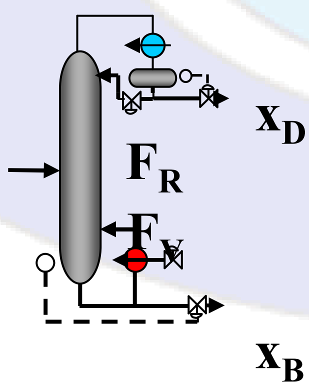
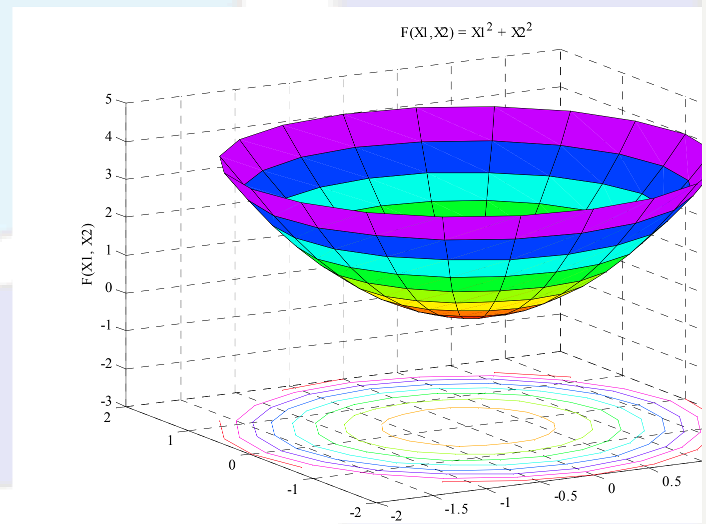
MODELACION Y SIMULACION DE PROCESOS

OPTIMIZACION DE PROCESOS

Prof. FRANCISCO CUBILLOS





OPTIMIZACION

Problema presente en todas las áreas de la ingeniería

“Encontrar la mejor solución a un problema dado”

Cuando :

- Existen muchas soluciones (infinitas)
- Las soluciones pueden ser continuas o discretas
- El conjunto solución puede estar restringido físicamente

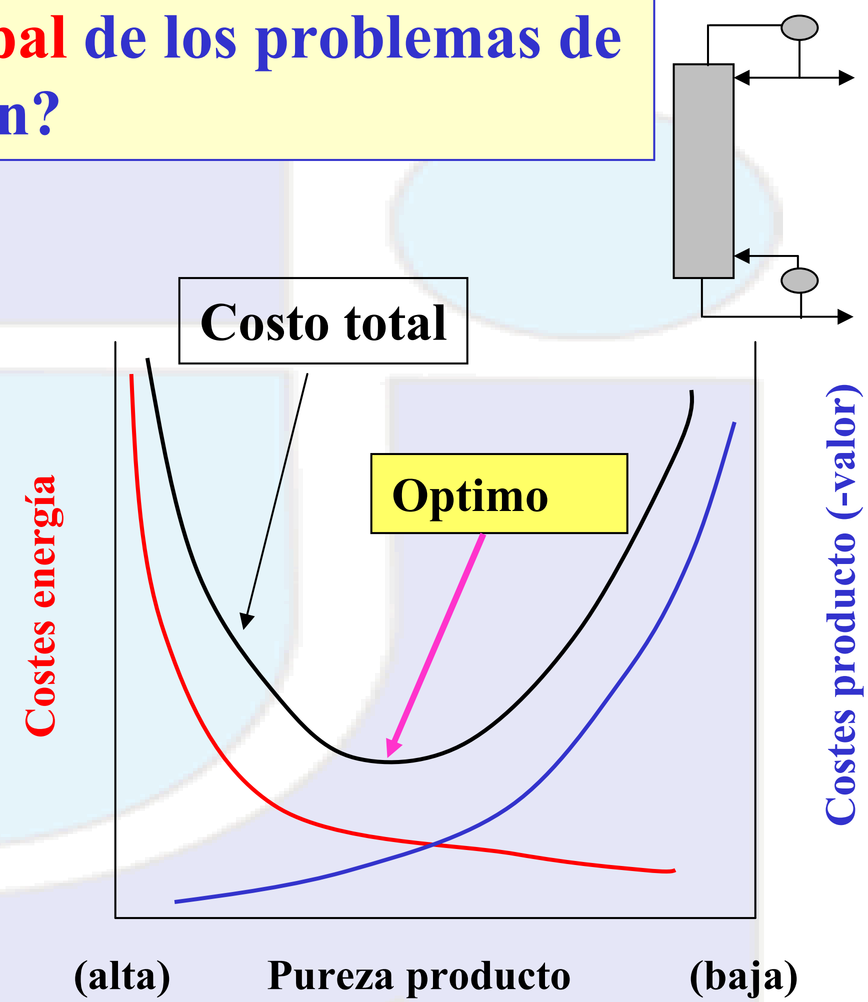
¿Cuál es la característica principal de los problemas de optimización?

Característica principal

Hay una relación entre las variables y el objetivo.

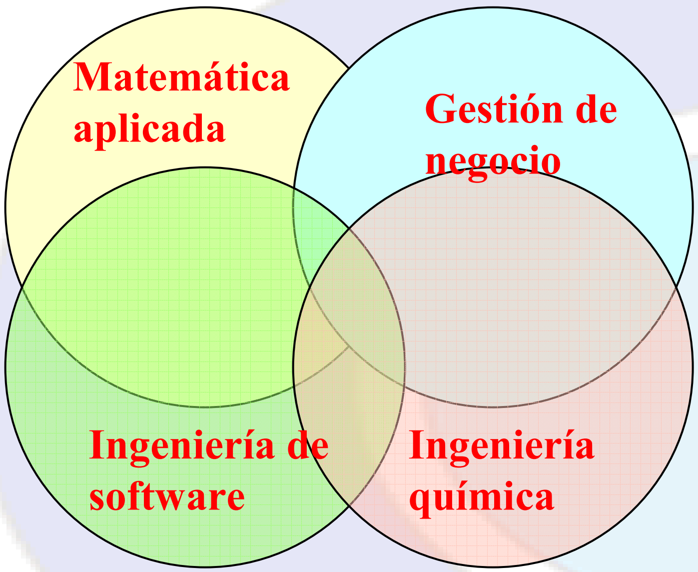
Hay que identificar estos compromisos antes de desarrollar los modelos matemáticos.

Hay que entender el problema cualitativamente antes de resolverlo cuantitativamente.



INTRODUCCIÓN

Quién hace optimización?



Y muchos más!

- **Programación matemática Investigación operativa**

  Incluye estadística, modelado, etc.

- **Optimización aplicada**

  Todas las áreas de ingeniería

- **Planificación y logística**

  Gestión de la cadena de suministro, gestión de recursos.

ORIENTACIONES DE LA OPTIMIZACION

•**MATEMATICA** : Orientado hacia la formulación de problemas y sus propiedades, los algoritmos, convergencia, robustez, existencia de soluciones

•**NUMERICA**: proposición y propiedades de los algoritmos desde un punto de vista practico, orientado a la rapidez, exactitud y estabilidad de los códigos computacionales.

• **INGENIERIA**: Aplicación los métodos de optimización para la solución de problemas reales, factibilidad de las soluciones, implementaciones a nivel de usuario.

En ingeniería de procesos la optimización es parte de los denominados PSE (Sistemas de Ingeniería de Procesos) junto a modelación, simulación y control de procesos.

La optimización en Ingeniería de procesos ha evolucionado desde la formulación de problemas como ejercicio académico y la solución analítica de problemas simples, hace unas décadas atrás, hasta hoy en día, donde un gran conjunto de problemas prácticos pueden ser solucionados efectivamente gracias al desarrollo de técnicas numéricas de solución y a la potencia de calculo de los computadores.

PROBLEMAS TIPICOS RESUELTOS POR TECNICAS DE OPTIMIZACION

- Diseño de equipos
- Diseño optimo de procesos
- Formulación de compuestos
- Optimización operacional
- Schedulling y planificación
- Plantas multipropósito
- Cadena de suministro y stocks
- Integración energética
- Algoritmos de control
- Sintonía de controladores
- Reconciliación y detección de errores
- Estimación de Parámetros
- Selección y posicionamiento de sensores
- Mezclas de productos

Ejemplo : Diseño de equipos

Inputs

X_f

F

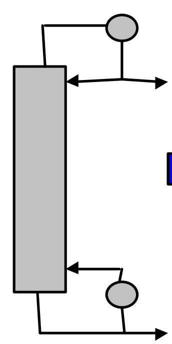
T_f, T_{cw}

Outputs

P

X_D

X_B



Operation

T_{tray}

F_{reflux}

F_{reboil}

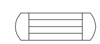
Exchange

Q_{cond}

Q_{reboil}

Equipment

NT, NF, ..



Equipment

A

Fcw

N_{tubes}

Ejemplo : Operación de equipos

Inputs

X_f, F, T_f

T_{cw}, F_{cw}

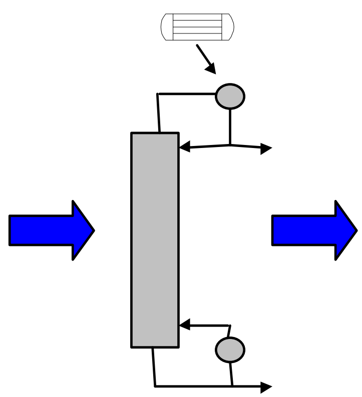
F_{reflux}

F_{reboil}

Equip.

NT, NF

A, N_{tubes}, ..



