

Instituto de Computación – Facultad de Ingeniería  
Universidad de la República

Proyecto de Grado

**Formulación y resolución de problema de planificación de procesos en  
biorefinería**

Estudiantes: Diego Marcher, Marcelo Restuccia, Martín Spangenberg.

Supervisor: Carlos Testuri.

Usuarios: Soledad Gutiérrez, Adrián Ferrari.



“Existe una opinión muy generalizada según la cual la matemática es la ciencia más difícil cuando en realidad es la más simple de todas. La causa de esta paradoja reside en el hecho de que, precisamente por su simplicidad, los razonamientos matemáticos equivocados quedan a la vista. En una compleja cuestión de política o arte, hay tantos factores en juego y tantos desconocidos o inaparentes, que es muy difícil distinguir lo verdadero de lo falso. El resultado es que cualquier tonto se cree en condiciones de discutir sobre política y arte (y en verdad lo hace) mientras que mira la matemática desde una respetuosa distancia.”

Ernesto Sábato - Uno y el Universo



# Contenido

1.	Introducción.....	1
1.1.	Motivación .....	2
1.2.	Objetivo.....	5
2.	Marco Teórico.....	7
2.1.	Síntesis de procesos – Un enfoque de optimización. ....	7
2.2.	Modelado matemático .....	9
2.2.1.	Programación lineal .....	9
2.2.2.	Programación entera mixta .....	9
2.3.	Lenguajes de Modelado Algebraico:.....	10
2.4.	GAMS (General Algebraic Modeling System): .....	11
2.4.1.	Usando GAMS .....	11
2.4.2.	Estructura de un Modelo GAMS .....	11
2.5.	EMSO.....	15
3.	Problema.....	17
3.1.	Introducción.....	17
3.2.	Entidades.....	17
3.3.	Superestructura .....	18
3.4.	Modelo del problema planteado por el Instituto de Ingeniería Química.....	19
4.	Requisitos del prototipo .....	23
4.1.	Requerimientos de interoperabilidad.....	23
4.2.	Requerimientos de interfaz de usuario .....	23
5.	Modelo Matemático .....	25
5.1.	Introducción.....	25
5.2.	Nomenclatura .....	25
5.2.1.	Conjuntos Iniciales .....	25
5.2.2.	Parámetros.....	25
5.2.3.	Variables.....	26

5.3.	Restricciones .....	26
5.4.	Predicados sobre los parámetros .....	27
5.5.	Función objetivo .....	28
6.	Codificación del modelo mediante un lenguaje algebraico.....	29
6.1.	¿Por qué GAMS? .....	29
6.2.	Ventajas de GAMS .....	29
6.3.	Solución.....	29
7.	Integración con EMSO.....	35
7.1.	Objetivo de la integración.....	35
7.2.	Estructura de proyecto EMSO.....	35
7.3.	Desarrollo.....	37
7.3.1.	<i>Parser</i> .....	37
7.4.	Interfaz.....	39
7.4.1.	Imágenes.....	40
8.	Pruebas realizadas .....	43
8.1.	Test 1.....	43
8.1.1.	Test 1.1.....	43
8.1.2.	Test 1.2.....	45
8.1.3.	Test 1.3.....	46
8.2.	Test 2.....	47
8.2.1.	Test 2.1.....	48
8.2.2.	Test 2.2.....	49
8.3.	Test 3: Modelo propuesto por Instituto de Ingeniería Química .....	52
8.3.1.	Prueba con datos estimados.....	55
8.3.2.	Prueba con datos provistos por Instituto de Ingeniería Química .....	60
9.	Conclusiones .....	69
10.	Referencias.....	71

11.	Anexos.....	73
11.1.	Código GAMS .....	73
11.2.	Restricciones asociadas a la formulación de optimización del artículo de Bao et al.....	78
11.3.	Salida de ejecución de Test 1 en GAMS.....	82
11.4.	Salida de ejecución de Test 2 en GAMS.....	84
11.5.	Salida de ejecución de Test 3 en GAMS.....	86
11.6.	Salida de ejecución de Test 4 en GAMS.....	87
11.7.	Salida de ejecución de Test 5_1 en GAMS.....	88
11.8.	Salida de ejecución de Test 5_2 en GAMS.....	89
11.9.	Salida de ejecución de Test Principal en GAMS con datos estimados.....	90
11.10.	Salida de ejecución de Test Principal en GAMS con datos provistos por el IIQ.....	92

## Resumen

Una biorefinería produce combustibles, energía y variados compuestos a partir del procesamiento de biomasa, una fuente de energía renovable. Para el procesamiento de biomasa se pueden utilizar numerosos procesos de base que a partir de ciertos compuestos de insumo generan determinados productos. La posibilidad de establecer configuraciones alternativas de operación a partir de la selección de diferentes procesos básicos caracteriza al problema de la planificación de una biorefinería. Dependiendo de las propiedades de los productos que vinculan los procesos, se establecen posibles secuencias de estos (camino de síntesis). Cada configuración de procesos básicos y sus vínculos determinan la eficiencia de los resultados junto a costos de instalación y operación. El problema consiste en determinar cuáles configuraciones entre las consideradas son óptimas a partir de ciertos criterios de utilidad según rendimientos y costos. Este informe detalla el planteo, diseño, resolución y ejecución de un modelo matemático que representa el problema. Asimismo se brindará la posibilidad de interoperar con una herramienta de simulación de procesos de industria (EMSO) lo que abarca importación de datos desde la herramienta hacia nuestro sistema, para así poder reutilizar modelos existentes. Se presentará un marco teórico, decisiones tomadas, planteamiento de la solución, ejecuciones de varias instancias del modelo, análisis de los resultados obtenidos y conclusiones obtenidas.

# 1. Introducción

En el presente nos encontramos en una situación de alta dependencia de los combustibles fósiles, los cuales nos proveen la energía necesaria para la mayoría de las maquinarias y automóviles. El principal problema de esta fuente de energía para nuestro país, es la dependencia con países proveedores, además de los altos costos de los mismos y sin perder de vista que el mismo proviene de una fuente no renovable. Es por estas razones que es necesario realizar investigaciones asociadas a la producción de energías renovables no convencionales (ERNC), logrando la sustitución parcial de los combustibles fósiles.

Dentro de las ERNC que más se destacan podemos encontrar la energía solar, la energía producida con hidrógeno, eólica, mareomotriz y los biocombustibles.

Las tecnologías de producción de ERNC se encuentran en diferentes niveles de desarrollo, por una lado la energía solar y eólica llevan varios años de investigación y desarrollo pero son dependientes de las circunstancias climáticas, por otro lado la energía producida con hidrógeno y mareomotriz no cuentan con suficientes resultados que concluyan un buen rendimiento.

La biomasa representa una abundante fuente de carbón renovable que nos permite la producción de bioenergía y biomateriales. Se han logrado importantes avances en los procesos químicos, genética y biotecnología que permiten convertir la biomasa en combustibles y productos de valor, lo cual es conocido como biorefinería. Nuestro país cuenta con una gran cantidad de cultivos agro energéticos como el pasto o la madera de eucalipto que ofrecen un enorme potencial para el desarrollo de bioenergía y biomateriales de forma sustentable.

Los biocombustibles se están desarrollando día a día y se espera que en el corto plazo puedan sustituir parte del combustible fósil que se utiliza hoy en día. Logrando generar energía con un menor impacto ambiental, disminuyendo las emisiones de CO<sub>2</sub>.

Podemos nombrar varias ventajas de los biocombustibles, menor daño medioambiental, energía renovable, disminución de dependencia con los países extractores de petróleo, nuevos puestos de trabajo, desarrollo del área científica y un importante crecimiento de las áreas rurales. Podemos resumir que los biocombustibles presentan ventajas ambientales, económicas y sociales.

Uno de los biocombustibles más demandados en el mundo es el etanol, el cual es utilizado como complemento del combustible en países como Brasil, Estados Unidos y Alemania en forma masiva. El bioetanol es alcohol producido luego de la fermentación de los azúcares de la sacarosa, almidón y la celulosa de productos vegetales. Brasil genera bioetanol hoy en día a partir de la caña de azúcar, Estados Unidos utiliza maíz y en Uruguay se está evaluando la posibilidad de producir bioetanol a partir de pasto o de la madera de eucalipto.

El bioetanol de primera generación es aquel que se produce a partir de alimentos como la caña de azúcar o el maíz, esto ha traído grandes discusiones sobre el impacto generado sobre los precios de los alimentos, por esta razón se está trabajando en el desarrollo de la tecnología para la producción de bioetanol de segunda generación, el mismo se genera a partir de desechos agrícolas, forestales, municipales, cultivos energéticos, etc.

Con los precios de hoy en día, tanto de los combustibles fósiles como de la materia prima necesaria para producir bioetanol, se puede concluir que el bioetanol no es competitivo en el mercado. Es por esto que es importante buscar que las biorefinerías produzcan derivados que puedan aumentar la competitividad de la misma. El diseño de una biorefinería está dado por el conjunto de procesos que se utilizan y sus interconexiones. Es muy importante lograr el mejor diseño posible de la biorefinería, para esto es necesario contar con un estudio con las diferentes alternativas, en este punto es en el que vamos a hacer foco, logrando crear un modelo matemático que permita definir las mejores configuraciones. Permitiendo tanto crear las diferentes alternativas, como poder proyectar la producción en el tiempo.

Atacaremos al problema de manera algebraica modelando sus procesos, productos, propiedades y relaciones como ecuaciones, inecuaciones y variables matemáticas continuas y discretas.

Para ello se construirá de forma teórica y algebraica un modelo que resuelva la problemática planteada pero a su vez sea tan genérico como para poder resolver otras realidades del mismo dominio del problema. Además se desarrollará un prototipo práctico que permita gestionar el problema, visualizar los resultados y brinde herramientas para el análisis de los datos de las soluciones obtenidas.

## **1.1. Motivación**

El uso de modelos matemáticos para la toma de decisiones de forma científica es la característica esencial de la Investigación Operativa. Términos como programación, optimización y planificación son habituales en Investigación Operativa.

El término planificación está presente en una gran cantidad de actividades, los gobiernos planifican sus actuaciones económicas, los presupuestos, las políticas de salud, educación y seguridad entre otros. Las empresas y plantas industriales planifican sus presupuestos, sus inversiones y sus diseños.

En la ingeniería de software al momento de emprender un proyecto, es en la etapa de diseño donde se tiene que tener el mayor cuidado y previsión, pues cualquier error detectado en esta etapa será mucho menos costoso de resolver que si se encontrara más adelante en otra etapa del proyecto. Al igual que la ingeniería de software, al momento de crear una planta, es la etapa de diseño una de las más importantes sobre todo a nivel de negocio, pues un error de diseño detectado en una planta en régimen, constituye un problema grave que puede incluso implicar el rediseño de la misma. Un error de diseño detectado luego de que la planta está en producción tiene un fuerte impacto a nivel económico y social.

Imaginemos una planta que utiliza cierto proceso (llamémoslo X) como parte de un conjunto de procesos para la creación de cierto producto. Esta planta luego de puesta en producción siempre se encontrará en régimen. Luego de un tiempo en producción se encuentra un proceso Y que realiza el mismo trabajo que el proceso X, con el mismo rendimiento, de manera más eficiente y a menor costo. Sin duda suplantará el proceso X por el Y optimizará la producción de la planta. Este cambio implicaría un rediseño de la planta la cual a su vez implicaría que la planta detenga su producción por un determinado tiempo. Como consecuencia de lo anterior la empresa estaría perdiendo tiempo para producir su producto y por lo tanto perderá competitividad, además de los costos que abarcaría la compra del nuevo proceso y su instalación, y las implicancias sociales de tener al personal detenido. En resumen si se hubieran detectado las ventajas del proceso Y en el momento de diseñar la planta se habrían evitado los problemas antes mencionados.

Es por esto que la etapa de diseño de una planta es crítica y actualmente requiere de un tiempo enorme (años) y grandes costos. Al igual que muchas plantas, en el caso de las biorefinerías al momento de diseñar la planta se cuenta con una gran variedad de procesos y productos que la planta podría manejar en conjunto para lograr una combinación que cumpla con sus objetivos. Es claro que no todas las combinaciones de procesos tendrán el mismo resultado, es por esto que en la etapa de diseño se intenta encontrar la mejor combinación de procesos que alcance los objetivos de la planta.

Simplificar la etapa de diseño de una biorefinería aportaría un gran ahorro tanto económico como de tiempo.

Este proyecto busca generar una herramienta que permita la planificación y optimización del diseño de una planta, en particular una biorefinería. A continuación se puntualizan las principales razones por las cuales es primordial contar con herramientas de este tipo a la hora de diseñar una biorefinería.

- Los costos de modificación de uno o más procesos luego que se tiene la planta en marcha son mucho mayores que en la etapa de diseño, por lo que una buena planificación del diseño puede significar un gran ahorro económico.
- La cantidad de variantes que existe a la hora de diseñar una biorefinería son infinitas y contar con una herramienta que permita analizar el impacto de las diferentes variantes es sin duda una gran ventaja.
- Siempre es importante contar con análisis científico de los costos y rendimientos, para esto es necesario contar con un modelo matemático que permita presentar un proyecto de este tipo.
- Como nombramos anteriormente el desarrollo de la tecnología necesaria para la producción de biocombustibles está en constante crecimiento, y es necesario tener una herramienta que permita incorporar nuevos procesos y evaluar ágilmente su impacto.

Otra motivación para la creación de herramientas de este tipo es el alto compromiso que presentan los gobiernos del mundo. A raíz de la crisis de los combustibles fósiles las potencias mundiales han incrementado considerablemente la inversión en investigación y desarrollo de combustibles renovables, el *Protocolo de Kioto* ha sido uno de los motivadores de este cambio de políticas energéticas. El mismo produce una constante presión a las potencias mundiales para el aumento de la producción de energía renovable. En este sentido, la Unión Europea se ha planteado la meta de satisfacer con bioenergía el 12.5% de sus necesidades energéticas en el sector doméstico e industrial para 2010, el 26% para 2020 y el 58% para 2050. Las metas para el sector de transporte son de un 5,8% para 2010 y un 20% para 2020. En cuanto a producción de químicos renovables, la Unión Europea no cuenta con metas oficiales, aunque se estima que en Alemania, el 12% de la producción de químicos base provienen de fuentes renovables. [1] Analizando estos números se puede ver que el cambio hacia una bioeconomía será lento y paulatino pero a paso firme. Sin embargo, la implementación de soluciones energéticas renovables demandará que éstas sean tanto ambiental como económicamente factibles. Nuevamente concluimos que los beneficios ambientales no son discutibles pero sin embargo los rendimientos económicos aún no son tan visibles por lo que contar con todas las herramientas que apoyen en la contribución de este aspecto serán recibidas con gran gratitud.

## **1.2. Objetivo**

A continuación se plantean los objetivos a alcanzar al concluir este proyecto de grado.

### **Objetivo General:**

- Estudiar el problema de la configuración de procesos de una biorefinería, formular el problema como un modelo matemático de optimización, codificar el modelo matemático mediante un lenguaje algebraico y validar el modelo con instancias de prueba.

### **Objetivos Específicos:**

- Estudiar diferentes herramientas que solucionen este dominio de problema y lograr una interoperabilidad entre éstas y nuestra solución.
- Proveer una interfaz de usuario que permita la construcción de modelos de forma intuitiva y amigable, y una interfaz para poder visualizar las configuraciones resultantes de la optimización así como del modelo inicial.
- Trabajar junto con el Instituto de Ingeniería Química para lograr crear un modelo real de biorefinería, con el cual se ejecute un conjunto de pruebas para la validación del modelo matemático.
- Análisis de las soluciones obtenidas.



## 2. Marco Teórico

### 2.1. Síntesis de procesos – Un enfoque de optimización.

Síntesis y selección de alternativas tecnológicas es una actividad de desarrollo clave en la industria de procesos. Recientemente, ésta se ha vuelto particularmente importante para el diseño conceptual de las biorefinerías. Este trabajo presenta un método de acceso directo para la síntesis y proyección de biorefinerías integradas. [2]

El Biocombustible es una fuente renovable de energía derivada de cualquier materia orgánica tales como plantas y animales. Respecto a los combustibles basados en petróleo, el bio-combustible provee de varias ventajas ambientales como ser sustentabilidad y reducción de emisión de gases. A modo de ejemplo, el etanol generado con maíz tiene el potencial de reducir la emisión de gases GHG (greenhouse gas) en un 52% comparado con combustibles fósiles convencionales. El proceso que convierte la biomasa en biocombustible produce bajas emisiones de GHG y es más amigable al ambiente si se compara con procesos para los combustibles fósiles. En 2007 se gastó más de 4 billones de dólares americanos en todo el mundo para la investigación y producción de biocombustibles.

Las biorefinerías son instalaciones que mediante procesos convierten biomasa en productos de valor como biocombustibles. Existen múltiples tecnologías de conversión establecidas en una biorefinería. Dada la gran cantidad de alternativas y combinaciones de tecnologías que se pueden utilizar en una biorefinería, existe una fuerte necesidad de proyectar opciones de manera rápida y metódica. También es necesario explorar diferentes niveles de integración para reducir desperdicios y conservar recursos.

Como existe una enorme cantidad de configuraciones de procesos, materias primas, y productos en una biorefinería, el objetivo de este artículo es desarrollar una metodología sistemática que maneje dicho problema. Una aproximación sistemática es desarrollada en este trabajo para mostrar de forma rápida los potenciales caminos tecnológicos que existen y sintetizar una biorefinería basado en varias funciones objetivo.

## Declaración del problema

Una manera sencilla de ver el problema que plantea el artículo de Bao et al. puede ser la siguiente: dado un grupo de materias primas y un grupo de productos deseados, sintetizar un proceso que cumple con cierto objetivo (como por ejemplo maximizar ganancia). Para la resolución del problema existen varios procesos con características de performance conocidas (por ejemplo costo) que se pueden utilizar y combinar.

En el artículo se introduce una representación estructural de procesos y productos en forma de grafo que se muestra en la Fig. 1, donde los procesos son representados mediante elipses y los productos mediante rectángulos:

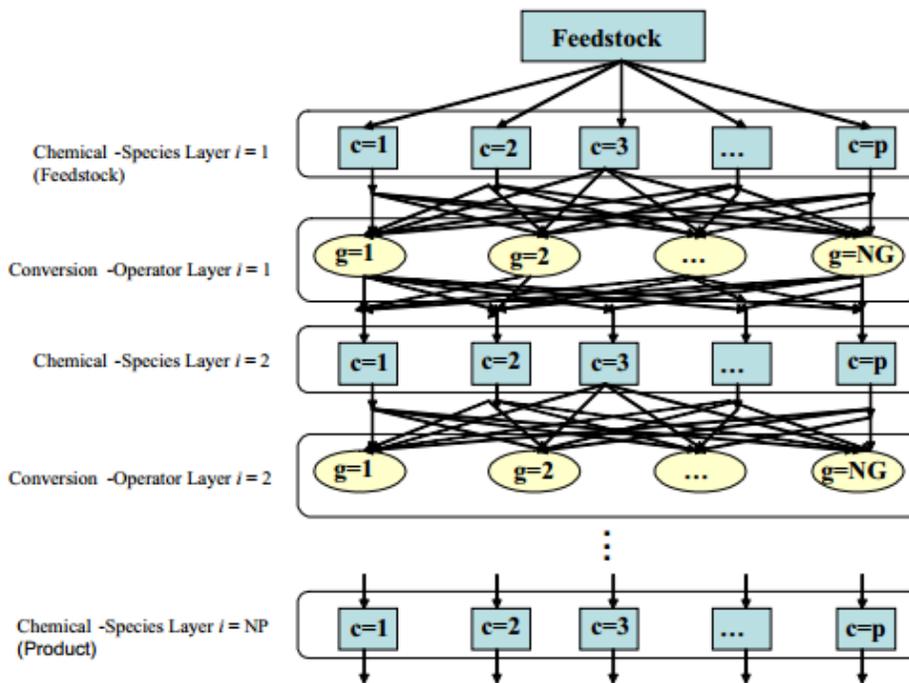


Fig. 1.

## Formulación Matemática

El grafo está categorizado en productos químicos y tecnologías de conversión (procesos) que cumplen con el objetivo de operar con los productos. El diagrama (Fig. 1) tiene capas alternadas de productos seguidas de procesos. Hay  $NP$  capas de productos y  $NP-1$  capas de procesos, cada una identificada con un índice  $i$ . La primera capa representa la materia prima, mientras que la última capa ( $i = NP$ ) representa el

producto deseado. El resto de las capas de productos representan los productos involucrados en la biorefinería.

Cierto producto  $c$  producido por uno o varios procesos en la capa  $i$  es recolectado por diferentes procesos de la capa  $i+1$ . El reúso de un producto está permitido y se logra asignando dicho producto a una capa anterior. Dado un producto  $c$  de cierta capa  $i$ , éste puede ser separado para ser entregado a varios procesos. Además de los procesos, se pueden introducir procesos vacíos que permiten que un producto viaje de una capa a otra sin ser procesado.

Los conceptos anteriores se pueden incluir en una formulación de optimización con ciertas restricciones.

Ver Anexo 1.2

La imagen de la figura 1 es tanto una representación del modelo como una representación de las posibles configuraciones de interés que se lograrían dependiendo de las funciones objetivo como pueden ser maximizar ganancias, o la producción, entre otros. Este artículo brinda una base de conocimiento para la comprensión de la toma de decisiones a la hora de diseñar una biorefinería. Es de gran apoyo para la formulación de un primer acercamiento al modelo matemático que describe al problema.

