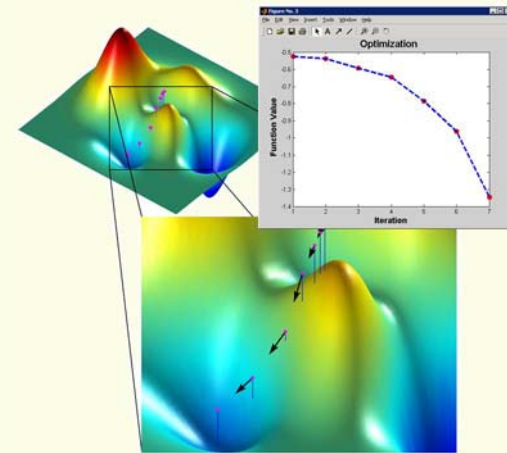
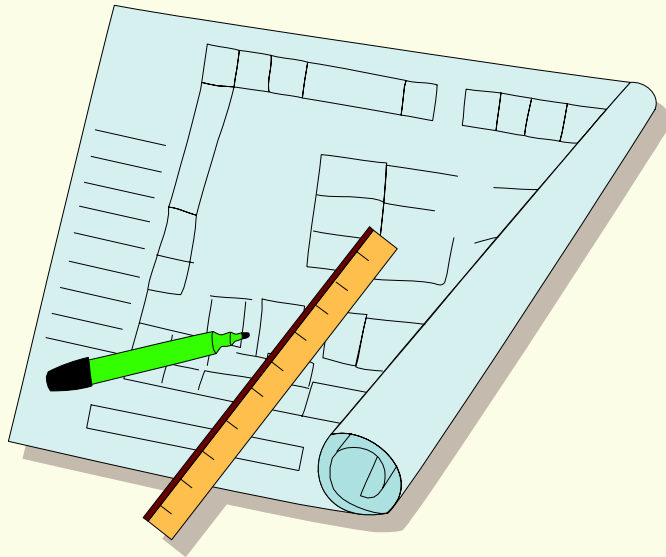


Ottimizzazione strutturale dello schema di processo

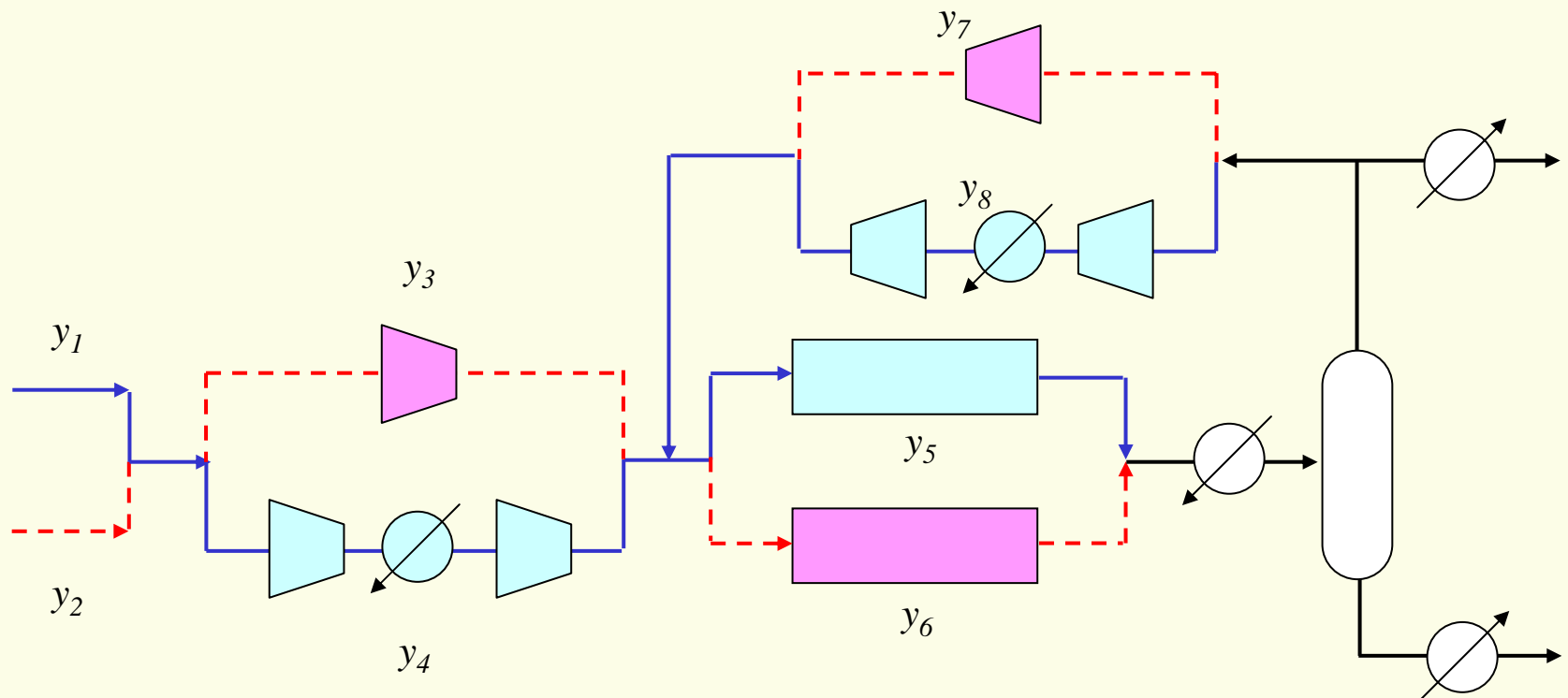


Introduzione alla ottimizzazione strutturale

La sintesi del *flowsheet* di processo (struttura del processo, schema di processo) può essere condotta tramite l'ottimizzazione di una **sovrastuttura** impostando un problema MINLP.

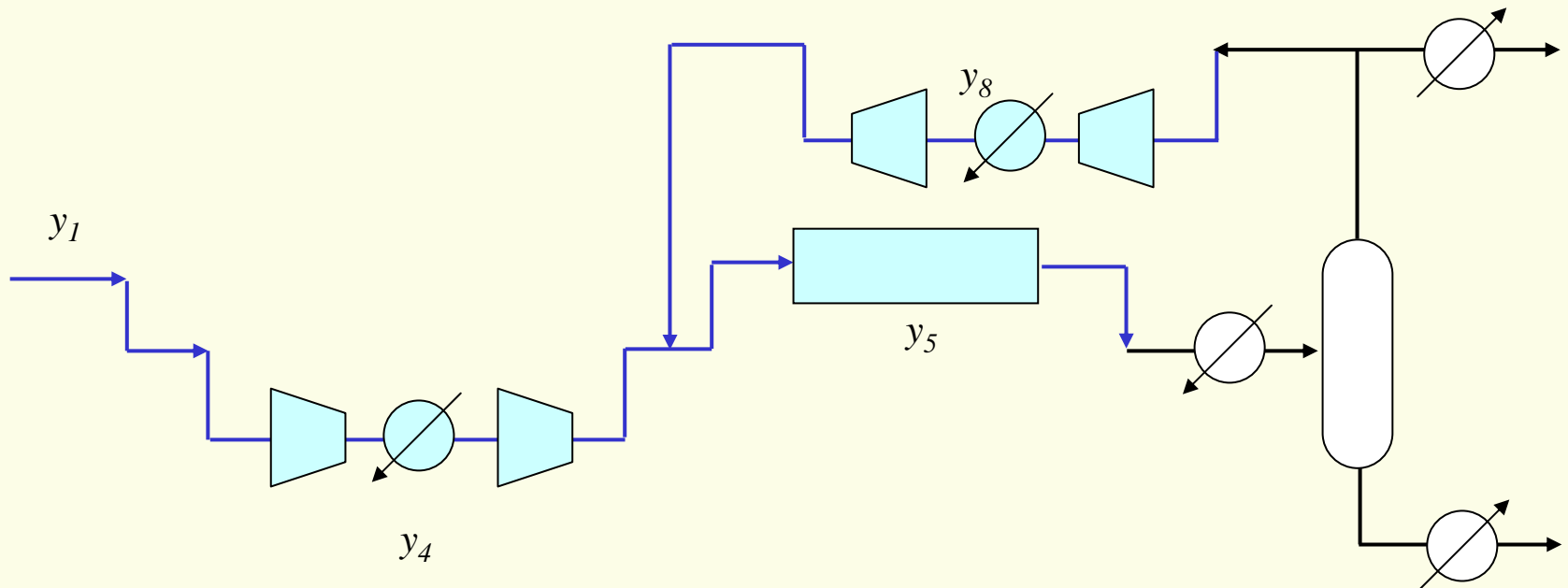
Si hanno due problemi fondamentali da risolvere:

- Lo sviluppo della sovrastuttura
- La modellazione e la risoluzione del problema MINLP associato



Introduzione alla ottimizzazione strutturale

Se si selezionano solo le apparecchiature e le correnti: 1, 4, 5, 8 tramite le variabili binarie booleane: $y_1 = 1$, $y_4 = 1$, $y_5 = 1$, $y_8 = 1$ di presenza e $y_2 = 0$, $y_3 = 0$, $y_6 = 0$, $y_7 = 0$ di assenza si ha ad esempio il seguente flowsheet:



Introduzione alla ottimizzazione strutturale

Il problema maggiore relativo alla costruzione della sovrastruttura è il **numero elevato di alternative** che possono scaturire da essa.

Uno degli approcci alla sua realizzazione è quello proposto da Kocis e Grossmann (1987, 1989) ed esteso da Kravanja e Grossmann (1990, 1993, 1994) basato su **regole euristiche** volte a ridurre l'elevato numero di alternative.



Introduzione alla ottimizzazione strutturale

Si consideri ad esempio il processo di sintesi dell'ammoniaca. Dopo un'analisi dettagliata del processo è possibile evidenziare le seguenti alternative:

1. Reattore: **strati adiabatici con raffreddamento intermedio**, **tubolare**
2. Separazione del prodotto: **flash con condensazione**, **assorbimento e distillazione**
3. Recupero idrogeno: **separazione a membrana**, **spurgo**

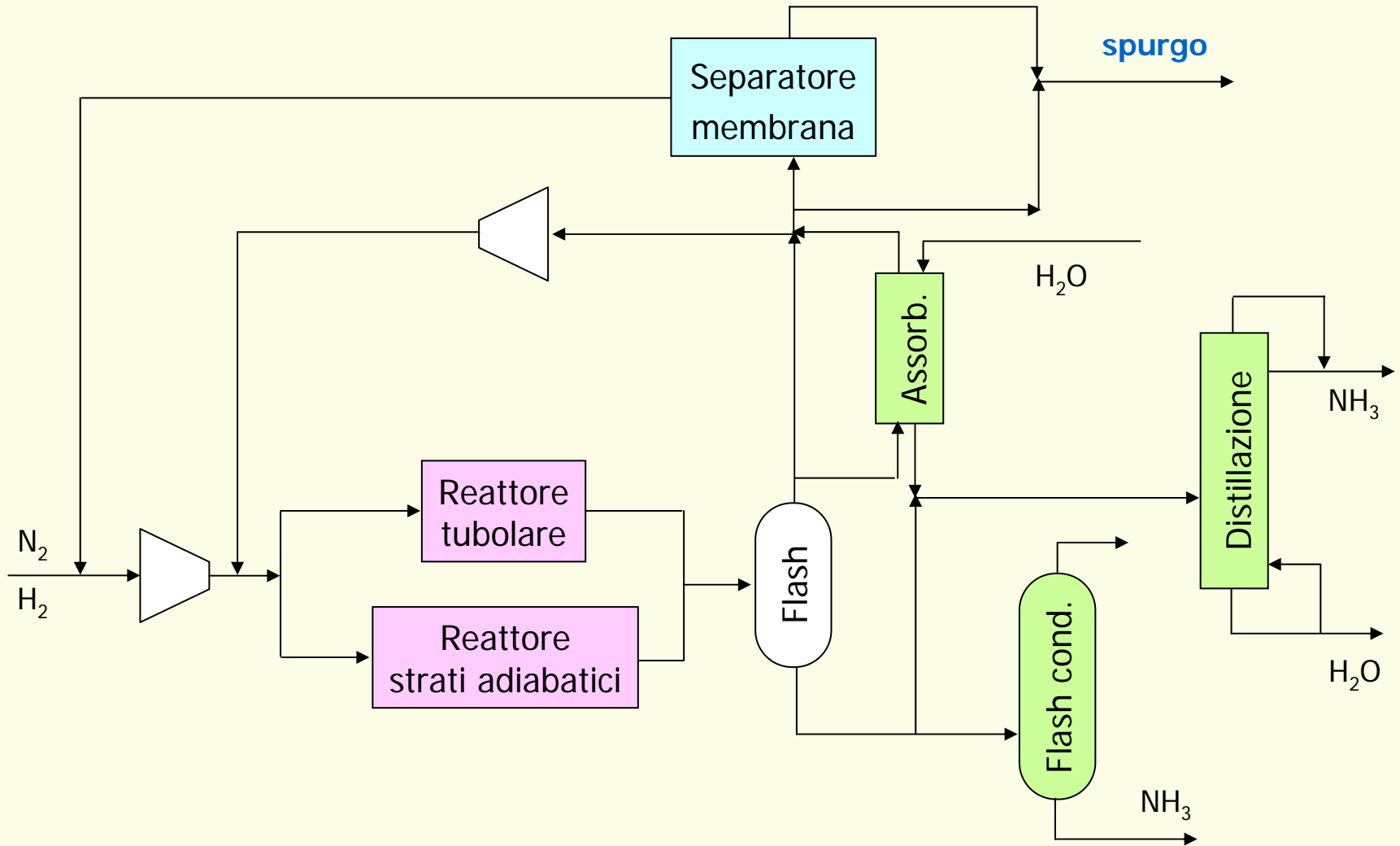
La sovrastruttura proposta contiene 8 possibili flowsheet prodotti dalle tre alternative binarie.

Date n alternative binarie (aut, aut) il numero di flowsheet presenti nella sovrastruttura di sintesi risulta essere: 2^n .

