** Heat exchanger network (HEN); Evolutionary algorithm; Quantum inspired evolutionary
22 algorithms (QIEA); Stochastic optimization.

23 **1. Introduction**

24 In an age where instability in fossil-based fuels prices forces the academy and industry to constantly research
25 and develop new ways to optimize energy usage and make it more environmental friendly, energy-efficient
26 processes become of main interest. A way to increase efficiency in industrial processes is the synthesis of heat
27 exchanger networks (HENs) [1]. Heat exchangers are devices used to exchange energy in the form of heat. A
28 network of heat exchangers, is a set of process streams and/or utility services interleaved by heat exchangers.
29 These systems are designed to reduce the demand for utility services, integrate processes, increase the
30 efficiency of processes and reduce operating and capital costs [1,2]. These systems are usually designed
31 assuming certain operational variables that can be obtained from simulations or experimental data. Some of
32 these are flow rates, temperatures, pressures, compositions, heat transfer coefficients, among others. The main
33 problem of fixing these variables is that sometimes the network of exchangers obtained may not be practical
34 for the industrial case of interest [3].

35 The first attempts on reducing energy consumption was through trial and error [4]; given the physical
36 limitations of the possible arrangements, these studies did not necessarily guarantee the best energy savings.
37 In 1978, Linnhoff and Flower proposed the optimization of such networks in two stages. In the first stage a
38 network is generated with low energy consumption according to certain heuristic rules, on the second stage
39 said network is used as an initial value to an evolutionary method whose purpose is the reduction of total costs
40 [5,6]. The authors highlighted the advantages of using an evolutionary method because it works with no
41 previous knowledge of the initial values, allowing a greater search space in order to avoid local minima.
42 Despite this, the authors do not guarantee that their method always generates the best solution. In 1983,
43 Linnhoff and Hindmarsh proposed one of the most mentioned methods used for energy integration in heat
44 exchangers, the Pinch design method. The method consists of assigning an optimum ΔT_{\min} for a process, with
45 which the Pinch point (a point where the temperature difference between a hot and a cold fluid is minimum) is
46 determined, allowing the estimation of the minimum hot and cold utilities [7]. This method does not
47 necessarily generate the lowest total costs because it does not take into account the process constraints, and
48 tends to generate solutions with a high amount of exchangers. Yeomans and Grossmann, developed in 1999 a
49 model for the optimization of superstructures in synthesis of processes. A superstructure refers to a process
50 diagram that includes all potential process units and their most relevant connections. In their article, the
51 authors manage to propose a frame of reference to represent, simulate and solve problems of process synthesis

52 that can be described by linear models [8]. The proposed model can solve simple linear models but it is not
53 applicable for non-linear cases. In general, the behavior of industrial systems is non-linear. In the case of heat
54 exchanger networks, the inclusion of restrictions and the calculation of the exchangers' areas introduce non-
55 linearity to the objective function to be optimized.

56 In 2002, Soršak and Kravanja studied the simultaneous synthesis of heat exchanger networks including
57 different types of exchangers through the use of non-linear programming (NLP). These authors used the
58 superstructure proposed by Grossmann [9]. The authors report that the use of different exchangers generates
59 results with significant differences to those commonly reported. In 2008, Agarwal and Gupta proposed a
60 multi-objective optimization for the design of heat exchanger networks using genetic algorithms. The method
61 was characterized by not using any heuristics and using multiobjective optimization with respect to cost
62 functions [10]. The problem with the previous work is the restriction of not using any type of heuristics; this
63 is not necessarily good, since many of these heuristics can generate more realistic results with respect to
64 purely mathematical approaches. Sanaye and Niroomand, studied the effects of changing several
65 configurations of streams and cleaning schedules for heat exchangers in a HEN of a specific plant in order to
66 reduce operational costs [11]. Although the problem presents results for a particular solution, the authors
67 proved the effectiveness of optimizing HENs generating a considerable amount of financial savings. In 2015,
68 Peng and Cui proposed a method for the simultaneous synthesis of heat exchanger networks based on
69 simulated annealing algorithms. The problem is divided in two stages, first the authors use simulated
70 annealing to evaluate the structures of HENs, and on the second stage the simulated annealing is used again to
71 minimize the total annualized cost (TAC) [12]. The main issue with the proposed algorithm was the
72 computing time, for a 15 streams problem, their method took 2316647 seconds, more than 26 days. In 2016,
73 authors like Núñez-Serna and Zamora studied the re-optimization of HENs previously designed by other
74 optimization schemes [13]. Although the authors do improve in the designs they present, their model is biased
75 by the initial value of the previous optimization scheme, meaning that they did not guarantee a global optimal
76 solution; they only improved the previous result with stochastic methods.

77 Multiple authors advice the use of evolutionary algorithms to carry out the optimization of the networks; one
78 of the main advantages of heuristic methods such as this is that they use stochastic operators which use

79 probability in their favor [14]. Since these algorithms do not require information on the gradient of the
80 function, implies that they are affective regardless of the nature of the objective function, or its restrictions.
81 Evolutionary algorithms inspired by principles of quantum mechanics (QIEA) focus on generating new
82 evolutionary algorithms using concepts and principles of quantum computing. QIEAs incorporate Qbits,
83 Qgates and quantum decoherence in the evolutionary algorithm to increase its robustness [15].

84 This optimization usually becomes a MINLP problem due to the formulation of the heat exchanger networks,
85 and the nature of the objective function. In the present work, an algorithm for the optimization of heat
86 exchanger networks, a MINLP problem is formulated and validated. A quantum inspired evolutionary
87 algorithm is chosen as the appropriate tool to optimize the networks due to its probabilistic nature and its
88 robustness to approach the considerable amount of possibilities involved in the optimization process. The
89 validation is carried out with three case studies in increasing amount of streams with solutions given in the
90 literature by other authors.

91 **2. Model development**

92 2.1. Objective function

93 The heat exchanger network must comply with having the lowest number of units, the smallest total area of
94 exchange and the lowest possible use of industrial utility services. A problem of multiobjective optimization
95 is then generated, where the desired result should satisfy these three objectives. The most common way to
96 solve these types of problems is through the use of the weighted sum method; where objective functions are
97 combined in a sum, multiplying each term by weights that vary depending on each problem. In the case of
98 heat exchanger networks, all the functions are united in the terms of costs, in order to obtain a network that is
99 economically favorable.

$$\text{OF} = \text{Minimize} \left[\left(\sum A_i F_{\text{HS}_i} + \sum B_j F_{\text{CS}_i} \right) + \sum \left(C F_k + C C_k A_{\text{ex},k}^{\beta_k} \right) \right] \quad [1]$$

100 Where the first term corresponds to the costs associated with the use of utility services. A_i and B_j correspond
101 to values for the cost of using hot and cold utility services respectively, and F_{CS_i} and F_{HS_j} are the flows of hot
102 and cold utility services. The second term corresponds to the costs associated with heat exchangers, where

103 CF, CC and β are parameters that depend on the exchanger. The minimization of the previous equation
104 guarantees that the network of heat exchangers possesses a low number of units, less industrial services, and
105 moderate exchange areas. Equations of this type can be found in the literature and are commonly used for
106 these types of problems [16,17].

107 The total area of exchange is obtained with the sum of the respective areas of each of the exchangers. This
108 area is a function of the mean logarithmic temperature difference (ΔT_{LM}), the heat transferred, and the heat
109 transfer coefficient of the streams [18].

$$A_{ex} = \frac{Q}{\Delta T_{LM} U} \quad [2]$$

$$\Delta T_{LM} = \frac{(T_{H,in} - T_{C,out}) - (T_{H,out} - T_{C,in})}{\ln\left(\frac{T_{H,in} - T_{C,out}}{T_{H,out} - T_{C,in}}\right)} \quad [3]$$

$$U = (h_H^{-1} + h_C^{-1})^{-1} \quad [4]$$

110 Where:

111 A_{ex} : Area of exchanger

112 Q: Energy transferred in the exchanger

113 ΔT_{LM} : Mean logarithmic temperature difference

114 U: Overall heat transfer coefficient

115 $T_{H,in}$, $T_{H,out}$: Temperature at the inlet and at the outlet of the hot stream in the heat exchanger

116 $T_{C,in}$, $T_{C,out}$: Temperature at the inlet and at the outlet of the cold stream in the heat exchanger

117 h_H : Heat transfer coefficient for the hot stream

118 h_C : Heat transfer coefficient for the cold stream

119 By adding up all the exchanger areas of each unit, the total area of the network is:

$$A_{\text{Network}} = \sum_{i=1}^n A_{\text{ex},i} \quad [5]$$

120 This simple model for the estimation of the area has been shown to generate satisfactory results [19–21]. The

121 energy balances carried out throughout the present work have the following general form:

$$\sum_{k \in \text{ST}} q_k = F_{\text{CP}_s} (\text{TS}_s - \text{TO}_s); \quad S \in \text{PS} \quad [6]$$