Operation Outputs

P

XD

XB

Ejemplo : Estimación de modelos y parámetros

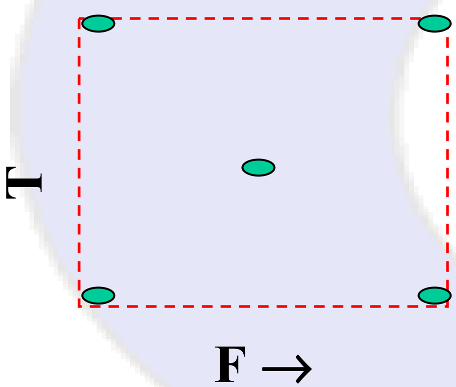
Diseño experimental
Max informacion

→

Sintesis de modelos
Estructura de modelos

→

Evaluación
Est. de parámetros



Max (informacion)

Min (incerteza)

$$A \rightarrow B$$

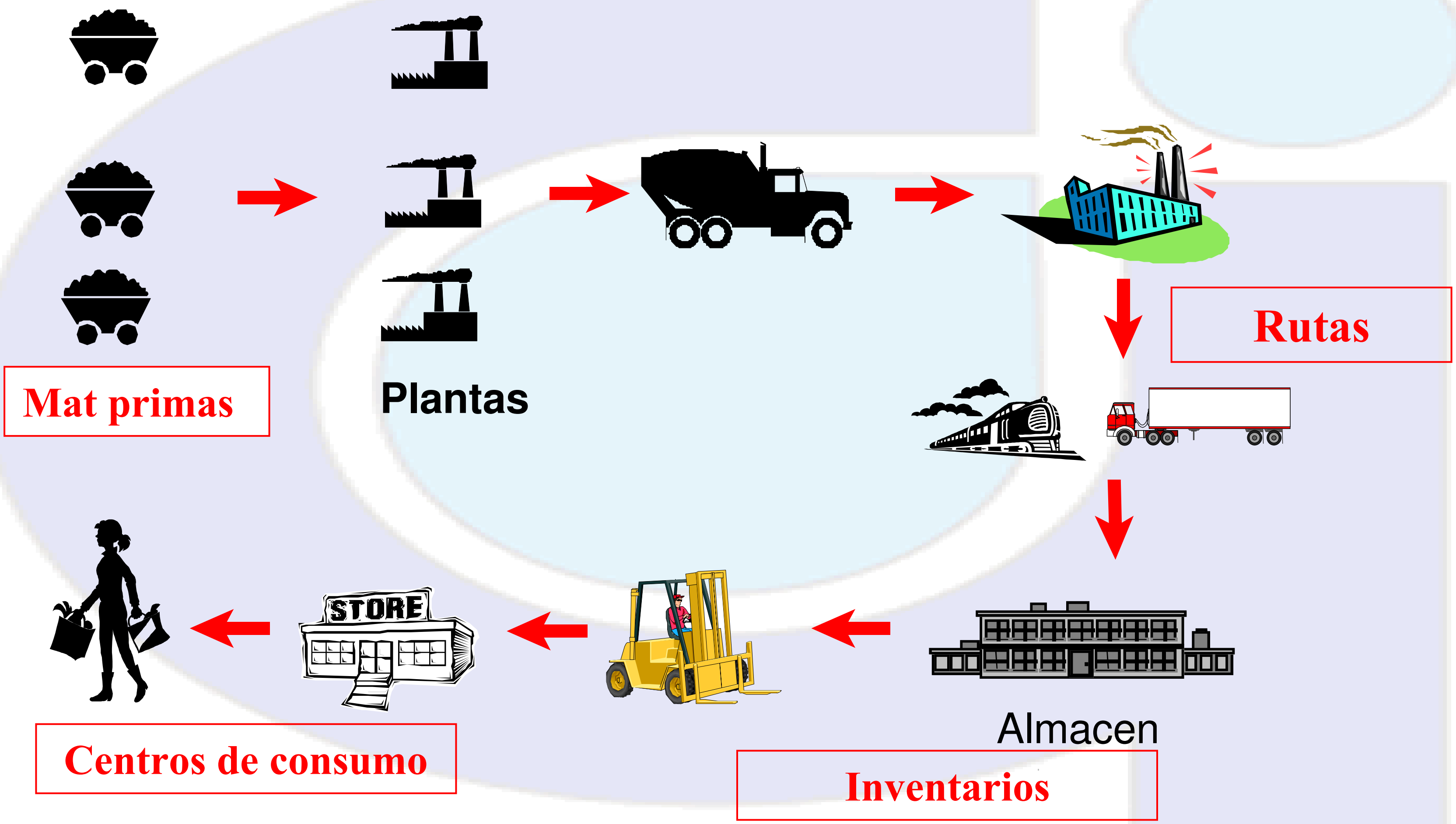
$$-r_A = \frac{k_{01} e^{-E_1/RT} C_A}{1 + k_{02} e^{-E_2/RT} C_B}$$

Min errores|
- **sum cuadrados**

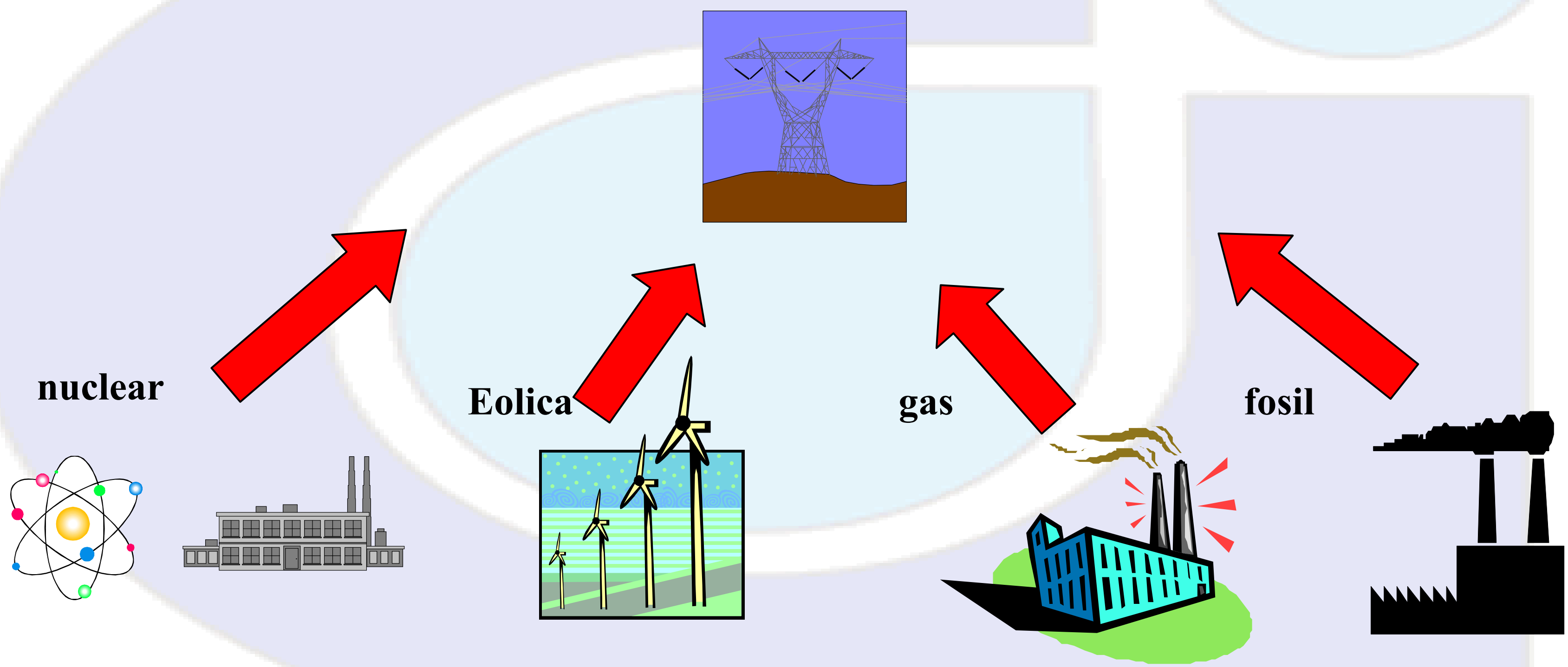
$k_{01} = 1.2e7 \pm \ldots$

$k_{02} = \ldots$

Logistica /Cadena de suministros

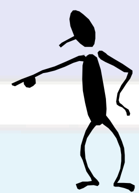


Ejemplo : Matriz generación eléctrica



EL PROBLEMA Y SU SOLUCIÓN

Optimización basada en modelos



Es importante ver los efectos de un error del modelo en la solución

FORMULACION

Utilitarios / propios

De sencillo a muy complejo

Decisiones a tomar → **modelo** → **Método de resolución y software** → **Solución**

La formulación y el método de resolución permiten la solución

ELEMENTOS DE UN PROBLEMA DE OPTIMIZACION

En un problema de optimización distinguimos los siguientes elementos:

•**Función Objetivo** : F.O: Es la formulación de la medida de lo "bueno" (optimo) de la solución. Ej:

- Inversión, Costo total, Retorno económico, Costo unitario
- Producción, Rendimiento Tiempo de procesamiento
- , Volumen equipo

La función objetivo se puede maximizar, minimizar, ser nula o simplemente no existir.

•**Variables de Decisión X,Y** : Corresponden a las variables independientes del problema, es decir el objetivo de un problema de optimización es encontrar el conjunto de variables de decisión (X*,Y*) que optimizan la función objetivo. Luego

Por convención X son variables contínuas (reales) e Y son variables discretas (0,1; V,F)

•**Restricciones o límites (Bounds)** : Corresponden a las restricciones físicas o practicas del problemas puestas como ecuaciones de igualdad, desigualdad, exclusión o inclusión.