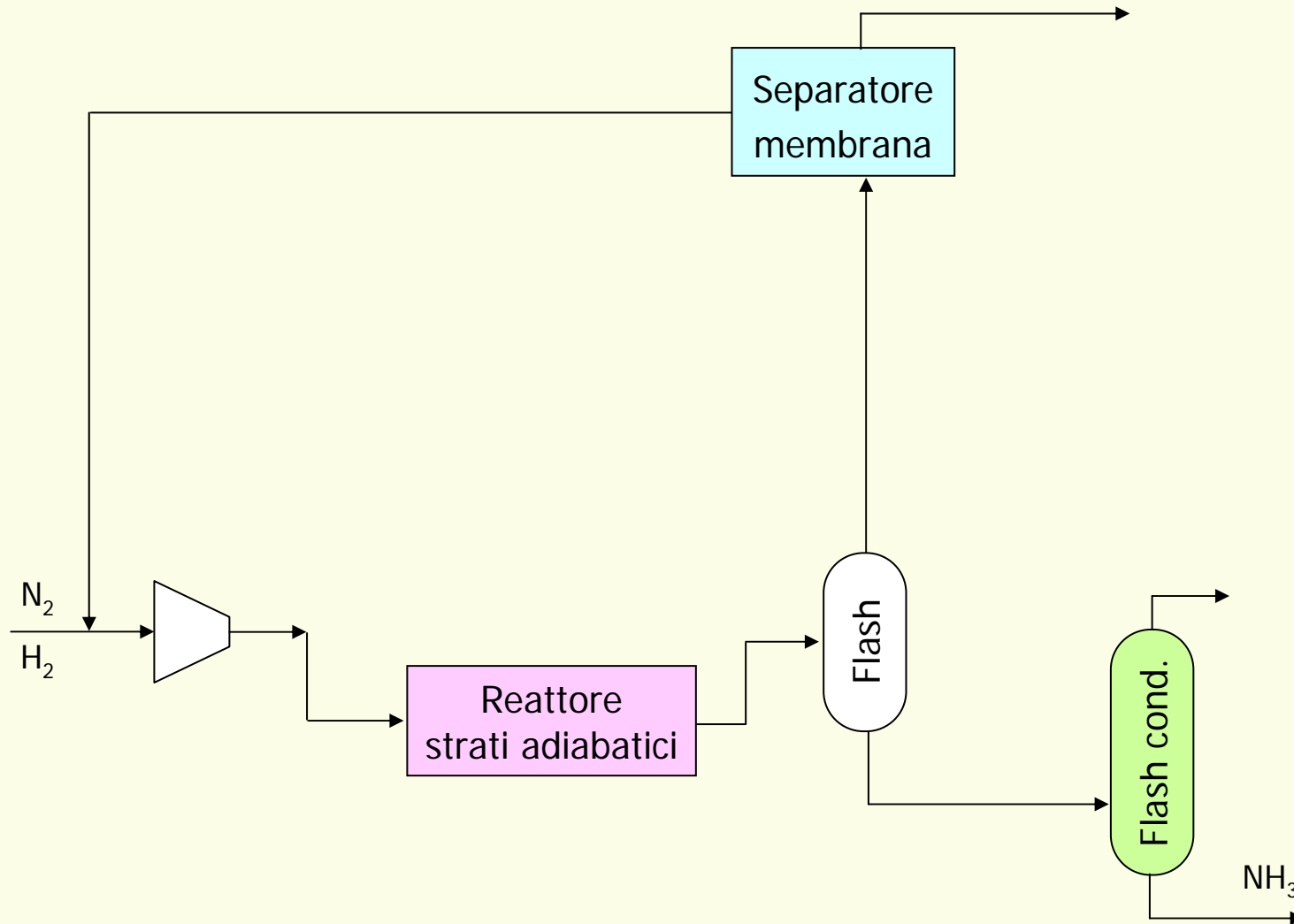
N.B.: Una delle tecniche di riduzione sistematica delle alternative del flowsheet è quella proposta da Douglas (1988) basata sulla sequenza di **decomposizione gerarchica** dello schema di processo (Conceptual Design). Essa ha il difetto di essere sequenziale e non aggredisce il problema con un approccio simultaneo globale.



Sovrastruttura processo di sintesi dell'ammoniaca



Caso particolare della sovrastruttura



Modelli Mixed-Integer

Una volta definita la sovrastruttura dello schema di processo, il problema di ottimizzazione ad esso connesso assume la seguente forma:

$$\begin{aligned} \underset{x,y}{\text{Min}} \quad & Z = C(x, y) \\ \text{s.t.} \quad & h(x) = 0 \\ & g(x, y) \leq 0 \\ & x \in X, \quad y \in \{0,1\}^m \end{aligned}$$

- Dove x è il vettore delle **variabili continue** di processo (temperature, pressioni, portate, frazioni molari, ...) mentre il vettore y indica l'eventuale presenza delle unità di processo nello specifico flowsheet (**variabili intere binarie**).
- Le equazioni di bilancio materiale ed energetico $h(x) = 0$ sono in genere non lineari.
- Le disequazioni $g(x,y) \leq 0$ indicano viceversa specifiche di processo o limiti sulle variabili continue.

Modelli Mixed-Integer

In genere, le variabili binarie y compaiono nella funzione obiettivo e nei vincoli: **linearmente**. Infatti nei termini di costo esse indicano i costi fissi:

$$C(x, y) = c^T y + f(x)$$

Mentre nei vincoli di disuguaglianza esse rappresentano condizioni logiche della forma:

$$g(x, y) = Cx + By - d \leq 0$$



Modelli Mixed-Integer

Esistono algoritmi numerici volti alla risoluzione del problema specifico caratterizzato dalle condizioni summenzionate.

Tali algoritmi si basano sulla risoluzione di una sequenza di sottoproblemi NLP ed un problema *master* MILP.

Infatti una volta assegnate le variabili binarie, il problema MINLP si trasforma in un problema NLP che lavora solo sulle variabili continue. Il problema master MILP produce una approssimazione lineare globale per l'ottimizzazione delle variabili binarie.

La risoluzione del problema MINLP può comunque passare attraverso due metodologie distinte:

1. **Approssimazione/trasformazione** del problema MINLP a problema MILP tramite discretizzazione
2. **Decomposizione** e **riduzione dimensionale** del problema MINLP



Approssimazione MILP

Per ricondurre il problema non lineare ad un problema MILP si suddividono le variabili continue x in:

$$x = \begin{bmatrix} z^d \\ x^c \end{bmatrix}$$

Dove z^d è il vettore di condizioni operative che dà vita alle non linearità (temperature, pressioni, conversioni, fattori di split, ...) mentre x^c è un vettore di flussi di materia, calore ed energia che compaiono linearmente nelle relative equazioni.

Quindi, una volta fissati i valori z^d , le equazioni non lineari $h(x) = 0$ si trasformano in equazioni lineari $E x^c = e$, dove la matrice E ed il vettore e dipendono dalle variabili z^d : $E(z^d)$, $e(z^d)$.



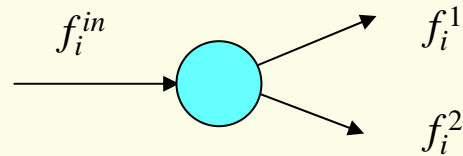
Approssimazione MILP

Dato che le variabili z^d possono assumere più di un singolo valore fisso, risulta necessario discretizzarle tramite l'introduzione di variabili binarie ausiliarie: y^d . Così facendo il nuovo problema viene espresso in funzione di condizioni operative discrete ed al contempo risulta lineare sia nella funzione obiettivo che nei vincoli:

$$\begin{aligned} \text{Min} \quad & C = a_1^T y + a_2^T y^d + b^T x^c \\ \text{s.t.} \quad & E_1 y^d + E_2 x^c = e \\ & D_1 y + D_2 y^d + D_3 x^c \leq d \\ & y, y^d = \{0,1\} \quad x^c \geq 0 \end{aligned}$$

Approssimazione MILP

Per comprendere meglio quanto appena indicato, si consideri il seguente caso semplificato relativo ad uno splitter:



È possibile scrivere le seguenti equazioni di bilancio materiale:

$$f_i^1 = \eta f_i^{in}$$

$$f_i^2 = f_i^{in} - f_i^1$$

dove η è il rapporto di split relativo alla corrente 1. Si noti che l'equazione: $f_i^1 = \eta f_i^{in}$ è **non lineare** (è infatti bilineare).

Nonostante la sua semplicità è fonte di non convessità e complicazioni numeriche.

Approssimazione MILP

Per linearizzare il problema, si considerino N valori discreti di η_k con $k=1, \dots, N$.

È possibile *disaggregare* la corrente di ingresso f_i^{in} nelle correnti $f_i^{in,k}$ introducendo le variabili binarie $y^{d,k}$. In questo modo le equazioni di bilancio dello splitter vengono trasformate in:

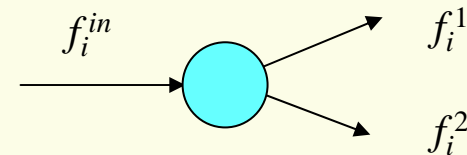
$$f_i^1 = \sum_{k=1}^N \eta_k f_i^{in,k}$$

$$f_i^{in} = \sum_{k=1}^N f_i^{in,k}$$

$$f_i^{in,k} - U y^{d,k} \leq 0 \quad k = 1, \dots, N$$

$$\sum_{k=1}^N y^{d,k} = 1 \quad f_i^{in,k} \geq 0$$

$$f_i^2 = f_i^{in} - f_i^1$$

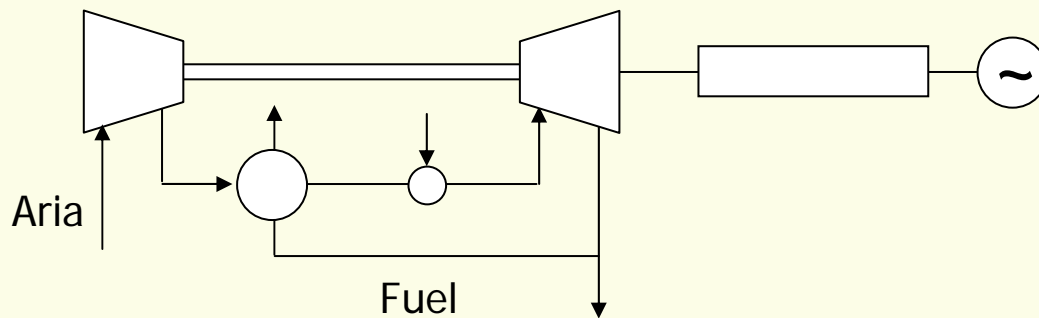


Il problema è stato linearizzato anche se la sua dimensione è inevitabilmente aumentata.