122 Where:

123 TS: Supply Temperature

124 TO: Target temperature

125 ST: Number of streams

126 PS: Number of process streams

127 2.2. Algorithm

128 The algorithm can be broken into two main procedures, initial population creation and optimization. The

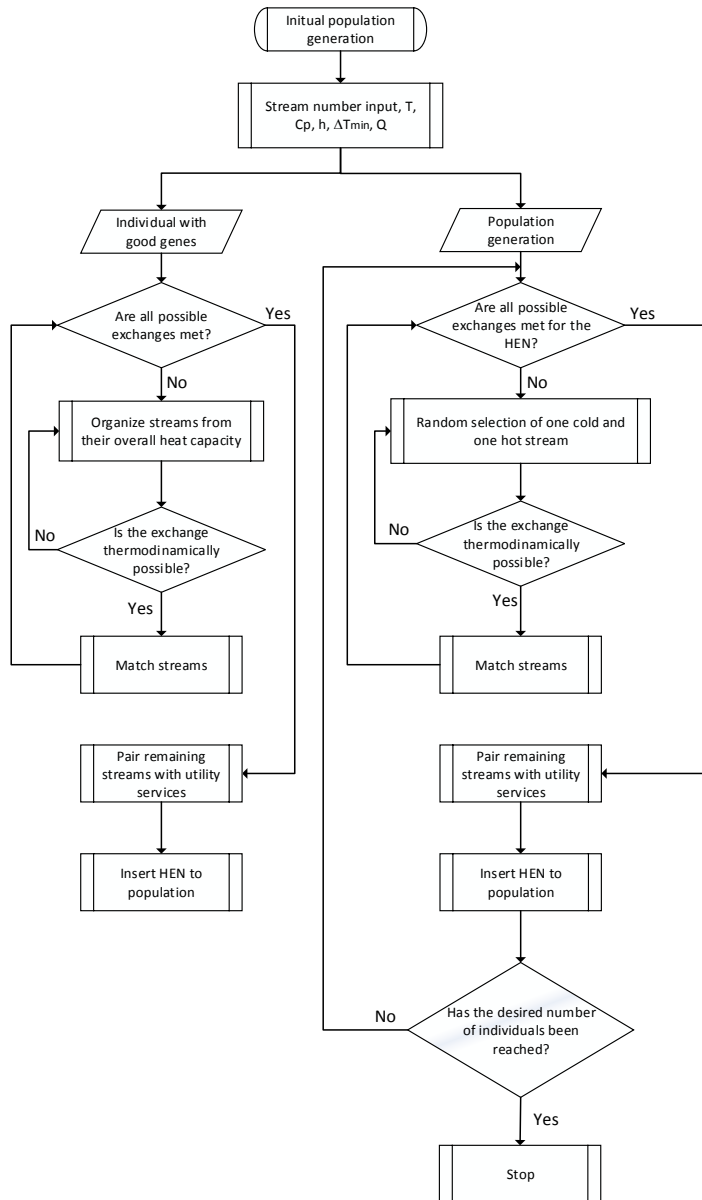
129 generation of the initial population is explained in Figure 1, and it is divided in two main parts. First, the

130 stream numbers, temperatures, heat capacities and heat transfer coefficient are inputted. Then the energy that

131 the stream needs is calculated. Two streams one cold and one hot are paired randomly, the match is then

132 checked to see if it is thermodynamically possible, if it is, then both streams exchange all the possible energy

133 they can supply to each other, if it isn't the process of selection happens again until no pair of streams can be
134 matched. To supply the remaining energy in streams that could not be paired, process utility streams are
135 implemented. The HEN generated is checked so that the number of units in the network is not above 40% of
136 the minimum number of possible units. Once the desired number of individuals for the population is reached,
137 the algorithm stops. An individual whose purpose is to have good genes but not enough to deviate the
138 optimization process into a local minima is inserted into the initial population. The generation of this
139 individual takes place in a process much similar to the one described above, but instead of randomly selecting
140 streams, the streams are organized depending on their overall heat capacity, and pairs are made with streams
141 that have the greater overall heat capacities, similar to the Pinch process.



142

143

Figure 1. Generation of initial population.

144

Once the initial population has been generated, the optimization procedure takes place. This procedure is

145

explained in Figure 2, and it is divided into four parts, migration, reproduction, mutation and selection. The

146

migration part is included to help diversify the population in each generating, thus making it easier for the

147

optimization process to avoid local minima. In the migration part a given number of individuals is inserted

148

into the main population with the same procedure of creation carried out in the generation of the initial

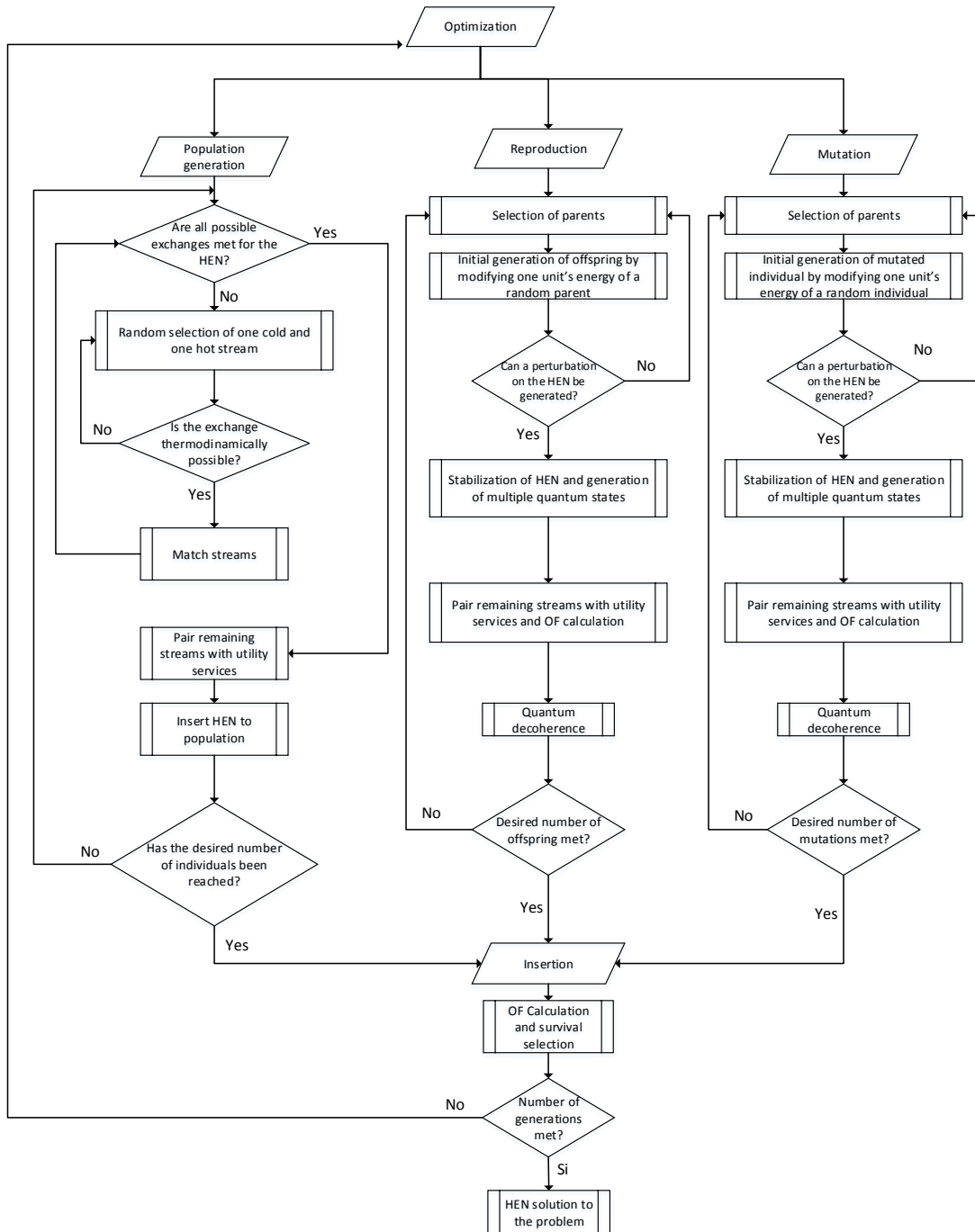
149

population, but the part regarding the individual with good genes. For the reproduction part, two parent

150

streams are selected randomly ensuring that the children can have a trait similar to its parents. These parent

151 streams must have a similar exchange between two streams but with different amounts of energies exchanged.
152 The offspring of these streams carries on the same exchange from both parents, and the same HEN structure
153 of one of its parents. The amount of energy inherited by the offspring is a random percentage of the mean
154 energy difference between the exchange from the parents. This perturbation in the unit of interest, forces the
155 neighboring units to seek an energy equilibrium. In the process of balancing energies in the units affected, the
156 following may occur. If for example stream A needs to be heated from T_1 to T_2 , and a cold stream B needs to
157 be cooled from T_3 to T_4 , if the exchange between these streams is affected by the heat inherited by the
158 offspring described before, and the unit perturbed affects stream A in the interval $[t_1, t_2]$ with t_1 and $t_2 \in [T_1,$
159 $T_2]$; then if the heat exchanged is increased, the range of temperatures $[t_1, t_2]$ can increase to $[t_1', t_2]$ or $[t_1, t_2']$
160 with $t_1' > t_1$ and $t_2' < t_2$. The same can be said for the cold stream B. It is there where the quantum part of the
161 algorithm takes place. A quantum bit of states + or – depending of the direction in which the energy is either
162 added or removed, creates n Qbits when the perturbation propagates throughout the HEN of the offspring
163 generated. A binary variable is defined to check if a given unit has been updated if any of its neighbors were
164 modified. These Qbits are entangled by the objective function and Qgates, logical operators that determine the
165 generation of such states. Once all possible states are considered, quantum decoherence takes place and the
166 HEN observed by the algorithm is chosen as the new individual to be inserted into the pool of offspring. The
167 before described process occurs until a given amount of offspring is generated. Mutation takes place in a
168 similar manner, there are no parents involved, a HEN is selected randomly from the population, a unit from
169 this HEN is also selected randomly and the energy exchanged suffers a random variation of its original value.
170 This percentage is low enough for no abrupt changes to take place in the mutation process.



171

172

Figure 2. Optimization.

173 Once the migration, reproduction and mutation have successfully generated a specific amount of individuals,
 174 these are inserted into the main population, and by calculating the capital and operational costs of the
 175 network, the individuals with the best traits are selected for survival, and a new generation begins and the
 176 process repeats itself until a specific number of generations is met.

177 **3. Cases and discussion**

178 The model was validated with problems with 9 and 10 process streams [13], and a problem with 15 process
 179 streams [22]. The values and data reported for the objective functions were set by the respective articles.

