Optimización de Procesos

Vicente Rico Ramírez

Departamento de Ingeniería Química

Instituto Tecnológico de Celaya

Índice de Contenido

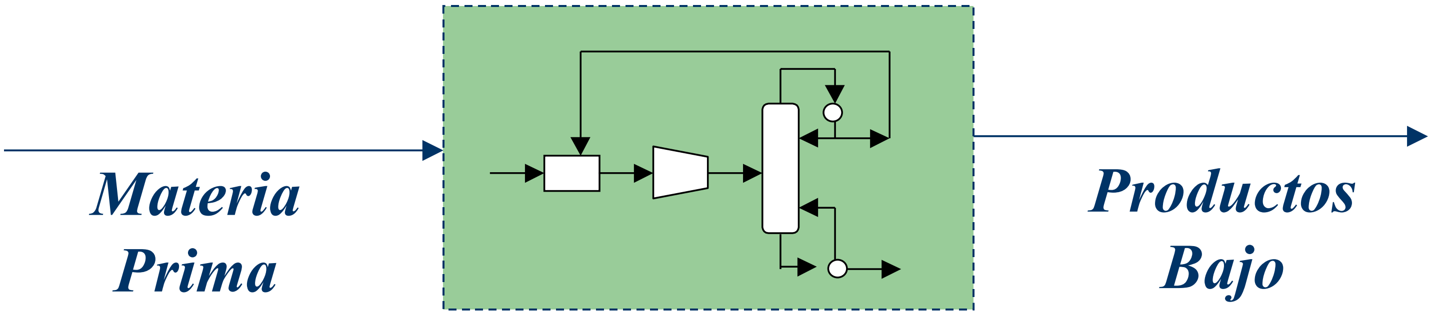
Índice de Contenido

3 Etapas en la Ingeniería de Procesos "*Process Systems Engineering*"

- Síntesis (o Diseño)
- Simulación (o Análisis)
- Optimización

Síntesis (o Diseño) de Procesos

Materia Prima (condiciones iniciales)

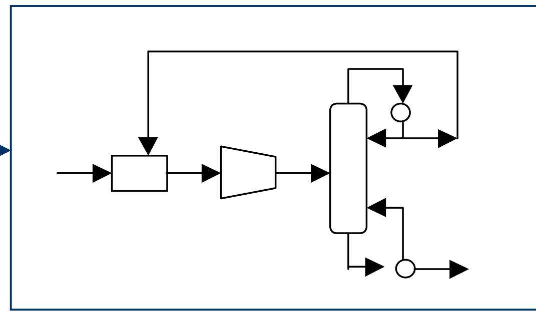


Productos Bajo Especificación

Determinación de la **Estructura del Proceso** para realizar la transformación deseada

Análisis (o Simulación) de Procesos

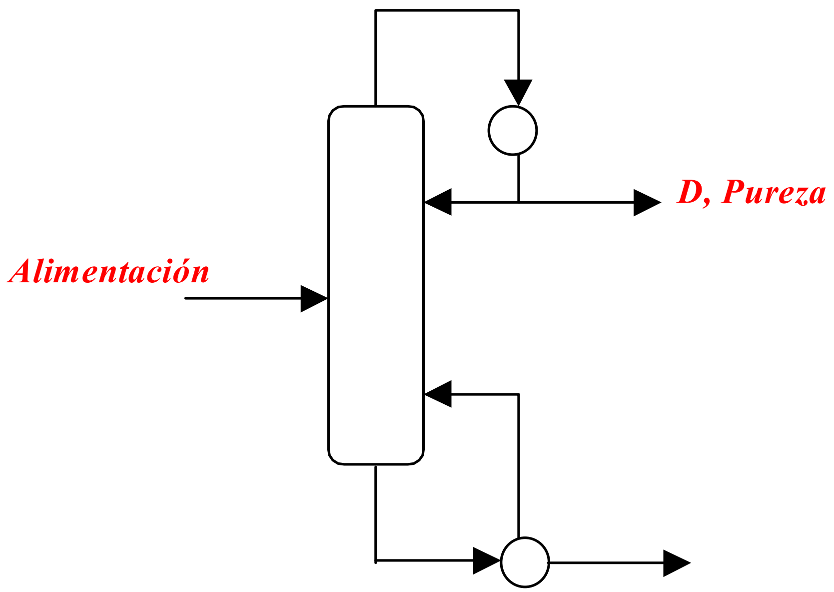
Materia Prima (condiciones iniciales)



Productos Bajo Especificación

Dadas las condiciones de entrada y la estructura del proceso, determinar las **variables de salida**

Optimización de Procesos



Minimizar Costo

N=?