## 2.2. Modelado matemático

En el modelo matemático construido para la solución de la problemática planteada, tanto las restricciones como la función objetivo, son lineales. Además, la solución planteada contiene variables tanto continuas como enteras, es por ello que el problema se convierte en un problema de programación entera mixta.

### 2.2.1. Programación lineal

Matemáticamente, los problemas de programación lineal (LP) son de la siguiente forma,

$$\begin{array}{l} \text{Maximizar ó Minimizar } c \cdot x \\ \text{Sujeto a } \begin{cases} A \cdot x \geq b \\ L \leq x \leq U \end{cases} \end{array} .$$

Donde  $x$  es un vector de variables que son números reales continuos.  $cx$  es la función objetivo, y  $Ax \geq b$  representa un conjunto de restricciones.  $L$  y  $U$  son vectores límites superior e inferior de las variables. [3]

### 2.2.2. Programación entera mixta

Matemáticamente, los problemas de Programación entera mixta (MIP) son de la siguiente forma,

$$\begin{array}{l} \text{Minimizar } c \cdot x + d \cdot y \\ \text{Sujeto a } \left\{ \begin{array}{l} A \cdot x + B \cdot y \geq b \\ L \leq x \leq U \\ y = \{0, 1, 2, \dots\} \end{array} \right. \end{array}$$

Donde  $x$  es un vector de variables que son números reales continuos,  $y$  es un vector de variables que sólo pueden tomar valores enteros;  $c \cdot x + d \cdot y$  es la función objetivo, y  $A \cdot x + B \cdot y \geq b$  representan el conjunto de restricciones.  $L$  y  $U$  son los vectores límites superior e inferior de las variables continuas,  $y = \{0, 1, 2, \dots\}$  es el dominio de la variable  $y$ .

### 2.3. Lenguajes de Modelado Algebraico:

Los lenguajes de modelado algebraico son lenguajes de programación de alto nivel para describir y resolver problemas algebraicos a gran escala (por ejemplo, problemas de optimización).

Una ventaja particular de algunos lenguajes de modelado algebraicos como AIMMS, AMPL, GAMS o Xpress-Mosel, es la similitud de su sintaxis para la notación matemática de problemas de optimización. Esto permite una definición muy concisa y legible de problemas en el campo de la optimización, que es apoyado por ciertos elementos del lenguaje como conjuntos, índices, expresiones algebraicas, manejo de datos variables y restricciones con nombres arbitrarios. La formulación algebraica de un modelo no contiene información de cómo procesarlo.

Un lenguaje de modelado algebraico no resuelve esos problemas directamente; en realidad lo que hace es llamar algoritmos externos apropiados para obtener una solución. Estos algoritmos son llamados solucionadores y pueden manejar cierto tipo de problemas matemáticos como:

- problemas lineales
- problemas enteros
- problemas enteros mixtos
- problemas cuadráticos
- problemas de complementariedad mixtos
- programas matemáticos con restricciones de equilibrio
- sistemas no lineales con restricciones
- problemas no lineales generales
- programas no lineales con derivados discontinuos
- problemas no lineales enteros
- problemas de optimización global
- problemas de optimización estocásticos

Para la resolución de nuestra problemática planteada elegimos utilizar GAMS

## **2.4. GAMS (General Algebraic Modeling System):**

GAMS es una herramienta diseñada específicamente para el modelado lineal, no lineal y los problemas de optimización entero mixtos, entre otros. También permite al usuario concentrarse en el modelado del problema por tener una sencilla configuración.

GAMS es especialmente útil para el manejo de grandes y complejos problemas. El sistema modela problemas de una manera muy compacta y natural. Como usuarios, podemos cambiar la formulación de forma rápida y sencilla, podemos cambiar de un solucionador a otro, y podemos incluso transformar problemas de lineal a no lineal.

Al eliminar la necesidad de pensar en los problemas puramente técnicos específicos de la máquina, tales como cálculos de direcciones, tareas de almacenamiento, vinculación subrutina, y de entrada-salida y control de flujo, GAMS aumenta el tiempo disponible para conceptualizar y ejecutar el modelo, y el análisis de los resultados, permitiendo concentrarnos únicamente en el modelo.

El lenguaje que utiliza GAMS es formalmente similar a lenguajes de programación utilizados comúnmente. Por tanto, es familiar para cualquier persona con experiencia en programación.

### **2.4.1. Usando GAMS**

Los datos se introducen en listas y tablas de forma similar a cualquier lenguaje de programación. Los modelos se describen en declaraciones algebraicas concisas que son fáciles para los seres humanos y las máquinas para leer. Conjuntos cerrados de restricciones estrechamente relacionadas se introducen en una sentencia. GAMS genera automáticamente cada ecuación de restricción. Las declaraciones de los modelos pueden ser reutilizados sin tener que cambiar el álgebra cuando surgen otras instancias del problema, o cuando se plantean distintos objetivos. Es decir se pueden elegir qué restricciones utilizar.

[4]

### **2.4.2. Estructura de un Modelo GAMS**

Un Modelo GAMS es una colección de declaraciones ordenadas por una única regla; las entidades del modelo no pueden ser referenciadas antes de declararse.

Un Modelo GAMS se compone de las siguientes entidades: Sets, Data, Variables, Equations, Model Display.

**Sets:** Son los “bloques de construcción” básicos de un modelo GAMS. Definen los índices en la representación algebraica del modelo.

```
sets set_name ["text"] [/element ["text"] {,element ["text"]} /]
```

```
J   productos      /pasto, madera, celulosa, lignina/  
K   procesos       /chipeadora, explosionPorVapor, HidrolisisAcida/
```

Los sets J y K son ejemplos de sets estáticos, los mismos son asignados por el usuario y no cambian.

**Data:** Las listas y las Tablas son dos de las maneras fundamentales para ingresar datos en un Modelo GAMS.

Las listas se estructuran de la siguiente manera

```
parameter[s] param_name [text] [/ element [=] signed_num  
{,element [=] signed num} /]
```

PARAMETERS

```
    Capacidad(K)  capacidades de los procesos  
/ chipeadora      100  
  explosionPorVapor 100  
  HidrolisisAcida  100/
```

En este caso la lista representa el volumen/capacidad de los procesos. El índice K determina el dominio de las entidades de la lista, las cuales son procesos. La lista asigna un valor a cada elemento del dominio.

Las Tablas se estructuran de la siguiente manera

```
table table_name [text]  
element { element }  
element signed_num { signed_num}
```

{element signed\_num { signed\_num } } ;

TABLE CoefE(J,K) coeficientes de entrada

	chipeadora	explosionPorVapor	HidrolisisAcida
pasto	0	1	0
madera	0.5	0	0.5
celulosa	0.2	0	0
lignina	0.3	0	0.5

En este caso J y K determinan el dominio de la tabla y se le asigna un valor a cada par (J,K). De esta manera en el ejemplo vemos que el proceso explosionPorVapor tiene valor 1 en el coeficiente de entrada para el producto pasto.

**Ecuaciones:** El poder de los lenguajes de modelado algebraico tales como GAMS se hace más aparente en la creación de las ecuaciones y restricciones que comprenden el modelo bajo construcción.

Los componentes de las ecuaciones son los siguientes en orden:

1. Nombre de la ecuación
2. El dominio
3. Condición de restricción de dominio (opcional)
4. El símbolo “..”
5. Expresión izquierda
6. Operador relacional (=|, =e, =g)
7. Expresión derecha

Significado de los operadores relacionales

- =| menor o igual
- =e igual
- =g mayor o igual

eqn\_name(domain\_list).. expression eqn\_type expression ;

R2(J,Jp,K)\$((CoefE(Jp,K) ne 0) and (CoefE(J,K) ne 0) ) .. CoefE(Jp,K) \* R(J,K) =E= CoefE(J,K) \* R(Jp,K);

En esta ecuación el nombre es R2, el dominio (J,Jp,K), la condición \$((CoefE(Jp,K) ne 0) and (CoefE(J,K) ne 0) ), expresión izquierda CoefE(Jp,K) \* R(J,K) , operador =E=, expresión derecha CoefE(J,K) \* R(Jp,K)

**Funciones objetivo:** GAMS no tiene explícitamente una entidad llamada función objetivo. Para especificar la función a ser optimizada por el modelo se crea una variable y se le asigna una ecuación.

```
Ganancia =E= SUM(J,valor(J)*Q(J)) - CT;
```

Finalmente, la función objetivo, maximiza la ganancia. Representado en GAMS es del tipo:

```
solve model_name using model_type MAXIMIZING Ganancia;
```

**Modelo y sentencia Solve:** Un modelo es una colección de ecuaciones. Como otras entidades de GAMS hay que asignarle un nombre y declararlas. Un modelo define qué ecuaciones se usarán para resolver la función objetivo, en el caso de que se usen todas las definidas se le puede asignar la palabra /all/.

```
model[s] model_name [text] [/ all | eqn_name {, eqn_name} /]  
{,model_name [text] [/ all | eqn_name {, eqn_name} /]} ;
```

```
MODEL maximizarGanancia /ALL/;
```

En este caso el modelo maximizarGanancia usará todas las ecuaciones que se crearon en GAMS para optimizar.

En la sentencia Solve se determina el modelo a utilizar, el tipo de problema, la función objetivo y qué tipo de optimización se desea.

```
solve model_name using model_type maximizing|minimizing var_name|;
```

```
SOLVE maximizarGanancia USING MIP MAXIMIZING Ganancia;
```

En este caso se maximizará la ecuación Ganancia usando todas las restricciones definidas.

## **2.5. EMSO**

EMSO es un simulador de procesos orientado a las ecuaciones con una interfaz gráfica para el modelado de procesos en estado de equilibrio, dinámico o complejo. EMSO significa Entorno para Modelado, Simulación y Optimización. Detalles sobre la integración de nuestra herramienta con EMSO se muestran en el capítulo 7. [5]



## 3. Problema

### 3.1. Introducción

Se plantea estudiar el problema de síntesis de procesos de una biorefinería, formular el problema como un modelo de optimización, implementar un mecanismo de resolución computacional y resolver diferentes instancias del problema.

Basándonos en las ideas planteadas en el artículo de Bao et al., diagramamos el problema con un grafo dirigido donde se distinguen dos posibles nodos (procesos y productos) y las aristas representan la relación entre ellos.

Para la representación del problema usamos un esquema de jerarquías (niveles) donde los productos son representados con rectángulos y los procesos con elipses. Tanto el primer como el último nivel estarán conformados por productos, materias primas y productos finales respectivamente.

Productos y procesos relacionados:

- Si el producto “A” es del nivel  $i$  y el proceso “B” del nivel  $i+1$ , entonces “A” puede ser un insumo de “B”.
- Si el producto “A” es del nivel  $i+1$  y el proceso “B” del nivel  $i$ , entonces “B” puede generar “A”.

Para la validación del modelo de optimización y la resolución de diferentes instancias del problema contamos con el apoyo del Instituto de Ingeniería Química.

### 3.2. Entidades

#### **Proceso:**

Llamamos proceso a todo mecanismo de transformación de materia entrante en otra saliente.

#### Atributos:

- Costo fijo.
- Costo variable: ligados a la cantidad de unidades de salida, se calcula por unidad procesada.
- Capacidad: la misma refleja la capacidad de procesamiento de un proceso.

Para cada proceso se establecen la formulación de los productos de entrada y los rendimientos de los productos de salida. Ambos, formulación y rendimientos, se describen con coeficientes normalizados a la unidad. En el caso de la formulación, los coeficientes indican, para cada producto, el ratio de masa de entrada que participa en una unidad de masa del proceso. En el

caso de los rendimientos, los coeficientes indican, para cada producto, el ratio de masa que sale con respecto a la unidad de masa procesada.

**Producto:**

Llamamos producto a los objetos consumidos/producidos por los procesos anteriormente definidos.

Atributos:

- Cantidad: representa la cantidad inicial de materia prima con la que se cuenta.
- Valoración: representa el valor por unidad, el mismo puede tomar un valor negativo como pueden ser por ejemplo, los desechos.

### **3.3. Superestructura**

**Grafo modelo:**

- La estructura que modela el problema es un grafo dirigido cuyos nodos son productos o procesos.
- Se definen niveles, los cuales representan un estado del proceso de transformación desde la materia prima, hasta el producto final como un todo. En un nivel determinado, pueden existir sólo procesos o sólo productos, estando los niveles intercalando entre procesos y productos; esto es, un proceso tiene como predecesor un producto y como sucesor otro producto, no existen productos adyacentes o procesos adyacentes.
- Cada proceso puede tanto consumir como producir una cantidad arbitraria de productos.
- El grafo comienza y termina con uno o más productos.

**Grafo solución:**

A partir de la superestructura y de la función objetivo definida y con la ayuda de un lenguaje algebraico que interprete un conjunto de reglas que modelan la realidad de una planta biorefinería, se obtiene el grafo solución al problema, junto con datos de interés a la solución como por ejemplo, materia prima utilizada, cantidad de producto final producido, costos totales, restos, etc.

### **3.4. Modelo del problema planteado por el Instituto de Ingeniería Química**

En la Fig. 2 se muestra una instancia del modelo generalizado anterior que cubre las necesidades del Instituto de Ingeniería Química según lo relevado en reuniones iniciales. El problema a resolver consta de maximizar la ganancia para esta instancia, brindando el diseño que se tiene que seguir para lograr el cometido. Se utiliza madera y pasto como materia prima y mediante seis etapas de procesamiento, se genera etanol y etanol<sup>98</sup>. La primera etapa de procesamiento se llama chipeo físico y cuenta con dos procesos para transformar la materia prima en fracciones pequeñas y grandes. Las fracciones pequeñas se utilizan luego como insumo de uno o varios procesos disponibles de la etapa de pre tratamiento, los cuales generan caldo. El caldo se utiliza como insumo para los procesos de la etapa de separación, los cuales generan celulosa, lignina y hemicelulosa. De todos los productos generados en esta etapa sólo la celulosa se utiliza como insumo de los procesos de la etapa de fermentación. En la etapa de fermentación los procesos generan caldo fermentado, el cual es utilizado por los procesos de la siguiente etapa de separación para generar bioetanol y residuos. Por último, el bioetanol se utiliza por los procesos de la última etapa de procesamiento para generar los productos finales etanol y etanol<sup>98</sup>. Cabe aclarar que en el conjunto de productos de salida en la etapa de separación, se omitió la representación de la biomasa pues afectaba la legibilidad del diagrama, igualmente fue tenido en cuenta y está presente en la superestructura.

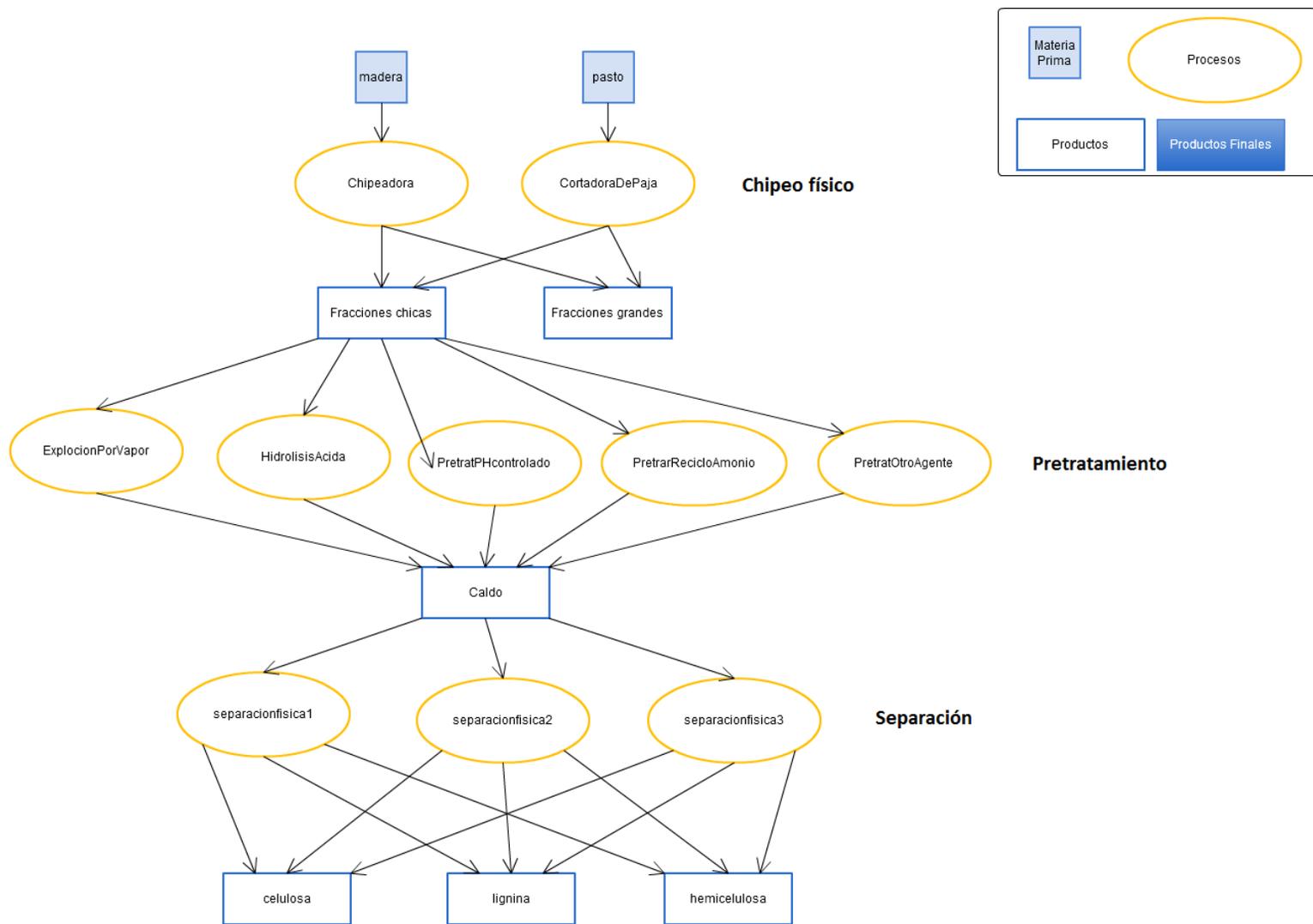


Fig. 2.1.

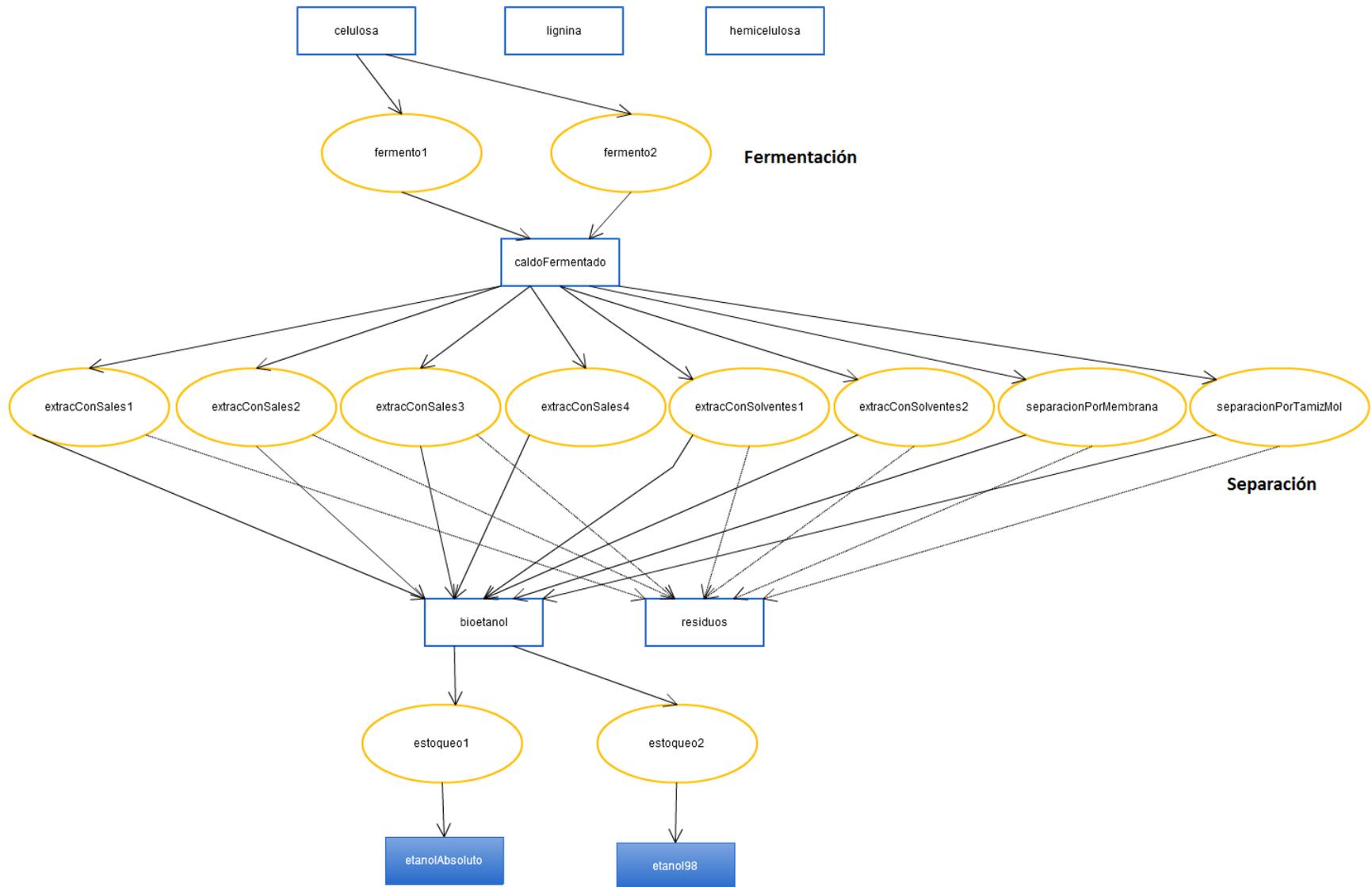


Fig. 2.2.