Ejemplo, Modelos y ecuaciones del proceso, balances, restricciones y límites operacionales, estados lógicos.

Espacio Factible:

Es la región encerrada entre las restricciones y la función objetivo.

Si la solución de un problema esta en esta región se dice que la solución es ***Factible***. Si la solución esta fuera de esta región se dice que es una solución ***Infactible***

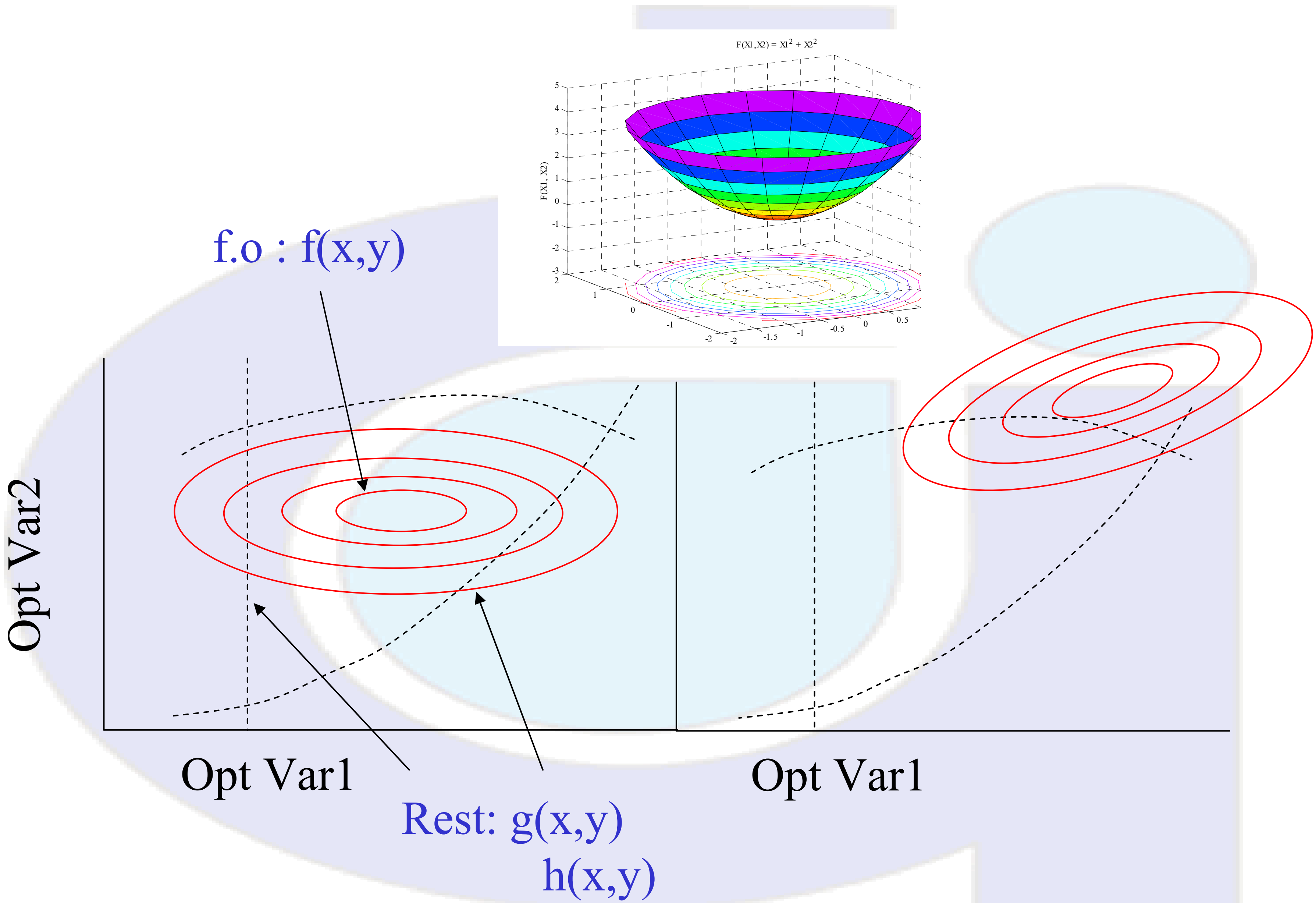
FORMA ESTANDAR DE UN PROBLEMA DE OPTIMIZACION

$$\begin{aligned} &\min \ f(x,y) \\ &st\ h(x,y)=0 \\ &\quad g(x,y)\leq 0 \\ &x\in R^n \quad y\in \{0,1\}^{ny} \end{aligned}$$

Donde ***f***: Función Objetivo, ***h***: restricciones de igualdad,
g: Restricciones de desigualdad,

x; Variables reales, ***y***: Variables enteras

Notar que max ***f*** = min (-***f***)


f.o : f(x,y)
Opt Var2
Opt Var1
Opt Var1
Rest: g(x,y)
h(x,y)

Ejemplo simple: Encontrar la relación entre L y D en un estanque cilíndrico de volumen V que haga mínimo el costo en materiales

$$\text{Min}\left\{ C_T \frac{\pi D^2}{2} + C_S \pi D L = \text{cost} \right\}$$

$$\text{s.t.} \qquad V - \frac{\pi D^2 L}{4} = 0$$

Dos variables continuas (L,D), restricción V

Se puede reemplazar la restricción en la FO para eliminar L quedando solo con la variable D. (problema sin restricciones)

CLASIFICACION DE LOS MÉTODOS DE OPTIMIZACION

DETERMINISTICOS

En base a técnicas de calculo numérico

Requieren modelos matemáticos robustos

Se conoce la tolerancia de la solución

Siempre dan el mismo resultado

Garantizan Optimo Local

ESTOCASTICOS

Técnicas aleatorias de búsqueda simple o Heurística

Modelos mas generales

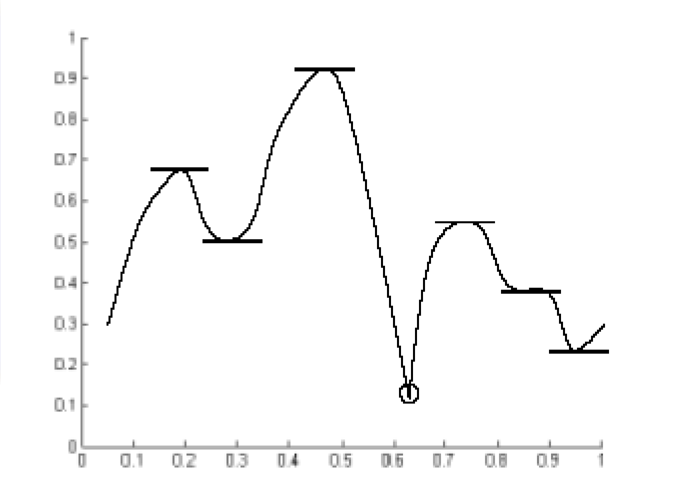
Problemas con el manejo de restricciones

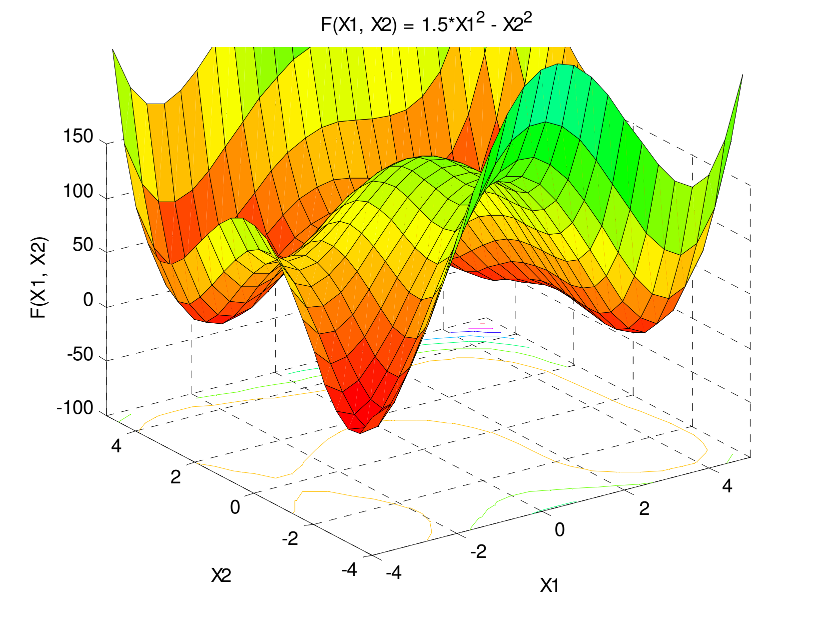
No garantizan tolerancia en solución y resultados variables en un mismo caso

Optimo Global

Optimo global, Óptimos locales :

Un problema de optimación puede tener varias sub-soluciones optimas Óptimos locales, La mejor de ellas es el Optimo Global