R=?

P=?

Definir una ***función objetivo*** y determinar los mejores valores de las **variables de diseño**

Interacción entre Etapas de la Ingeniería de Procesos

- ✓La **optimización** requiere de la solución de problemas de **simulación** en cada iteración
- ✓La **optimización** es una herramienta imprescindible en el **diseño** de un proceso

Introducción: Algunos Conceptos en la Optimización de Procesos

Previo a la Optimización: Modelación

Representación Matemática de la Fisicoquímica del proceso:

- Balances de Masa
- Balances de Energía
- Relaciones Termodinámicas
- Ecuaciones de Diseño
- Balances de Momentum
- Restricciones Particulares

→ Sistema de Ecuaciones No Lineales

Análisis de Grados de Libertad

Para un sistema de **M Ecuaciones** y **N Variables**, el número de grados de libertad, **F**, está dado por:

$$F = N - M$$

Tres casos:

- $F = 0$ El sistema tiene solución **UNICA**
- $F \geq 1$ El sistema puede **OPTIMIZARSE**
- $F < 0$ El sistema está sobre especificado:

MODELO INCORRECTO

Simulación u Optimización?

Grados de Libertad

F = Número de Variables – Número de Ecuaciones

$F = N - M$

Simulación ó Análisis

$F=0$

El sistema debe ser consistente

Optimización

$F \geq 1$

***Función Objetivo**: Maximizar utilidades, Minimizar costos, etc.*

Función Objetivo: obtención de diseños óptimos

Simulación u Optimización?

Simulación

$$x_1 + x_2 = 2$$
$$x_1 = 3x_2$$
$$x_1, x_2 \geq 0$$

$$F = 2 - 2 = 0$$

Solución única

$$x_1 = 1.5$$
$$x_2 = 0.5$$

Optimización

$$x_1 + x_2 = 2$$
$$x_1, x_2 \geq 0$$

$$F = 2 - 1 = 1$$

Soluciones posibles:

$$\min \quad x_1 - x_2$$

Función objetivo

x_1	x_2
0	2
1	1
1.5	0.5
2	0
$\vdots$	$\vdots$

Solución óptima

Selección de Variables de Diseño

M = 900 N = 1000

¿ Como seleccionar 100 Variables de Diseño ?

Matriz de Incidencia

$$f_1 = \ln(x_1) - 2 = 0$$
$$f_2 = x_2 - 3x_4 - 5 = 0$$
$$f_3 = (x_2)^3 - x_3 + \sqrt{x_4} - 1 = 0$$

	x_1	x_2	x_3	x_4
f_1	X			
f_2		X		X
f_3		X	X	X

Trayectorias de Steward

Variable de Diseño: Cualquiera de x_2, x_3 y x_4

	x_1	x_2	x_3	x_4
f_1	$\boxed{X}$			
f_2		$\boxed{X}$		X
f_3		X	$\boxed{X}$	X

Representación Matemática del Problema de Optimización

- Variables Discretas y Continuas
- Restricciones (Ecuaciones, Desigualdades) Lineales y No Lineales

$$
\begin{aligned}
&\min\ f(\underline{x}, \underline{y}) \\
&s.t. \quad \underline{h}(\underline{x}, \underline{y}) = 0 \\
&\qquad \underline{g}(\underline{x}, \underline{y}) \le 0 \\
&\underline{x} \in R^n, \underline{y} \in \{0,1\}
\end{aligned}
$$

El Modelo Matemático

$$\min \ f(\underline{x}, \underline{y})$$
$$s.t. \quad \underline{h}(\underline{x}, \underline{y}) = 0$$
$$\underline{g}(\underline{x}, \underline{y}) \le 0$$
$$\underline{x} \in R^n, \underline{y} \in \{0,1\}$$

Minimizar Costos
Maximizar Utilidades

Temperatura, Presión, etc.

Límites:
0$\le$ Comp $\le$1

Balances de Materia, Energía, Relaciones de Equilibrio, etc.

Decisiones discretas: ¿ Equipo Existe ?