Approssimazione MILP: caso applicativo

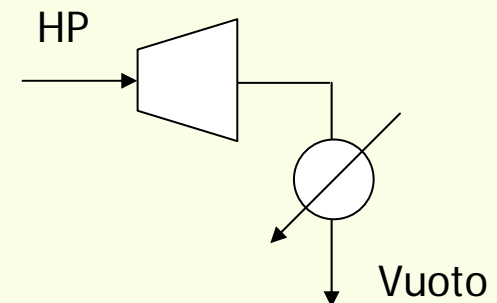
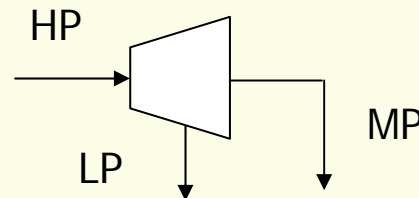
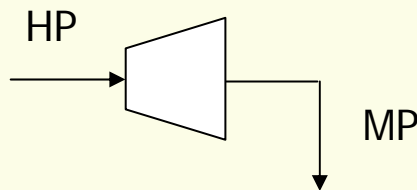
In questo esempio si applica l'approssimazione MILP alla ottimizzazione di impianti per la produzione di utility (Kalitventzeff, 1991): energia elettrica, meccanica (pompe, compressori), vapore a vari livelli di pressione.

Nota la richiesta di utility è possibile definire la sovrastruttura che contenga le possibili unità: caldaie a tubi d'acqua e a tubi di fumo, fornaci, turbine a gas e a vapore, generatori elettrici. È anche pensabile di acquistare esternamente alcune fonti energetiche: ad esempio l'energia elettrica.



TURBINA a GAS per generazione ELETTRICITÀ

TURBINE a VAPORE



Approssimazione MILP: caso applicativo

Fissata la sovrastruttura il problema di ottimizzazione della rete di utility assume la forma:

$$\text{Min } C = \text{Costi investimento} + \text{Costo Fuel}$$

s.t. Bilanci di materia ed entalpici

Vincoli logici

Il problema proposto viene formulato in termini lineari → MILP.

I **costi delle apparecchiature** ad esempio possono essere modellati **linearmente** come:

$$C_i = a_i y_i + b_i F_i$$

Dove a_i e b_i sono delle costanti proporzionali rispettivamente al costo fisso e a quello di esercizio e F_i è un parametro operativo caratteristico dell'apparecchiatura (ad es.: vapore prodotto, energia assorbita, prevalenza, ...).

Si sottolinea che la determinazione dei parametri a_i e b_i avviene effettuando alcuni calcoli preliminari che legano ad esempio la portata unitaria di vapore al corrispondente costo del combustibile necessario a produrla.

Inserendo il costo complessivo della singola apparecchiatura, i termini costituenti il problema MILP assumono la forma:

$$C_i = a_i y_i + b_i F_i$$

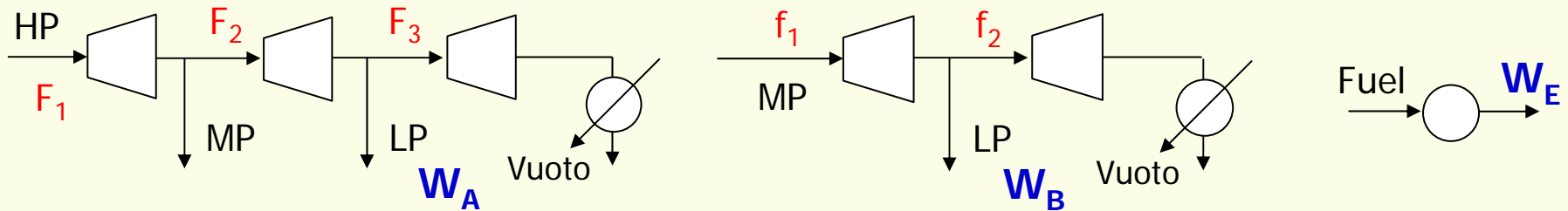
$$F_i - U y_i \leq 0$$

$$F_i \geq 0 \quad y_i = \{0,1\}$$



Approssimazione MILP: caso applicativo

Consideriamo ora il caso specifico di richiesta di potenza elettrica W_P che sia ottenibile tramite una turbina a vapore operante ad alta pressione W_A o tramite una turbina operante a media pressione W_B o tramite un generatore elettrico W_E come indicato in figura:



1. Potenza prodotta dalle turbine A e B con efficienza η ed entalpia H :

$$W_A = F_1 \eta_{1A} (H_{HP} - H_{MP}) + F_2 \eta_{2A} (H_{MP} - H_{LP}) + F_3 \eta_{3A} (H_{LP} - H_{VAC})$$

$$W_B = f_1 \eta_{1B} (H_{MP} - H_{LP}) + f_2 \eta_{2B} (H_{LP} - H_{VAC})$$

dato che si assumono T e P costanti allora anche η e H sono costanti \rightarrow linearità in F_i e f_j

2. Specifica produzione energia elettrica: $W_P = W_A + W_B + W_E$
3. Vincolo per la selezione di una sola alternativa: $y_A + y_B + y_E = 1$

$$W_A - U y_A \leq 0$$

$$W_B - U y_B \leq 0$$

$$W_E - U y_E \leq 0$$

Strategie di decomposizione

Se le non linearità del problema vengono tenute in conto, senza passare attraverso la loro linearizzazione, oltre alla complicazione del problema esistono comunque due ulteriori problematiche:

- Quando si fissano le variabili binarie, la formulazione NLP risultante deve gestire un **numero elevato di variabili e di equazioni ridondanti** che accrescono la dimensionalità e la complicazione del problema. Infatti anche se si pongono uguali a zero le portate entranti alle unità assenti (*unità a secco*), occorre comunque condurre a convergenza le equazioni di bilancio ad esse associate. Ciò introduce delle singolarità che sfavoriscono notevolmente la soluzione numerica.
- L'effetto delle **non convessità** viene notevolmente accentuato quando le portate assumono valore nullo a causa dell'assenza di alcune unità. Ciò può condurre a convergenze puntuali subottimali o all'esclusione della combinazione ottimale di unità di processo presenti nel flowsheet.

Viene di seguito presentata la strategia risolutiva basata sulla **modellazione e decomposizione del problema** introdotta da Kocis e Grossmann (1987, 1989) ed estesa da Kravanja e Grossmann (1990, 1993, 1994).



Strategie di decomposizione

Al fine di modellare il problema MINLP, la sovrastruttura viene rappresentata in termini di: **nodi di interconnessione** e **nodi di unità di processo**.

Si introduce la seguente simbologia:

U insieme delle unità di processo u .

N insieme dei nodi di interconnessione n .

S insieme delle correnti di processo s .

$I^{U(u)}$ insieme delle correnti di input all'apparecchiatura u .

$O^{U(u)}$ insieme delle correnti di output dall'apparecchiatura u .

$I^{N(n)}$ insieme delle correnti di input al nodo di interconnessione n .

$O^{N(n)}$ insieme delle correnti di output dal nodo di interconnessione n .