## 4. Requisitos del prototipo

### 4.1. Requerimientos de interoperabilidad

La herramienta es capaz de interoperar con otros sistemas de optimización, logrando que el usuario no tenga que reescribir todo el modelo si se presentara un cambio en la superestructura. El sistema permite importar archivos generados por alguna herramienta de modelado de procesos, creándose automáticamente tanto los productos, los procesos y sus relaciones.

### 4.2. Requerimientos de interfaz de usuario

Para la utilización de la herramienta de una forma sencilla y amigable se le brinda al usuario una interfaz gráfica que le permita realizar las diferentes tareas que nombraremos a continuación.

#### **Alta, baja y modificación (ABM) de producto:**

El usuario puede dar de alta nuevos productos, modificar, o borrar productos existentes en el sistema ingresando sus atributos para luego poder ser utilizados como entradas y/o salidas de los procesos. Se debe indicar nombre, cantidad inicial, valorización y costo de adquisición.

#### **ABM de proceso:**

El usuario puede dar de alta nuevos procesos, modificar, o borrar procesos existentes en el sistema ingresando sus atributos para luego poder ser utilizados como nodos en el grafo modelo (superestructura). Se debe indicar nombre, costo fijo, costo variable, productos de entrada y salida con sus correspondientes proporciones.

#### **Importación/Exportación de datos:**

El sistema permite al usuario importar datos de los procesos, productos y superestructuras.

Lo que permite es importar archivos previamente exportados de EMSO para evitar el esfuerzo por re-trabajo en volver a modelarlos en el nuevo sistema.

#### **Importación modelo en GAMS:**

El sistema permite que el usuario importe un archivo de datos con sintaxis GAMS con el que se crean los procesos y productos (con sus respectivos atributos y conexiones).



## 5. Modelo Matemático

### 5.1. Introducción

En este capítulo se presentará el modelo matemático desarrollado para la optimización de los procesos en una biorefinería. Para esto, se plantea el problema como un problema de optimización lineal definiendo dominios, conjuntos, subconjuntos, variables entre otros, que representan los procesos y productos, y ecuaciones e inecuaciones que modelan las restricciones de la realidad. Se definen conjuntos los cuales representan los posibles procesos y productos. Se definen parámetros los cuales contienen las relaciones entre procesos y productos, así como también valorización, costo, cantidad inicial y cantidad final de cada producto.

### 5.2. Nomenclatura

#### 5.2.1. Conjuntos Iniciales

$J$  = conjunto de productos.

$K$  = conjunto de procesos.

$F \subseteq J$  Conjunto de productos finales.

$E_k \subseteq J$  conjunto de productos que son entrada del proceso  $k$ , con  $k \in K$ .

$S_k \subseteq J$  conjunto de productos que son salida del proceso  $k$ , con  $k \in K$ .

$I_j \subseteq K$  conjunto de procesos que tienen como salida al producto  $j$ .

$O_j \subseteq K$  conjunto de procesos que tienen como entrada al producto  $j$ .

$R$  conjunto de posibles productos que ingresan a procesos,  $R := \{(j, k) \mid j \in E_k, \forall k \in K\}$ .

$P$  conjunto de posibles productos que salen a procesos,  $P := \{(k, j) \mid j \in S_k, \forall k \in K\}$ .

#### 5.2.2. Parámetros

$\text{coef}E(j, k)$  Coeficiente del producto de entrada  $j$  en la fórmula de reacción correspondiente al proceso  $k$ , con  $k \in K, j \in J$ .

$\text{coef}S(j, k)$  Coeficiente del producto de salida  $j$  en la fórmula de reacción correspondiente al proceso  $k$ , con  $k \in K, j \in J$ .

$c_k$  costo unitario del proceso  $k$ , con  $k \in K$ .

$f_k$  costo fijo del proceso  $k$ , con  $k \in K$ .

$s_j$  cantidad inicial del producto  $j$ , con  $j \in J$ .

$v_j$  valoración del producto  $j$ , con  $j \in J$ .

$a_j$  costo de adquisición del producto  $j$ , con  $j \in J$ .

$cap_k$  capacidad de producción del proceso  $k$ , con  $k \in K$ .

Nota:  $coefE(j, k)$  y  $coefS(j, k)$  representan la proporción (normalizada (número entre 0 y 1)) de un producto  $j$  en un proceso  $k$ .

Ejemplo

Sea la reacción  $3A + B \rightarrow C + D$  del proceso  $P$ , los coeficientes correspondientes serían:

$$coefE(A, P) = 0.75$$

$$coefE(B, P) = 0.25$$

$$coefS(C, P) = 0.5$$

$$coefS(D, P) = 0.5$$

### 5.2.3. Variables

$R_{jk}$  Cantidad de producto  $j$  que entra al proceso  $k$ , con  $k \in K, j \in J$ .

$P_{jk}$  Cantidad entregada de producto  $j$  por el proceso  $k$ , con  $k \in K, j \in J$ .

$Q_j$  Cantidad de producto  $j$  que no es utilizado, con  $j \in J$ .

$U_k \in \{0,1\}$  vale 1 si el proceso  $k$  es utilizado en la solución, con  $k \in K$ .

### 5.3. Restricciones

La cantidad de un producto que genera un proceso es igual a la suma de las cantidades de producto entrante por el coeficiente de salida del producto en la ecuación de reacción,

$$P_{jk} = \left( \sum_{j' \in E_k} R_{j'k} \right) \cdot coefS(j, k), \quad \forall k \in K, \forall j \in S_k.$$

Las cantidades de entrada de producto en cada proceso debe respetar la relación definida en la ecuación del proceso al que pertenecen,

$$\frac{coefE(j,k)}{R_{jk}} = \frac{coefE(j',k)}{R_{j'k}}, \quad \forall j, j' \in E_k, \forall k \in K.$$

La cantidad de producto j debe respetar un balance de entradas y salidas,

$$s_j + \sum_{k \in I_j} P_{jk} = \sum_{k \in O_j} R_{jk} + Q_j, \quad \forall j \in J.$$

Restricción para validar si el proceso k es utilizado en la solución.  $U_k$  vale 1 si y solamente si, el proceso es utilizado en la solución,

$$\sum_{j \in E_k} R_{jk} \leq U_k \cdot cap_k, \quad \forall k \in K.$$

#### 5.4. Predicados sobre los parámetros

Los coeficientes de entrada y salida de los productos para los procesos deben ser reales entre 0 y 1 incluidos. A su vez, la suma de estos coeficientes para un proceso dado tiene que ser igual a 1,

$$coefE(j,k) \in [0,1], \quad \forall j \in J, \forall k \in K.$$

$$coefS(j,k) \in [0,1], \quad \forall j \in J, \forall k \in K.$$

$$\sum_{j \in E_k} coefE(j,k) = \sum_{j \in O_k} coefS(j,k) = 1, \quad \forall k \in K.$$

## 5.5. Función objetivo

Maximizar valoración de los productos menos los costos de producción: usaremos esta función objetivo para diseñar el prototipo,

$$F_{obj} = \max \left\{ \sum_{j \in J} v_j \cdot Q_j - \sum_{k \in K} \left( f_k \cdot U_k + c_k \cdot \sum_{j \in E_k} R_{jk} \right) - \sum_{j \in J} s_j \cdot a_j \right\}.$$

## 6. Codificación del modelo mediante un lenguaje algebraico

En nuestro caso, nos encontramos frente a un problema lineal en enteros mixto ya que existe una variable discreta. La variable  $U$ , que es la que determina si un proceso  $K$  es utilizado o no en la solución óptima, es una variable binaria (por lo tanto discreta) y la que convierte el problema, originalmente lineal, en un problema lineal en enteros mixta.

### 6.1. ¿Por qué GAMS?

A la hora de elegir un programa para la transformación del modelo matemático a un lenguaje de modelado algebraico contamos con varias opciones; AIMMS, AMPL, GAMS o Xpress-Mosel son programas utilizados para el fin deseado. [6]

Todos los programas mencionados son de muy similares características y están orientados al manejo de un lenguaje de modelado algebraico. En lo que respecta a nuestro objetivo la elección de cualquiera de estos es acertada. GAMS fue la primera recomendación debido a que es una herramienta utilizada por el Instituto de Ingeniería Química en la Facultad de Ingeniería.

### 6.2. Ventajas de GAMS

GAMS es flexible y potente. Los modelos son totalmente portables de una plataforma informática a otra. Facilita el análisis de sensibilidad. Podemos programar fácilmente un modelo a resolver para diferentes valores de un elemento y luego generar un informe de salida mostrando las características de la solución para cada caso. Los modelos pueden ser desarrollados y documentados de forma simultánea debido a que GAMS nos permite incluir un texto explicativo, como parte de la definición de cualquier símbolo o ecuación. Es una herramienta ideal para apoyar este proyecto.

### 6.3. Solución

En esta sección se explica la transición del modelo matemático a GAMS.

Primero se definen los conjuntos de datos usados:

$K$  representa el conjunto de todos los procesos en el modelo, este conjunto es constante.

$J$  representa el conjunto de todos los productos en el modelo, este conjunto es constante.

**Jp** es una copia del conjunto J. Es un conjunto auxiliar que contiene los mismos productos que j, es constante.

**c(K)** es una lista del costo variable de los procesos, para cada proceso se obtiene el costo variable de procesar una unidad. Es constante.

Cuando se habla de procesar una unidad se refiere a unidad de entrada de materias primas sumadas.

**f(K)** es la lista contenedora de los costos fijos que tiene cada proceso, para cada proceso se obtiene el costo fijo del mismo. Es constante.

**cap(K)** es la lista contenedora de la capacidad/volumen que tiene cada proceso, para cada proceso se obtiene su capacidad. Es constante.

**EsPrima(J)** lista que contiene para cada producto un valor que es 0 ó 1 indicando si el producto es del tipo materia prima o no. Devuelve 1 si j es materia prima.

**EsProdFinal(J)** lista que contiene para cada producto un valor que es 0 ó 1 indicando si el producto es del tipo producto final o no. Devuelve 1 si j es producto final.

**Demanda(J)** lista que contiene para cada producto la demanda a cubrir, esta lista generalmente devolverá cero para todo los productos que no sean finales y para estos devolverá la cantidad necesitada.

**v(J)** lista que contiene el valor de cada producto. Es el valor de descarte de un producto sobrante. En el caso de la materia prima es el valor de compra.

**s(J)** lista que contiene las cantidades iniciales de cada producto con la que empieza el modelo a optimizar.

**a(J)** lista que contiene los costos de adquisición de cada producto (por unidad)

**CoefE(J,K)** es una tabla de datos constantes, contiene para cada par (j,k) el coeficiente de entrada del producto j en el proceso k. Si un producto no forma parte de las entradas de un proceso entonces el valor en la tabla es cero, de lo contrario el valor varía entre 0 y 1.

**CoefS(J,K)** es una tabla de datos constantes, contiene para cada par (j,k) el coeficiente de salida del producto j en el proceso k. Si un producto no forma parte de las salidas de un proceso entonces el valor en la tabla es cero, de lo contrario el valor varía entre 0 y 1.

**R(J,K)** representa la cantidad de producto j entrante en un proceso k. Es un tipo de dato variable. A modo de ejemplo si al proceso chipeadora le entraran 10 unidades del producto madera  $R(\text{madera, chipeadora})=10$ .

**P(J,K)** Representa la cantidad de producto j saliente de un proceso k. Es un tipo de dato variable. A modo de ejemplo si al proceso chipeadora luego de procesar la entrada devuelve 6 unidades del producto fraccionesChicas  $P(\text{fraccionesChicas, chipeadora})=6$ .

**Q(J)** representa el resto del producto j, se obtiene de restarle al total de un producto las cantidades usadas por los procesos que tienen al producto como entrada.

**CT** es un dato variable que representa el costo total del modelo. Este dato representa la suma de los costos fijos y variables de todos los procesos que se utilizaron.

**CV(K)** es un dato variable que representa para cada proceso, el costo variable de procesar todas las unidades que se consumieron. Si un proceso reutiliza un producto, éste no debe ser considerado para calcular el costo variable sino, agregarse al costo final de la solución.

**CantDeJsEntranteEnK(K)** suma de todas las cantidades de productos que entran en el proceso k. Es un dato variable.

**U(K)** variable binaria que indica si el proceso K se usa o no. Toma valores 0 ó 1.

**Ganancia** es la diferencia entre el costo total y el valor de los productos producidos (se distingue entre materia prima y no prima).

#### **Ecuaciones usadas:**

1)

La cantidad de un producto que genera un proceso es igual a la suma de las cantidades de producto entrante por el coeficiente del producto en la ecuación de reacción,

$$P_{jk} = \left( \sum_{j' \in E_k} R_{j'k} \right) \cdot coefS(j, k), \quad \forall k \in K, \forall j \in S_k.$$

Esta ecuación se separa en dos líneas en lenguaje GAMS, la primera representa la ecuación en sí misma donde la sumatoria se obtiene de otra ecuación (cantDeJsEntranteEnK). La segunda línea define la ecuación “cantDeJsEntranteEnK” que devuelve el resultado de la sumatoria.

$$\begin{aligned} R1(J,K) .. \quad P(J,K) =E= CantDeJsEntranteEnK(K) * coefS(J,K); \\ SUMAUX1(K) .. CantDeJsEntranteEnK(K) =E= SUM(J$(CoefE(J,K) ne 0), R(J,K)); \end{aligned}$$

En la primera ecuación los coeficientes de salida son datos constantes y se obtienen de la tabla coefS, Para que el modelo funcione se necesita que la tabla contenga los valores respectivos para el par (J,K) o sea (producto, proceso).

Al igual que la primera ecuación, los coeficientes de entrada utilizados en la segunda ecuación son datos constantes y se obtienen de una tabla, en este caso coefE, también se utiliza R(J,K) que representa la cantidad de producto j enviado al proceso k. R es un dato variable.

En resumen la segunda ecuación determina la cantidad total de producto que entra en el proceso K, para esto calcula la sumatoria de todas las cantidades de productos entrantes en K para los pares (J,K) contenidos en la tabla coefE que sean distintos de cero. Si coefE(j,k) es cero significa que el proceso K no recibe al producto j en sus entradas.

2)

Las cantidades de entrada de producto en cada proceso debe respetar la relación definida en la ecuación del proceso al que pertenecen,

$$\frac{coefE(j, k)}{R_{jk}} = \frac{coefE(j', k)}{R_{j'k}}, \quad \forall j, j' \in E_k, \forall k \in K.$$

Esta ecuación se resuelve en GAMS como una restricción a todo par de productos j, jp para un proceso k. La condición para la restricción es que el valor en la tabla coefE para los pares (j,k) y (jp,k) tiene que ser distinto a cero. En otras palabras para un proceso K esta restricción se aplica a todos los pares de productos j,jp que sean entrada del proceso.

$$R2(J,Jp,K)\$(CoefE(Jp,K) ne 0) and (CoefE(J,K) ne 0) .. CoefE(Jp,K) * R(J,K) =E= CoefE(J,K) * R(Jp,K);$$

3)

La cantidad de producto j debe respetar un balance de entradas y salidas,

$$S_j + \sum_{k \in I_j} P_{jk} = \sum_{k \in O_j} R_{jk} + Q_j, \quad \forall j \in J.$$

Esta ecuación se representa en GAMS mediante una única restricción y es bastante directa la traducción.

El lado derecho de la ecuación representa la sumatoria de la cantidad de producto entrante en el proceso k para todos los procesos que cumplan que el par (j,k) tiene un valor distinto de cero en la tabla de coeficientes de entrada, más el resto del producto.

R3(J) .. SUM(K\$(CoefS(J,K) ne 0), P(J,K)) + s(J) =E= SUM(K\$(CoefE(J,K) ne 0), R(J,K)) + Q(J);

El lado izquierdo de la ecuación la sumatoria de la cantidad de producto saliente en el proceso k para todos los procesos que cumplan que el par (j,k) tiene valor distinto de cero en la tabla coefS, más la cantidad inicial del producto.

4)

Restricción para validar si el proceso k es utilizado en la solución. Vale 1 si y solamente si el proceso es utilizado en la solución,

$$\sum_{j \in E_k} R_{jk} \leq U_k \cdot cap_k, \quad \forall k \in K.$$

Esta ecuación es representada directamente en GAMS de la siguiente forma

R4(K) .. SUM(J, R(J,K)) =L= U(K) \* cap(K);

La sumatoria de las cantidades entrantes de los productos en el proceso K tiene que ser menor o igual a la capacidad del proceso, si el proceso no es utilizado el valor tiene que ser cero. U(K) ajusta lo anterior pues es un valor binario que vale cero si el proceso no se usa y uno en caso contrario.

5)

La función objetivo es maximizar la valoración de los productos menos los costos de producción. Esto es, maximizar el resultado de la suma de los costos de todas las cantidades de productos no utilizados menos el costo resultante de la suma de los costos fijos y variables de todos los procesos que se utilizaron,

$$F_{obj} = \max \left\{ \sum_{j \in J} v_j \cdot Q_j - \sum_{k \in K} \left( f_k \cdot U_k + c_k \cdot \sum_{j \in E_k} R_{jk} \right) - \sum_{j \in J} s_j \cdot a_j \right\}.$$

Nos referimos a “cantidad de producto no utilizado” como la cantidad de producto que no pasó por las entradas de ningún proceso.

La traducción a GAMS es bastante directa y se formula de la siguiente manera.

RGanancia .. Ganancia =E= SUM(J,valor(J)\*Q(J)) - CT;

CT es el costo total de producción y se calcula usando el costo fijo de cada proceso y el costo variable. Para el costo variable se define la restricción R5 que para cada proceso K determina el costo variable total de procesamiento en relación a la cantidad de producto procesado. La ecuación es la siguiente:

R5(K) .. CV(K) =E= SUM(J\$(CoefE(J,K) ne 0),R(J,K) \* c(K));

El costo total de producción se calcula como la sumatoria de todos los costos variables totales de cada proceso más el costo fijo del proceso en caso de haberse utilizado más los costos de adquisición de los productos.

COST .. CT =E= SUM(K, CV(K) + U(K)\*f(K)) + SUM(J,a(J)\*s(J));

### Branch and Cut

Como solver se utilizó CBC (Coin-OR Branch and Cut) que es un método de optimización combinatorial que resuelve problemas de programación entera. [7]

## 7. Integración con EMSO

Para facilitar el uso del modelo, se decidió integrar la solución con otros sistemas de dominios similares. Se realizó un estudio de los sistemas informáticos actuales que tengan como objetivo la simulación de procesos y/o flujos de productos en el ámbito industrial resultando de este estudio, dos posibles sistemas para la integración, EMSO y ASPEN.

Profundizando en los respectivos sistemas, ASPEN demuestra ser una herramienta muy compleja para interoperar con sistemas externos, esto se debe a que los archivos de exportación que genera Aspen son de uso propio del sistema y son muy complejos de procesar. Sin embargo EMSO demuestra ser un sistema más simple respecto a la interoperabilidad, los archivos de exportación son bien estructurados y no tan complejos de procesar.

Para la integración con EMSO, nos pusimos en contacto con Jimena Ferreira de la Facultad de Ingeniería (UDELAR) quien tiene experiencia con la herramienta, y nos proveyó información del Software, importación y exportación de datos, así como datos de entrada y salida para comparar.

### 7.1. Objetivo de la integración

Integrar nuestro modelo matemático hecho en GAMS con EMSO.

Permitir que un usuario pueda importar procesos desde proyectos EMSO, esto permite que el usuario obtenga de un proyecto construido en EMSO, la mejor solución para el diseño de su biorefinería, también agiliza la creación de procesos y productos para un proyecto nuevo.

### 7.2. Estructura de proyecto EMSO

Para lograr una integración primero se necesita saber la estructura de archivos generados por EMSO.

En la Figura 3 se muestra a grandes rasgos la arquitectura modular del software.