180 3.1. Cases 1

181 Table 1. Data for 9-process streams problem [13].

Stream	T ⁱⁿ [°C]	T ^{out} [°C]	F _{Cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ²]
H1	327	40	100	0.50
H2	220	160	160	0.40
H3	220	60	60	0.14
H4	160	45	400	0.30
C1	100	300	100	0.35
C2	35	164	70	0.70
C3	85	138	350	0.50
C4	60	170	60	0.14
C5	140	300	200	0.60
Hot Utility	330	250	--	0.50
Cold Utility	15	30	--	0.50

182 Heat exchanger cost = 10000 + 350A \$USD (A in m²).

183 Time of study = 5 years.

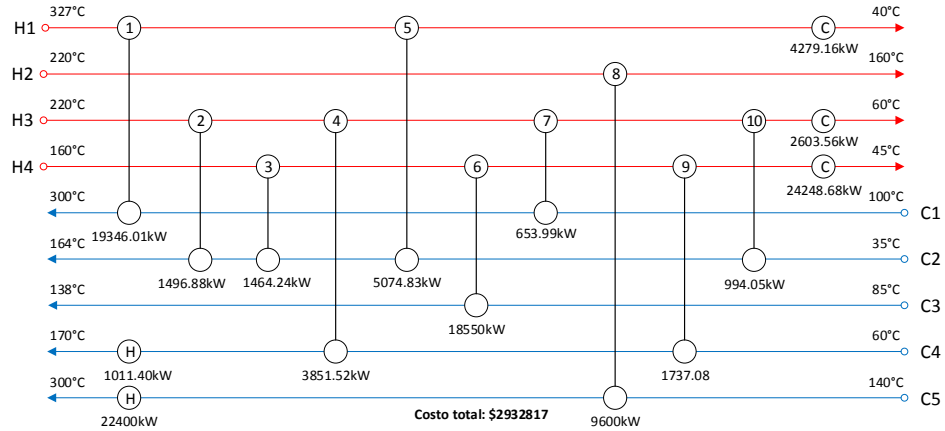
184 Annual cost of hot utility = 60 \$USD kW⁻¹ year⁻¹.

185 Annual cost of cold utility = 6 \$USD kW⁻¹ year⁻¹.

186 From the data given in Table 1, a set of 100 individuals was created as the initial population, consisting of 99
 187 individuals generated randomly, and 1 with good genes. The above data for the capital and operational costs
 188 can be simplified with the following equation:

$$OF = \text{Minimize} \left[(\Sigma 60F_{HSi} + \Sigma 6F_{CSi}) + \frac{\Sigma(10000 + 350A)}{5} \right] \quad [7]$$

189 Figure 3 shows the results obtained by Núñez-Serna and Zamora. The authors obtained an optimum with a
 190 total value for the OF of \$2932910, 15 exchangers, two that use a hot utility, and two using a cold utility. A
 191 total heat flow provided by the hot utility of 23411.4 kW and a heat flow provided by cold utility of 31131.4
 192 kW.



193

194

Figure 3. Optimal heat exchanger network for case 1, obtained by [13].

195

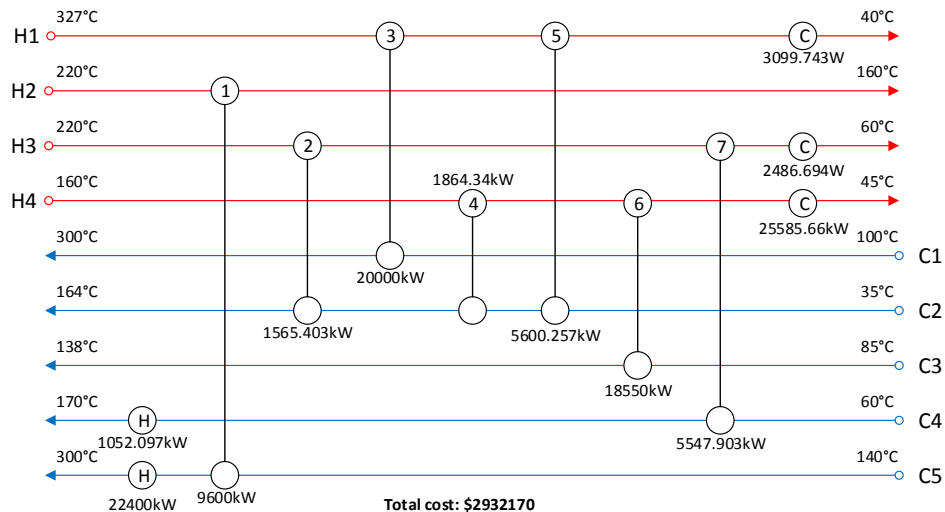
The results obtained in the present work are presented in Figure 4. An optimum was obtained with a total cost

196

of \$ 2932170, 12 exchangers, two that use a hot utility and three that use cold utility. A heat flow provided by

197

hot utility of 23452.10 kW and a heat flow provided by cold utility of 31172.10 kW.



198

199

Figure 4. Optimal heat exchanger network for case 1, obtained by the model presented in this work.

200

For the first case, the proposed network obtained with the model used, generates lower total costs than those

201

obtained in the comparative article, in addition to a network with a smaller number of exchangers (result

202

shown in Figure 2). The difference in the final value of the network is attributed to a better utilization of

203

energy among process streams, reducing the use of industrial services. The solution time was 14 minutes; a

204

constant value of 100 individuals was used at the beginning of each generation. In each generation, 20% of

205

the population was reproduced and mutated as recommended in the literature [14]. By determining at which

206 generation the difference between the best individuals from the actual and the previous generation had a value
 207 less than or equal to 10^{-4} , the maximum number of generations was found to be close to 20, this value of 20
 208 generations was fixed for the other cases studied. Table 2 shows results obtained by other authors, the value
 209 of 2.9322M\$/yr acquired with the method proposed in this article, presents the lowest value with no stream
 210 splits for this problem.

211 Table 2. Optimal results for case 1.

Authors	Number of Units	Total Area [m ²]	Q _{Hot} ^{Utility} [MW]	Q _{Cold} ^{Utility} [MW]	TAC [M\$/yr]
Linnhoff and Ahmad [23]	13	17400	25.31	33.03	2.9600
Zhu et al. [24]	10	16380	26.83	34.55	2.9800
Lewin [25]	11	16880	25.69	33.41	2.9460
Yerramsetty and Murty [26]	15	16536	25.88	33.6	2.9420
Huo et al. [27]	11	18453	23.88	31.6	2.9360
Peng and Cui [12]	15	17745	24.50	32.22	2.9350
Zamorea eta l. [13]	15	18735	23.41	31.13	2.9329
This Work	12	18771	23.45	31.17	2.9322

212

213 3.2. Cases 2

214 Table 3. Data for 10-process streams problem [13].

Stream	T ⁱⁿ [K]	T ^{out} [K]	F _{Cp} [kW K ⁻¹]
H1	433	366	8.79
H2	522	411	10.55
H3	544	422	12.56
H4	500	339	14.77
H5	472	339	17.73
C1	355	450	17.28
C2	366	478	13.90
C3	311	494	8.44
C4	333	433	7.62
C5	389	495	6.08
Hot Utility	509	509	--
Cold Utility	311	355	--

215 $U = 0.852 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ for matches between process streams and cold utility.

216 $U = 1.136 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ for matches between process streams and hot utility.

217 Annual cost of heat exchangers = $145.63A^{0.6} \text{ USD year}^{-1}$ (A in m²).

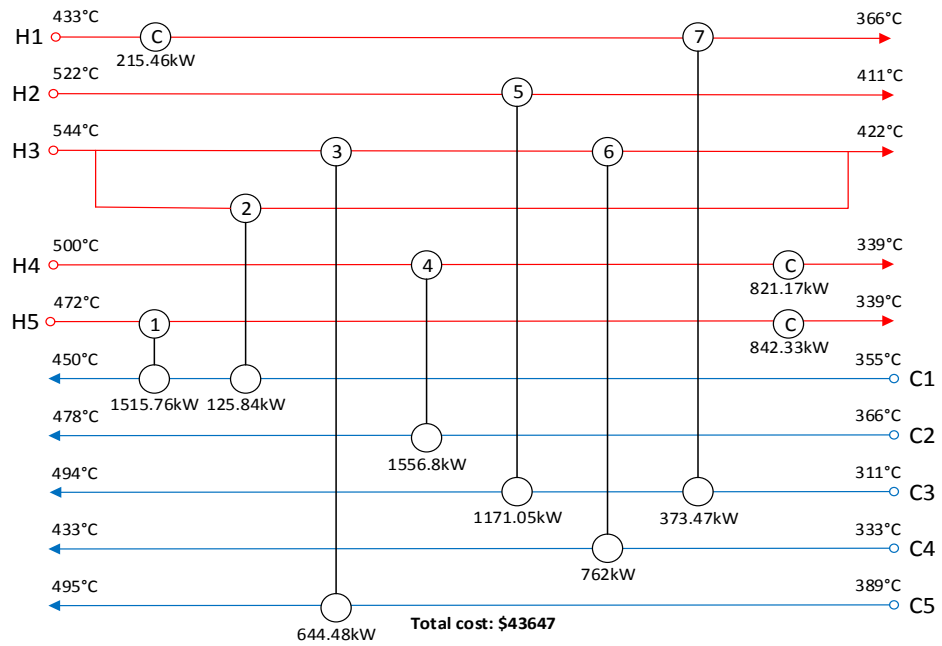
218 Annual cost of hot utility = $37.64 \text{ USD kW}^{-1} \text{ year}^{-1}$.