CLASIFICACION SEGÚN EL TIPO DE PROBLEMA

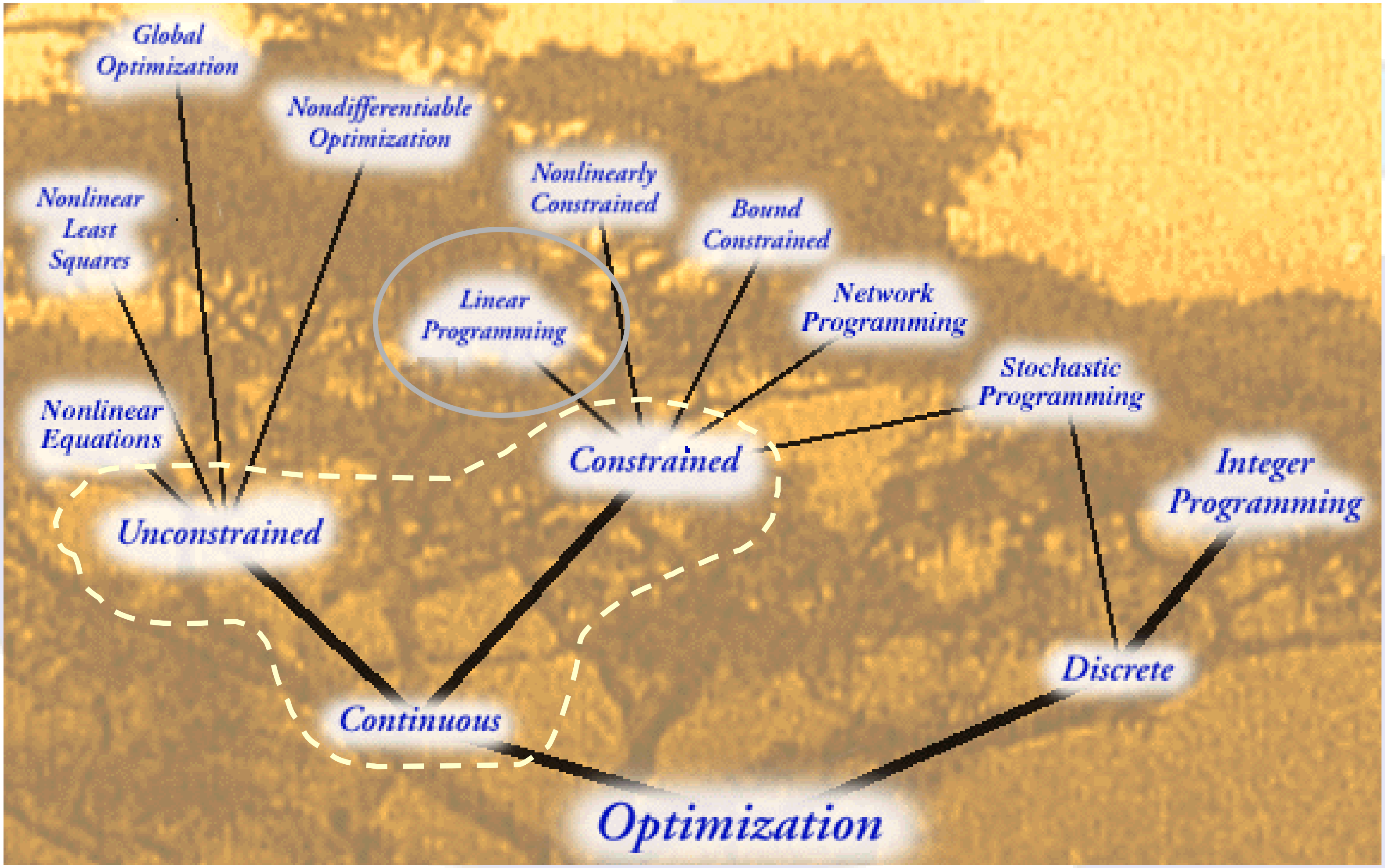
Según el tipo de Función Objetivo y las restricciones, los problemas se clasifican en :

SIN RESTRICCIONES **CON RESTRICCIONES**

De acuerdo a la forma matemática del problema:

- **LP** (Linear Programming): FO y restricciones lineales
- **NLP** (Non linear Programming) FO y/o restricciones no-lineales
- **MILP** (Mixer Integer LP) LP entera mixta
- **MINLP**(Mixer Integer NLP) LP entera mixto

Principales categorías de optimización

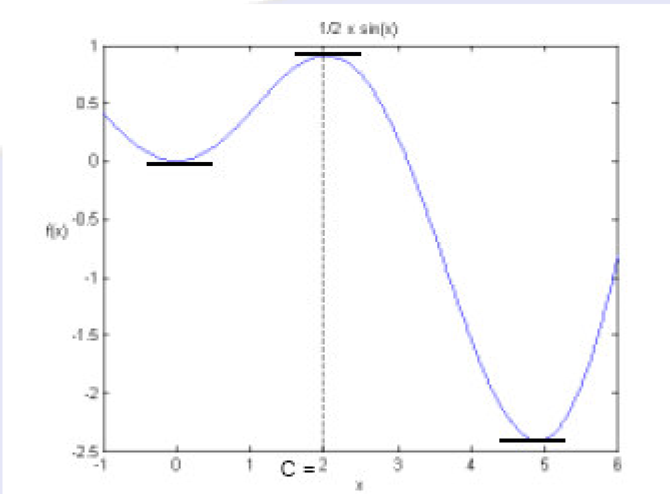


Ajustar el método al problema

Problemas típicos en IP asociados al tipo de optimización

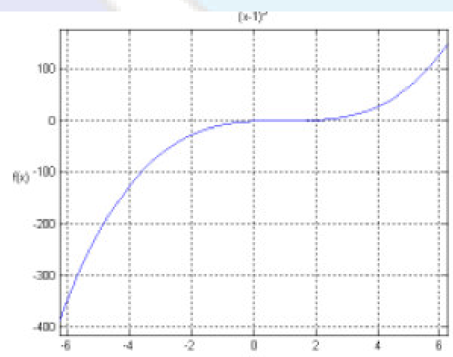
	MILP	MINLP	Global	LP,QP	NLP	SA/GA
HENS	x	x	x	x	x	x
MENS	x	x	x	x	x	x
Separations	x	x				
Reactors		x	x	x	x	
Equipment Design		x			x	x
Flowsheeting		x			x	
Scheduling	x	x		x		x
Supply Chain	x	x		x		
Real-time optimization				x	x	
Linear MPC				x		
Nonlinear MPC			x		x	
Hybrid	x				x	

En la teoría del análisis numérico, el optimo esta relacionado con la derivada de la función:



Optimo $\quad f'(x)=0$

Ej. $f(x)=(x-1^3)$

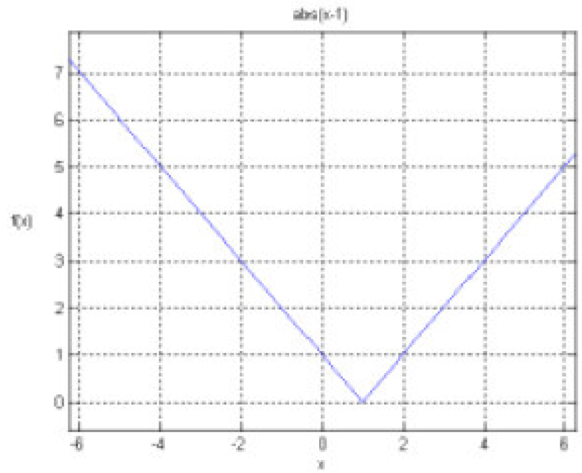


$f'(x)=3(x-1)^2$

$f'(1)=0$

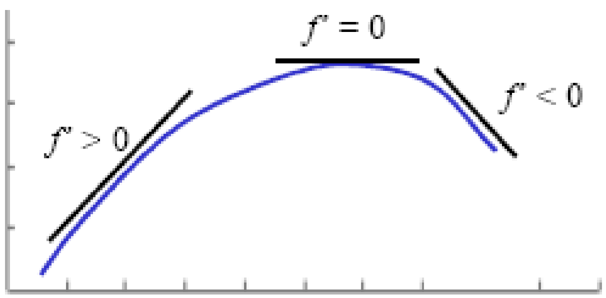
¡Necesaria pero no suficiente ¡

Ej. $f(x) = |x - 1|$

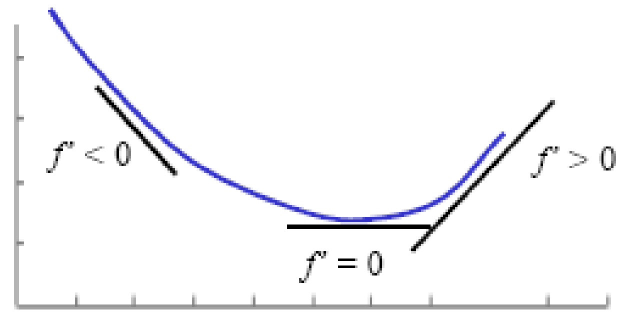


Aca f(x) no es continua, f'(x) no existe sin embargo existe un optimo.

" si no existe f' entonces podria ser un punto optimo"



Máximo Relativo



Mínimo Relativo

También es necesario saber si estamos en presencia de un mínimo o un máximo.

La segunda derivada nos da un criterio para saber si es máximo o mínimo

Sea "c" un número crítico de una función en la cual $f'(c)=0$ y f existe para todos los valores de x en algún intervalo abierto que contenga a "c". Entonces si $f''(c)$ existe y,

i. Si $f''(c)<0$, f tiene un valor máximo relativo en "c".

ii. Si $f''(c)>0$, f tiene un valor mínimo relativo en "c".

Nótese que si $f''(c)=0$ nada puede concluirse.

Optimización Multivariable

Con más de una variable (X1,X2..) definimos el gradiente y la hessiana según :

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right) \quad \text{es el gradiente y,}$$

$$H \equiv \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{vmatrix} \quad \text{es la matriz Hessiana}$$

CONDICION NECESARIA Y SUFICIENTE PARA OPTIMO LOCAL

$$\nabla f(x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*) = 0 \qquad \&$$

$$H(x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*) \text{ sea semi - definida positiva}$$

donde

$$[\nabla f]_i = \frac{\partial f}{\partial x_i} \qquad \& \qquad [H]_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$$

Sea D una matriz simétrica de $n \times n$ definida positiva (negativa). Entonces:

a) D^{-1} existe
b) D^{-1} es definida positiva (negativa)
c) $A\,D\,A^t$ es semidefinida positiva (negativa) para cualquier matriz $A\; m \times n$.