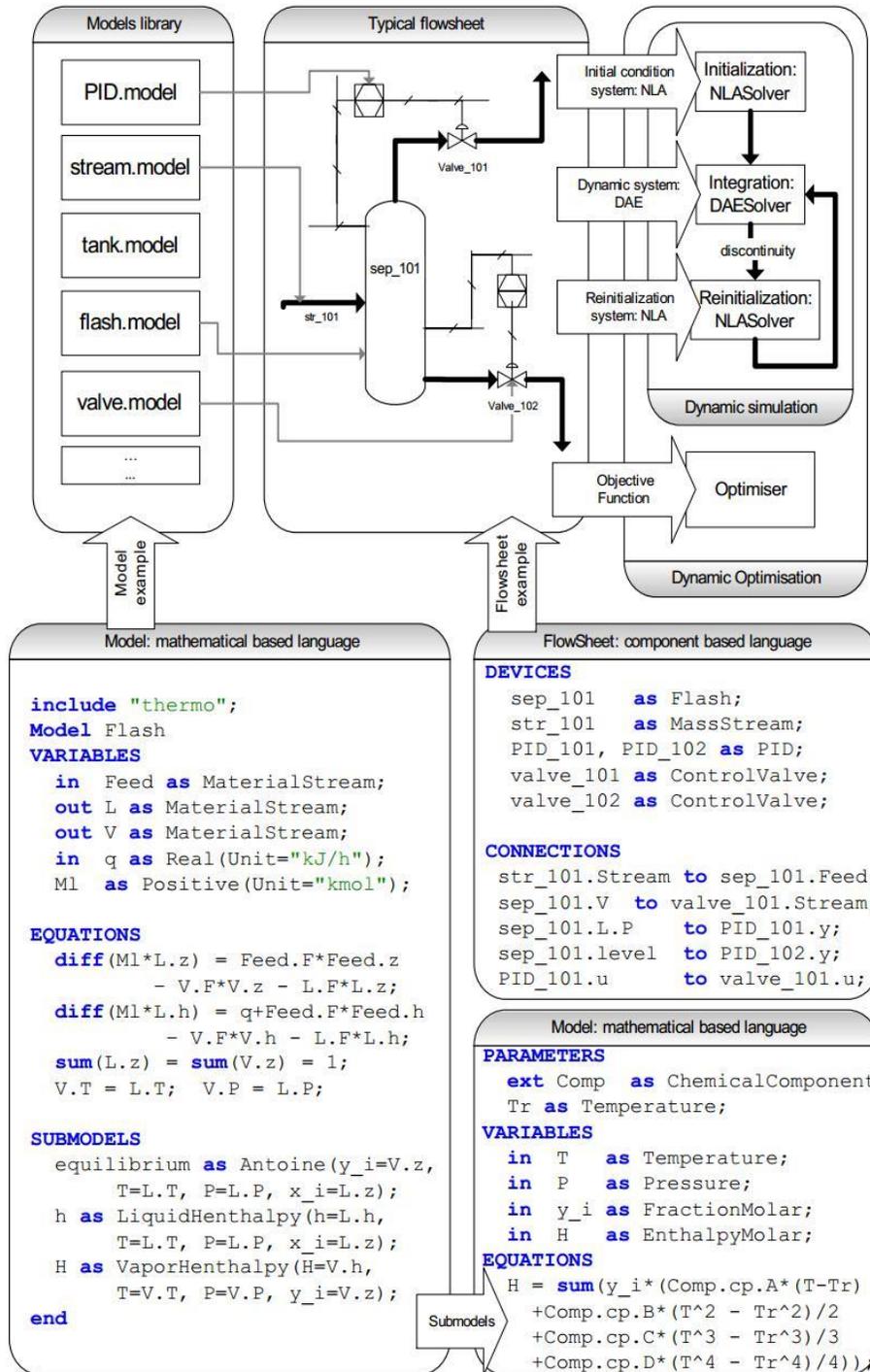


Fig. 3 - Visión general de la estructura de EMSO y sus componentes. [8]

Los proyectos generados por el software se componen principalmente de un *flowsheet* y de modelos, EMSO pone a disposición del usuario los mismos en dos formatos diferentes, mediante una interfaz de usuario (parte superior de la Fig.3) y mediante archivos basados en lenguaje matemático (parte inferior de la Fig.3).

Los *flowsheet* son los documentos encargados principalmente de definir los tipos de cada proceso y las conexiones entre los procesos que contiene la industria. En estos archivos, un proceso es una instancia de un modelo y representa un dispositivo real de la industria que está siendo analizada. Entonces, un único modelo puede ser utilizado para representar diferentes equipos que tienen la misma estructura pero pueden tener diferentes condiciones (diferentes parámetros y especificaciones).

Los procesos pueden conectarse entre ellos para formar el *flowsheet* que es una abstracción de la industria real que se está analizando.

Los Modelos por otro lado son los encargados de definir las propiedades de cada proceso. En el lenguaje usado por EMSO, un modelo consiste en una abstracción matemática de algún equipo o proceso real. Cada modelo puede contener parámetros, variables, ecuaciones, condiciones iniciales, condiciones de límite y sub modelos.

### **7.3. Desarrollo**

Para lograr la integración con EMSO desarrollamos un programa Java que se encarga de *parsear* el contenido de los archivos generados por un proyecto EMSO y lo transforma en uno GAMS con nuestro modelo incluido. También se desarrolló una interfaz con Java Swing para facilitar la integración. Utilizamos Java y la librería GamsJavaApi.jar para completar el desarrollo y la integración con GAMS.

#### **7.3.1. Parser**

El programa consiste en interpretar el contenido de los archivos generados por EMSO y transformarlos en procesos, productos y relaciones legibles en el lenguaje utilizado por GAMS para poder crear un proyecto GAMS que contenga dicha información además de nuestro modelo matemático.

Existen ciertas diferencias en lo que respecta a la información que se utiliza en nuestro modelo y la que se utiliza en un proyecto EMSO. En un proyecto EMSO existe información que no se necesita para el modelo matemático y por lo tanto esta es ignorada en la transición. Los proyectos EMSO también carecen de información necesaria para correr el modelo matemático por lo que se necesita que el usuario pueda agregar esta información faltante de alguna manera luego de importar el proyecto EMSO.

Los archivos del tipo Model contienen identificadores para cada conducto de entrada y de salida del proceso definido de la siguiente manera:

```
in      i1 as conc_mol(Brief="Concentración de A");
in      i2 as conc_mol(Brief="Concentración de A");
```

```
out    o1 as conc_mol(Brief="Concentración de B");
out    o2 as conc_mol(Brief="Concentración de B");
```

Esto nos permite identificar más adelante qué procesos irán conectados entre sí para definir qué proceso entrega producto a otro y quién recibe.

En los archivos del tipo *flowsheet* se definen los procesos y las relaciones entre ellos, más específicamente, se muestra la relación entre los conductos de entrada y salida de los procesos.

La sección del archivo que define los procesos es la siguiente:

```
DEVICES
R1 as ProcesoTipo2;
R2 as ProcesoTipo1;
R3 as ProcesoTipo1;
R4 as ProcesoTipo2;
CAo as conc_mol;
```

R1, R2, R3, R4 y CAo son procesos definidos por el modelo que está a su derecha.

El *Parser* al reconocer los modelos, crea un Proceso con el nombre  $R_i$  y la estructura  $\text{ProcesoTipo}_i$ .

La sección del archivo que define las relaciones es la siguiente:

```
CONNECTIONS
CAo to R1.i1;
R1.o1 to R2.i1;
R1.o2 to R3.i1;
R2.o1 to R4.i1;
R3.o1 to R4.i2;
```

El *parser* interpreta estas líneas como una relación entre los conductos de entrada y salida de los procesos, indicando que un producto generado por un proceso se le entregará a otro proceso.

EMSO no define a los productos como entidades, pero nuestro modelo en lenguaje GAMS precisa de los productos y sus propiedades para funcionar. Es por esto que si bien no se conocen los productos que generan los procesos, se conocen las relaciones entre entradas y salidas de los procesos, pudiendo determinar cuáles procesos tienen productos iguales en sus conexiones y de esta manera definir un producto para estas conexiones.

A modo de ejemplo en el código anterior el proceso  $R_1$  libera por el conducto  $o_1$  un producto a  $R_2$  quien lo recibe por el conducto  $i_1$ . El *Parser* definirá a este producto como  $P_1$ .

Para que el modelo funcione también precisamos que los productos tengan la propiedad “valor” que determina el valor del producto. Como este dato no se encuentra en EMSO y no puede ser generado, se necesita una instancia donde el usuario asigne este valor al producto.

Así también, se necesitan otras propiedades de los procesos que no se encuentran en los archivos EMSO como ser el volumen del proceso, el costo fijo y variable de procesar los productos, las relaciones entre cantidades de entrada y salida de productos.

#### **7.4. Interfaz**

La GUI se creó con el objetivo de permitir al usuario interactuar con el diseño de la planta biorefinería. Además de permitir la importación de proyectos de EMSO, permite visualizar de manera simple e interactiva la solución generada por el modelo.

Consta de tres partes principales:

1. Una sección que permite crear una superestructura desde cero, cargar el diseño de una fábrica en formato GAMS o cargar un proyecto EMSO, para en todos los casos poder luego ser optimizada con el modelo matemático.
2. Una sección que le permite ver al usuario la estructura creada.
3. Una sección para visualizar la solución de manera simple e interactiva. En esta sección se muestra en forma de grafo dirigido la solución obtenida por el modelo matemático.

### 7.4.1. Imágenes

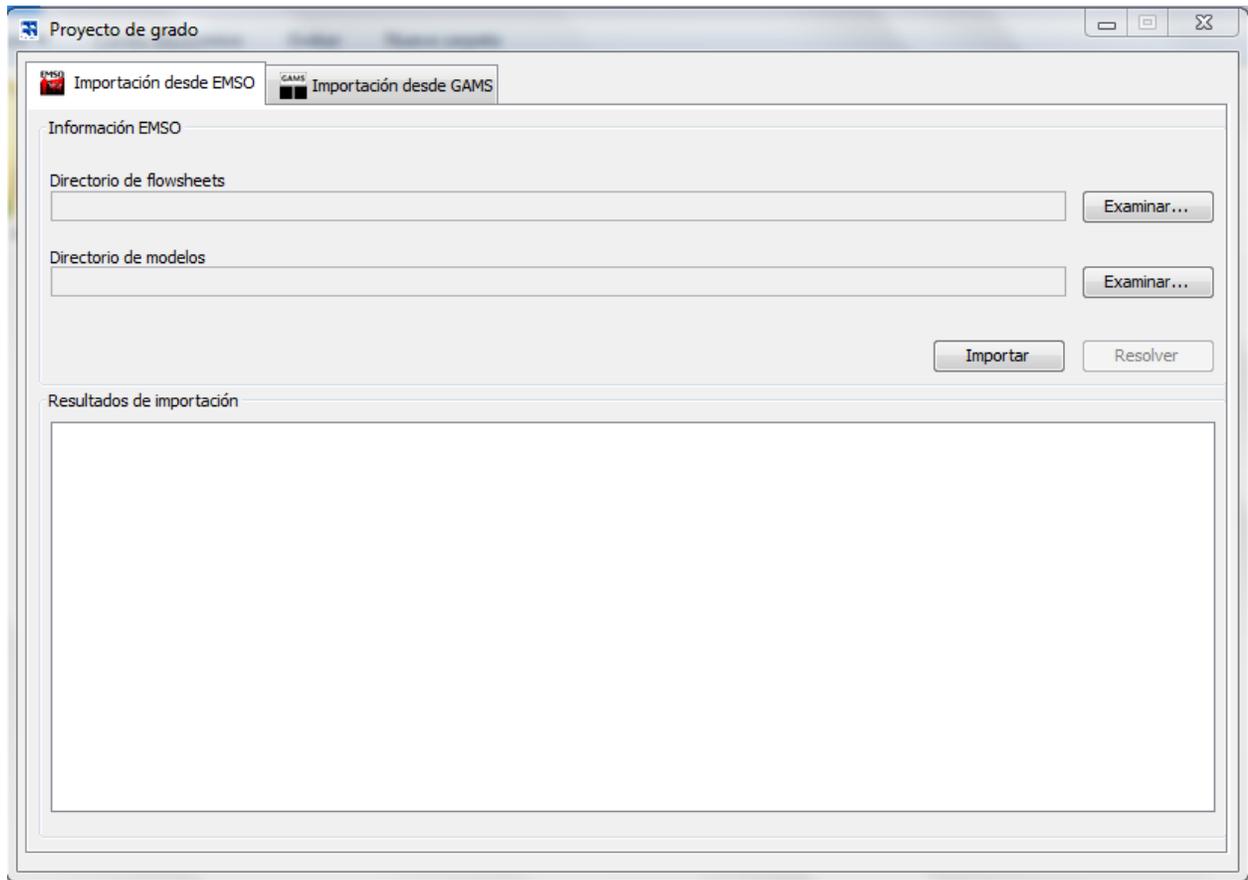


Fig. 4 Sección principal.

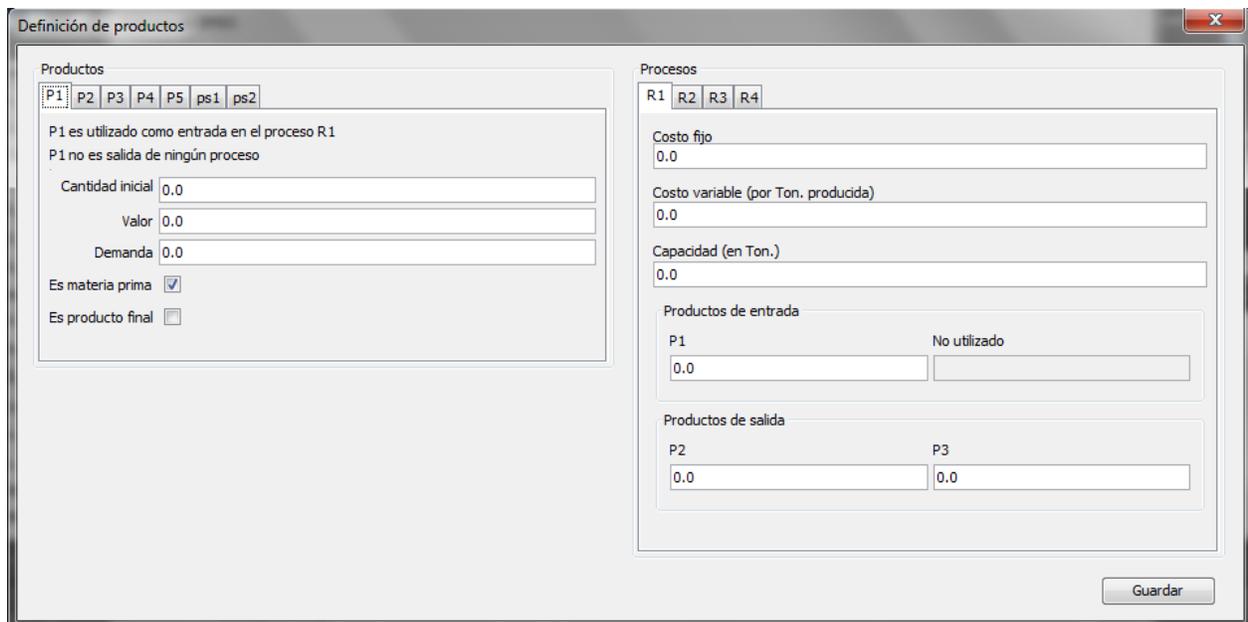


Fig. 5 Editor del modelo.

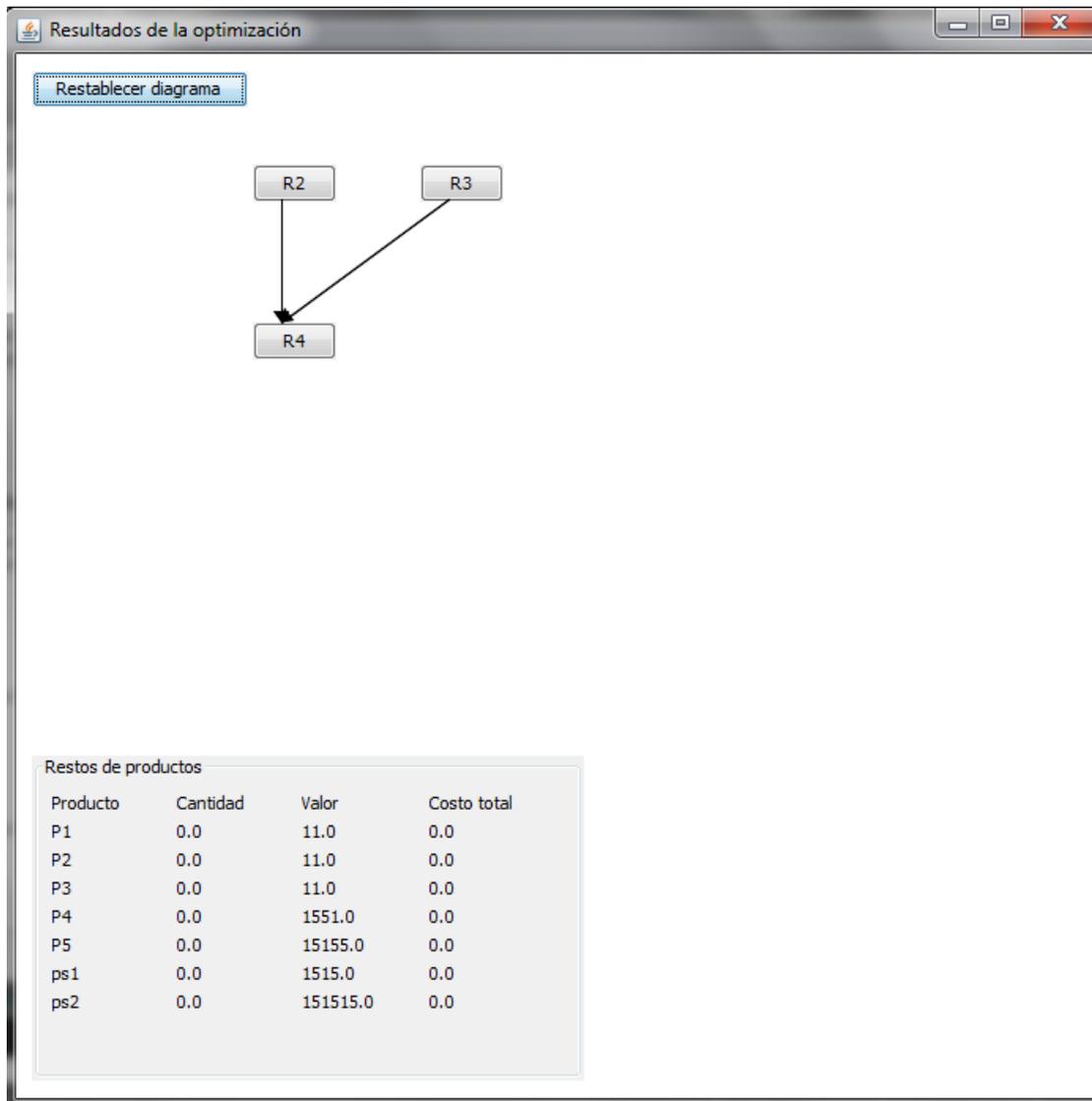


Fig. 6 Panel de resultados.

La pantalla principal de la GUI (Fig. 4) está diseñada para permitirle al usuario elegir entre tres opciones a la hora de crear una estructura. Mediante pestañas se separan las opciones:

**a. Importar modelo desde EMSO:** Permite al usuario cargar una estructura importado desde un proyecto EMSO. De esta manera el software se encarga de interpretar los archivos EMSO y crear una estructura acorde a éstos, simplificando el trabajo al usuario.

**b. Importar modelo desde GAMS:** Permite al usuario cargar una estructura importada desde un proyecto GAMS. De esta manera el software se encarga de interpretar el archivo GAMS y crear una estructura acorde a este, simplificando el trabajo al usuario.

**c. Crear modelo:** Esta opción permite al usuario crear una estructura desde cero.

Cualquiera sea la opción elegida por el usuario para crear la estructura, el siguiente paso es editarla. La figura 5 muestra el panel de edición de la estructura, interfaz utilizada por el usuario para editar la estructura cargada o creada. En la misma se permite agregar procesos y productos además de editar los parámetros relacionados a cada uno.

Luego de finalizada la edición el programa genera una estructura optimizada a partir de la estructura creada y muestra al usuario una pantalla con los datos de la solución (Fig.6). Esta pantalla permite al usuario interactuar con la estructura solución representada en forma de grafo dirigido. También se muestra una tabla con los datos de la solución.

### **Dificultades encontradas**

1. Si bien EMSO maneja procesos y las relaciones entre sus entradas y salidas, el sistema no maneja el concepto de producto como tal, esto significa que no se manejan variables como el costo de los productos (parámetros imprescindibles para nuestro modelo).
2. Los procesos de un proyecto EMSO no tienen por qué manejar variables que para nuestro modelo son imprescindibles, a modo de ejemplo un proceso podría no tener volumen.

### **Alternativas a las dificultades encontradas**

1. Nuestro modelo necesita ciertas variables para funcionar correctamente, algo que EMSO no maneja. Para esto se discutieron las siguientes alternativas:
  - a. Una solución para la importación de proyecto de EMSO es pedirle al usuario que en los modelos de EMSO agregue estos parámetros manualmente.
  - b. Otra solución es que luego de importar los procesos, pedir al usuario que ingrese en una interfaz estos parámetros.
2. Al igual que lo anterior las alternativas son
  - a. Exigir al usuario que para lograr una importación exitosa todos los procesos deben contener los parámetros necesarios.
  - b. Luego de importar los procesos, pedir al usuario que ingrese en una interfaz estos parámetros.

En ambos casos se optó por una interfaz.

## 8. Pruebas realizadas

### 8.1. Test 1

El Objetivo de este test es corroborar la selección de procesos utilizados generada por el modelo matemático. Dado el modelo de la Fig.7 se realizan cambios en los atributos de los procesos y se estudian los resultados.