219 Annual cost of cold utility = $18.12 \text{ USD kW}^{-1} \text{ year}^{-1}$.

220 With the data presented in Table 3, an initial population was created with the same characteristics as the one
 221 discussed in case 1. The following equation summarizes information given:

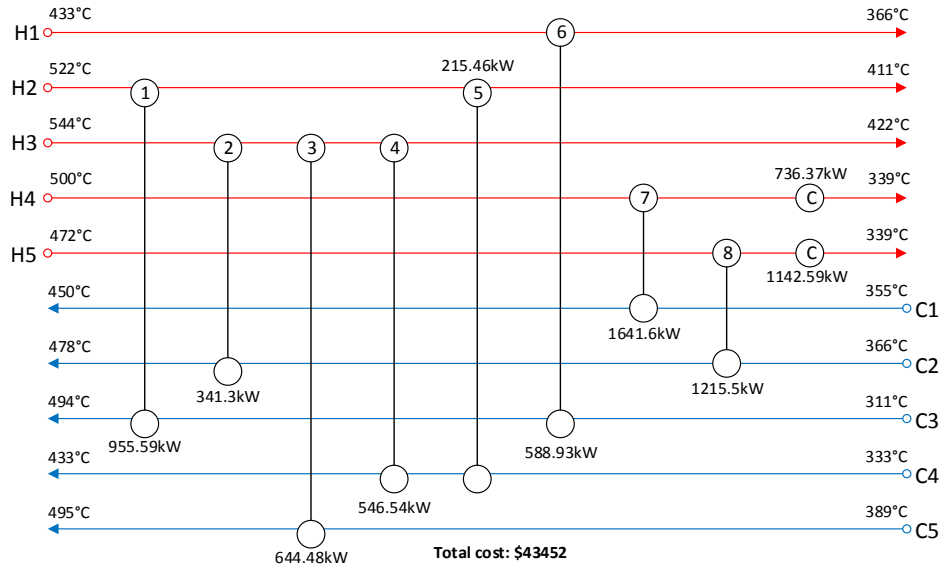
$$OF = \text{Minimize} \left[(\Sigma 37.64 F_{HSi} + \Sigma 18.12 F_{CSi}) + \frac{\Sigma (145.63 A^{0.6})}{1} \right] \quad [8]$$

222 Figure 5 shows the results obtained by Núñez-Serna and Zamora. The authors obtain an optimum with a total
 223 cost of \$ 43647, 10 exchangers, and three of these using cold utility. A total heat flow provided by the utility
 224 service of 1878.96 kW. The authors also include in their result stream splitting.



225
 226 Figure 5. Optimal heat exchanger network for case 2, obtained by [13].

227 Figure 6 shows the results obtained in the present work. An optimum with a total cost of \$ 43452, 10
 228 exchangers, two of these using cold utility and a total heat flow provided by the cold utility of 1878.96 kW.



229
230

Figure 6. Optimal heat exchanger network for case 2, obtained by the model presented in this work.

231 For the second case, the proposed network generated lower total costs compared to the article of reference, as
 232 well as a network with a similar number of exchangers, and no stream splitting was implemented. The
 233 solution time was 100 minutes, the same parameters set in the previous case were fixed including the number
 234 of generations. An increase in the solution time is observed, this value is expected due to the increase in the
 235 number of streams, thus generating more quantum states considered in the optimization process. In Table 4
 236 results can be compared between the results obtained by several authors and the present work. As can be seen
 237 the value for the TAC presented in this work is close to the values reported in the literature by other authors,
 238 and the utility and number of units reported are also similar.

239

Table 4. Optimal results for case 2.

Authors	Number of Units	$Q_{Cold}^{Utility}$ [MW]	TAC [M\$/yr]
Linnhoff and Ahmad [23]	10	1975	43934
Lewin [25]	10	1879	43452
Pariyani et al. [28]	10	1879	43439
Yerramsetty and Murty [26]	10	1879	43538
Peng and Cui [13]	10	1879	43411
Zamorea et al. [13]	10	1879	43647
This Work	10	1879	43452

240

241

3.3. Cases 3

Table 5. Data for 15-process streams problem [22].

Stream	T ⁱⁿ [°C]	T ^{out} [°C]	F _{Cp} [kW °C ⁻¹]	h [kW °C ⁻¹ m ²]
H1	180	75	30	2.00
H2	280	120	60	1.00
H3	180	75	30	2.00
H4	140	40	30	1.00
H5	220	120	50	1.00
H6	180	55	35	2.00
H7	200	60	30	0.40
H8	120	40	100	0.50
C1	40	230	20	1.00
C2	100	220	60	1.00
C3	40	190	35	2.00
C4	50	190	30	2.00
C5	50	250	60	2.00
C6	90	190	50	1.00
C7	160	250	60	3.00
Hot utility	325	325	--	1.00
Cold utility	25	40	--	2.00

243 Annual cost of heat exchangers = $8000 + 500A^{0.7}$ \$USD year⁻¹ (A in m²).

244 Annual cost of hot utility = 80 \$USD kW⁻¹ year⁻¹.

245 Annual cost of cold utility = 10 \$USD kW⁻¹ year⁻¹.

246 Table 5 presents the data presented by the article of reference for the 15-process stream process. The initial

247 population is created in the same way as in the previous cases. The values regarding operational and capital

248 costs are summarized in the following equation:

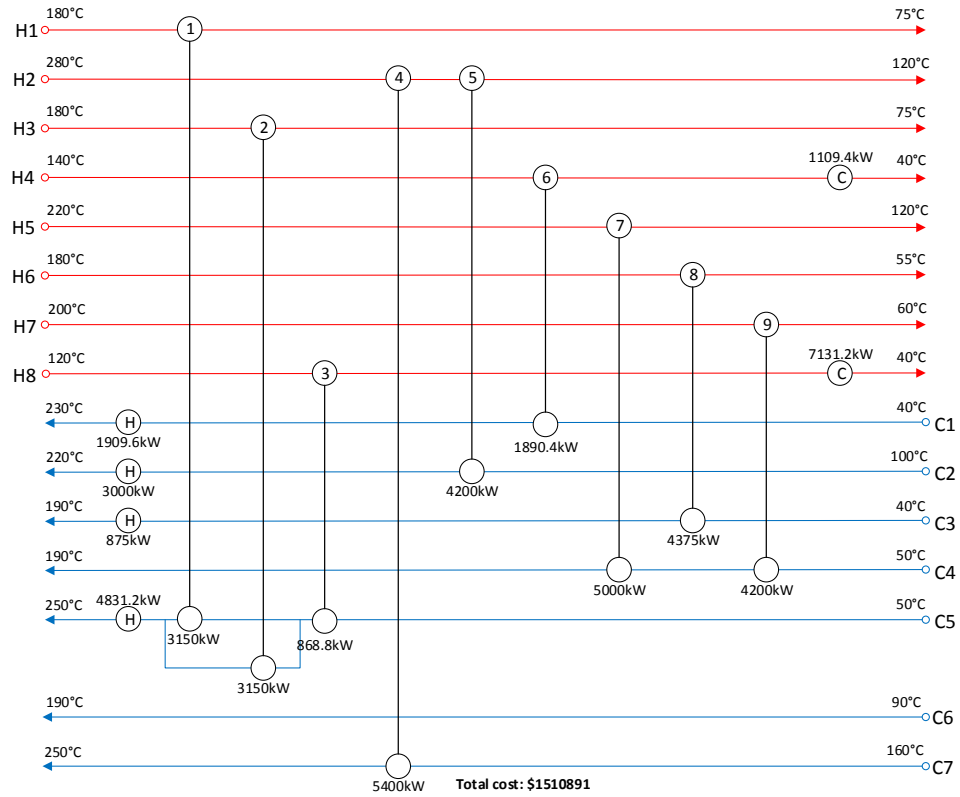
$$FO = \text{minimizar} \left[(\Sigma 80F_{HSi} + \Sigma 10F_{CSi}) + \frac{\Sigma (8000 + 500A^{0.7})}{1} \right] \quad [9]$$

249 Figure 7 shows the results obtained by Fieg et al. An optimum with a total cost of \$ 1510891 is reported, 15

250 exchangers, four exchangers with hot utility and two exchangers with cold utility. A total heat flow of hot

251 utility of 10615.80 kW, and a total heat flow of cold utility of 8240.60 kW. The authors also include stream

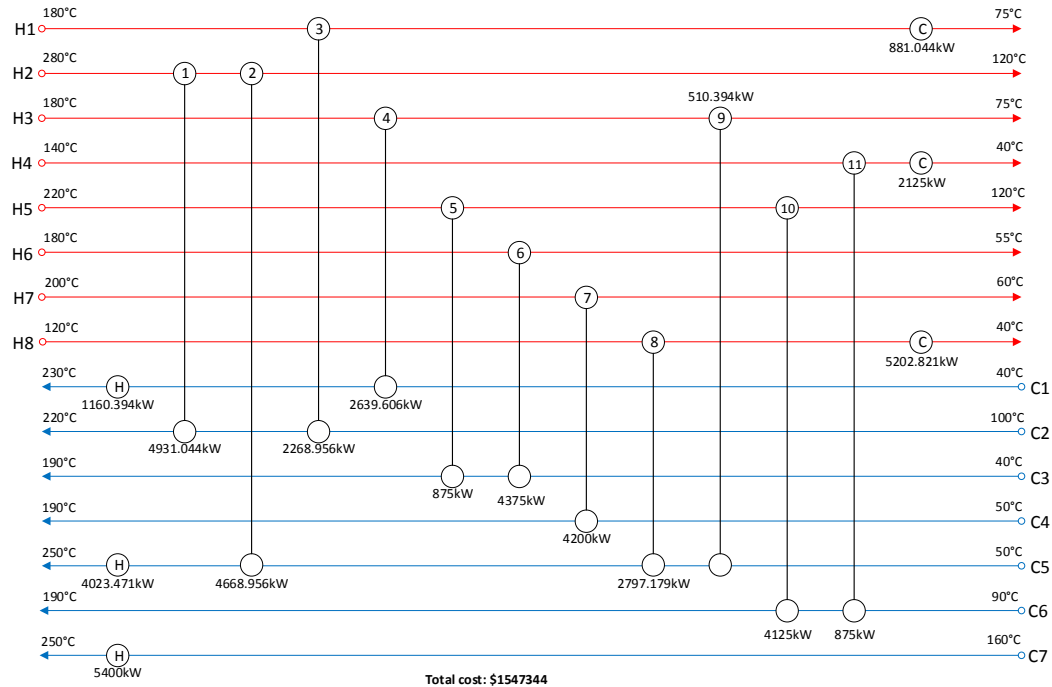
252 splitting in their solution.



253
254

Figure 7. Optimal heat exchanger network for case 3, obtained by [22].