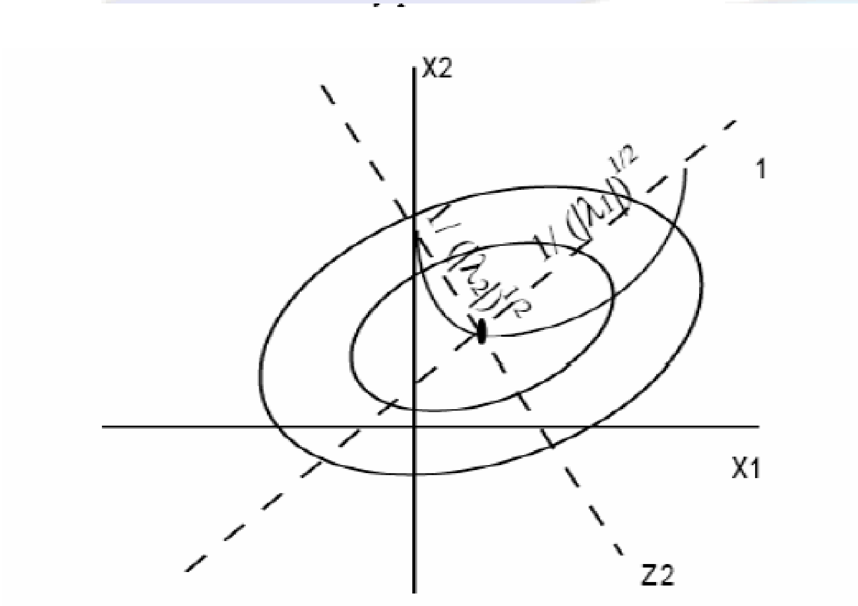
Autovalores

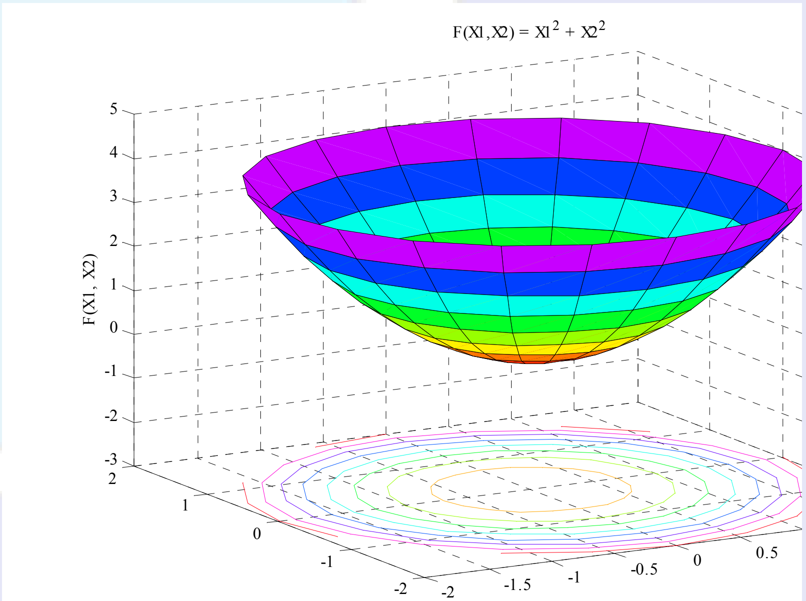
Sea $q(\vec{x}) \equiv \vec{x}\,'D\vec{x}$ una forma cuadrática, con D matriz simétrica. Sean $\lambda_1, \lambda_2, \ldots \lambda_n$ los n autovalores de la matriz D. Entonces:

a) $q(\vec{x})$ es definida positiva si y sólo si $\lambda_i > 0 \;\forall\; i$.
b) $q(\vec{x})$ es definida negativa si y sólo si $\lambda_i < 0 \;\forall\; i$.
c) $q(\vec{x})$ es semidefinida positiva si y sólo $\lambda_i \geq 0 \;\forall\; i$, siendo al menos un $\lambda_j = 0$.
d) $q(\vec{x})$ es semidefinida negativa si y sólo $\lambda_i \leq 0 \;\forall\; i$, siendo al menos un $\lambda_j = 0$.
e) $q(\vec{x})$ es indefinida si y sólo si algún $\lambda_i > 0$ y algún $\lambda_i < 0$.

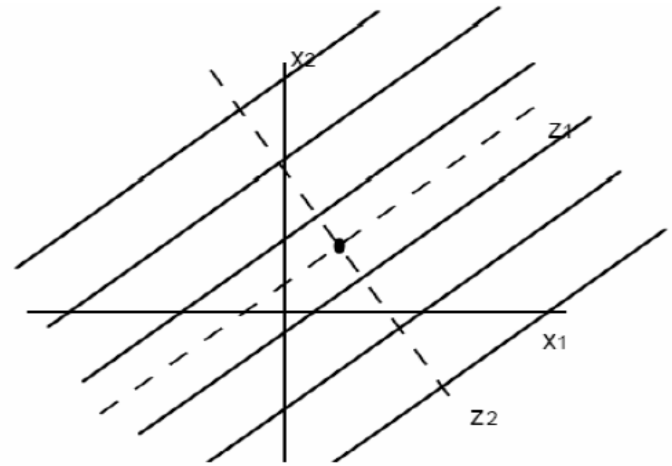
$$\det(A - \lambda\, I) = 0$$

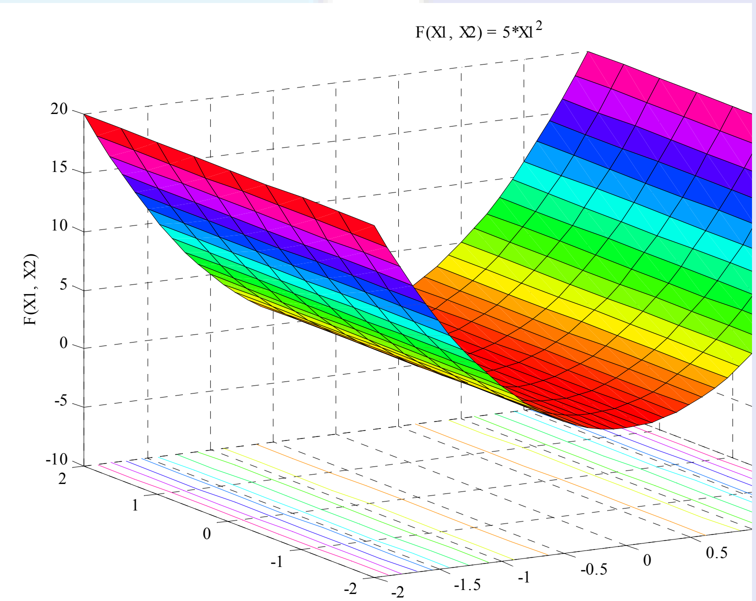
Autovalores son positivos o negativos : El mínimo o máximo puede estar en cualquier región del espacio factible. H Definida





Un autovalor es cero y el otro +/- :El mínimo o máximo esta en una intersección del espacio factible. H Semi-definida - Curvatura cero

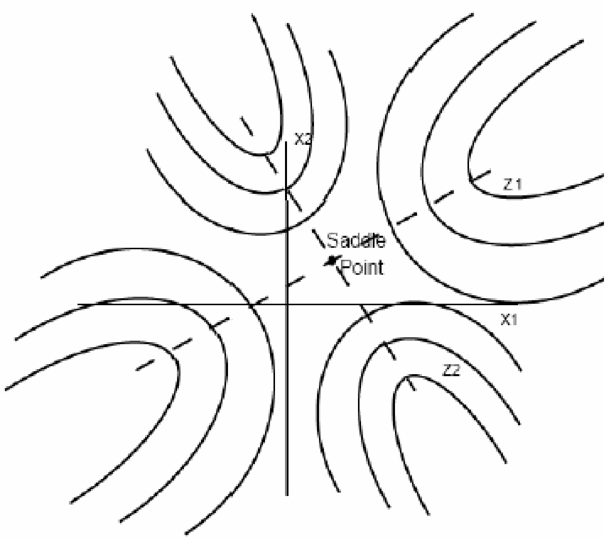


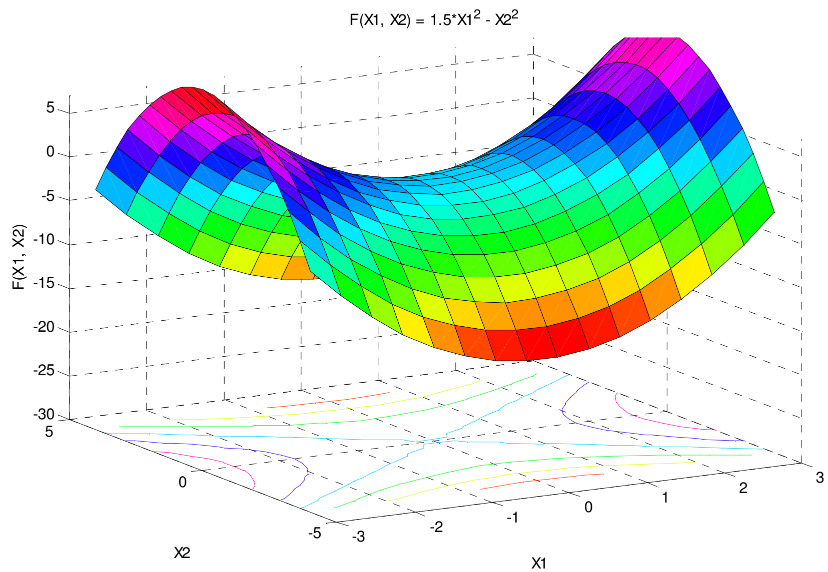


Caso especial del problema LP

Un autovalor es + y el otro - : H es indefinida

Punto de silla

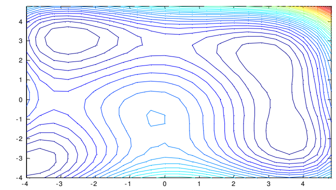




Teorema: Cualquier forma cuadrática semidefinida positiva $q(\vec{x}) = x^t Dx$ donde D es simétrica, es una función convexa en todo E^n. Si es definida positiva es estrictamente convexa.