**Modelo:** El modelo de la fig.7 consta de los productos p1, p2, p3 y ps y los procesos R1, R2, R3, R4 donde p1 es la materia prima (producto entrante en el proceso R1) y ps es el producto deseado (producto saliente del proceso R4).

Los procesos R2 y R3 tienen como entrada el producto p2 y como salida el producto p3

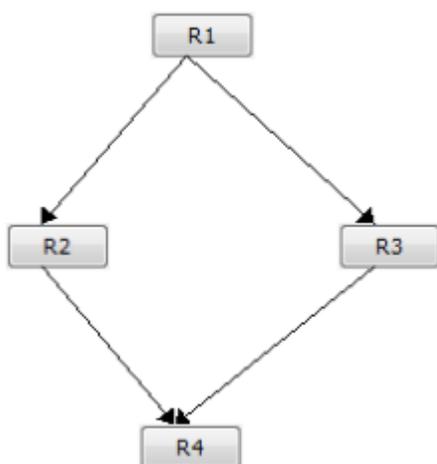


Fig. 7.

#### 8.1.1. Test 1.1

Para este test se utiliza el modelo de la Fig.7, Los procesos R2 y R3 son prácticamente iguales con la diferencia de que R2 tiene menor costo fijo. Esto debería generar menor costo de producción que el del proceso R3

#### Datos del Modelo:

Procesos	Costo fijo (USD)	Costo variable (USD/Ton)	Capacidad (Ton)
R1	5000	10	1000
R2	4000	10	1000

R3	5000	10	1000
R4	7000	10	1000

Productos	Cantidad inicial (Ton)	Costo de adq. (USD)	Valorización (USD)
p1	900	30	30
p2	0	-	-10
p3	0	-	5
ps	0	-	100

**Resultados:**



Fig. 8.

**Conclusiones:**

Los procesos R2 y R3 son prácticamente iguales con la diferencia de que R2 tiene menor costo fijo. Esto incide en el resultado ya que maximizar la ganancia implica disminuir los costos de producción. Es claro que utilizar R2 en vez de R3 disminuirá el costo de producción, por lo tanto el resultado es el esperado.

### 8.1.2. Test 1.2

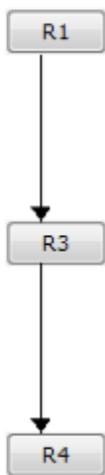
Para este test se utiliza el mismo modelo y los mismos datos que el test anterior, con una diferencia en el costo variable de R3. Se disminuye a la mitad el costo variable de R3, esto debería disminuir el costo de producción de R3.

#### Datos del Modelo:

Procesos	Costo fijo (USD)	Costo variable(USD/Ton)	Capacidad(Ton)
R1	5000	10	1000
R2	4000	10	1000
R3	5000	5	1000
R4	7000	10	1000

Productos	Cantidad inicial(Ton)	Costo de adq.(USD)	Valorización(USD)
p1	900	30	30
p2	0	-	-10
p3	0	-	5
ps	0	-	100

#### Resultados:



Restos de productos			
Producto	Cantidad	Valor	Beneficio total
p1	0.0	30.0	0,00
p2	0.0	-10.0	0,00
p3	0.0	5.0	0,00
ps	900.0	100.0	90000,00
Total de ingresos			90000,00
Costo de producción			66500,00
<b>Ganancia</b>			<b>23500,00</b>

Fig. 9.

**Conclusiones:**

Disminuir el costo variable (costo de procesar una tonelada) del proceso R3 genera una disminución en los costos de producción mucho mayor que la diferencia de costos fijos entre R2 y R3. Es por esto que si bien R3 tiene mayor costo fijo que R2, producir 900 toneladas con el proceso R3 reduce mucho más el costo de producción, lo cual es acorde con el resultado.

**8.1.3. Test 1.3**

Para este test se utiliza el mismo modelo y los mismos datos que el test anterior, con una diferencia en las capacidades de los procesos R2 y R3. Se reducen a la mitad las capacidades de R2 y R3, de este modo tanto R2 como R3 no pueden procesar las 900 toneladas de p2 por sí solos.

**Datos del Modelo:**

Procesos	Costo fijo (USD)	Costo variable (USD/Ton)	Capacidad (Ton)
R1	5000	10	1000
R2	4000	10	500
R3	5000	10	500
R4	7000	10	1000

Productos	Cantidad inicial (Ton)	Costo de adq. (USD)	Valorización (USD)
p1	900	30	30
p2	0	-	-10
p3	0	-	5
ps	0	-	100

## Resultados:

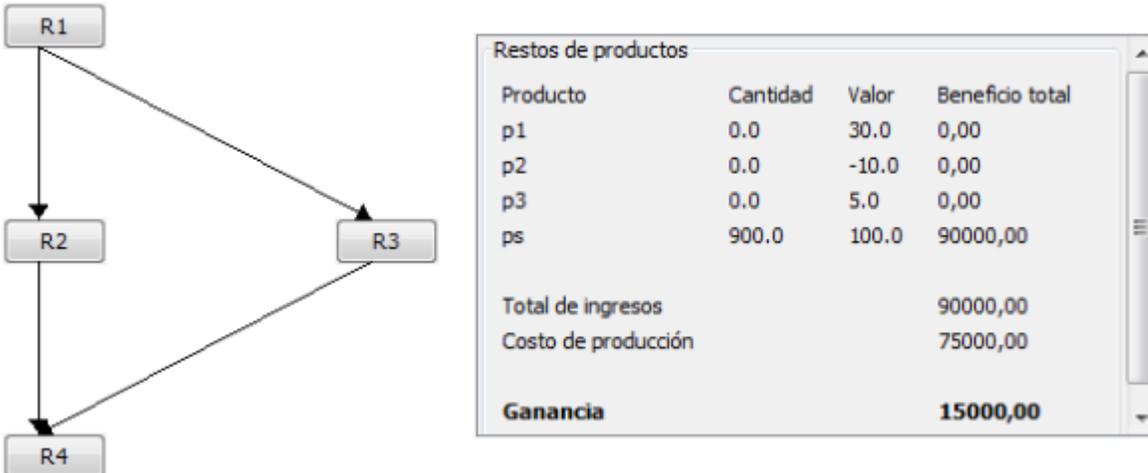


Fig. 10.

## Conclusiones:

Disminuir la capacidad de los procesos R2 y R3 a la mitad provoca que las 900 toneladas del producto saliente del proceso R1 no puedan ser procesadas por un único proceso, pues sus capacidades son menores a la cantidad de producto. Es por esto que se utilizan ambos procesos (R2 y R3) en conjunto para procesar las 900 toneladas, lo cual disminuirá la ganancia pues ahora se suman al costo de producción los costos fijos de ambos procesos en lugar del de uno solo (como en los test anteriores).

## 8.2. Test 2

El Objetivo de este test es corroborar la selección de procesos utilizados generada por el modelo matemático. Dado el modelo de la Fig.11 se realizan cambios en la cantidad inicial de materia prima y se estudian los resultados.

**Modelo:** El modelo de la fig.11 consta de los productos p1, p2, p3, p3, p4, p5 y ps y los procesos R1, R2, R3, R4, R5 donde p1 es la materia prima (producto entrante en el proceso R1) y ps es el producto deseado (producto saliente de los procesos R4 y R5).

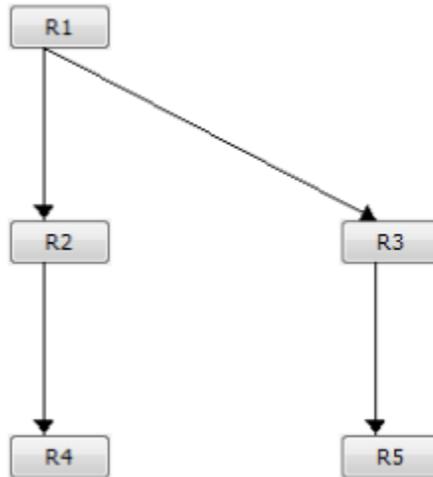


Fig. 11.

### 8.2.1. Test 2.1

Para este test se utiliza el modelo de la figura 11.

Dado el gran costo fijo que tiene el proceso R2, la producción generada con 1000 unidades de materia prima tiene un costo mucho mayor a la ganancia y por lo tanto no sería un proceso perteneciente a la solución.

#### Datos del Modelo:

Procesos	Costo fijo (USD)	Costo variable (USD/Ton)	Capacidad (Ton)
R1	5000	10	2000
R2	50.000	10	2000
R3	5000	10	2000
R4	4000	10	2000
R5	6000	10	2000

Productos	Cantidad inicial (Ton)	Costo de adq. (USD)	Valorización (USD)
p1	1000	25	25

p2	0	-	10
p3	0	-	5
P4	0		5
P5	0		5
ps	0	-	120

**Resultados:**

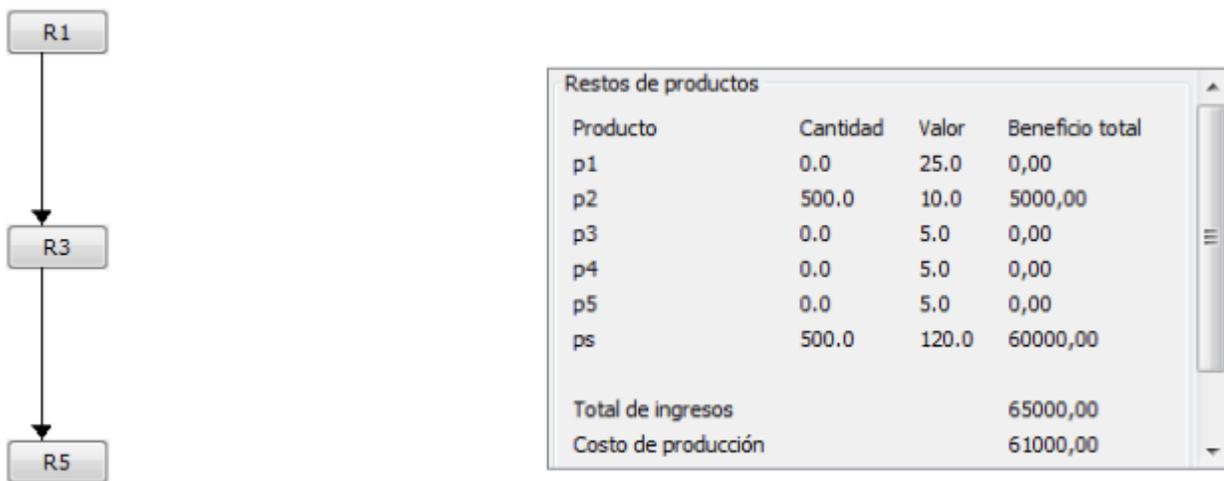


Fig. 12.

**Conclusiones:**

De las 1000 toneladas de materia prima se generan 500 del producto p2 al ser procesadas por R1. Estas 500 toneladas están a disposición del proceso R2 pero éste tiene un costo fijo tan elevado que procesar 500 unidades sumaría un costo de producción muy alto al costo total (el valor de vender 500 unidades de ps las cuales fueron generadas por procesar p2, es mucho menor al costo que tuvo producirlas). Es por esto que se descarta la utilización del proceso R2.

**8.2.2. Test 2.2**

Para este test se utiliza el modelo y los datos del test anterior con una diferencia en la cantidad inicial de materia prima. Si bien R2 tiene un costo fijo muy elevado, la relación entre el precio de adquisición de materia prima (USD 25) y el precio de venta del producto final (USD 120) es mucho menor, esto sugiere

que exista cierta cantidad producto final que cubra los gastos del procesamiento del proceso R2 y genere ganancia.

**Datos del Modelo:**

<b>Procesos</b>	<b>Costo fijo (USD)</b>	<b>Costo variable (USD/Ton)</b>	<b>Capacidad (Ton)</b>
R1	5000	10	2000
R2	50.000	10	2000
R3	5000	10	2000
R4	4000	10	2000
R5	6000	10	2000

<b>Productos</b>	<b>Cantidad inicial (Ton)</b>	<b>Costo de adq. (USD)</b>	<b>Valorización (USD)</b>
p1	2000	25	25
p2	0	-	10
p3	0	-	5
P4	0		5
P5	0		5
ps	0	-	120

## Resultados:

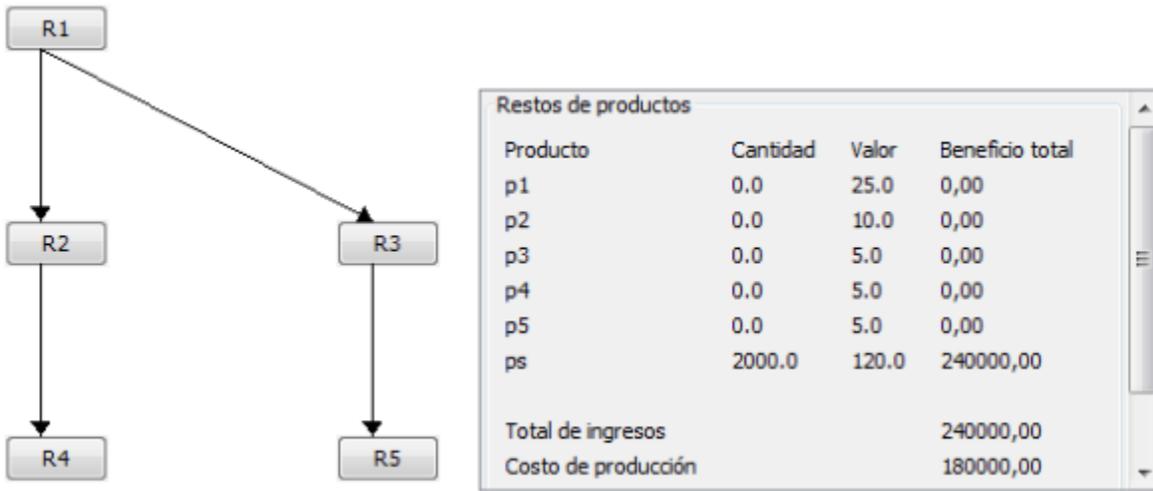


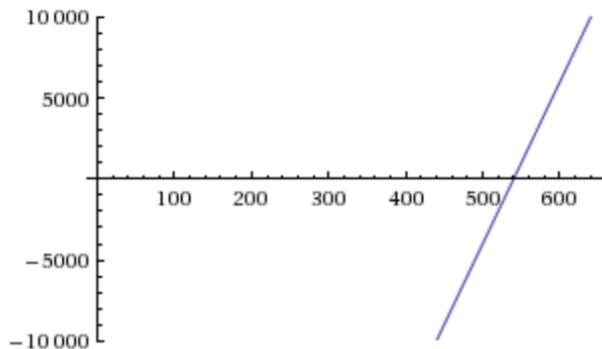
Fig. 13.

## Conclusiones:

De las 2000 toneladas de materia prima se generan 100 del producto p2 al ser procesadas por R1, estas 1000 toneladas quedan a disposición del proceso R2.

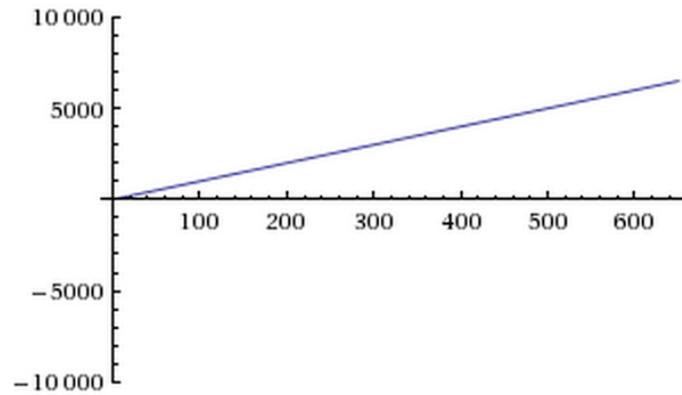
Si graficamos los costos de producción que tendría utilizar el proceso R2 y R4 entonces la gráfica cumpliría con la ecuación  $y = 120 \cdot x - 54.000 - 20 \cdot x$ , donde "x" es la cantidad de producto p2, "120\*x" es el valor obtenido de vender x unidades del producto final, 54.000 corresponde a los costos fijos de R2 y R4 y "20\*x" corresponde a los costos variables sumados de R2 y R4. Ver Fig.14.

Plot:



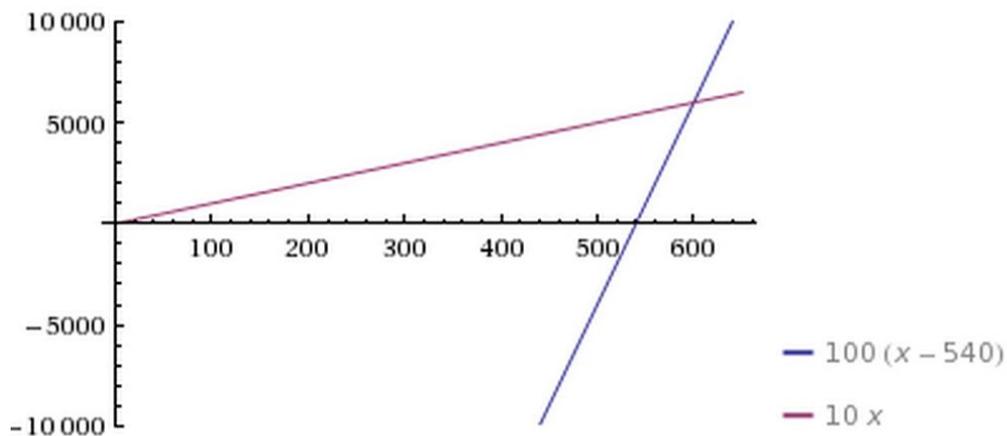
(Fig. 14) Gráfica de costos de producción en relación a cantidad de producto.

La gráfica de la figura 15 representa el valor obtenido de vender el producto p2 en vez de utilizarlo en el proceso R2.



(Fig. 15) Gráfica de valor obtenido por venta de producto p2.

Para que el modelo utilice al proceso R2 y genere ganancias entonces la cantidad de producto p2 necesaria para este fin tiene que ser mayor a la abscisa de la intersección de las gráficas de las figuras 14 y 15.



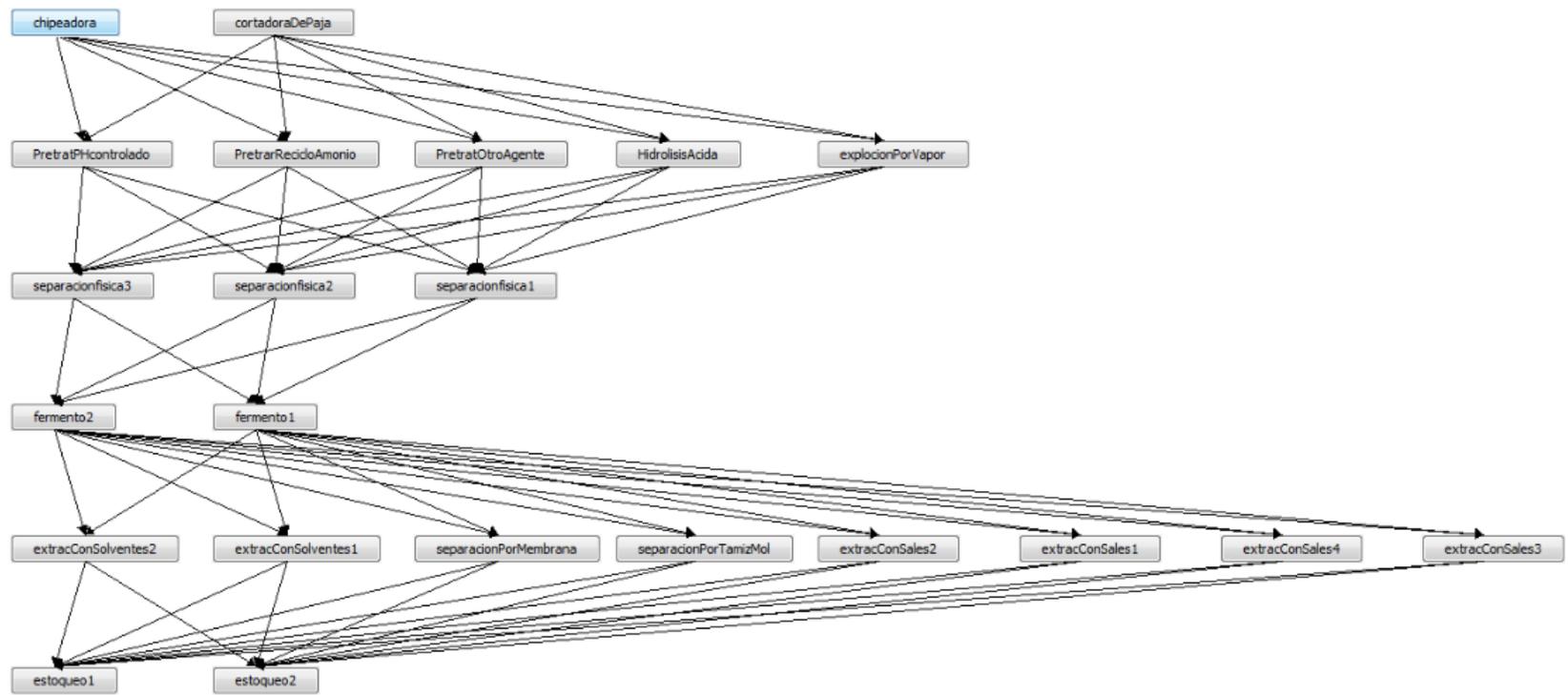
(Fig. 16) Gráfica Intersección de Fig. 14 y Fig. 15.