Strategie di decomposizione

Il problema **MINLP** assume quindi la forma:

$$Z = \text{Min}_{x,d,z,y} \sum_{u \in U} (c_u y_u + f_u(d_u)) + \sum_{s \in S} c_s$$

$$\text{s.t.} \quad \left. \begin{array}{l} h_u(d_u, z_u, x_p, x_q) = 0 \\ g_u(d_u, z_u, x_p, x_q) \leq 0 \\ x_p^F \geq 0, \quad x_p^F - x_p^{F,UP} y_u \leq 0 \\ d_u \geq 0, \quad d_u - d_u^{UP} y_u \leq 0 \\ r_n(d_n, x_p, x_q) = 0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} u \in U, p \in I^{U(u)}, \\ q \in O^{U(u)}, n \in N, \\ p \in I^{N(n)}, q \in O^{N(n)} \end{array}$$

$$x_s \in X_s = \{x_s^{LO} \leq x_s \leq x_s^{UP}\} \quad s \in S$$

$$d_u \in D_u = \{0 \leq d_u \leq d_u^{UP}\} \quad u \in U$$

$$d_n \in D_n = \{0 \leq d_n \leq d_n^{UP}\} \quad n \in N$$

$$z_u \in Z_u = \{z_u^{LO} \leq z_u \leq z_u^{UP}\} \quad u \in U$$

$$y \in Y = \{y \in \{0,1\}^m, \quad Ey \leq e\}$$

c_u è il termine di costo fisso per ogni unità u

f_u è il termine di costo dipendente da d_u

d_u è un vettore di variabili decisionali e dimensionali relativo all'apparecchiatura u

c_s è il termine di costo delle materie prime (+) e dei prodotti (-)

h_u e g_u sono i vincoli relativi all'unità di processo u

x_p^F è la corrente di input all'unità u , d_u è una sua variabile decisionale. x_p^F e d_u si annullano se $y_u = 0$.

$x_p^{F,UP}$ e d_u^{UP} sono attivi se l'unità u esiste ($y_u = 1$)

r_n mette in relazione le correnti di input con quelle di output per il nodo di interconnessione n attraverso le variabili decisionali d_n

x_s è il vettore di variabili per ogni corrente s (Portata, T, P, x_1, \dots)

d_n è un vettore di variabili decisionali e dimensionali relativo al nodo di interconnessione n

z_u è un vettore di variabili interne e di performance per l'unità di processo u



Strategie di decomposizione

Per incrementare la presenza di vincoli lineari, i bilanci di massa vengono scritti in termine di portate di singolo componente.

I nodi di interconnessione vengono modellati per eliminare le non convessità.

ESEMPIO: proprio per descrivere le scelte multiple, mutuamente esclusive, rappresentate dai nodi di interconnessione si introduce lo splitter multicomponente in cui entra una corrente F_0 e da cui può uscire una sola corrente di output tra le possibili N : F_1, F_2, \dots, F_N . Indicando con f_i^j la portata del componente j nella corrente i , con $j = 1, \dots, C$ e $i = 0, \dots, N$ si ha:

$$F_i = \sum_{j=1}^C f_i^j \quad i = 0, \dots, N$$

$$f_0^j = \sum_{i=1}^N f_i^j \quad j = 1, \dots, C$$

$$F_i - U y_i \leq 0 \quad i = 1, \dots, N$$

$$F_i \geq 0 \quad f_i^j \geq 0 \quad i = 1, \dots, N \quad j = 1, \dots, C$$

$$\sum_{i=1}^N y_i = 1 \quad y_i = \{0, 1\}$$

L'insieme di queste equazioni e disequazioni traduce il fatto che la corrente di output ha portata e composizione uguale a quella di input F_0 assegnata.

Lo stesso può essere fatto anche per il **bilancio entalpico** dello splitter multicomponente.



Strategie di decomposizione

La sovrastruttura viene quindi decomposta (suddivisa) in uno **specifico flowsheet** e nei **sottosistemi di unità non esistenti**.

L'idea è quella di risolvere il problema NLP solo per la porzione di apparecchiature esistenti.

I sottosistemi vengono invece subottimizzati per fornire delle approssimazioni lineari al problema *master*.



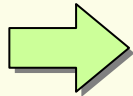
Strategie di decomposizione

Per poter affrontare il problema NLP relativo ad uno specifico flowsheet, l'insieme U delle apparecchiature viene suddiviso in un sottoinsieme UE (**esistenti**, $y_i = 1$) e in un sottoinsieme UN (**non esistenti**, $y_i = 0$) con $U = UE \cup UN$. Il problema NLP si **riduce** quindi a:

$$Z = \text{Min}_{x,d,z} \sum_{u \in UE} [c_u y_u + f_u(d_u)] + \sum_{s \in S} c_s$$

$$s.t. \left. \begin{aligned} h_u(d_u, z_u, x_p, x_q) &= 0 \\ g_u(d_u, z_u, x_p, x_q) &\leq 0 \\ 0 \leq x_p^F &\leq x_p^{F,UP} \\ 0 \leq d_u &\leq d_u^{UP} \end{aligned} \right\} u \in UE, p \in I^{UE(u)}, q \in O^{UE(u)}$$

$$\begin{aligned} & r_n(d_n, x_p, x_q) = 0 && n \in N, p \in I^{N(n)}, q \in O^{N(n)} \\ & x_t^F = 0 && t \in I^{UN(u)}, u \in UN \\ & x_s \in X_S, d_u \in D_u, d_n \in D_n, z_u \in Z_u && s \in S, u \in UE, n \in N \end{aligned}$$



Avendo indicato con x_t^F le portate delle correnti di input alle apparecchiature non esistenti.

Strategie di decomposizione

Il passo successivo è quello di ottimizzare i sottosistemi di unità non esistenti che sono collegati alla sovrastruttura tramite i nodi di interconnessione.

Le portate ai nodi di interconnessione x_t sono note e provenienti dal problema NLP. In questo modo è possibile risolvere il problema relativo alle unità non esistenti che potrebbero però fare comparsa nel flowsheet dell'iterazione successiva qualora venissero attivate. La soluzione dei sottoproblemi ottenuti dalla decomposizione della sovrastruttura fornisce i dati linearizzati per la successiva procedura di ottimizzazione della porzione Mixed Integer relativa al problema *master*.

$$Z_{sub} = \underset{x,d,z}{Min} \sum_{u \in UN} (c_u y_u + f_u(d_u)) + \sum_{s \in I^{UN(u)}} \mu_s x_s - \sum_{s \in O^{UN(u)}} \mu_s x_s$$

$$s.t. \left. \begin{array}{l} h_u(d_u, z_u, x_p, x_q) = 0 \\ g_u(d_u, z_u, x_p, x_q) \leq 0 \end{array} \right\} u \in UN, p \in I^{UN(u)}, q \in O^{UN(u)}$$