255 Figure 8 shows the results obtained in the present work. An optimum with a total cost of \$ 1547344, 17
 256 exchangers, three with hot utility and three with cold utility. Moreover, total heat flows for hot and cold utility
 257 of 10583.86 and 8208.86 kW respectively.



258
259

Figure 8. Optimal heat exchanger network for case 3, obtained by the model presented in this work.

260
261
262
263
264
265
266
267
268
269
270
271
272

The solution presented for case 3 has a 2.41% of difference compared to the value obtained by the article of reference. The solution presented by these authors is considered the best solution in the literature [12] with stream splitting. The difference in the solutions is attributed to the existence of stream splitting in the network. The present work does not include stream splitting in its algorithm due to the lack of information regarding the criteria that should be used to make this type of decisions reported in the literature. In order to avoid the use of decisions or design restrictions that do not guarantee the presence of the global optimum in the feasibility region, stream splitting was not included. The total solution was 1470 minutes. The increase in the solution time is attributed mainly to the quantum part of the algorithm. For this particular problem, although restrictions make the problem less linear, the lack of restrictions also permits the quantum algorithm to create more quantum states, increasing the solution time. In a specific quantum system, values oscillating between 1 and 8000 possibilities were observed for either reproduction or mutation. These values serve to support the quantum inclusion to the evolutionary algorithms. It is evident that thanks this; a wide number of possibilities are evaluated with reasonable computational time.

273

Table 6. Optimal results for case 3.

Authors	Number of Units	Total Area [m ²]	Q _{Hot} ^{Utility} [MW]	Q _{Cold} ^{Utility} [MW]	TAC [M\$/yr]
Björk & Nordman	No structure	--	--	--	1530063

Authors	Number of Units	Total Area [m ²]	Q _{Hot} ^{Utility} [MW]	Q _{Cold} ^{Utility} [MW]	TAC [M\$/yr]
[29]	given				
Fieg et al. [22]	15	--	10616	8241	1510891
Peng and Cui [13]	17	3691	10974	8599	1537252
This Work	17	4328	10584	8209	1547344

274

275 Table 6 presents the data given by other authors and the present work for the optimal value for the TAC in
276 case 3. The results shown let us conclude that the network given in this work has a 2% difference in its
277 optimal value for the TAC against the lowest value reported in the literature for case 3. The results obtained
278 for the three problems analyzed allow us to conclude that the algorithm has been correctly validated. An
279 algorithm was obtained that generates solutions with low total costs, adequate number of heat exchangers, and
280 low use of utility services. The algorithm needs no information of approximations or simplifications to arrive
281 to the optimal solution; making it competitive against superstructures, which still need to use some
282 simplifications to arrive to the desired solution.

283 4. Conclusions

284 The use of quantum inspired evolutionary algorithms in the optimization of heat exchanger networks was
285 implemented in the presented work. The model was validated with data and results reported in the literature
286 by several authors. Results showed that the algorithm provided networks similar to the ones reported in the
287 literature with FAC values alike, which is expected from a stochastic method of optimization. Due to the use
288 of principles of quantum mechanics, the model was capable of working simultaneously with multiple
289 solutions. At the same time a vast numbers of alternatives were generated; this allowed the optimization to
290 avoid the use of superstructures as an initial value and thus removed the need to make assumptions that could
291 lead to local optima. In spite of that, as the number of process streams increased, and no restrictions were
292 incorporated, the simulation time was significantly affected, although this behavior is common for these types
293 of optimizations. No stream splitting was considered in the heat exchanger network, it was omitted due to the
294 lack of information in the literature on appropriate methodologies to insert this criterion into the design.

295 References

- 296 [1] Angsutorn N, Siemanond K, Chuvaree R. Heat exchanger network synthesis using MINLP Stage-
297 wise model with pinch analysis and relaxation. vol. 33. Elsevier; 2014. doi:10.1016/B978-0-444-
298 63456-6.50024-7.
- 299 [2] Pouransari N, Maréchal F. Heat recovery networks synthesis of large-scale industrial sites: Heat load
300 distribution problem with virtual process subsystems. *Energy Convers Manag* 2015;89:985–1000.
301 doi:10.1016/j.enconman.2014.11.006.
- 302 [3] Tantimuratha L, Asteris G, Antonopoulos DK, Kokossis a. C. A conceptual programming approach
303 for the design of flexible HENs. *Comput Chem Eng* 2001;25:887–92. doi:10.1016/S0098-
304 1354(01)00653-6.
- 305 [4] Kobayashi S, Ichikawa A. Synthesis of Optimal Heat Exchange Systems - An Approach by the
306 Optimal Assignment Problem in Linear Programming. *Chem Eng Sci* 1971;26:1367–80.
- 307 [5] Linnhoff BOD, Flower JR. Synthesis of Heat Exchanger Networks: I. Systematic Generation of
308 Energy Optimal Networks. *AIChE* 1978;24:633–42.
- 309 [6] Paterson WR, Rudd DF, Seader JD, Processes C, Plants C, Vary K, et al. Synthesis of Heat
310 Exchanger Networks: II. Evolutionary Generation of Networks with Various Criteria of Optimality.
311 *AIChE* 1978;24:642–54.
- 312 [7] Linnhoff B, Hindmarsh E. The Pinch Design Method for Heat Exchanger Networks. *Chem Eng Sci*
313 1983;38:745–63. doi:10.1016/0009-2509(83)80185-7.
- 314 [8] Yeomans H, Grossmann IE. A systematic modeling framework of superstructure optimization in
315 process synthesis. *Comput Chem Eng* 1999;23:709–31.
- 316 [9] Sorsak A, Kravanja Z. MINLP retrofit of heat exchanger networks comprising different exchanger
317 types. *Comput Aided Chem Eng* 2002;10:349–54. doi:10.1016/S1570-7946(02)80086-4.
- 318 [10] Agarwal A, Gupta SK. Multiobjective Optimal Design of Heat Exchanger Networks Using New
319 Adaptations of the Elitist Nondominated Sorting Genetic Algorithm, NSGA-II. *Ind {&} Eng Chem*

- 320 Res 2008;47:3489–501. doi:10.1021/ie070805g.
- 321 [11] Sanaye S, Niroomand B. Simulation of heat exchanger network (HEN) and planning the optimum
322 cleaning schedule 2007;48:1450–61. doi:10.1016/j.enconman.2006.12.006.
- 323 [12] Peng F, Cui G. Efficient simultaneous synthesis for heat exchanger network with simulated annealing
324 algorithm. Appl Therm Eng 2015;78:136–49. doi:10.1016/j.applthermaleng.2014.12.031.
- 325 [13] Núñez-Serna RI, Zamora JM. NLP model and stochastic multi-start optimization approach for heat
326 exchanger networks. Appl Therm Eng 2016;94:458–71. doi:10.1016/j.applthermaleng.2015.10.128.
- 327 [14] Coello C. A Short Tutorial on Evolutionary Multiobjective Optimization. Evol Multi-Criterion Optim
328 2001;1993:21–40. doi:10.1007/3-540-44719-9_2.
- 329 [15] Zhang G. Quantum-inspired evolutionary algorithms: A survey and empirical study. J Heuristics
330 2011;17:303–51. doi:10.1007/s10732-010-9136-0.
- 331 [16] Liu LL, Fan J, Chen PP, Du J, Yang FL. Synthesis of heat exchanger networks considering fouling,
332 aging, and cleaning. Ind Eng Chem Res 2015;54:296–306. doi:10.1021/ie5027524.
- 333 [17] Onishi VC, Ravagnani MASS, Jiménez L, Caballero JA. Multi-objective synthesis of work and heat
334 exchange networks : Optimal balance between economic and environmental performance. Energy
335 Convers Manag 2017;140:192–202. doi:10.1016/j.enconman.2017.02.074.
- 336 [18] March L. Introduction to Pinch Technology. 1998.
- 337 [19] Biyanto TR, Gonawan EK, Nugroho G, Hantoro R, Cordova H, Indrawati K. Heat exchanger network
338 retrofit throughout overall heat transfer coefficient by using genetic algorithm. Appl Therm Eng
339 2016;94:274–81. doi:10.1016/j.applthermaleng.2015.10.146.
- 340 [20] Rev E, Fonyo Z. Diverse pinch concept for heat exchange network synthesis: the case of different
341 heat transfer conditions. Chem Eng Sci 1991;46:1623–34. doi:10.1016/0009-2509(91)87010-A.
- 342 [21] Thuy NTP, Pendyala R, Marneni N. Heat exchanger network optimization using differential evolution

343 with stream splitting. *Appl Mech Mater* 2014;625:373–7.
344 doi:10.4028/www.scientific.net/AMM.625.373.

345 [22] Fieg G, Luo X, Jezowski J. A monogenetic algorithm for optimal design of large-scale heat exchanger
346 networks. *Chem Eng Process Process Intensif* 2009;48:1506–16. doi:10.1016/j.cep.2009.10.003.

347 [23] Linnhoff B, Ahmad S. Cost optimum heat exchanger networks-1. Minimum energy and capital using
348 simple models for capital cost. *Comput Chem Eng* 1990;14:729–50. doi:10.1016/0098-
349 1354(90)87083-2.

350 [24] Zhu XX. Automated design method for heat exchanger network using block decomposition and
351 heuristic rules Actual Composite Curves. *Comput Chem Engng* 1997;21:1095–104.
352 doi:10.1016/S0098-1354(96)00320-1.

353 [25] Lewin DR. A generalized method for HEN synthesis using stochastic optimization - II The synthesis
354 of cost-optimal networks. *Comput Chem Eng* 2009;33:1363–70.

355 [26] Yerramsetty KM, Murty CVS. Synthesis of cost-optimal heat exchanger networks using differential
356 evolution. *Comput Chem Eng* 2008;32:1861–76. doi:10.1016/j.compchemeng.2007.10.005.

357 [27] Zhaoyi H, Liang Z, Hongchao Y, Jianxiong Y. Simultaneous synthesis of structural-constrained heat
358 exchanger networks with and without stream splits. *Can J Chem Eng* 2013;91:830–42.
359 doi:10.1002/cjce.21702.