Por lo tanto si se tiene más de 600 toneladas de p2, utilizar al proceso R2 aumentaría las ganancias. Para lograr 600 toneladas de p2 se necesitan 1200 toneladas de materia prima. Al utilizar 2000 toneladas de materia prima se incluye a los procesos R2 y R4 como parte de la solución como era de esperarse.

### 8.3. Test 3: Modelo propuesto por Instituto de Ingeniería Química

El Objetivo de estos test es corroborar el resultado obtenido al utilizar el modelo propuesto por la contraparte.

**Modelo:** El modelo de la fig. 17 representa el modelo completo propuesto por el Instituto de Ingeniería Química, donde los productos eucalipto y pasto son materia prima, y los productos etanol absoluto y etanol98 son los productos finales deseados.



(Fig. 17) Modelo de la contraparte – Información detallada de la superestructura, ver Fig. 2 de la sección 3.4.

### 8.3.1. Prueba con datos estimados

Nota: los datos presentados a continuación son estimaciones hechas por parte de los autores en base al estado actual de la industria obtenido de diversas fuentes, la solución del problema está sujeta a que los datos de entrada sean realistas y completos, ya que en algunos casos los datos aquí presentes son ficticios o supuestos.

#### Datos del Modelo:

#### Costos fijos, costos variables y capacidades de los procesos:

Proceso	Costo fijo (USD)	Costo variable (USD/Ton)	Capacidad (Ton)
Chipeadora	6000	1,44	180.160
Cortadora De Paja	3950	1,05	140.800
Explosión Por Vapor	2000	1,7	200.000
Hidrólisis Ácida	1800	1,68	100.000
Pre tratamiento PH Controlado	500	1,88	100.000
Pre tratamiento Reciclo Amonio	700	2,5	100.000
Pre tratamiento Otro Agente	800	2	100.000
Separación Física 1	1100	2,1	80.000
Separación Física 2	1300	2,2	90.000
Separación Física 3	1200	0,8	70.000
Fermento 1	400	0,7	120.000

Fermento 2	350	0,63	120.00
Extracción Con Sales 1	2000	1,1	110.000
Extracción Con Sales 2	1800	1,2	110.000
Extracción Con Sales 3	1600	1,3	110.000
Extracción Con Sales 4	1400	1,4	110.000
Extracción Con Solventes 1	1700	1,8	100.000
Extracción Con Solventes 2	1600	2,0	100.000
Separación Por Membrana	1000	2,2	130.000
Separación Por Tamiz. Mol	3700	0,95	120.000
Estoqueo 1	780	1,8	150.000
Estoqueo 2	790	1,2	150.000

Tabla 1.

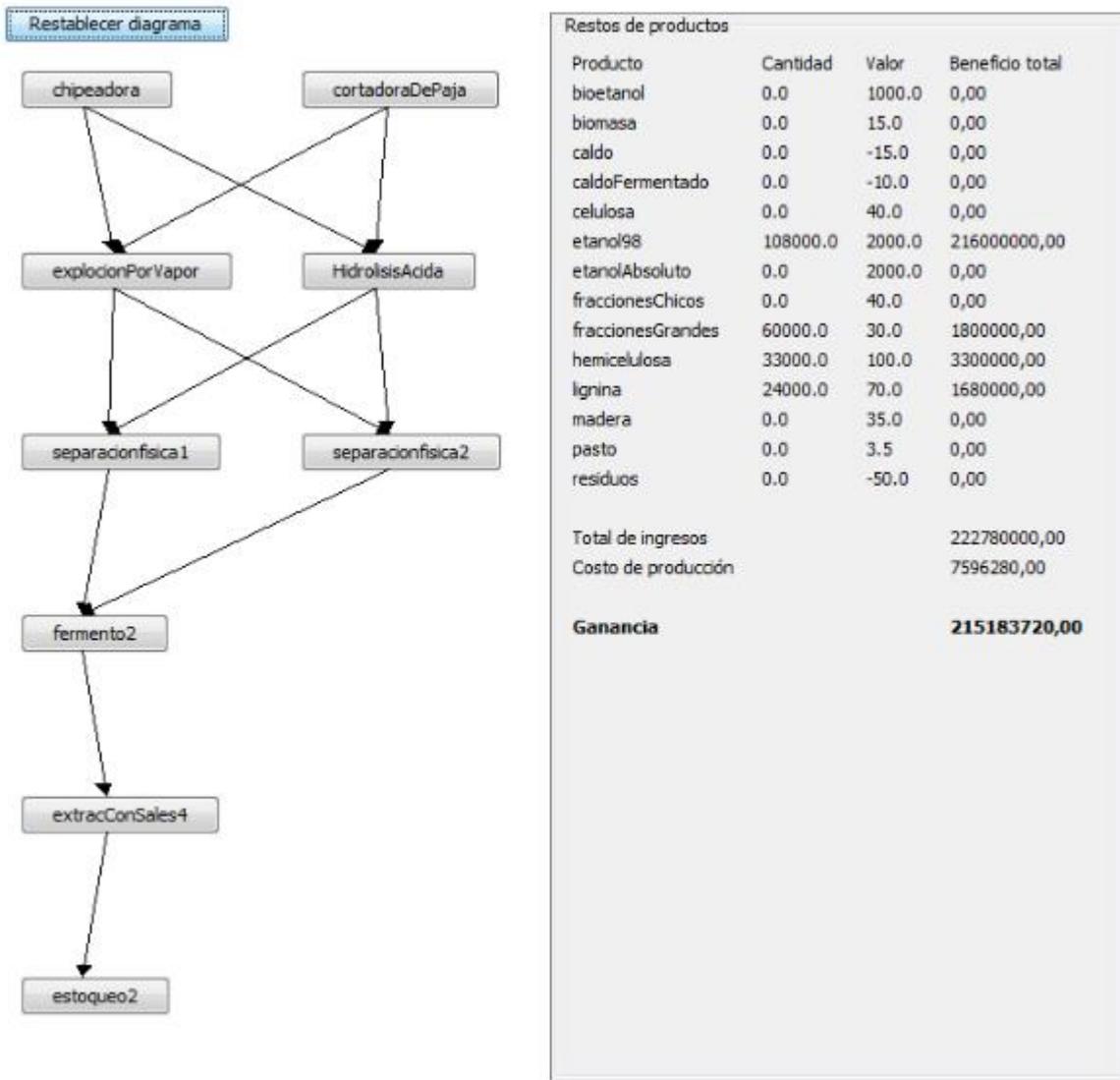
**Cantidades iniciales, costos y valorización de los productos:**

<b>Productos</b>	<b>Cantidad inicial (Ton)</b>	<b>Costo (USD)</b>	<b>Valorización (USD)</b>
Madera	150.000	40	35
Pasto	75.000	4	3,5
Fracciones Chicas	0	0	40
Fracciones Grandes	0	0	30

Caldo	0	0	-15
Celulosa	0	0	40
Lignina	0	0	70
Hemicelulosa	0	0	100
Caldo Fermentado	0	0	-10
Bioetanol	0	0	1000
Biomasa	0	0	15
Residuos	0	0	-50
Etanol Absoluto	0	0	2000
Etanol 98	0	0	2000

Tabla 2.

**Resultados:**



(Fig. 18) Resultado del modelo propuesto por el Instituto de Ingeniería Química.

La interfaz gráfica provee un menú contextual al ubicar el puntero sobre un proceso el cual contiene información relativa al proceso en sí y a los productos de entrada y de salida tal como se aprecia en la figura 19.

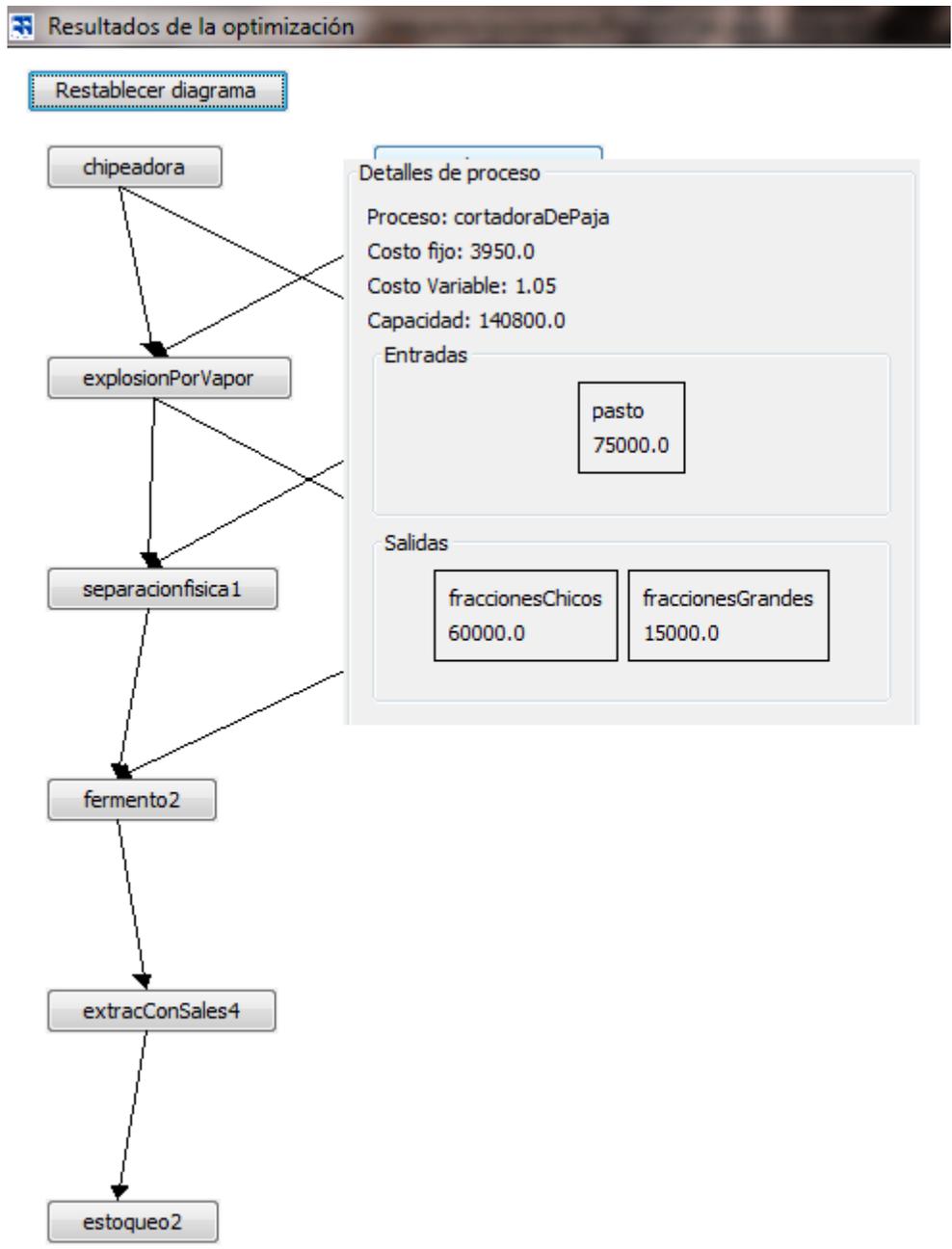


Fig. 19 – Detalle de proceso en solución óptima.

**Conclusiones:**

Dada la cantidad de productos iniciales (materia prima) y las capacidades de los procesos que consumen los productos fracciones chicas y grandes, se ve que la cantidad total de producto de fracciones chicas y fracciones grandes superan la capacidad de cualquiera de los procesos mencionados por lo tanto es de

esperar que se utilicen más de un proceso para procesar dichos productos. Esto concuerda con la solución pues se utilizan los procesos Explosión por Vapor e Hidrólisis ácida para procesar las fracciones chicas y grandes. Lo mismo sucede con la relación entre las capacidades de los procesos que consumen el producto caldo y las cantidades de caldo disponible, efectivamente se utilizan dos procesos para procesar el caldo en la solución.

Para la selección de los procesos que consumen celulosa, como la cantidad de celulosa no supera las capacidades de los procesos y teniendo en cuenta que todos estos procesos producen lo mismo (caldo fermentado), la decisión se basa en cuál de los procesos tiene menor costo de producción, este proceso es fermento<sup>2</sup> lo cual es coherente con el resultado. Para los últimos dos procesos del grafo y partiendo de la base de que las cantidades de producto no superan las capacidades, es de esperar que se elija el camino que genere mayor cantidad de etanol absoluto dado que es el que generará mayor ganancia, y por lo tanto pertenecerán a la solución estoqueo<sup>2</sup> y el proceso que genere mayor cantidad de producto bioetanol, lo cual es coherente con el resultado.

### 8.3.2. Prueba con datos provistos por Instituto de Ingeniería Química

Nota: los datos presentados a continuación son estimaciones en base al estado actual de la industria, la solución del problema está sujeta a que los datos de entrada sean realistas y completos, ya que en algunos casos los datos aquí presentes son ficticios o supuestos.

#### Datos del Modelo:

#### Costos fijos, costos variables y capacidades de los procesos:

Proceso	Costo fijo(USD)	Costo variable (USD/Ton.)	Capacidad (Ton./año)
Chipeadora	35.000	30	61.320
Cortadora De Paja	10.000	10	105.120
Explosión Por Vapor	15.0000	60	153.300
Hidrólisis Ácida	5.000	80	45.990
Pre tratamiento PH Controlado	5.000	40	45.990
Pre tratamiento Reciclo	6.000	40	45.990

Amonio			
Pre tratamiento Otro Agente	8.000	45	45.990
Separación Física 1	2.000	2	24.528
Separación Física 2	50.000	2,5	30.660
Separación Física 3	15.000	3	40.660
Fermento 1	5.000	3,1	45.990
Fermento 2	5.000	2,7	45.990
Extracción Con Sales 1	15.000	10	45.990
Extracción Con Sales 2	16.000	12	45.990
Extracción Con Sales 3	17.000	13	45.990
Extracción Con Sales 4	20.000	14	45.990
Extracción Con Solventes 1	8.000	55	45.990
Extracción Con Solventes 2	8.500	50	45.990
Separación Por Membrana	10.000	30	40.660
Separación Por Tamiz. Mol	20.000	30	40.660
Estoqueo 1	12.500	300	5.256
Estoqueo 2	10.500	310	5.256

Tabla 3.

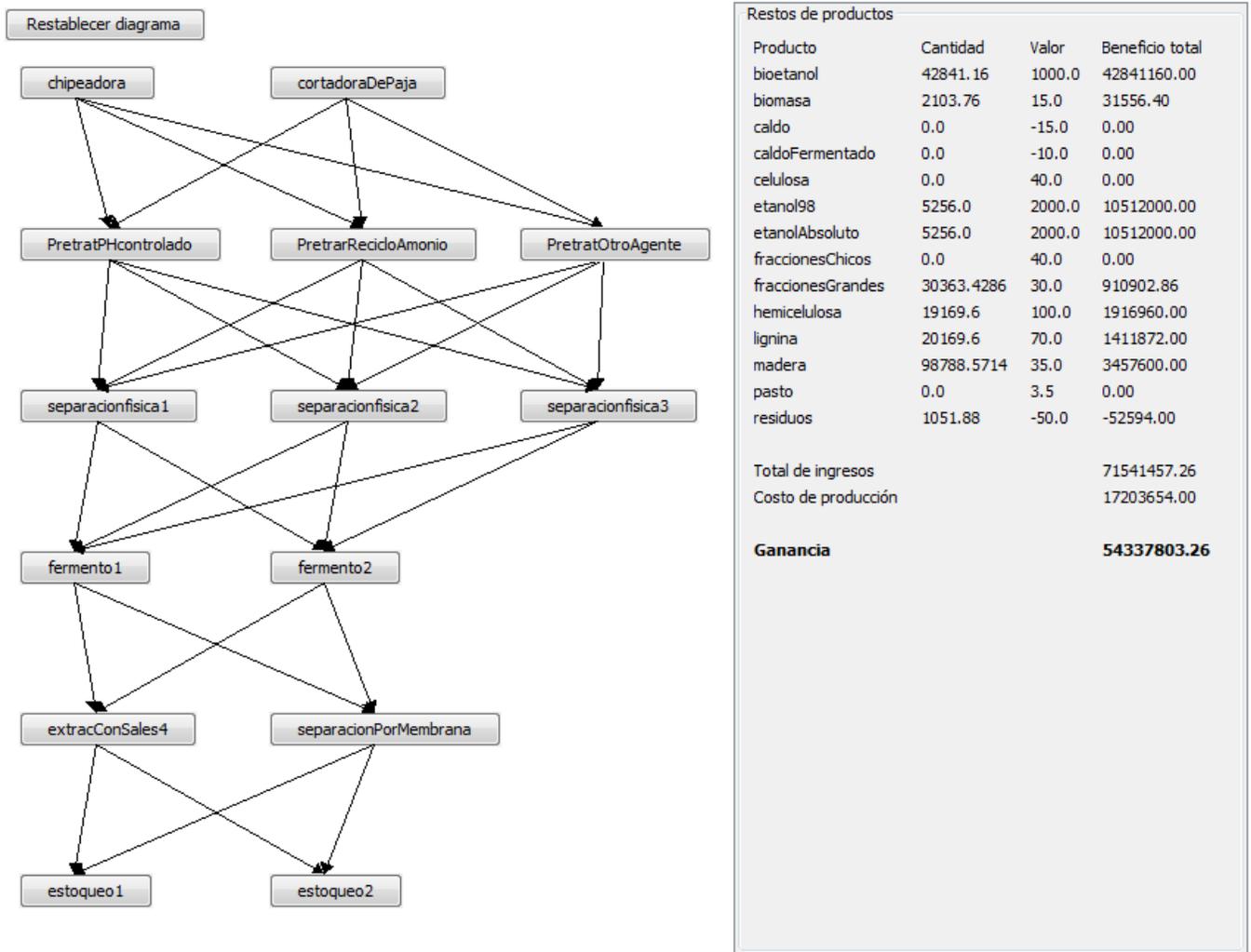
**Cantidades iniciales, costos y valorización de los productos:**

Productos	Cantidad inicial(Ton)	Costo(USD)	Valorización(USD)
Madera	150.000	40	35
Pasto	75.000	4	3,5
Fracciones Chicas	0	0	40
Fracciones Grandes	0	0	30

Caldo	0	0	-15
Celulosa	0	0	40
Lignina	0	0	70
Hemicelulosa	0	0	100
Caldo Fermentado	0	0	-10
Bioetanol	0	0	1000
Biomasa	0	0	15
Residuos	0	0	-50
Etanol Absoluto	0	0	2000
Etanol 98	0	0	2000

Tabla 4.

**Resultados:**



(Fig. 20) Resultado del modelo propuesto por el Instituto de Ingeniería Química.

A continuación se presentan los detalles de los procesos del modelo en régimen de producción con sus respectivas entradas, salidas, flujos de productos, capacidades y costos. Todos los costos se expresan en dólares americanos y las capacidades, y cantidades en toneladas.

# Etapa de chipeo físico



Fig. 21.

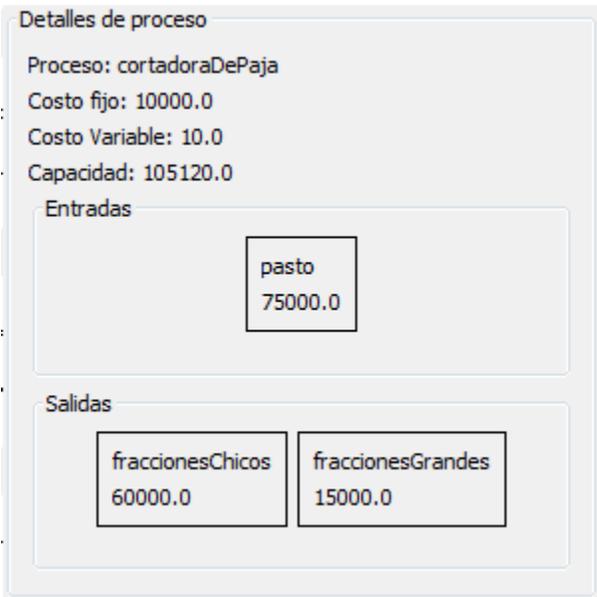


Fig. 22.

## Etapa de pre tratamiento

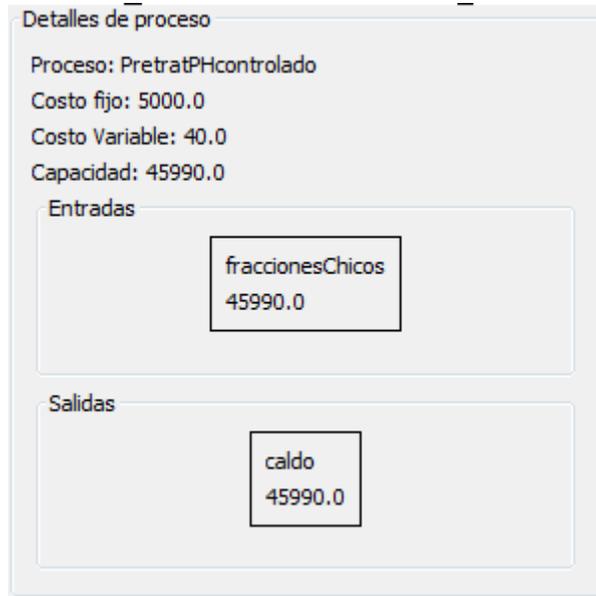


Fig. 23.