$$x_p = x_t \quad u \in UN, p \in I^{UN(u)}, t \in I^{N(n)}$$

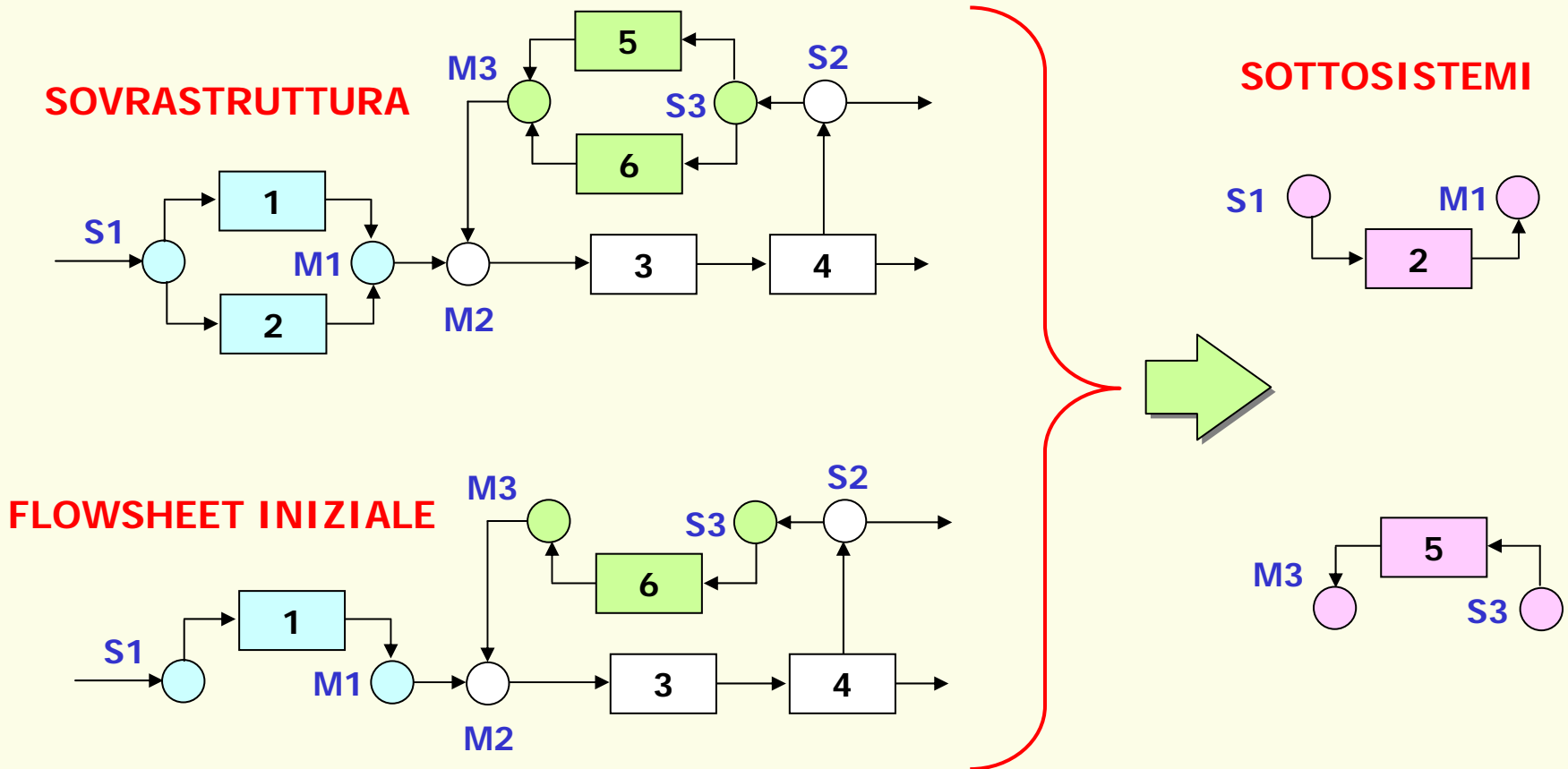
$$x_s \in X_s, d_u \in D_u, d_n \in D_n, z_u \in Z_u \quad u \in UN, s \in I^{UN(u)}, t \in O^{UN(u)}$$

N.B.: La soluzione di questo problema fornisce in genere una buona stima delle condizioni che si avrebbero se un'unità non esistente venisse introdotta nel flowsheet di processo.

Determinazione dei sottosistemi

Uno dei punti fondamentali per la risoluzione del problema complessivo MINLP è quello relativo alla determinazione sistematica dei sottosistemi da subottimizzare.

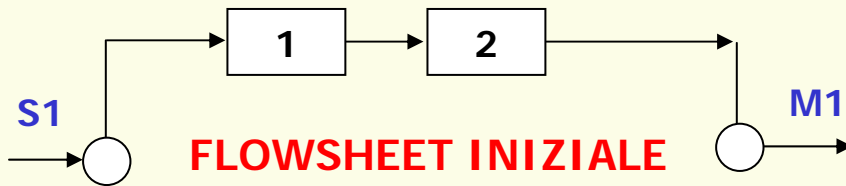
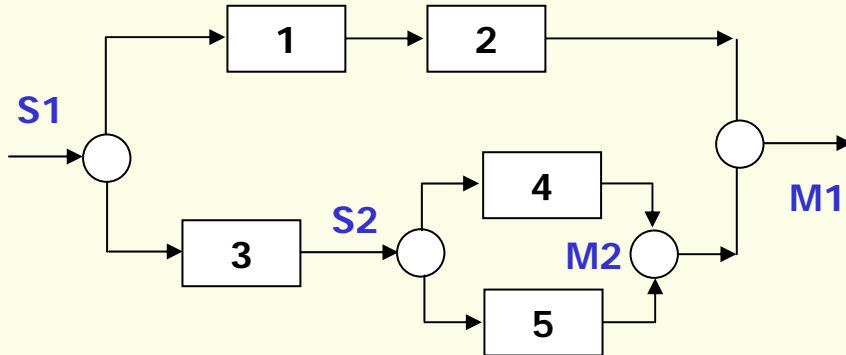
Si consideri a titolo di esempio:



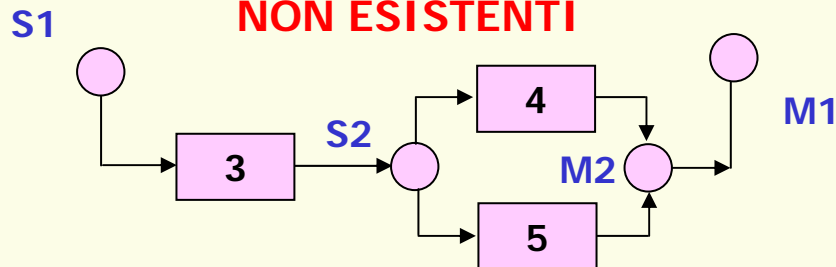
Determinazione dei sottosistemi

Nel caso invece si abbia:

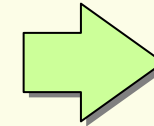
SOVRASTRUTTURA



APPARECCHIATURE NON ESISTENTI

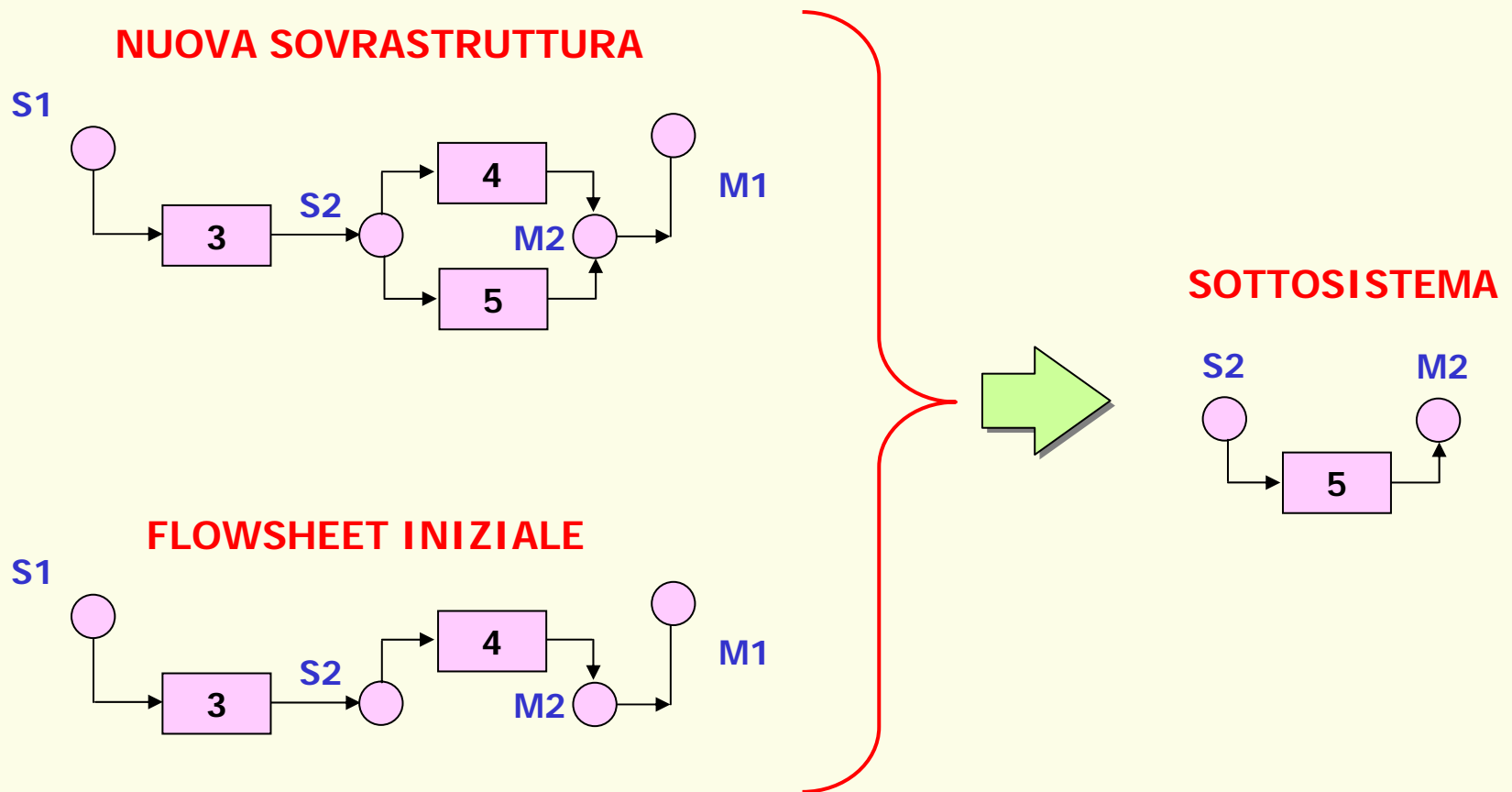


SOTTOSISTEMI



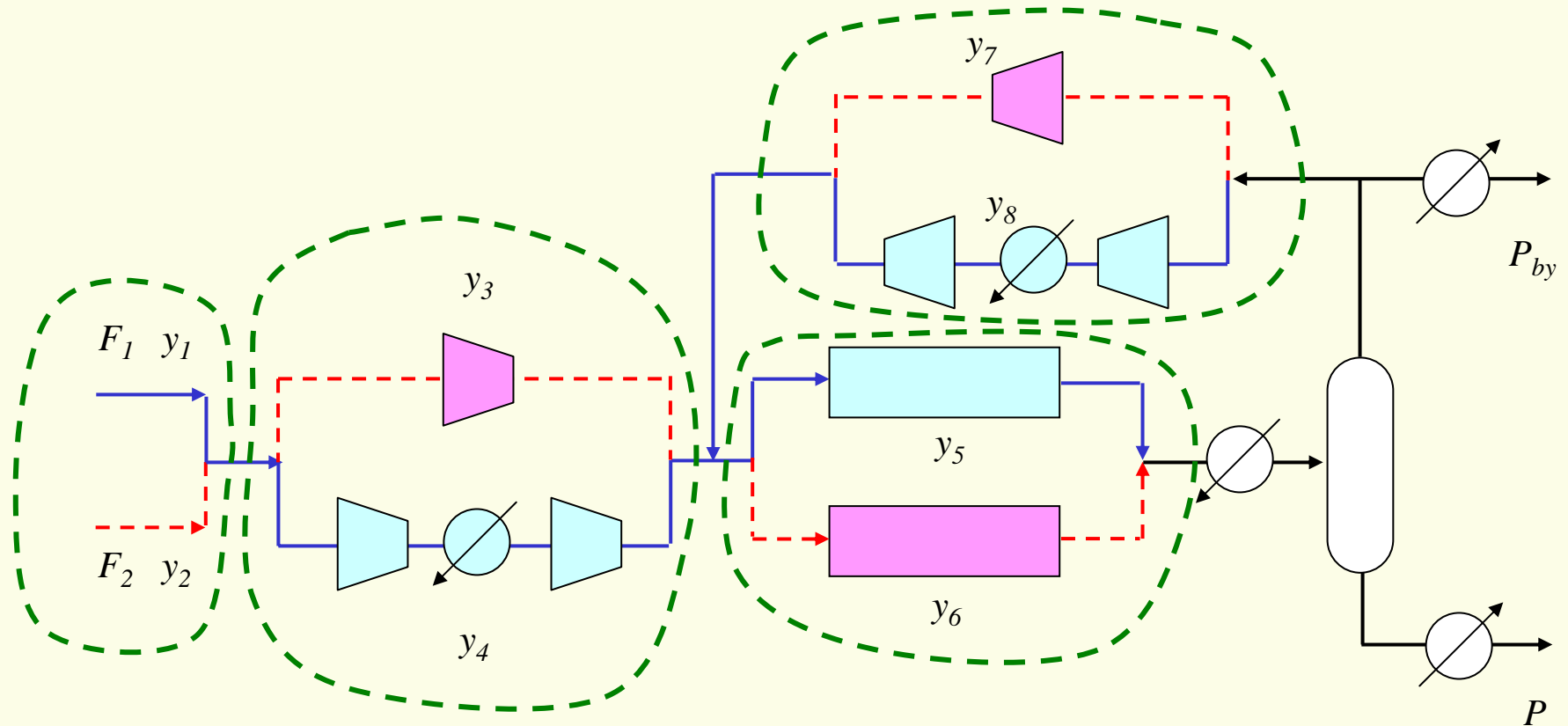
Determinazione dei sottosistemi

Si prosegue nella decomposizione del sottosistema di apparecchiature non esistenti considerandolo come se fosse una nuova sovrastruttura e passando alla sua decomposizione ricorsiva:



Caso applicativo

Si riporta in forma succinta un caso applicativo presentato da Kravanja e Grossmann (1990) sviluppato utilizzando il programma PROSYN per la soluzione di problemi MINLP. L'obiettivo è quello della ottimizzazione strutturale del flowsheet di processo.



Caso applicativo

Linee guida

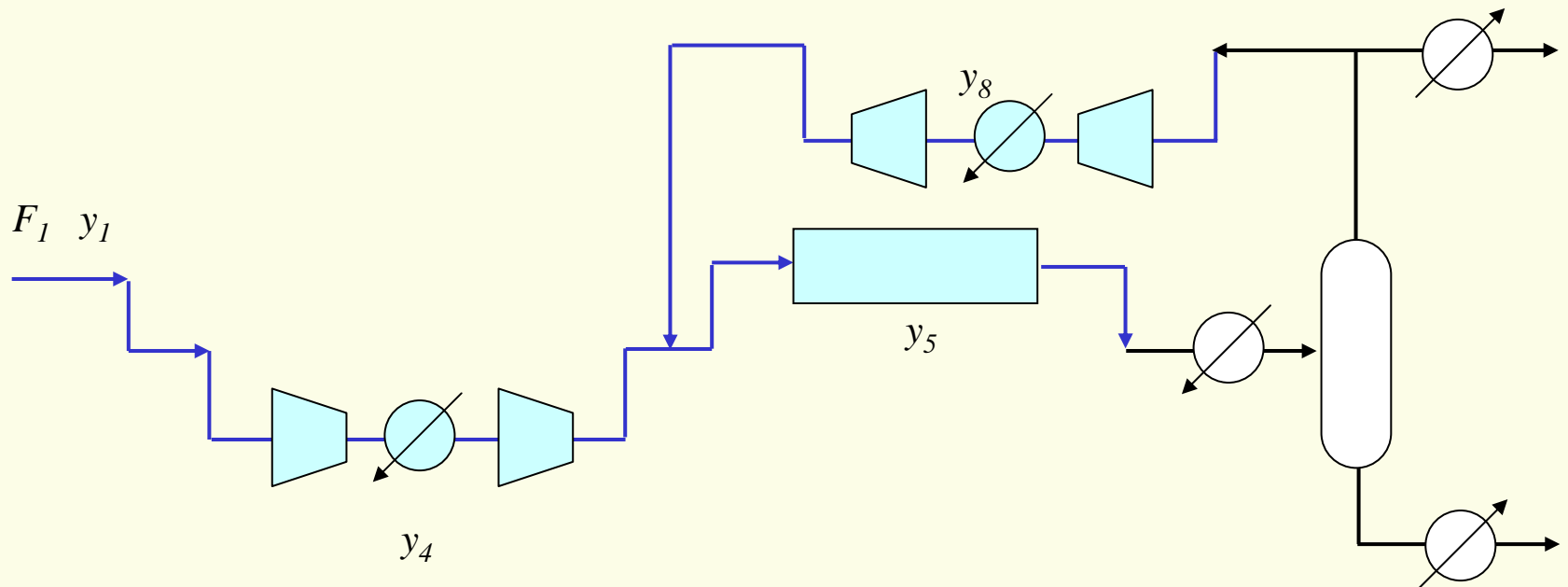
1. Il prodotto C viene ottenuto a partire da due reagenti A e B
2. La reazione avviene ad alta pressione. Perciò l'alimentazione deve essere compressa **o** tramite un compressore a singolo stadio **o** a doppio stadio con raffreddamento intermedio.
3. La reazione è esotermica e può essere condotta alternativamente in due reattori adiabatici. Il primo reattore è meno costoso del secondo ma la conversione per singolo passaggio è minore.
4. Un flash separa il prodotto liquido C dagli inerti e dai reagenti non convertiti. Il prodotto deve avere una purezza almeno del 90% e deve soddisfare ad una richiesta di mercato che sia al massimo pari a 1 kmol/h.
5. Si procede al riciclo dei componenti non reagiti. Per evitare un accumulo di inerti occorre determinare la portata di spurgo ottimale.
6. La corrente di riciclo deve essere ricompresa per sopperire alle perdite di carico. Anche in questo caso occorre optare o per un compressore a singolo stadio o per uno a doppio stadio.
7. La temperatura minima del prodotto e del sottoprodotto deve essere almeno di 400 K.
8. Si desidera massimizzare il profitto annuo.