Teorema: Cualquier forma cuadrática semidefinida negativa $q(\vec{x}) = x^t Dx$ donde D es simétrica, es una función cóncava en todo E^n. Si es definida negativa es estrictamente cóncava.

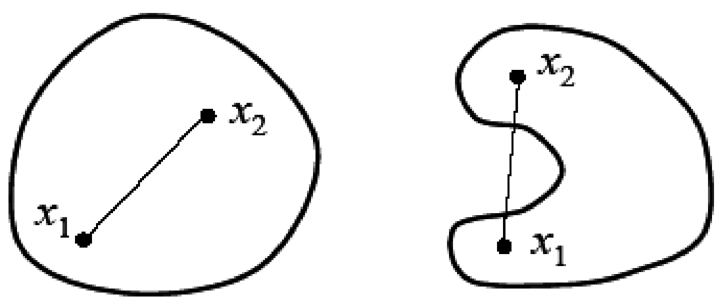
Teorema: Sea $f(\vec{x})$ una función $\in C^2$ (segundas derivadas parciales existen y son continuas). Entonces $f(\vec{x})$ es cóncava (convexa) sobre una región R en E^n si y sólo si su Hessiano es definido o semi definido negativo (positivo) para toda $\vec{x}$ de la región R.



OPTIMO LOCAL O GLOBAL ????

La propiedad de convexidad del problema nos da la respuesta .

Definición: Un conjunto X en $E^n(R^n)$ es convexo si y sólo si para dos puntos cualquiera $\vec{x}_1$ y $\vec{x}_2$ en X y cualquier valor escalar $0 \le \lambda \le 1$, el punto $\vec{x} = \lambda\vec{x}_1 + (1-\lambda)\vec{x}_2$ también está dentro de X.

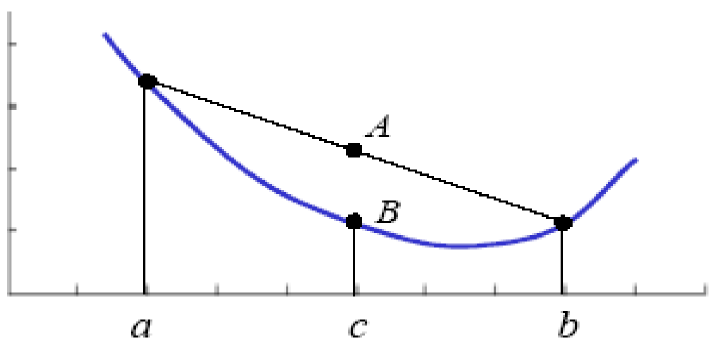


Convexo　　　　No Convexo

Ej. Una esfera, un triángulo, el espacio R^n, una línea recta y un punto son conjuntos convexos. Un hiperplano también es un conjunto convexo.

Definición: Una función escalar $f(\vec{x})$ es una función convexa definida sobre un conjunto convexo X en E^n si para dos puntos cualquiera $\vec{x}_1$ *y* $\vec{x}_2$ *en* X.

$$f(\lambda\vec{x}_1 + (1-\lambda)\vec{x}_2) \leq \lambda f(\vec{x}_1) + (1-\lambda)f(\vec{x}_2) \text{ donde } 0 \leq \lambda \leq 1$$



$$\overline{AC} = \lambda f(a) + (1-\lambda)f(b)$$
$$\overline{BC} = f(\lambda a + (1-\lambda)b)$$

•Cualquier mínimo local de una funcion convexa (sobre una región irrestricta) es un minimo global !

•Una función es convexa si su matriz hesiana es positiva definida

f(x) es	H(x) es	$x^T H(x) x$	Autovalores
estricta convexa	positiva definida	>0	>0
Convexa	positiva semi definida	>=0	>=0
estricta concava	negativa definida	<0	<0
Concava	negativa semi definida	<=0	<=0

EJEMPLO 1 FUNCIONES

$f(x)=2x_1^2-3x_1x_2+2x_2^2 \longrightarrow \begin{vmatrix} 4 & -3 \\ -3 & 4 \end{vmatrix}$ $l_1=1,\quad l_2=7$ **convexa**

$f(x)=x_1^2+x_1x_2+2x_2+4 \longrightarrow \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$ $l_1=1+\sqrt{2}, l_2=1-\sqrt{2}$ **??**

$f(x)=2x_1-3x_2+6 \longrightarrow \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$ $l_1=0, l_2=0$ **convexa y cóncava**

EJEMPLO 2 una región

R1: $-x_1^2+x_2>=1$ $g_1(x)=-x_1^2+x_2-1>=0$

R2 : $x_1-x_2>=-2$ $g_2(x)=x_1-x_2+2>=0$

$$\begin{vmatrix} -2 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$$ convexa

CONVEXA

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{vmatrix}$$ convexa y cóncava

SOLUCION MEDIANTE TECNICAS NUMERICAS

La mayoría de los problemas prácticos de optimización resultan ser de tipo no lineal (NLP)

Métodos para NLP

Los métodos de solución para un problema NLP multivariable se basan en buscar sucesivamente el punto optimo a partir de un valor inicial Xo. Las condiciones de optimalidad pueden ser aproximadas en un intervalo mediante serie de Taylor para dar:

$$0 \approx \nabla f(x) = \nabla f(x^k) + \nabla^2 f(x^k)\,(x - x^k)$$

$$\Rightarrow \quad (x - x^k) \equiv d = -\left(\nabla^2 f(x^k)\right)^{-1} \nabla f(x^k)$$

A la solución recursiva de esta ecuación se le llama "Método de Newton" que requiere el cálculo del gradiente y la hessiana.

0. Guess x^0, Evaluate $f(x^0)$.

1. At x^k, evaluate $\nabla f(x^k)$.

2. Evaluate $B^k = \nabla^2 f(x^k)$ or an approximation.

3. Solve: $\boldsymbol{B^k\, d = -\nabla f(x^k)}$
   If convergence error is less than tolerance:
   e.g., $\|\nabla f(x^k)\| \le \varepsilon$ and $\|d\| \le \varepsilon$ STOP, else go to 4.

4. Find α so that $0 < \alpha \le 1$ and $f(x^k + \alpha\, d) < f(x^k)$ sufficiently (Each trial requires evaluation of $f(x)$)

5. $x^{k+1} = x^k + \alpha\, d$. Set $k = k + 1$ Go to 1.

Ejemplo

Representative Problem (Hughes, 1981)

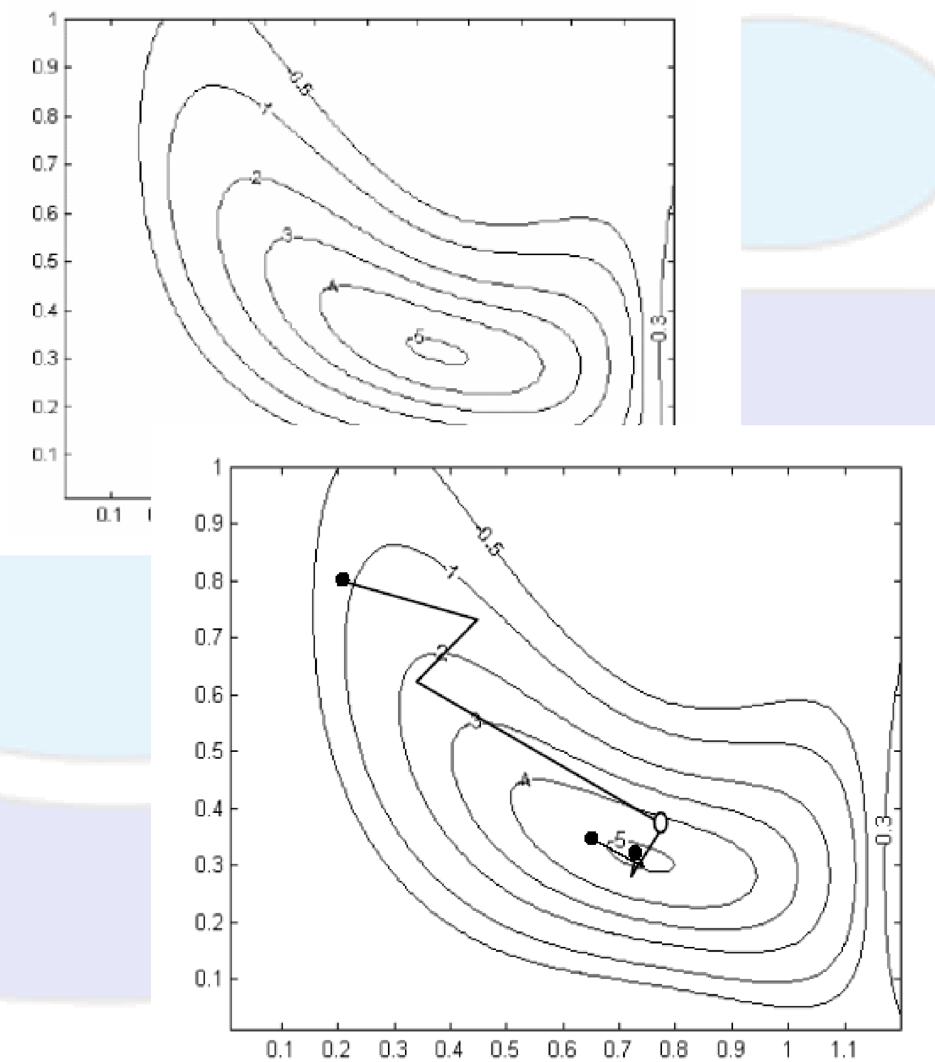
$$Min\ \ f(x_1, x_2) = \alpha\, exp(-\beta)$$
$$u = x_1 - 0.8$$
$$v = x_2 - (a_1 + a_2\, u^2\, (1 - u)^{1/2} - a_3\, u)$$
$$\alpha = -b_1 + b_2\, u^2\, (1+u)^{1/2} + b_3\, u$$
$$\beta = c_1\, v^2\, (1 - c_2\, v)/(1 + c_3\, u^2)$$