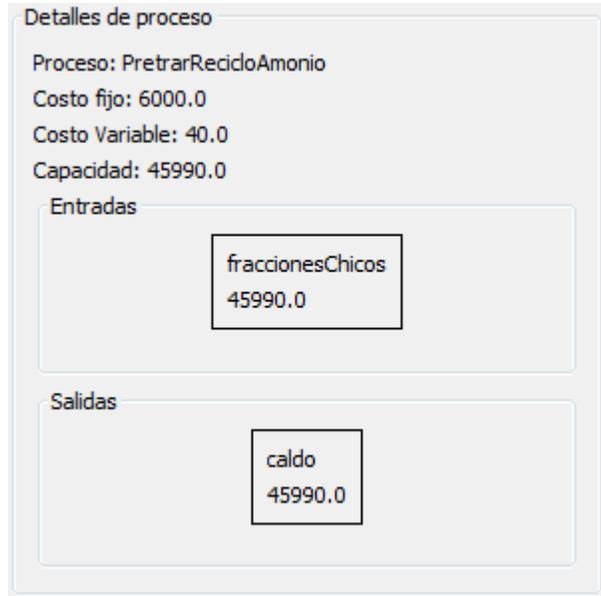


Fig. 24.

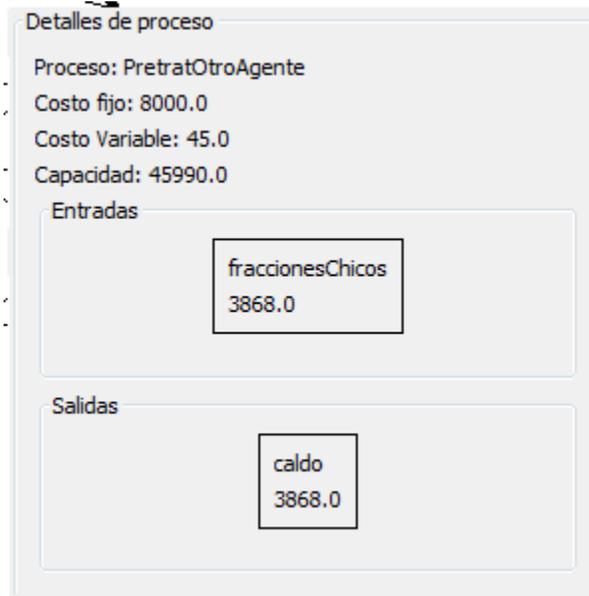


Fig. 25.

## Etapa de separación física

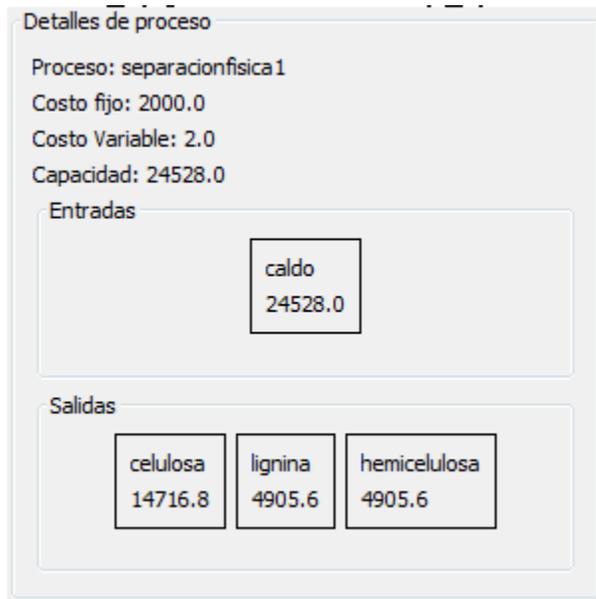


Fig. 26.

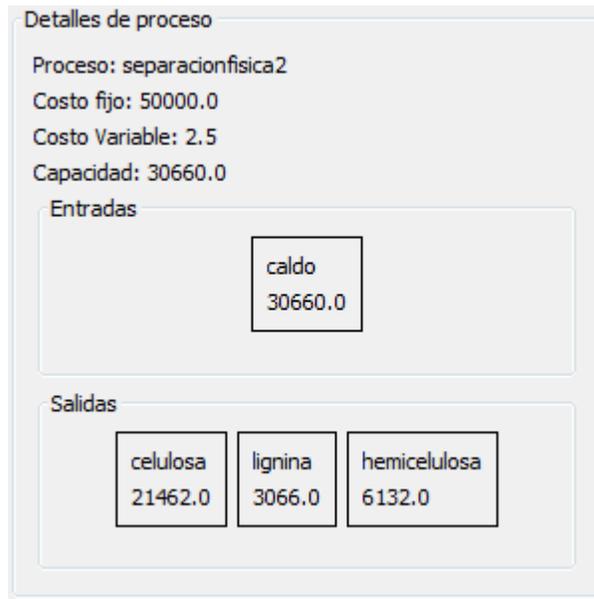


Fig. 27.

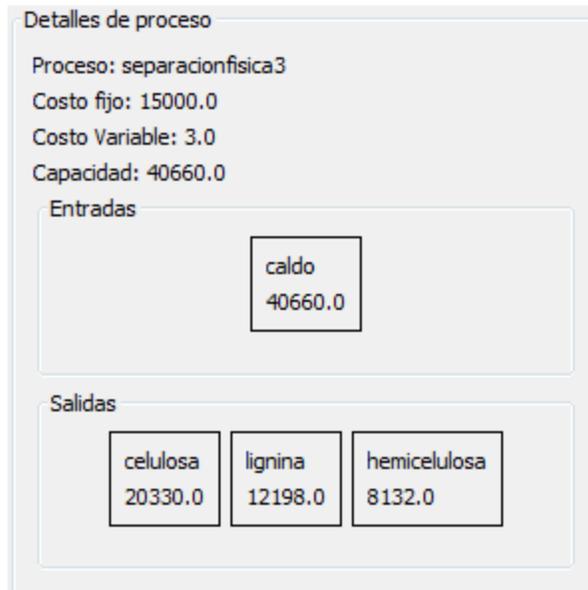


Fig. 28.

## Etapa de fermentación

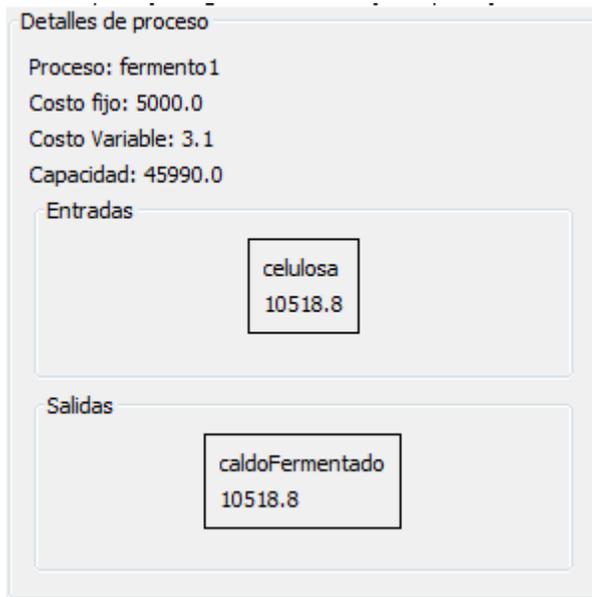


Fig. 29.

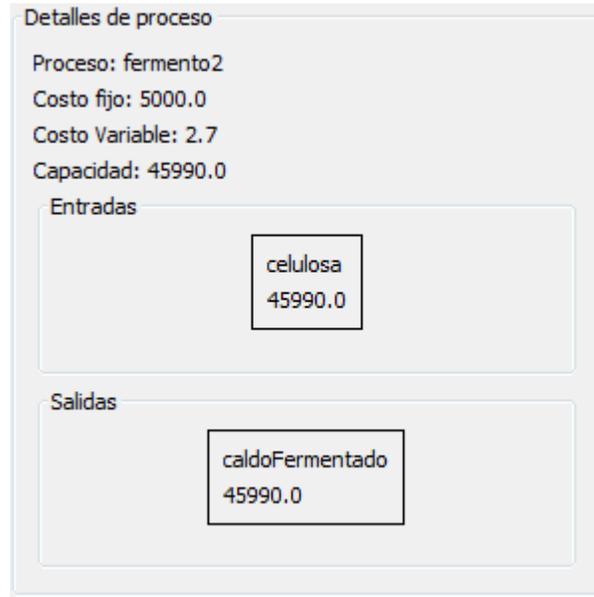


Fig. 30.

## Etapa de separación

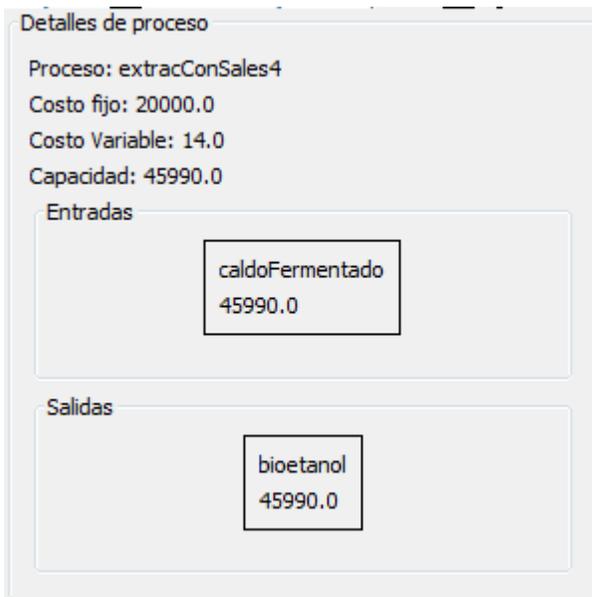


Fig. 31.

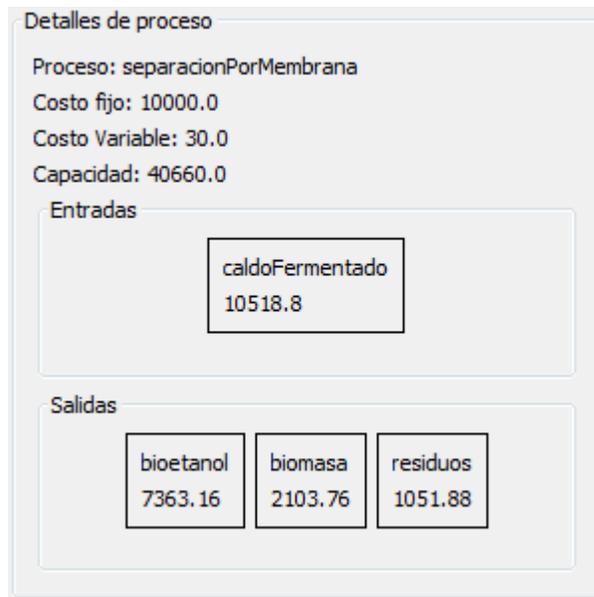


Fig. 32.

## Etapa de estoqueo

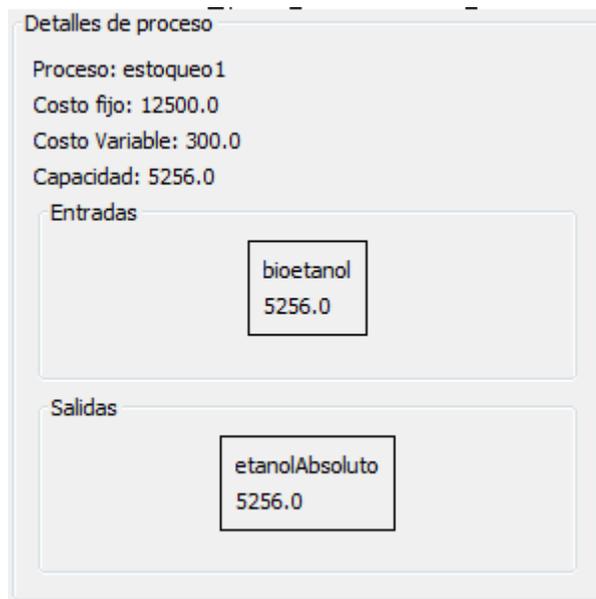


Fig. 33.



Fig. 34.

### Conclusiones:

Los resultados obtenidos muestran un cuello de botella en los procesos estoqueo1 y estoqueo2 porque los insumos colman sus respectivas capacidades (Ver Fig. 33 y Fig. 34). Esto implica que no es posible producir más cantidad de etanol o etanol98 del que se produjo. Igualmente, los procesos anteriores (Extracción con sales4 y Separación por membrana) trabajan a máxima capacidad y a máximo consumo de insumo disponible respectivamente para obtener bioetanol, pues este producto tiene una valorización mayor al costo de producción del mismo (Ver Fig. 31 y Fig. 32). La primera etapa de separación también muestra un cuello de botella, pues los insumos colman las capacidades de todos los procesos de dicha etapa (Ver Fig. 26, Fig. 27 y Fig. 28). Esto genera, no conveniente la producción de una mayor cantidad de caldo puesto a que tiene una valorización negativa y todos los procesos de la etapa de pre tratamiento producen únicamente caldo. Debido a lo anterior y a que vender la madera sin procesar es más conveniente que vender las fracciones chicas y grandes procesándola, se produce un excedente de madera.

## 9. Conclusiones

En este proyecto se estudió el problema de la planificación de una biorefinería, se buscó formular el problema como un modelo matemático de optimización y se llevó dicho modelo a un lenguaje algebraico. A partir de este modelo se construyó una herramienta que permite la definición y resolución de diferentes instancias, brindando una herramienta con importantes beneficios para la planificación de una biorefinería.

La utilización de modelos matemáticos ayuda a tomar dos tipos de decisiones:

- Decisiones estratégicas: son decisiones de una sola vez como puede ser el diseño de una biorefinería, las mismas tienen consecuencias a largo plazo para la organización.
- Decisiones operacionales: Es una decisión que implica cuestiones de planeación a corto plazo que generalmente deben hacerse repetidas veces como puede ser la modificación de un determinado proceso o un cambio de materia prima.

La herramienta que se brinda, sirve de apoyo en la toma de estos dos tipos de decisiones, pudiendo obtener el modelo de la planta biorefinería óptimo para las condiciones que se plantean, además de otorgar una herramienta ágil para el análisis de las diferentes alternativas de procesos debido a su simplicidad de modelado y facilidad de modificación de la superestructura. De esta manera se logró construir una herramienta capaz de aportar valor a la hora de elegir el diseño de una biorefinería debido a que esta, matemáticamente, brinda la solución óptima.

El foco principal a lo largo de todo el proyecto fue la construcción, verificación y validación del modelo matemático. Luego se tradujo a un lenguaje algebraico para su posterior ejecución, para esto se utilizó la potente herramienta GAMS. El uso de la herramienta GAMS para la traducción del lenguaje algebraico permite una completa y simple visualización de las características de la solución obtenida. GAMS separa los datos de estructura matemática del modelo lo que facilita la reformulación continua del modelo sin alterar los datos. Permite construir grandes modelos mantenibles que se pueden adaptar rápidamente a nuevas realidades.

A la hora de interoperar con sistemas externos se presentaron dos principales alternativas ASPEN y EMSO. Los archivos que genera EMSO presentan un formato estructurado y son sencillos de interpretar, con una estructura similar a la de GAMS, lo que permitió lograr una traducción de un modelo generado en EMSO a un modelo en nuestra herramienta. Por otra parte, ASPEN presenta una estructura de archivos compleja de interpretar por lo cual, se optó integrarse sólo con EMSO.

Contar con este tipo de interoperabilidad permite la reutilización de modelos y estructuras ya definidas en otro sistema, de manera tal de evitar esfuerzo adicional por re trabajo.

Para facilitar aún más la interacción del usuario con el sistema, se construyó una interfaz gráfica que permite crear nuevos modelos, editar modelos ya existentes, cargar modelos de archivo para luego poder visualizar tanto la superestructura como la solución óptima, así como un conjunto de datos de flujos, costos, cantidades utilizadas, rendimientos y ganancia neta, entre otros, dando una visión global de la solución, de manera gráfica.

El trabajo en conjunto con el Instituto de Ingeniería Química brindó al proyecto un punto de vista especializado en el área, que nos permitió la construcción de un modelo más cercano a la realidad con el cual se pudo verificar y validar el modelo matemático.

Si bien el proyecto apunta a optimizar el diseño de una biorefinería, el modelo construido está pensado para ser escalable y poder resolver diferentes problemas de otras áreas con un dominio similar.

### **Líneas futuras**

- Realizar las modificaciones necesarias en el modelo matemático para contemplar los casos de períodos de zafra.
- Ampliar el alcance de la interoperabilidad entre nuestra solución y EMSO.
- Integrar ASPEN.
- Agregado de variables de la realidad de la industria, tales como volumen físico de maquinaria, disposición física, costos operativos de la industria entre otros.
- Estudiar la adaptabilidad del modelo propuesto en otros rubros e industrias.
- Definir diferentes funciones objetivo.

## 10. Referencias

- [1] Revista Mexicana de Ingeniería Química, 2010. [En línea]. Available: <http://www.scielo.org.mx/pdf/rmiq/v9n3/v9n3a4.pdf>.
- [2] Bao BP, Ng DKS, Tay DHS, Jimenez-Gutierrez A, El-Halwagi MM. A shortcut method for the preliminary synthesis of process-technology pathways: an optimization approach and application for the conceptual design of integrated biorefineries, *Comput Chem Eng* 2011;35:1374.
- [3] Linear Programming, [En línea]. Available: [http://en.wikipedia.org/wiki/Linear\\_programming](http://en.wikipedia.org/wiki/Linear_programming).
- [4] Rosenthal, Richard E. GAMS User Guide, 5 2015. [En línea]. Available: <http://www.gams.com/dd/docs/bigdocs/GAMSUsersGuide.pdf>.
- [5] Soares, Rafael de Pelegrini. Manual de EMSO, 6 9 2006. [En línea]. Available: <http://vrtech.com.br/rps/pub/Manual.pdf>.
- [6] «General Algebraic Modeling System Wikipedia,» [En línea]. Available: [http://es.wikipedia.org/wiki/General\\_Algebraic\\_Modeling\\_System](http://es.wikipedia.org/wiki/General_Algebraic_Modeling_System).
- [7] Branch and cut, [En línea]. Available: [http://en.wikipedia.org/wiki/Branch\\_and\\_cut](http://en.wikipedia.org/wiki/Branch_and_cut).
- [8] R. de P. Soares and A.R.Secchi EMSO. A New Environment for Modelling, Simulation and Optimisation, [En línea]. Available: <http://vrtech.com.br/rps/pub/Escape13.pdf>.
- [9] GAMS, [En línea]. Available: <http://www.gams.com>.
- [10] Aspen Sitio web, [En línea]. Available: <http://www.aspentech.com/products/aspenONE/>.
- [11] EMSO Sitio web, [En línea]. Available: <http://vrtech.com.br/rps/emso.html>.
- [12] J. Trigo, Alejandro Mentaberry, Eugenio J. Cap, Alicia Zelada y Federico Villarreal. El potencial de la bioeconomía y las biorrefinerías, 2011. [En línea]. Available: [http://www.argentinainnovadora2020.mincyt.gob.ar/?wpfb\\_dl=25](http://www.argentinainnovadora2020.mincyt.gob.ar/?wpfb_dl=25).
- [13] Israel Rodríguez-Picos, Eusiel Rubio-Castro, Jesús Raúl Ortiz-del-Castillo, Oscar M. Hernández-Calderón, Medardo Serna-González, José M. Ponce-Ortega. Diseño óptimo de biorefinerías utilizando biomasa de algas, 10 5 2013. [En línea]. Available: [http://sistemanodalsinaloa.gob.mx/archivoscomprobatorios/\\_15\\_memoriaextenso/738.pdf](http://sistemanodalsinaloa.gob.mx/archivoscomprobatorios/_15_memoriaextenso/738.pdf).



## 11. Anexos

### 11.1. Código GAMS

Resolución del problema planteado por los usuarios utilizando el modelo matemático.