Caso applicativo

Dimensioni del modello

1. Variabili continue: **279**
2. Variabili intere binarie: **8**
3. Vincoli di uguaglianza e disuguaglianza: **293**

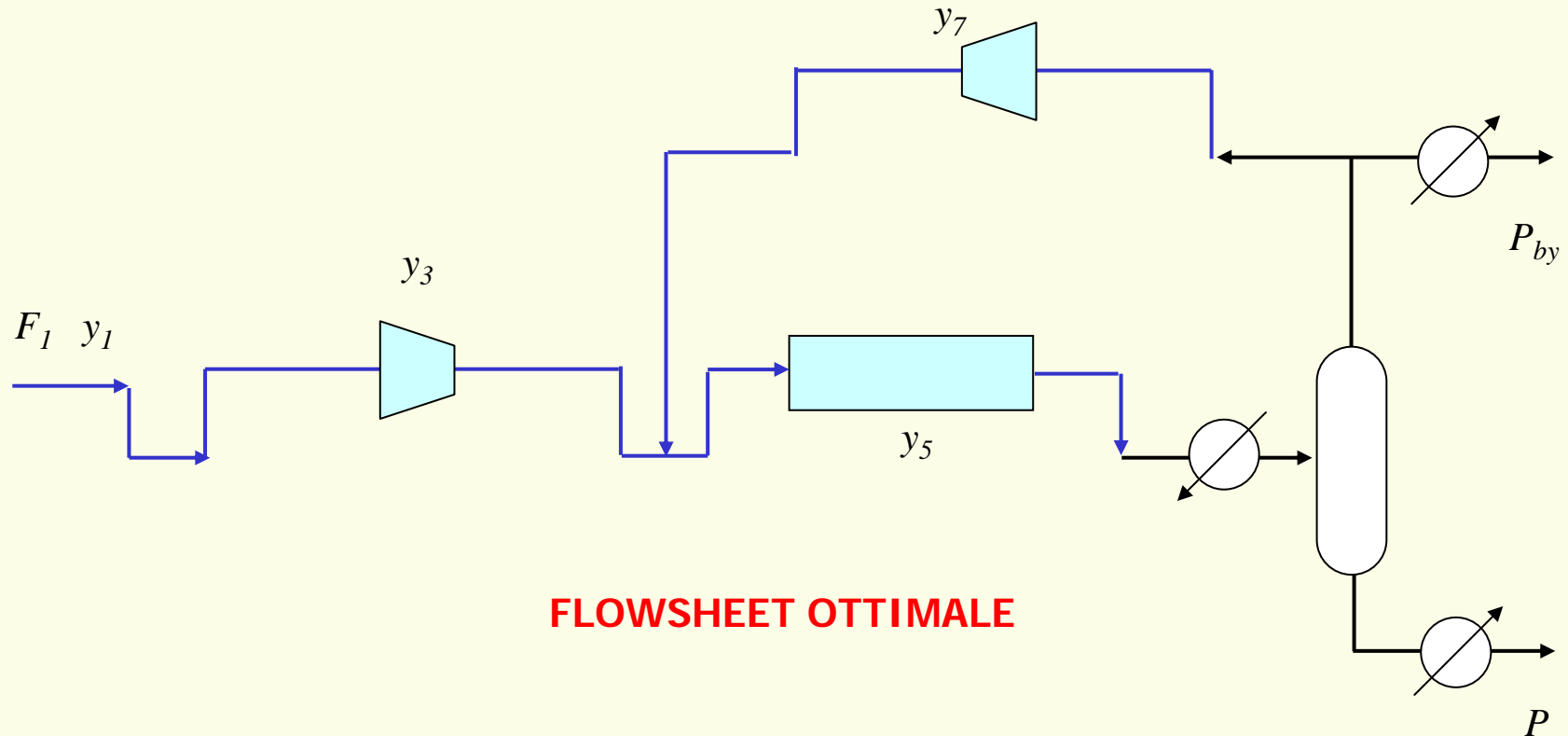


FLWSHEET INIZIALE

Caso applicativo

Risultati della ottimizzazione strutturale

1. Risolvendo contemporaneamente il problema NLP e quello di ottimizzazione della rete di scambio termico si ottiene un profitto annuo pari a: 1,679,000 \$/y. Non considerando i costi della rete di scambio termico il profitto sale a: 2,852,000 \$/y.
2. Tempo di esecuzione: 105 s su di un VAX-8800.



Caso applicativo

Considerazioni finali

1. Se nell'ambito della soluzione del problema MINLP integrato con la rete di scambio termico, si considera un ΔT_{min} fisso, ciò porta ad un'ottimizzazione che non tiene in conto i compromessi tra area di scambio e richiesta energetica. Si individua cioè la sola richiesta di calore da fornire/sottrarre. I risultati che si ottengono per il profitto annuo ammontano in tale caso a 3,403,000 \$/y. Questo valore è addirittura superiore a quello ottenuto con l'approccio integrato che ottimizza anche l'area di scambio, la richiesta energetica e il ΔT_{min} .
2. Andando però a calcolare a posteriori i costi della rete di scambio termico si ha una brutta sorpresa: il profitto annuo diviene negativo con -292,000 \$/y.
3. Ciò dimostra come sia importante mantenere accoppiate ed interagenti le varie voci che compongono la funzione obiettivo complessiva.



Bibliografia

- Biegler, L. T., Grossmann, I. E., Westerberg, A. W., "Systematic Methods of Chemical Process Design", Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, (1997)
- Diwekar, U. M., Grossmann, I. E., Rubin, E. S., *MINLP process synthesizer for a sequential modular simulator*, Ind. Eng. Chem. Res., **31**, 313-322, (1992)
- Douglas, J. M., "Conceptual Design of Chemical Processes", McGraw Hill, New York, (1988)
- Kalitventzeff, B., *Mixed integer nonlinear programming and its application to the management of utility networks*, Eng. Optimization, **18**, 183-207, (1991)
- Kocis G. R., Grossmann, I. E., *Relaxation strategy for the structural optimization of process flowsheets*, Ind. Eng. Chem. Res., **26**, 1869, (1987)
- Kocis G. R., Grossmann, I. E., *A modeling and decomposition strategy for the MINLP optimization of process flowsheets*, Comp. Chem. Engng. **13**, 797, (1989)
- Kravanja, Z., Grossmann, I. E., *PROSYN: an MINLP process synthesizer*, Comp. Chem. Engng. **14**, 1363, (1990)
- Kravanja, Z., Grossmann, I. E., *PROSYN: an automated topology and parameter process synthesizer*, Comp. Chem. Engng. **17**, S87-S94, (1993)
- Kravanja, Z., Grossmann, I. E., *New developments and capabilities in PROSYN – An automated topology and parameter process synthesizer*, Comp. Chem. Engng. **18**, 1097-1114, (1994)