a = [0.3, 0.6, 0.2]

b = [5, 26, 3]

c = [40, 1, 10]

x^* = [0.7395, 0.3144] $f(x^*) = 5.0893$



Métodos Cuasi-Newton:

Evitan el calculo riguroso de H^{-1}

Imponen propiedades D-P a H^{-1}

Aproximación de H^{-1} en cada iteración

DFP Formula: (Davidon, Fletcher, Powell, 1958, 1964)

$$B^{k+1} = B^k + \frac{(y - B^k s)y^T + y(y - B^k s)^T}{y^T s} - \frac{(y - B^k s)^T s\, y\, y^T}{(y^T s)(y^T s)}$$

$$(B^{k+1})^{-1} = H^{k+1} = H^k + \frac{s s^T}{s^T y} - \frac{H^k y\, y^T H^k}{y H^k y}$$

where: $s = x^{k+1} - x^k$

$y = \nabla f(x^{k+1}) - \nabla f(x^k)$

<u>BFGS Formula</u> (Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno, 1970-71)

$$B^{k+1} = B^k + \frac{y y^T}{s^T y} - \frac{B^k s\ s^T B^k}{s\,B^k s}$$

$$\left(B^{k+1}\right)^{-1} = H^{k+1} = H^k + \frac{\left(s - H^k y\right)s^T + s\left(s - H^k y\right)^T}{y^T s} - \frac{\left(y - H^k s\right)^T y\, s\, s^T}{\left(y^T s\right)\left(y^T s\right)}$$

Problema NLP con restricciones

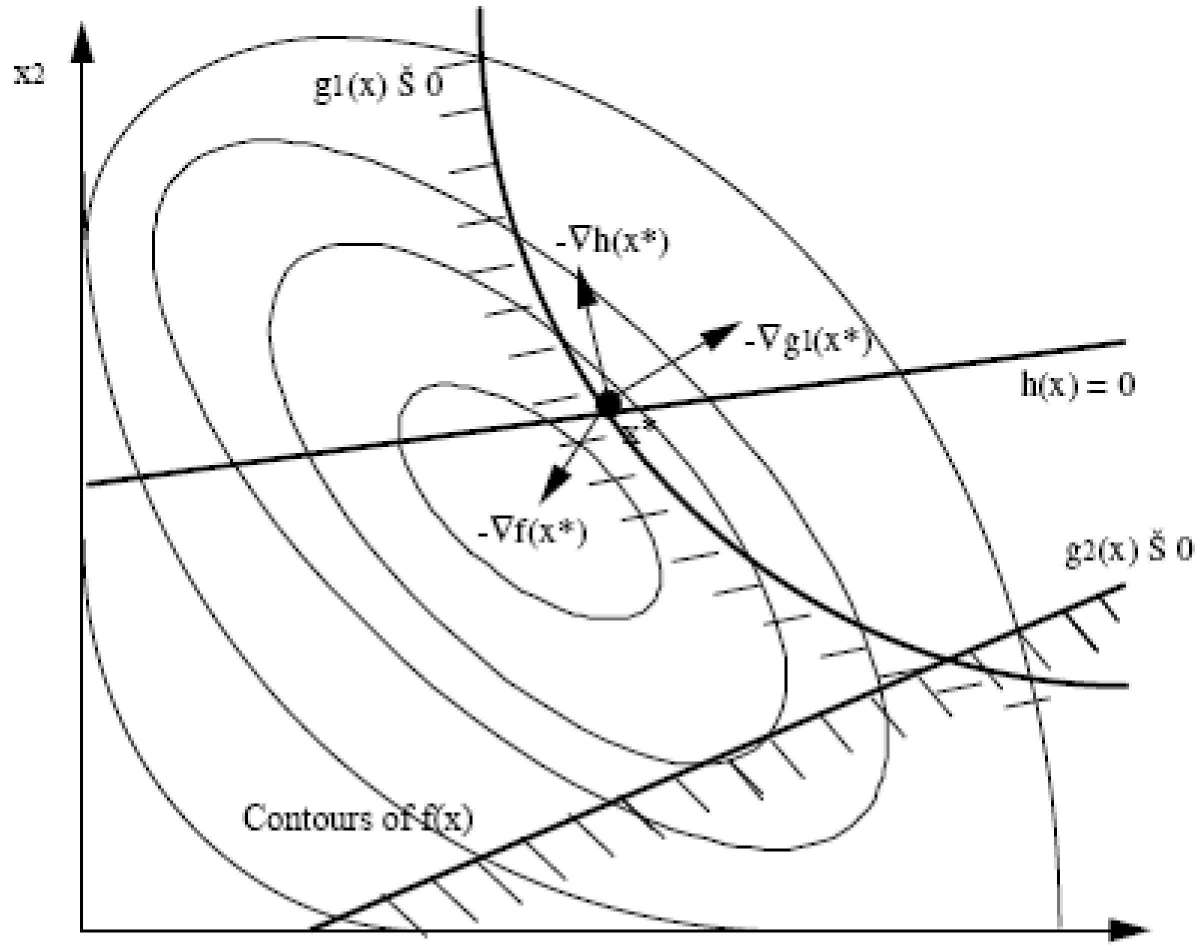
$$
\begin{aligned}
:\quad & \mathrm{Min}_X \; f(x) \\
\text{s.t.} \quad & g(x) \leq 0 \\
& h(x) = 0
\end{aligned}
$$

Condición suficiente para un único óptimo:

f(x) debe ser convexa Y la región factible convexa

Es decir : g(x) Convexa y h(x) lineal

(Condición 2º de Kuhn-Tucker)


x2
g1(x) Š 0
-∇h(x*)
-∇g1(x*)
h(x) = 0
-∇f(x*)
g2(x) Š 0
Contours of f(x)
x1

Condición necesaria (1º Kuhn-Tucker)

Balance de fuerzas (problema extendido irrestricto

$$\nabla L\ (x^*, u, v) = \nabla f(x^*) + \nabla g(x^*)\ u + \nabla h(x^*)\ v = 0$$

$u \geq 0$ Desigualdades en una dirección

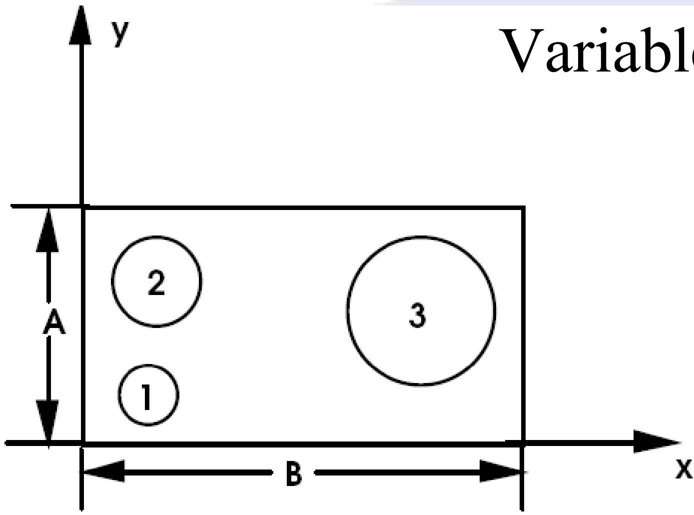
$g\ (x^*) \leq 0,\ \ h\ (x^*) = 0$ Factibilidad

$u_j\ g_j(x^*) = 0$ Complemento

u,v son conocidos como los "multiplicadores de Lagrange", Precios sombras, o variables duales.