#### SETS

**K** process /chipeadora, cortadoraDePaja, explosionPorVapor, HidrolisisAcida, PretratPHcontrolado, PretrarRecicloAmonio, PretratOtroAgente, separacionfisica1, separacionfisica2, separacionfisica3, fermento1, fermento2, extracConSales1, extracConSales2, extracConSales3, extracConSales4, extracConSolventes1, extracConSolventes2, separacionPorMembrana, separacionPorTamizMol, estoqueo1, estoqueo2/

**J** products /pasto, madera, fraccionesChicos, fraccionesGrandes, caldo, celulosa, lignina, hemicelulosa, caldoFermentado, bioetanol, biomasa, residuos, etanolAbsoluto, etanol98/

**Jp(J)** j prima copia del J /pasto, madera, fraccionesChicos, fraccionesGrandes, caldo, celulosa, lignina, hemicelulosa, caldoFermentado, bioetanol, biomasa, residuos, etanolAbsoluto, etanol98/;

#### PARAMETERS

**c(K)** costos variables de los procesos

/chipeadora	30
cortadoraDePaja	10
explosionPorVapor	60
HidrolisisAcida	80
PretratPHcontrolado	40
PretrarRecicloAmonio	40
PretratOtroAgente	45
separacionfisica1	2
separacionfisica2	2.5
separacionfisica3	3
fermento1	3.1
fermento2	2.7
extracConSales1	10
extracConSales2	12
extracConSales3	13

extracConSales4	14
extracConSolventes1	55
extracConSolventes2	50
separacionPorMembrana	30
separacionPorTamizMol	30
estoqueo1	300
estoqueo2	310/

**f(K)** costos fijos de los procesos

/chipeadora	35000
cortadoraDePaja	10000
explosionPorVapor	150000
HidrolisisAcida	5000
PretratPHcontrolado	5000
PretrarRecicloAmonio	6000
PretratOtroAgente	8000
separacionfisica1	2000
separacionfisica2	50000
separacionfisica3	15000
fermento1	5000
fermento2	5000
extracConSales1	15000
extracConSales2	16000
extracConSales3	17000
extracConSales4	20000
extracConSolventes1	8000
extracConSolventes2	8500
separacionPorMembrana	10000
separacionPorTamizMol	20000
estoqueo1	12500
estoqueo2	10500/

**cap(K)** capacidades de los procesos

/chipeadora	61320
cortadoraDePaja	105120

explosionPorVapor	153300
HidrolisisAcida	45990
PretratPHcontrolado	45990
PretrarRecicloAmonio	45990
PretratOtroAgente	45990
separacionfisica1	24528
separacionfisica2	30660
separacionfisica3	40660
fermento1	45990
fermento2	45990
extracConSales1	45990
extracConSales2	45990
extracConSales3	45990
extracConSales4	45990
extracConSolventes1	45990
extracConSolventes2	45990
separacionPorMembrana	40660
separacionPorTamizMol	40660
estoqueo1	5256
estoqueo2	5256/

**EsPrima(J)** costos variables de los procesos

/pasto 1  
madera 1/

**a(J)** costo de adquisicion del producto j

/pasto 4  
madera 40/

**EsProdFinal(J)** devuelve 1 si un producto es final

/etanolAbsoluto 1  
etanol98 1/

**Demanda(J)** devuelve la demanda a cubrir de los productos finales

/etanolAbsoluto 100

etanol98                    0/

**v(J)** devuelve el valor de un producto. Es el valor de desacarte de un producto sobrante. en el caso de la materia prima es el valor de compra.

/pasto	3.5
madera	35
fraccionesChicos	40
fraccionesGrandes	30
caldo	-15
celulosa	40
lignina	70
hemicelulosa	100
caldoFermentado	-10
bioetanol	1000
biomasa	15
residuos	-50
etanolAbsoluto	2000
etanol98	2000/

**s(J)** cantidades iniciales con la que empieza la fabrica

/pasto	75000
madera	150000
fraccionesChicos	0
fraccionesGrandes	0
caldo	0
celulosa	0
lignina	0
hemicelulosa	0
caldoFermentado	0
bioetanol	0
biomasa	0
residuos	0
etanolAbsoluto	0
etanol98	0/

**TABLE CoefE(J,K)** coeficientes de entrada

(Ver archivo Gams)

**TABLE CoefS(J,K)** coeficientes de salida

(Ver archivo Gams)

**VARIABLES**

R(J,K)	cant de prod j enviado a proc k
P(J,K)	cant de prod j devuelto por el proc k
Q(J)	cant total de un Prod j no utilizado
CT	costo total
CV(K)	costo variable
CantDeJsEntranteEnK(K)	sumatoria de Cijk
CTPunit	costo por unidad final producida
U(K)	variable binaria que indica si el proceso K se usa o no (0 o 1)
Ganancia	diferencia entre CostoTotal y el valor del resto de cada producto (se

distingue entre materia prima y no prima);

VARIABLE CT;

VARIABLE Ganancia;

POSITIVE VARIABLE R ;

POSITIVE VARIABLE P ;

POSITIVE VARIABLE CV ;

POSITIVE VARIABLE Q(J) ;

BINARY VARIABLE U;

**EQUATIONS**

SUMAUX1(K)	CantDeJsEntranteEnK
R1(J,K)	restrinccion sobre Pijk
R2(J,Jp,K)	Restricciones de proporciones para controlar las relaciones de R(j k)
R3(J)	restrinccion sobre Qij
R4(K)	indica si un proceso es utilizado en la solución o no

R5(K)	restrinccion sobre CVk
PredE(K)	predicado consistencia de relaciones de entrada
PredS(K)	predicado consistencia de relaciones de salida
COST	define objective function
RGanancia	Restricción que calcula la ganancia. esto es: suma del valor del resto de cada

producto menos el costo total CT;

SUMAUX1(K) ..	CantDeJsEntranteEnK(K) =E= SUM(J\$(CoefE(J,K) ne 0), R(J,K));
R1(J,K) ..	P(J,K) =E= CantDeJsEntranteEnK(K) * coefS(J,K);
R2(J,Jp,K)\$( (CoefE(Jp,K) ne 0) and (CoefE(J,K) ne 0) ) ..	CoefE(Jp,K) * R(J,K) =E= CoefE(J,K) * R(Jp,K);
R3(J) ..	SUM(K\$(CoefS(J,K) ne 0), P(J,K)) + s(J) =E= SUM(K\$(CoefE(J,K) ne 0), R(J,K)) + Q(J);
R4(K) ..	SUM(J, R(J,K)) =L= U(K) * cap(K);
R5(K) ..	CV(K) =E= SUM(J\$(CoefE(J,K) ne 0), R(J,K) * c(K));
COST ..	CT =E= SUM(K, CV(K) + U(K)*f(K)) + SUM(J,a(J)*s(J));
RGanancia ..	Ganancia =E= SUM(J,v(J)*Q(J)) - CT;
PredE(K) ..	SUM(J\$(CoefE(J,K) ne 0), CoefE(J,K)) =E= 1;
PredS(K) ..	SUM(J\$(CoefS(J,K) ne 0), CoefS(J,K)) =E= 1;

**MODEL** maximizarGanancia /ALL/;

**OPTION** MIP=CBC;

**SOLVE** maximizarGanancia USING MIP MAXIMIZING Ganancia;

## 11.2. Restricciones asociadas a la formulación de optimización del artículo de Bao et al.

1. El operador de conversión  $g_i$  de la capa  $i$  referido como  $\psi_{g_i, i}$  relaciona los flujos de productos que entran y salen de los procesos.

$$\begin{aligned}
 (F_{g_i, i, 1}^{out}, \dots, F_{g_i, i, c}^{out}, \dots, F_{g_i, i, NC}^{out}) = \psi_{g_i, i}(F_{g_i, i, 1}^{in}, \dots, F_{g_i, i, c}^{in}, \\
 \dots, F_{g_i, i, NC}^{in}, d_{g_i}, O_{g_i}) \quad \forall g_i, \quad \forall i
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

Donde  $F_{g_i,i,c}^{out}$  y  $F_{g_i,i,c}^{in}$  son los flujos del producto  $c$  saliendo y entrando del proceso  $g_i$  en la capa  $i$ . Las variables de diseño y de operación de un proceso  $g_i$  se denominan  $d_{g_i}$  y  $O_{g_i}$  respectivamente y  $NC$  es la cantidad de productos disponibles que tiene un proceso en el nivel  $i$ .

2. El costo anual total del proceso  $g_i$  en la capa  $i$  denominado  $TAC_{g_i,i}$  está dado por la función  $\Omega_{g_i,i}$  de la siguiente manera:

$$TAC_{g_i,i} = \Omega_{g_i,i}(F_{g_i,i,1}^{in}, \dots, F_{g_i,i,c}^{in}, \dots, F_{g_i,i,NC}^{in}, d_{g_i}, O_{g_i}) \quad \forall g_i, \quad \forall i \quad (2)$$

Los flujos del producto  $c$  en el nivel  $i$  e  $i+1$  ( $F_{c,i}$  y  $F_{c,i+1}$  respectivamente) están relacionados por las velocidades de formación o consumo a través de reacciones químicas sobre todos los procesos en esa capa.

$$F_{c,i+1} = F_{c,i} + \sum_{g_i} r_{g_i,c,i} \quad \forall g_i, \quad \forall i \quad (3)$$

Donde  $r_{g_i,c,i}$  es la velocidad de formación y consumo del producto  $c$  en el proceso  $g_i$  y se le asigna un valor positivo para identificar formación y negativo para identificar consumo.

3. El balance de las cantidades de materia para los flujos del producto  $c$  (de la capa  $i$ ) en los procesos de la capa  $i$  se determina de la siguiente manera:

$$F_{c,i} = \sum_{g_i} F_{g_i,c,i}^{in} \quad \forall c, \quad \forall i \quad (4)$$

El balance de materia para la mezcla de flujos del producto  $c$  de la operación de conversión de la capa  $i$  a la capa  $i+1$ :

$$F_{c,i+1} = \sum_{g_i} F_{g_i,c,i}^{out} \quad \forall c, \quad \forall i \quad (5)$$

El objetivo de la optimización puede apuntar a maximizar el rendimiento del producto deseado, i.e.

$$\text{Maximize } F_{p,NP} \quad (6)$$

Donde  $F_{p,NP}$  es el flujo del producto deseado saliendo de la última capa.

Otra opción para la función objetivo es la de maximizar el potencial económico que se define como el valor del producto menos el costo de materia prima y de procesamiento, i.e.

$$\text{Maximize } C^{\text{Product}} F_{p,NP} - C^{\text{Feedstock}} F^{\text{Feedstock}} - \sum_i \sum_{g_i} TAC_{g_i} \quad (7)$$

Donde  $C^{\text{Product}}$  es el precio de venta,  $C^{\text{Feedstock}}$  es el costo de la materia prima y  $F^{\text{Feedstock}}$  es el flujo de la materia prima.

El flujo de cada producto saliente del proceso  $g_i$  es calculado mediante un rendimiento dado  $y_{g_i,i,c}$  multiplicado por el flujo de una componente limitante (el índice de dicha componente es  $c = c_{g_i}^{\text{lim}}$  y su caudal de entrada es  $F_{g_i,c_{g_i}^{\text{lim}},i}^{\text{in}}$ ), i.e.

$$F_{g_i,c,i}^{\text{out}} = y_{g_i,c,i} F_{g_i,c_{g_i}^{\text{lim}},i}^{\text{in}} \quad \forall g_i, \quad \forall c, \quad \forall i \quad (8)$$

Los flujos de los diferentes productos entrantes en el proceso  $g_i$  se relacionan con el flujo de las componentes limitantes vía estequiometría o alguna otra forma denotada como  $v_{g_i,c,i}$ .

$$F_{g_i,c,i}^{\text{in}} = v_{g_i,c,i} F_{g_i,c_{g_i}^{\text{lim}},i}^{\text{in}} \quad \forall g_i, \quad \forall c, \quad \forall i \quad (9)$$

El costo total anual  $TAC_{g_i,i}$  del proceso  $g_i$  en la capa  $i$  está dado por un factor de costo  $\alpha_{g_i,i}$  multiplicado por el flujo de la componente limitante entrante del proceso, i.e.

$$TAC_{g_i,i} = \alpha_{g_i,i} F_{g_i,c_{g_i}^{\text{lim}},i}^{\text{in}} \quad \forall g_i, \quad \forall i \quad (10)$$

Para sintetizar una biorefinería rentable, el objetivo de optimización puede ser una función económica. Por ejemplo se podría minimizar el periodo de retorno de la inversión o "Payback Period" (PP) de la siguiente manera:

$$\text{Minimize } PP \quad (11)$$

Donde **PP** se calcula,

$$PP = \frac{\text{Fixed Capital Investment}}{(\text{Annual Sales} - \text{Total Annualized Cost}) \times (1 - \text{Tax Rate}) + \text{Annual Depreciation}} \quad (12)$$

Se cumple que *Annual Depreciation*  $\leq 0$

El costo total (annual cost (**TAC**)) es la sumación del costo total anual fijo (**TAFC**) y operacional (**TAOC**).

$$TAC = TAFC + TAOC \quad (13)$$

### 11.3. Salida de ejecución de Test 1 en GAMS

VARIABLE R.L cant de prod j enviado a proc k

	chipeadora	cortadoraDePaja	pretrarRecicloAmonio	pretratOtroAgente	separacionfisica1
pasto		50.000			
madera	100.000				
fraccionesChicas			10.000	100.000	
caldo					20.000

	separacionfisica2	Fermento1	fermento2	extracConSales4	separacionPorMembrana	Estoqueo1
caldo	100.000					
celulosa		2.000	100.000			
caldoFermentado				22.000	100.000	
bioetanol						92.000

VARIABLE P.L cant de prod j devuelto por el proc k

	chipeadora	cortadoraDePaja	pretrarRecicloAmonio	pretratOtroAgente	separacionfisica1
fraccionesChicas	70.000	40.000			
fraccionesGrandes	30.000	10.000			
caldo			10.000	100.000	
Celulosa					12.000
Lignina					4.0000
hemicelulosa					4.0000

	separacionfisica2	Fermento1	fermento2	extracConSales4	separacionPorMembrana	Estoqueo1
celulosa	70.000					
lignina	10.000					
hemicelulosa	20.000					
caldoFermentado		2.0000	100.000			
bioetanol				22.000	70.000	

biomasa					20.000	
residuos					10.000	
etanolAbsoluto						92.000

VARIABLE U.L variable binaria que indica si el proceso K se usa o no (0 o 1)

chipeadora	1.000,	cortadoraDePaja	1.000
pretrarRecicloAmonio	1.000,	pretratOtroAgente	1.000
separacionfisica1	1.000,	separacionfisica2	1.000
fermento1	1.000,	fermento2	1.000
extracConSales4	1.000,	separacionPorMembrana	1.000
estoqueo1	1.000		

208 VARIABLE Q.L cant total de un Prod j no utilizado

fraccionesGrandes	40.000,	lignina	14.000
hemicelulosa	24.000,	biomasa	20.000
residuos	10.000,	etanolAbsoluto	92.000

#### 11.4. Salida de ejecución de Test 2 en GAMS

VARIABLE R.L cant de prod j enviado a proc k

	R1	R3	R4
p1	900.000		
p2		900.000	
p3			900.000

VARIABLE P.L cant de prod j devuelto por el proc k

	R1	R3	R4
p2	900.000		
p3		900.000	
ps			900.000

VARIABLE U.L variable binaria que indica si el proceso K se usa o n o (0 o 1)

R1 1.000, R3 1.000, R4 1.000

VARIABLE Q.L cant total de un Prod j no utilizado

ps 900.000

### 11.5. Salida de ejecución de Test 3 en GAMS

VARIABLE R.L cant de prod j enviado a proc k

	R1	R2	R4
p1	900.000		
p2		900.000	
p3			900.000

VARIABLE P.L cant de prod j devuelto por el proc k

	R1	R2	R4
p2	900.000		
p3		900.000	
ps			900.000

VARIABLE U.L variable binaria que indica si el proceso K se usa o no (0 o 1)

R1 1.000, R2 1.000, R4 1.000

VARIABLE Q.L cant total de un Prod j no utilizado

### 11.6. Salida de ejecución de Test 4 en GAMS

VARIABLE R.L cant de prod j enviado a proc k

	R1	R2	R3	R4
p1	900.000			
p2		400.000	500.000	
p3				900.000

VARIABLE P.L cant de prod j devuelto por el proc k

	R1	R2	R3	R4
p2	900.000			
p3		400.000	500.000	
ps				900.000

VARIABLE U.L variable binaria que indica si el proceso K se usa o no (0 o 1)

R1 1.000, R2 1.000, R3 1.000, R4 1.000

VARIABLE Q.L cant total de un Prod j no utilizado

ps 900.000

### 11.7. Salida de ejecución de Test 5\_1 en GAMS

VARIABLE R.L cant de prod j enviado a proc k

	R1	R3	R5
p1	1000.000		
p3		500.000	
p5			500.000

VARIABLE P.L cant de prod j devuelto por el proc k

	R1	R3	R5
p2	500.000		
p3	500.000		
p5		500.000	
ps			500.000

VARIABLE U.L variable binaria que indica si el proceso K se usa o no (0 o 1)

R1 1.000, R3 1.000, R5 1.000

VARIABLE Q.L cant total de un Prod j no utilizado

p2 500.000, ps 500.000

### 11.8. Salida de ejecución de Test 5\_2 en GAMS

VARIABLE R.L cant de prod j enviado a proc k

	R1	R2	R3	R4	R5
p1	2000.000				
p2		1000.000			
p3			1000.000		
p4				1000.000	
p5					1000.000

VARIABLE P.L cant de prod j devuelto por el proc k

	R1	R2	R3	R4	R5
p2	1000.000				
p3	1000.000				
p4		1000.000			
p5			1000.000		
ps				1000.000	1000.000

VARIABLE U.L variable binaria que indica si el proceso K se usa o no (0 o 1)

R1 1.000, R2 1.000, R3 1.000, R4 1.000, R5 1.000

VARIABLE Q.L cant total de un Prod j no utilizado

ps 2000.000

### 11.9. Salida de ejecución de Test Principal en GAMS con datos estimados

VARIABLE P.L cant de prod j devuelto por el proc k

	chipeadora	cortadoraDePaja	explosionPorVapor	HidrolisisAcida	separacionfisica1
fraccionesChicas	105000.000	60000.000			
fraccionesGrandes	45000.000	15000.000			
caldo			65000.000	100000.000	
celulosa					45000.000
lignina					15000.000
hemicelulosa					15000.000

	separacionfisica2	fermento2	extracConSales4	estoqueo2
celulosa	63000.000			
lignina	9000.000			
hemicelulosa	18000.000			
caldoFermentado		108000.000		
bioetanol			108000.000	
etanol98				108000.000

VARIABLE R.L cant de prod j enviado a proc k

	chipeadora	cortadoraDePaja	explosionPorVapor	HidrolisisAcida	separacionfisica1
pasto		75000.000			
madera	150000.000				
fraccionesChicas			65000.000	100000.000	
caldo					75000.000

	separacionfisica2	fermento2	extracConSales4	estoqueo2
caldo	90000.000			
celulosa		108000.000		
caldoFermentado			108000.000	
bioetanol				108000.000

VARIABLE U.L variable binaria que indica si el proceso K se usa o no (0 o 1)

chipeadora	1.000,	cortadoraDePaja	1.000,	explosionPorVapor	1.000
HidrolisisAcida	1.000,	separacionfisica1	1.000,	separacionfisica2	1.000
fermento2	1.000,	extracConSales4	1.000,	estoqueo2	1.000

VARIABLE Q.L cant total de un Prod j no utilizado

fraccionesGrandes	60000.000,	lignina	24000.000
hemicelulosa	33000.000,	etanol98	108000.000

### 11.10. Salida de ejecución de Test Principal en GAMS con datos provistos por el IIQ

VARIABLE P.L cant de prod j devuelto por el proc k

	chipeadora	cortadoraDePaja	PretratPHcontrolado	PretrarRecicloAmonio	PretratOtroAgente	separacionfisica1
fraccionesChicas	35848.000	60000.000				
fraccionesGrandes	15363.4286	15000.000				
caldo			45990.000	45990.000	3868.0000	
celulosa						14716.000
lignina						4905.6000
hemicelulosa						4905.6000

	separacionfisica2	separacionfisica3	Fermento1	fermento2	extracConSales4	separacionPorMembrana
celulosa	21462.000	20330.0000				
lignina	3066.000	12198.0000				
hemicelulosa	6132.0000	8132.0000				
caldoFermentado			10518.8000	45990.0000		
bioetanol					45990.0000	7363.1600
biomasa						2103.7600
residuos						1051.8800

	Estoqueo1	Estoqueo2
etanolAbsoluto	5256.0000	
etanol98		5256.0000

VARIABLE R.L cant de prod j enviado a proc k

	chipeadora	cortadoraDePaja	PretratPHcontrolado	PretrarRecicloAmonio	PretratOtroAgente	separacionfisica1
pasto		75000.0000				
madera	51211.4286					
fraccionesChicas			45990.0000	45990.0000	3868.0000	
caldo						24528.0000

	separacionfisica2	separacionfisica3	Fermento1	fermento2	extracConSales4	separacionPorMembrana
caldo	30660.0000	40660.0000				
celulosa			10518.8000	45990.0000		
caldoFermentado					45990.0000	10518.8000

	Estoqueo1	Estoqueo2
bioetanol	5256.0000	5256.0000

VARIABLE U.L variable binaria que indica si el proceso K se usa o no (0 o 1)

Chipeadora	1.000,	CortadoraDePaja	1.000,	PretratPHcontrolado	1.000
PretrarRecicloAmonio	1.000,	PretratOtroAgente	1.000,	separacionfisica1	1.000
separacionfisica1	1.000,	separacionfisica2	1.000,	separacionfisica3	1.000
fermento1	1.000,	fermento2	1.000,	extracConSales4	1.000
separacionPorMembrana	1.000,	estoqueo1	1.000,	estoqueo2	1.000

VARIABLE Q.L cant total de un Prod j no utilizado

Madera	98788.5714,	fraccionesGrandes	30363.4286,	lignina	20169.6000
hemicelulosa	19169.6000,	bioetanol	42841.1600,	biomasa	2103.7600
residuos	1051.8800,	etanolAbsoluto	5256.0000,	etanol98	5256.0000