

Parámetros numéricos para algoritmos genéticos en el cálculo de la presión de sublimación

Jorge A. Autoruno,^{1*} y Daniel M. Autorodos²

¹Dpto. de Investigación de Operaciones, Universidad Autónoma de la Frontera, Saltillo, Coahuila.

²Grupo de Investigación de Operaciones, Centro de Investigación Numérica, Monterrey, Nuevo León.

* Correo electrónico: jautoruno@uaf.edu.mx

Resumen

Se ha analizado el efecto de algunos parámetros numéricos en el método de los algoritmos genéticos para la determinación de la presión de sublimación P^s usando datos de solubilidad de un sólido en un gas a alta presión. La presión P^s es usualmente pequeña para muchos sólidos de interés industrial ($\approx 10^2$ a $\approx 10^5$ bar) y las técnicas experimentales disponibles no pueden en muchos casos ser usadas para obtener valores exactos. Sin embargo, aunque pequeño, este valor es requerido en cálculos de solubilidad de sólidos en gases a alta presión para aplicaciones de extracción supercrítica por ejemplo. En esta línea, Valderrama y Zavaleta (2005) propusieron evaluar P^s usando datos de solubilidad del sólido en un gas a alta presión usando dicha variable como parámetro ajustable en la ecuación de solubilidad. A una temperatura fija T , la solubilidad "y" de un sólido en un gas a alta presión es $y = (P^s/P\phi^s)[\exp(V^s(P - P^s)/RT)]$, siendo ϕ^s el coeficiente de fugacidad del sólido en la fase gas, P^s es la presión de sublimación del sólido puro, V^s es el volumen molar del sólido, y R es la constante del gas ideal (Prausnitz et al., 1998). Los autores usaron el método de los algoritmos genéticos para estimar P^s método en el cual es necesario fijar algunos parámetros involucrados en el método (N^o de individuos y generaciones, probabilidad de cruzamiento y de mutación).

La influencia de los valores de estos parámetros en la estimación de P^s son analizados en este trabajo. Se usa la ecuación de estado de Peng-Robinson con las reglas de mezcla de Wong y Sandler como modelo termodinámico para evaluar ϕ^s (Wong and Sandler, 1992). En este estudio se analizan los resultados obtenidos haciendo variar el valor de estos parámetros y usando como función objetivo la desviación en la solubilidad y en la presión de sublimación calculada. Se consideraron las mezclas naftaleno+ CO_2 a 308K, fenantreno+etano a 318K y fenantreno+fluoroformo a 318K, usando datos de solubilidad de la literatura. El análisis se realiza de la siguiente forma: i) El número de individuos y el número de generaciones se hace variar entre 4 y 10. Se mantiene fijo en un 1% la probabilidad de mutación y en un 80% la probabilidad de cruzamiento; ii) Se estudia el efecto de la probabilidad de mutación variándola entre un 0.5% y un 5%. Se mantiene fija la combinación $[Ni/N_G] = 8/10$; y iii) Se varía la probabilidad de cruzamiento entre un 50% y un 100% y mantiene fija la combinación $[Ni/N_G] = 8/10$. La Tabla 1 resume algunos resultados.

Tabla 1: Efecto del número de individuos y el número de generaciones en P^s (en bar) y en la solubilidad y_2

$[Ni/N_G]$	naftaleno+ CO_2 (308 K)		fenantreno+etano (318 K)		fenantreno+fluoroformo (318 K)	
	$P^s \times 10^4$	$I\% \Delta y_2 I$	$P^s \times 10^4$	$I\% \Delta y_2 I$	$P^s \times 10^4$	$I\% \Delta y_2 I$
10/10	2.709	3.8	1.561	4.9	1.666	9.8
8/10	2.705	3.9	1.546	4.6	1.611	9.6
6/10	2.704	5.0	1.444	6.8	1.627	10.0

Las mayores desviaciones en la correlación de la solubilidad, se obtienen cuando la probabilidad de cruzamiento es de un 50%. Para valores de esta variable entre un 80% y 100% no hay diferencia apreciable en las desviaciones. Los resultados muestran que el modelo termodinámico usado es apropiado para estimar la presión de sublimación de sólidos. Además el método de los algoritmos genéticos muestra ser una buena herramienta para solucionar el problema de optimización estudiado aquí, proporcionando óptimos globales. Los resultados indican que la solubilidad es correlacionada con desviaciones absolutas promedios entre 3.8% y 9.0%, lo que se considera aceptable para esta propiedad. Para este tipo de cálculos se recomiendan los siguientes parámetros en el método de los algoritmos genéticos: individuos $N_i = 8$, generaciones $N_G = 10$, probabilidad de mutación $P_{mut} = 0.01$, y probabilidad de cruzamiento $P_{cruz} = 0.8$.

Referencias

J.M. Prausnitz, R.N. Lichtenthaler y E.G. de Azevedo. *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria*. Pearson Education, 1998. ISBN 9780132440509.

Jose O. Valderrama y Jack Zavaleta. Sublimation pressure calculated from high-pressure gas-solid equilibrium data using genetic algorithms. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 44(13):4824–4833, 2005.

David Shan Hill Wong y Stanley I. Sandler. A theoretically correct mixing rule for cubic equations of state. *AIChE Journal*, 38(5): 671–680, 1992. ISSN 1547-5905.