- **¿ Restricción Lineal o No Lineal ?**

$$2x + 3y = 1$$

$$yx + 3y = 1 \qquad\qquad x^2 + \ln(y) = 1$$

- **¿ Variable Continua o Discreta ?**

$200\text{ K} < \text{Temperatura} < 500\text{ K}$

$T = 253.75\text{ K}$

$T = 493.68\text{ K}$

$\boldsymbol{y}$

$y=0$ | $y=1$

Equipo No Existe | **Equipo Existe**

Clasificación de Técnicas de Optimización

Tipos de Variables

- Enteras
  - **Programación Entera**
- Continuas
  - **Tipos de Restricciones**
    - **Programación Lineal**
    - **Programación No Lineal**
- Enteras+Continuas
  - **Tipos de Restricciones**
    - **Programación Mixta Entera Lineal**
    - **Programación Mixta Entera No Lineal**

Tipos de Problemas de Optimización (Determinística, Estado Estable)

- Programación Lineal (LP)
- Programación Mixta Entera Lineal (MILP)
- Programación No Lineal (NLP)
- Programación Mixta Entera No lineal (MINLP)

Región Factible y Convexidad

$$\min \ f(\underline{x})$$

$$s.t. \quad \underline{h}(\underline{x}) = 0$$

$$\underline{g}(\underline{x}) \leq 0$$

$$\underline{x} \in R^n$$

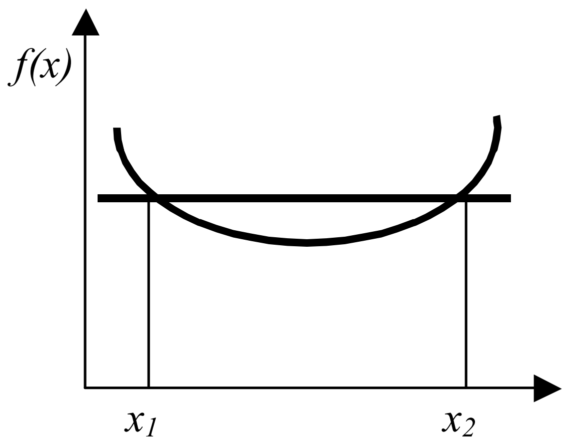
NLP

Función Convexa o No Convexa

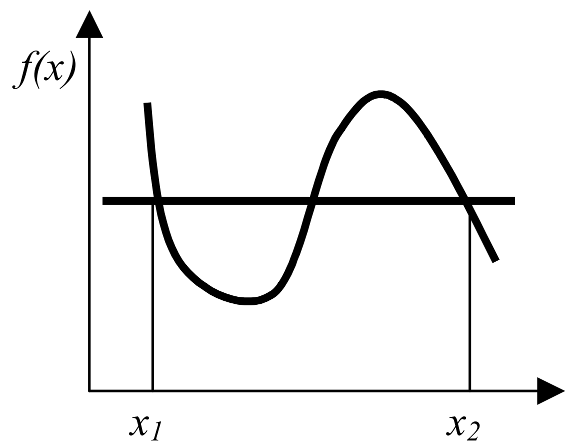
Función Convexa

f(x) es convexa si para toda x_1 y x_2 ε R:

$$f(\alpha x_1 + [1-\alpha]x_2) \le \alpha f(x_1) + (1-\alpha) f(x_2), \quad \forall \alpha \in (0,1)$$



Convexa



No Convexa

Función Convexa?

Función $f(x) = x^3 - 6x^2 + 11x - 6$ *Intervalo* (1,3)

$f(x_1) = f(1) = 0$ $f(x_2) = f(3) = 0$

$$f(\alpha x_1 + [1-\alpha]x_2) \le \alpha f(x_1) + (1-\alpha) f(x_2)$$

$\alpha = 0.25$

$$f(2.5) \le 0.25 f(1) + (0.75) f(3)$$

$$-0.375 \le 0$$

No Convexa

$\alpha = 0.75$

$$f(1.5) \le 0.75 f(1) + (0.25) f(3)$$

$$0.375 \le 0$$

No se cumple

Región Factible y Convexa

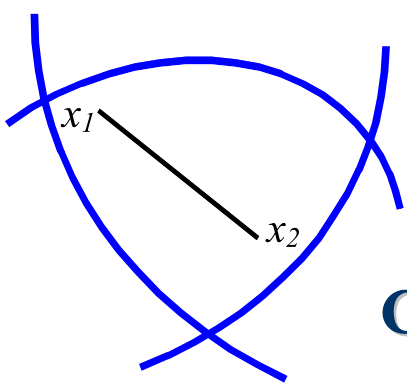
Región Factible. Definición:

$$FR = \{x \mid h(x) = 0, g(x) \le 0, x \in R^n\}$$

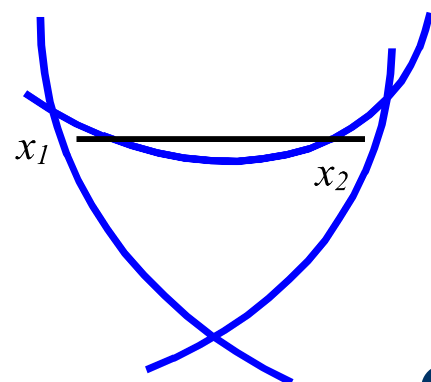
Convexa o No Convexa?

Convexa si para toda x_1 *y* x_2 ε *FR*:

$$x = \alpha x_1 + (1-\alpha)x_2 \in FR, \quad \forall \alpha \in (0,1)$$



Convexa



No Convexa

Técnicas de Optimización

Técnicas de Optimización

- Métodos Simplex y Puntos Interiores (LP)
- "*Branch and Bound*" (Ramificación y Acotamiento) (MILP)
- Estrategia del Conjunto Activo, SQP (Programación Cuadrática Sucesiva) (NLP)
- "*Outer Approximation*" y Descomposición de Benders (MINLP)