"***Variación del optimo con respecto a las restricciones***"

Ejemplo: Encontrar las mínimas dimensiones de la caja que encierre a los 3 cuerpos circulares



Variables $A, B, (x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)$

F.O: min(2A+2B)

Restricciones en la caja

$$\begin{cases} x_1, y_1 \geq R_1 & x_1 \leq B - R_1,\ y_1 \leq A - R_1 \\ x_2, y_2 \geq R_2 & x_2 \leq B - R_2,\ y_2 \leq A - R_2 \\ x_3, y_3 \geq R_3 & x_3 \leq B - R_3,\ y_3 \leq A - R_3 \end{cases}$$

Restricciones de los cuerpos

$$\begin{cases} (x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 \geq (R_1 + R_2)^2 \\ (x_1 - x_3)^2 + (y_1 - y_3)^2 \geq (R_1 + R_3)^2 \\ (x_2 - x_3)^2 + (y_2 - y_3)^2 \geq (R_2 + R_3)^2 \end{cases}$$

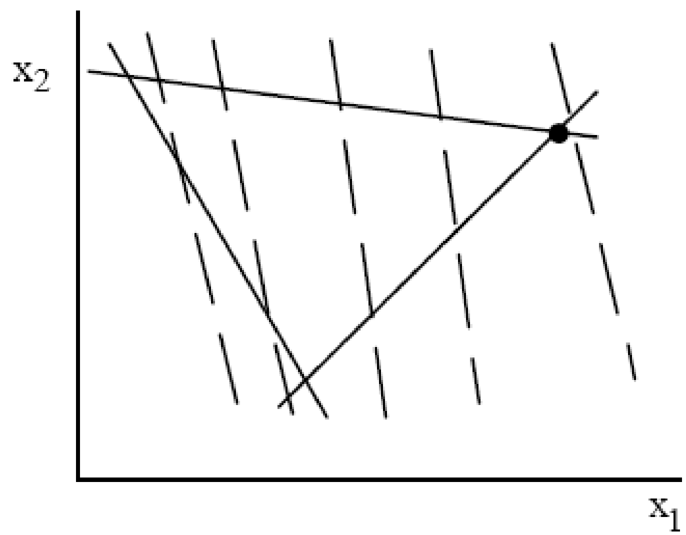
Caso Especial : Programación lineal LP

$$\begin{aligned} \text{Min} \quad & c^T x \\ \text{s.t.} \quad & Ax \le b \\ & Cx = d, \; x \ge 0 \end{aligned}$$

Todas las funciones son convexas, es decir existe optimo global

El optimo se posiciona en los vértices del espacio factible.

Método ***SIMPLEX*** busca en los vértices



Caso Especial 2: Programación cuadrática QP

$$\text{Min } a^T x + 1/2\, x^T B x$$
$$A x \leq b$$
$$C x = d$$

Problema asociado a mínimos cuadrados, estimación de parámetros, aproximación del problema NLP (Sequencial QP)

Este problema tiene algoritmos equivalentes a simplex en rapidez y estabilidad. En algunos casos especiales tiene solución exacta.

ALGORITMOS Y CODIGOS PARA NLP

Existen numerosos algoritmos y códigos para el problema NLP. Los más conocidos (usados) son:

•SQP (sequential Quadratic Programing): Problemas pequeños

• GRG2 - CONOPT (Gradiente reducido con restitución) Solver de excel, GINO. Lento pero robusto.

•MINOS (Gradiente reducido sin restitución), Problemas grandes n>100 muchas restricciones lineales.

SOFTWARES PARA OPTIMIZACION

Solver de Ms-Excel : Problemas diversos, usa GRG2

Optimization Toolbox de Matlab: Conjunto de programas para optimización, SQP, LP, QP para ser usado en conjunto con Matlab-Simulink.

GAMS: Compilador algebraico con rutinas para diversos problemas de optimizacion.

NAG : Códigos en Fortran y otros programas para una gran variedad de algoritmos.

Muchos simuladores traen asociado un optimizador en base a alguno de estos algoritmos. (HYSYS, ASPEN y otros)

Recomendaciones para formular un problema de optimización.

•Prevenir overflows en las funciones (1/x, log, sqrt)

$$x + y - \ln z = 0$$
$$\Downarrow$$
$$x + y - u = 0$$
$$\exp u - z = 0$$

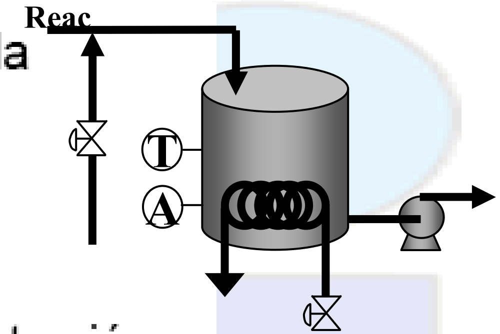
• Preferir los sistemas lineales

$$x_i L + y_i V = F z_i$$
$$\Downarrow$$
$$l_i + v_i = f_i$$
$$L - \sum l_i = 0, \text{ etc.}$$

•Reforzar los limites físicos de las variables

$$\text{e.g.} \quad a \le x \le b$$
$$g(x) \le 0$$

EJEMPLO OPTIMIZACION REACTOR BATCH



Se lleva a cabo una reacción en serie en fase líquida

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

en un reactor por lotes de 500 dm^3. La concentración inicial de A es de 1.6 mol/dm^3. El producto deseado es B y la separación del producto no deseado C es muy difícil y costosa. Dado que la reacción se efectúa a una temperatura relativamente alta, la reacción se puede extinguir fácilmente.

Costo del reactivo A puro: \$10 / mol A
Precio de venta de B puro: \$50 / mol B
Costo de separar A de B: \$50 / mol de A
Costo de separar C de B: \$30 [exp(0.5Cc)-1]
k1=0.4 h-1
k2 =0.01h-1 a 100°C

Se desea maximizar la ganancia

G = Ingreso – Costos

en donde Ingreso = 50 Cb V

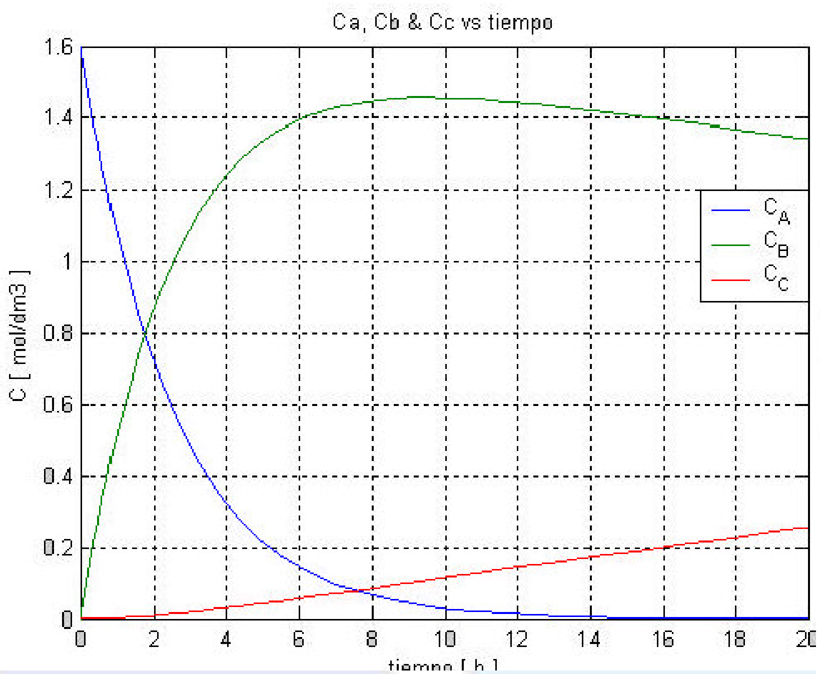
$$\max G = 50 C_B V - \left[10 C_{A0} V + 50 C_A V + 30(e^{0.5 C_C} - 1)\right]$$

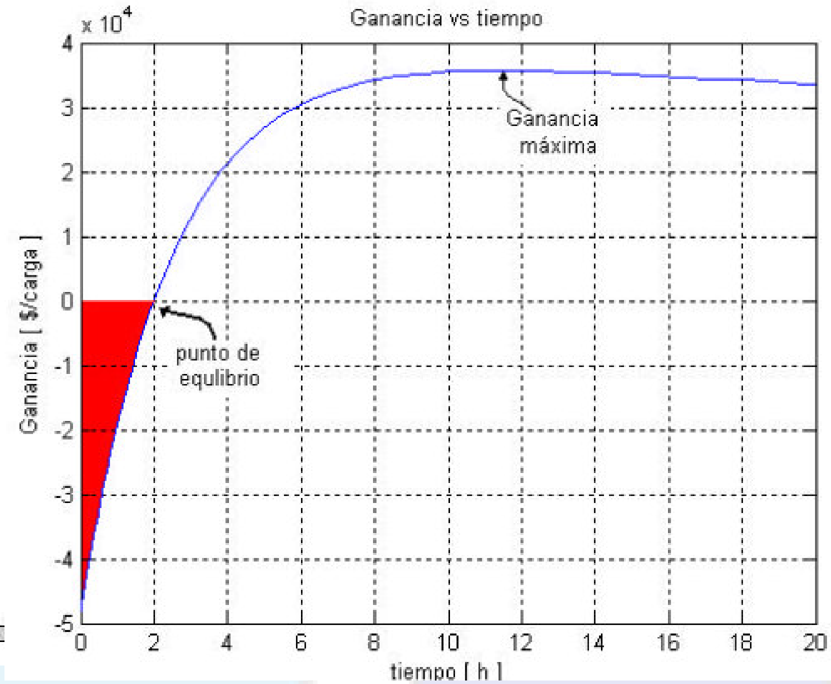
sujeta a las restricciones

$$C_A = C_{A0} e^{-k_1 t}$$

$$C_B = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1}\left[e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right]$$

$$C_C = C_{A0}\left[1 - \frac{k_2 e^{-k_1 t} - k_1 e^{-k_2 t}}{k_2 - k_1}\right]$$





tiempo optimo: 11.1953 horas
ganancia: 27762.15 $/carga
primera derivada: 0.000364 $/(carga-h)
segunda derivada: 143.136857$/(carga-$h^2$)

Solucionar este problemas usando:

- Solver de Excel
- Matlab
- GAMS
- Algoritmos Genéticos
- Analítico