360 [28] Pariyani A, Gupta A, Ghosh P. Design of heat exchanger networks using randomized algorithm.
361 *Comput Chem Eng* 2006;30:1046–53. doi:10.1016/j.compchemeng.2006.01.005.

362 [29] Björk KM, Nordman R. Solving large-scale retrofit heat exchanger network synthesis problems with
363 mathematical optimization methods. *Chem Eng Process Process Intensif* 2009;48:1506–16.

364

Table 1. Data for 9-process streams problem [13].

Stream	T^{in} [$^{\circ}\text{C}$]	T^{out} [$^{\circ}\text{C}$]	F_{Cp} [$\text{kW } ^{\circ}\text{C}^{-1}$]	h [$\text{kW } ^{\circ}\text{C}^{-1} \text{ m}^{-2}$]
H1	327	40	100	0.50
H2	220	160	160	0.40
H3	220	60	60	0.14
H4	160	45	400	0.30
C1	100	300	100	0.35
C2	35	164	70	0.70
C3	85	138	350	0.50
C4	60	170	60	0.14
C5	140	300	200	0.60
Hot Utility	330	250	--	0.50
Cold Utility	15	30	--	0.50

Heat exchanger cost = $10000 + 350A$ \$USD (A in m^2).

Time of study = 5 years.

Annual cost of hot utility = 60 \$USD $\text{kW}^{-1} \text{ year}^{-1}$.

Annual cost of cold utility = 6 \$USD $\text{kW}^{-1} \text{ year}^{-1}$.

Table 2. Optimal results for case 1.

Authors	Number of Units	Total Area [m²]	Q_{Hot}^{Utility} [MW]	Q_{Cold}^{Utility} [MW]	TAC [M\$/yr]
Linnhoff and Ahmad [23]	13	17400	25.31	33.03	2.9600
Zhu et al. [24]	10	16380	26.83	34.55	2.9800
Lewin [25]	11	16880	25.69	33.41	2.9460
Yerramsetty and Murty [26]	15	16536	25.88	33.6	2.9420
Huo et al. [27]	11	18453	23.88	31.6	2.9360
Peng and Cui [12]	15	17745	24.50	32.22	2.9350
Zamorea eta l. [13]	15	18735	23.41	31.13	2.9329
This Work	12	18771	23.45	31.17	2.9322

Table 3. Data for 10-process streams problem [13].

Stream	T^{in} [K]	T^{out} [K]	F_{Cp} [kW K ⁻¹]
H1	433	366	8.79
H2	522	411	10.55
H3	544	422	12.56
H4	500	339	14.77
H5	472	339	17.73
C1	355	450	17.28
C2	366	478	13.90
C3	311	494	8.44
C4	333	433	7.62
C5	389	495	6.08
Hot Utility	509	509	--
Cold Utility	311	355	--

$U = 0.852 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ for matches between process streams and cold utility.

$U = 1.136 \text{ kW m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ for matches between process streams and hot utility.

Annual cost of heat exchangers = $145.63A^{0.6}$ \$USD year⁻¹ (A in m²).

Annual cost of hot utility = 37.64 \$USD kW⁻¹ year⁻¹.

Annual cost of cold utility = 18.12 \$USD kW⁻¹ year⁻¹.

Table 4. Optimal results for case 2.

Authors	Number of Units	$Q_{\text{Cold}}^{\text{Utility}}$ [MW]	TAC [M\$/yr]
Linnhoff and Ahmad [23]	10	1975	43934
Lewin [25]	10	1879	43452
Pariyani et al. [28]	10	1879	43439
Yerramsetty and Murty [26]	10	1879	43538
Peng and Cui [13]	10	1879	43411
Zamoreta et al. [13]	10	1879	43647
This Work	10	1879	43452

Table 5. Data for 15-process streams problem [22].

Stream	$T^{\text{in}} [^{\circ}\text{C}]$	$T^{\text{out}} [^{\circ}\text{C}]$	$F_{Cp} [\text{kW } ^{\circ}\text{C}^{-1}]$	$h [\text{kW } ^{\circ}\text{C}^{-1} \text{ m}^{-2}]$
H1	180	75	30	2.00
H2	280	120	60	1.00
H3	180	75	30	2.00
H4	140	40	30	1.00
H5	220	120	50	1.00
H6	180	55	35	2.00
H7	200	60	30	0.40
H8	120	40	100	0.50
C1	40	230	20	1.00
C2	100	220	60	1.00
C3	40	190	35	2.00
C4	50	190	30	2.00
C5	50	250	60	2.00
C6	90	190	50	1.00
C7	160	250	60	3.00
Hot utility	325	325	--	1.00
Cold utility	25	40	--	2.00

Annual cost of heat exchangers = $8000 + 500A^{0.7}$ \$USD year⁻¹ (A in m²).

Annual cost of hot utility = 80 \$USD kW⁻¹ year⁻¹.

Annual cost of cold utility = 10 \$USD kW⁻¹ year⁻¹.

Table 6. Optimal results for case 3.

Authors	Number of Units	Total Area [m²]	Q_{Hot}^{Utility} [MW]	Q_{Cold}^{Utility} [MW]	TAC [M\$/yr]
Björk & Nordman [29]	No structure given	--	--	--	1530063
Fieg et al. [22]	15	--	10616	8241	1510891
Peng and Cui [13]	17	3691	10974	8599	1537252
This Work	17	4328	10584	8209	1547344

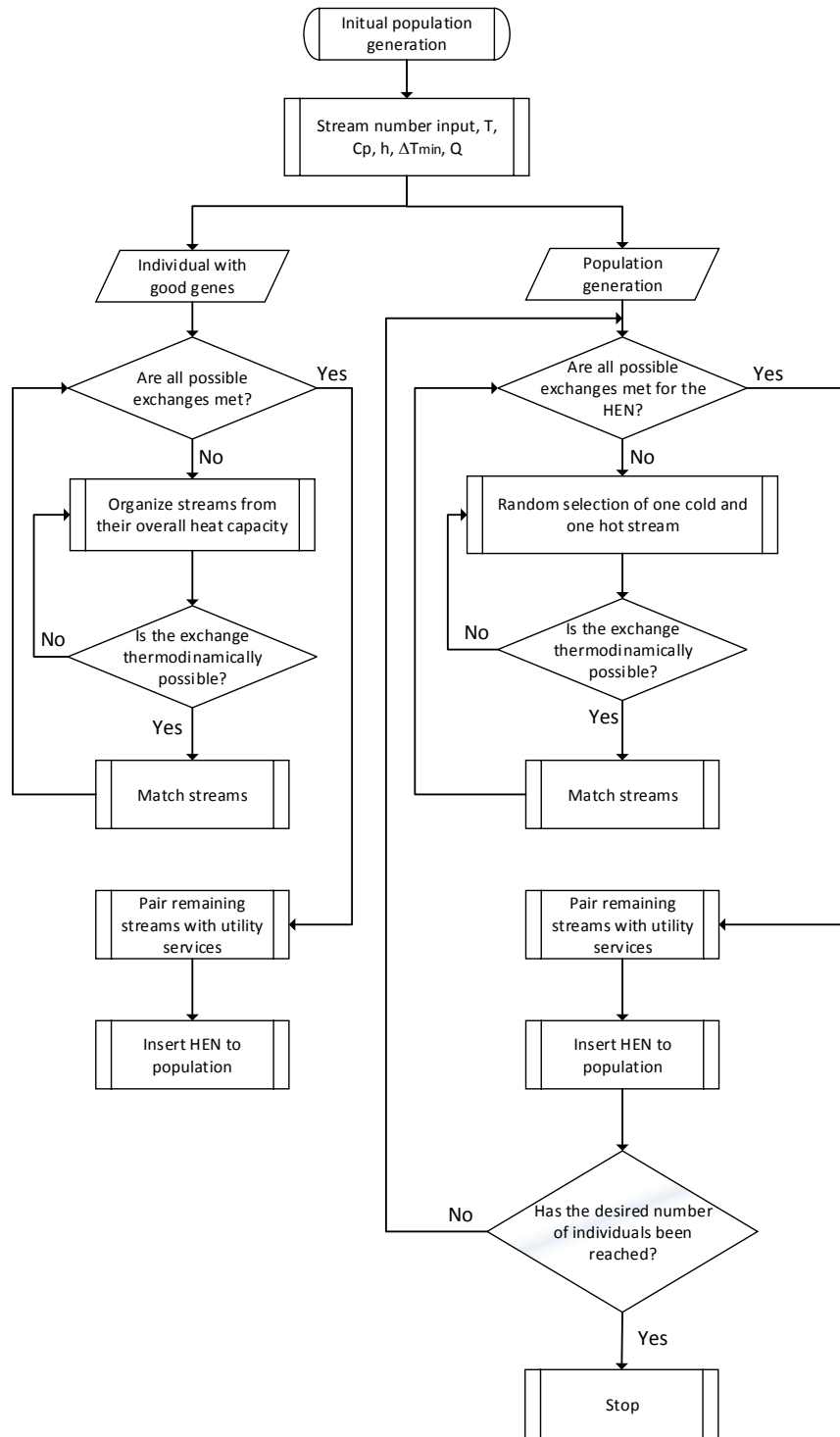


Figure 1. Generation of initial population.

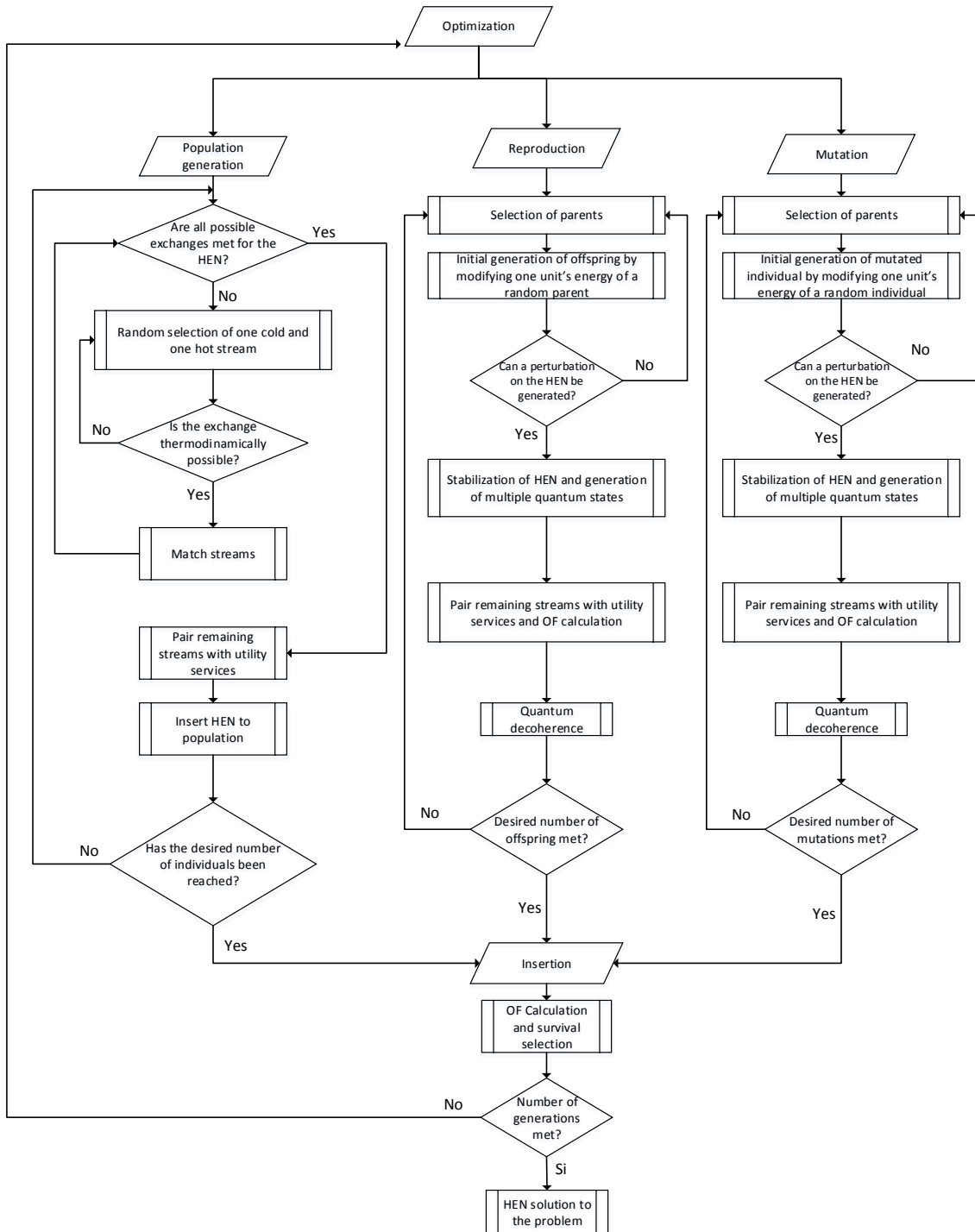


Figure 2. Optimization.

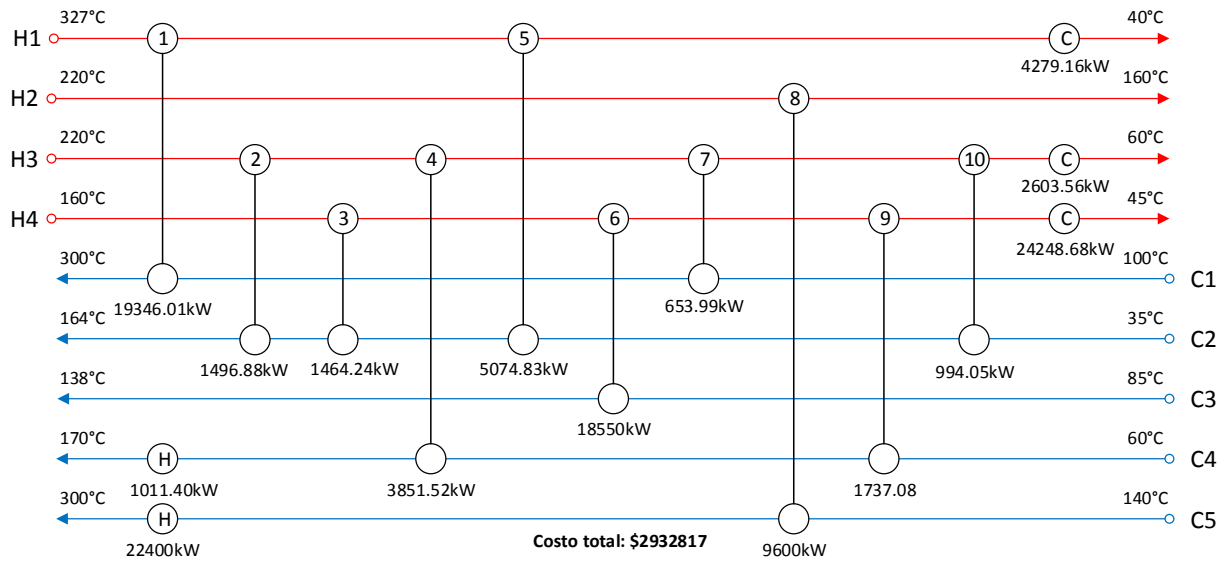


Figure 3. Optimal heat exchanger network for case 1, obtained by [13].

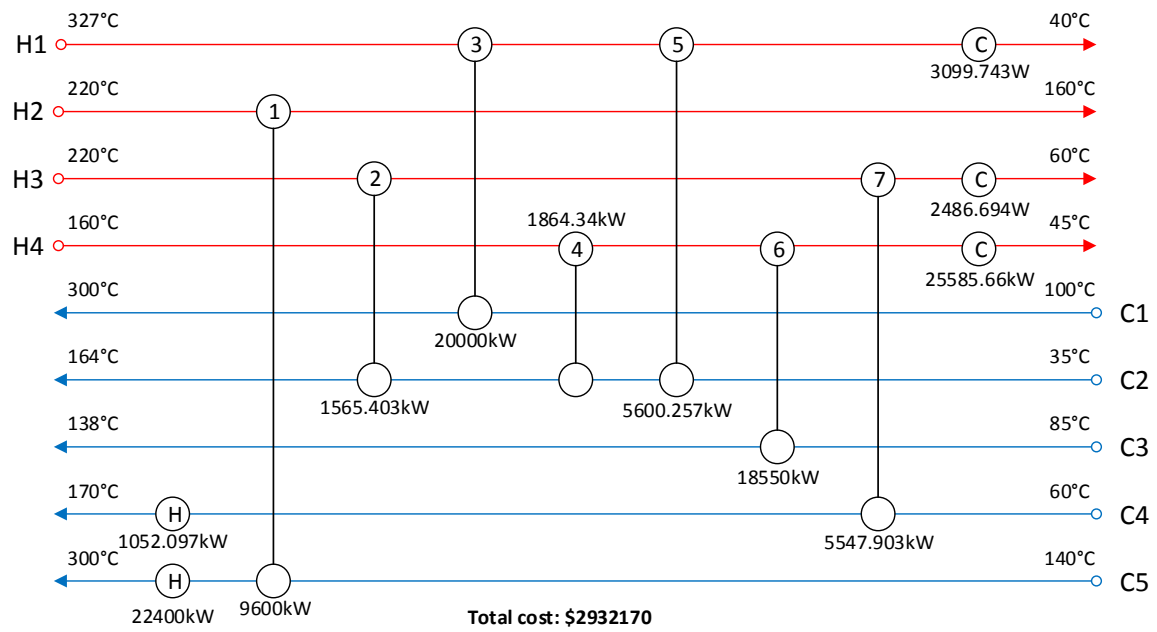


Figure 4. Optimal heat exchanger network for case 1, obtained by the model presented in this work.

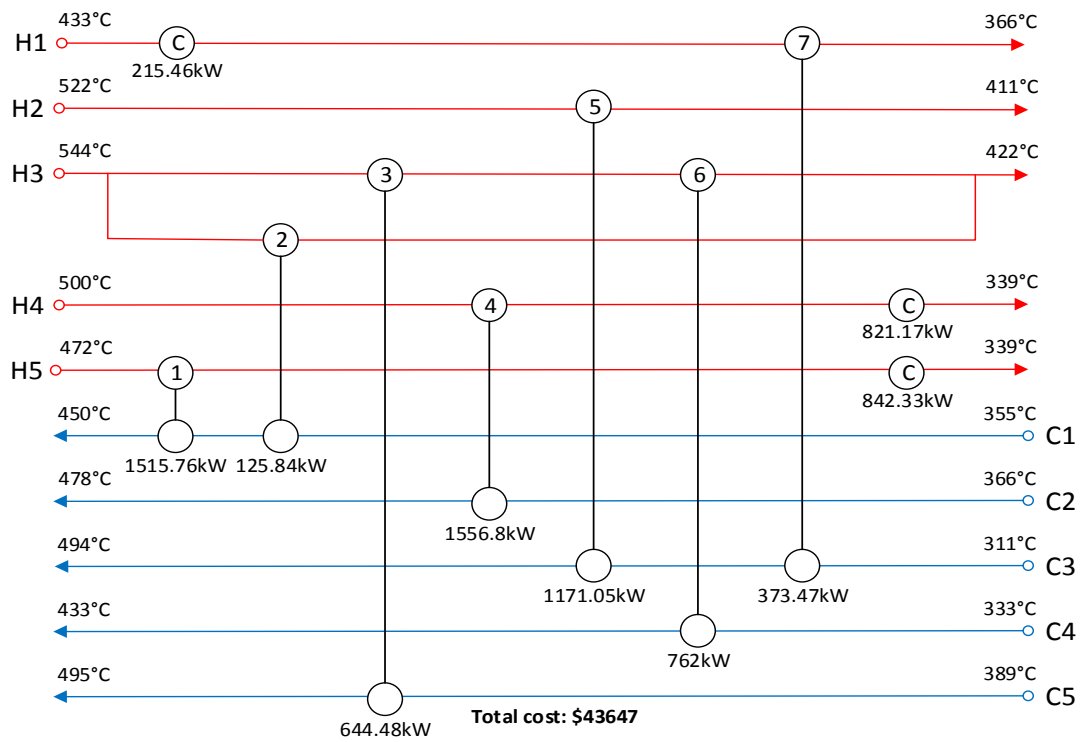


Figure 5. Optimal heat exchanger network for case 2, obtained by [13].

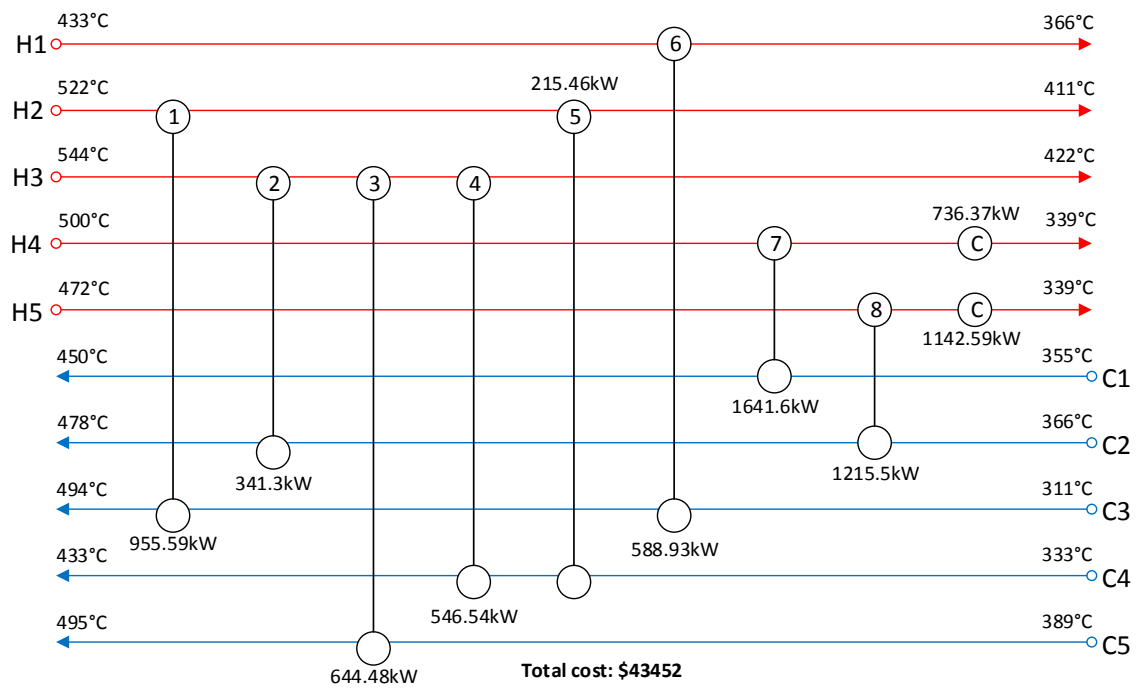


Figure 6. Optimal heat exchanger network for case 2, obtained by the model presented in this work.

Figure(s)

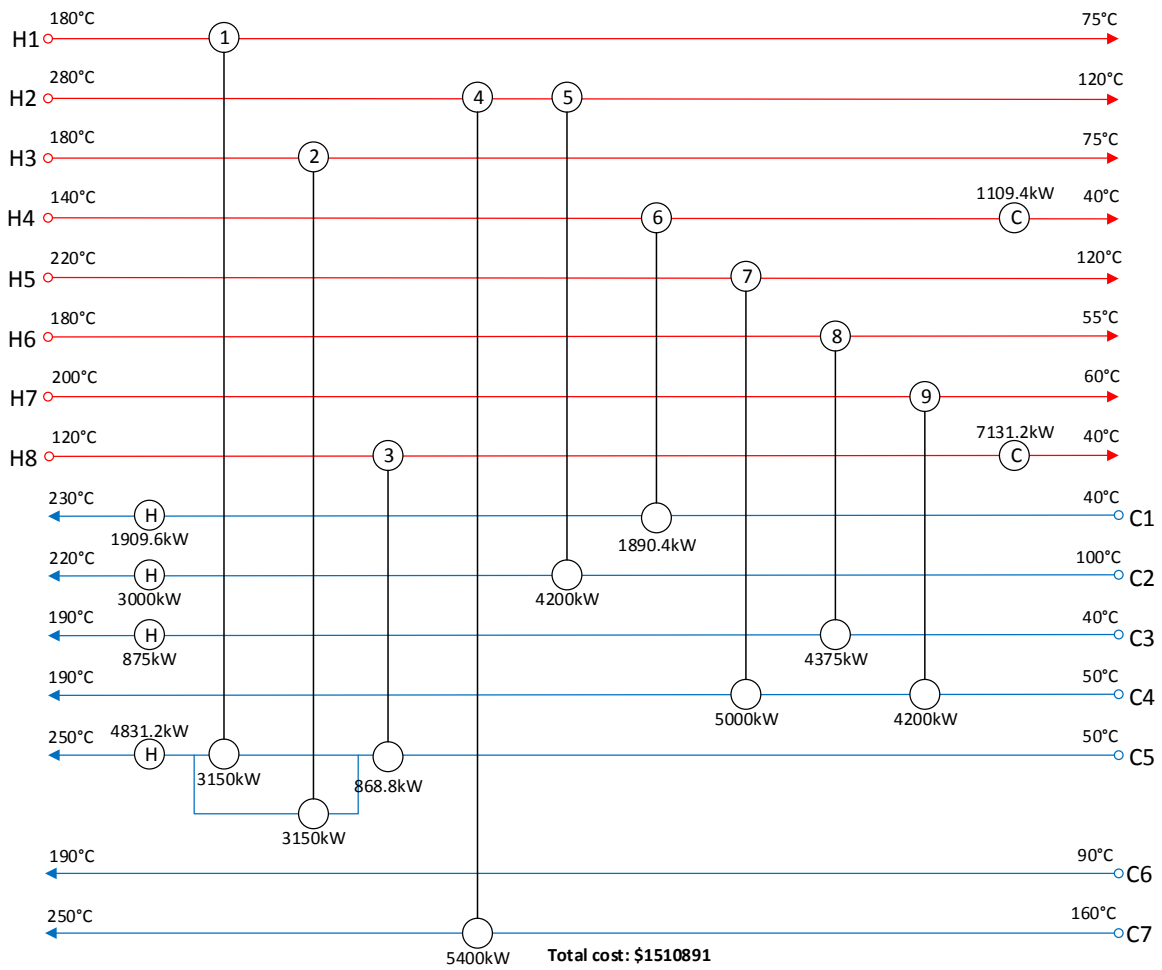


Figure 7. Optimal heat exchanger network for case 3, obtained by [22].

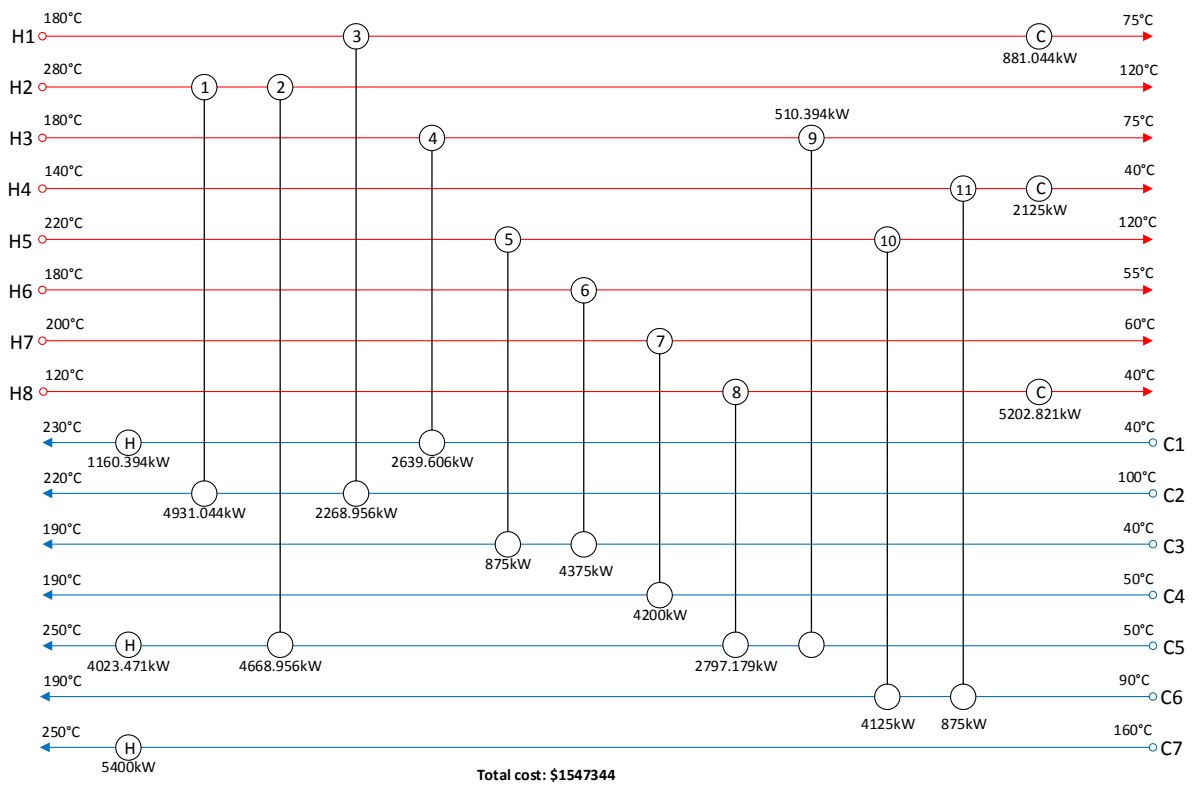


Figure 8. Optimal heat exchanger network for case 3, obtained by the model presented in this work.