Programación Lineal

Programación Lineal

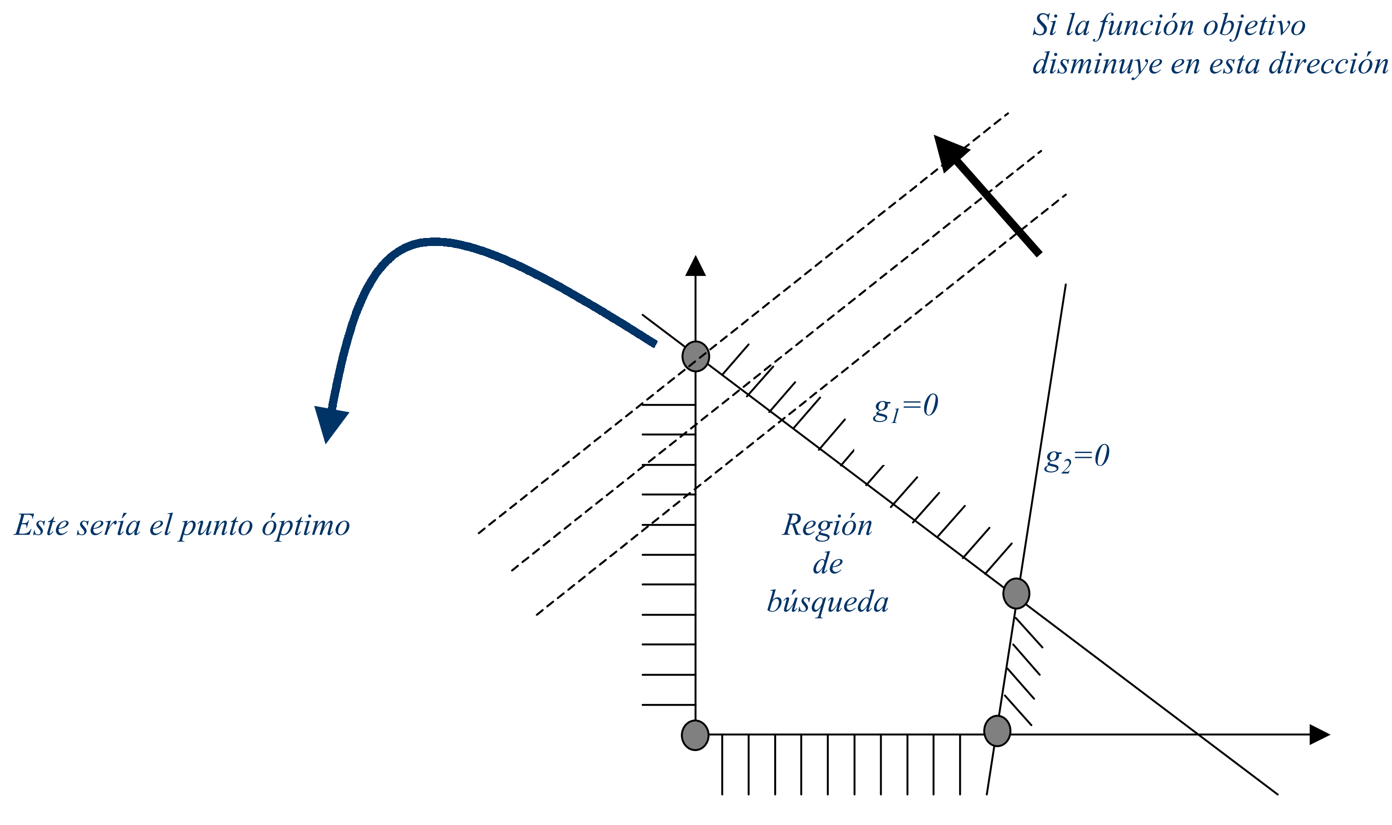
Forma General

$$\min \; c^T x$$
$$s.t. \; \underline{A}x \leq \underline{b}$$
$$x \geq 0$$
$$x \in R^n$$

$$\begin{aligned} &Maximize && 300x_1 + 200x_2 \\ &sujeto\,a && 5x_1 + 2x_2 \leq 180 \\ & && 3x_1 + 3x_2 \leq 135 \\ & && x_1 \leq 25 \end{aligned}$$

$$\underline{c} = \begin{bmatrix} 300 \\ 200 \end{bmatrix} \qquad \underline{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \qquad \underline{A} = \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 3 & 3 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \underline{b} = \begin{bmatrix} 180 \\ 135 \\ 25 \end{bmatrix}$$

Método Simplex



El óptimo se encuentra siempre en un punto "esquina"

Método Simplex

1) Introducir variables "slack" para convertir desigualdades en igualdades. El número de grados de libertad no cambia.

2) Utilizar $\underline{x}=0$ como punto inicial

3) Construir Matriz de Coeficientes

4) Efectuar pasos de eliminación Gaussiana hasta no obtener valores negativos en el renglón correspondiente a la función objetivo

$$\begin{aligned} 5x_1 + 2x_2 &\le 180 \\ 3x_1 + 3x_2 &\le 135 \\ x_1 &\le 25 \end{aligned} \quad \Longrightarrow \quad \begin{aligned} 5x_1 + 2x_2 + s_1 &= 180 \\ 3x_1 + 3x_2 + s_2 &= 135 \\ x_1 + s_3 &= 25 \end{aligned}$$

Método Simplex

Matriz de Coeficientes

x_1	x_2	s_1	s_2	s_3	b	
5	2	1	0	0	180	s_1
3	3	0	1	0	135	s_2
1	0	0	0	1	25	s_3
-300	-200	0	0	0	0	f

Punto inicial

$x_1 = 0$

$x_2=0$

$s_1 = 180$

$s_2=135$

$s_3 = 25$

Eliminación Gaussiana

s_3	x_2	s_1	s_2	s_3	b	
0	2	1	0	-5	55	s_1
0	3	0	1	-3	60	s_2
1	0	0	0	1	25	x_1
0	-200	0	0	300	7500	f

Pivoteo en el Método Simplex

El pivote en los pasos de eliminación Gaussiana se escoge de modo que:

- Columna: el coeficiente de la función objetivo es el más negativo
- Renglón: la menor proporción entre b y el coeficiente de la columna seleccionada

Renglón Pivote

¿Qué ocurre si no se toma la menor proporción?

s_2	x_2	s_1	s_2	s_3	b	
0	-3	1	-5/3	0	-45	s_1
1	1	0	1/3	0	45	x_1
0	-1	0	-1/3	1	-20	s_3
0	300	0	100	0	1350	f

Método Simplex

Eliminación Gaussiana

s_3	s_2	s_1	s_2	s_3	b	
0	0	1	-2/3	-3	15	s_1
0	1	0	1/3	-1	20	x_2
1	0	0	0	1	25	x_1
0	0	0	200/3	100	11500	f

Notas en el Método Simplex

1. En cada punto esquina, un número de variables igual al número de grados de libertad del problema valen cero

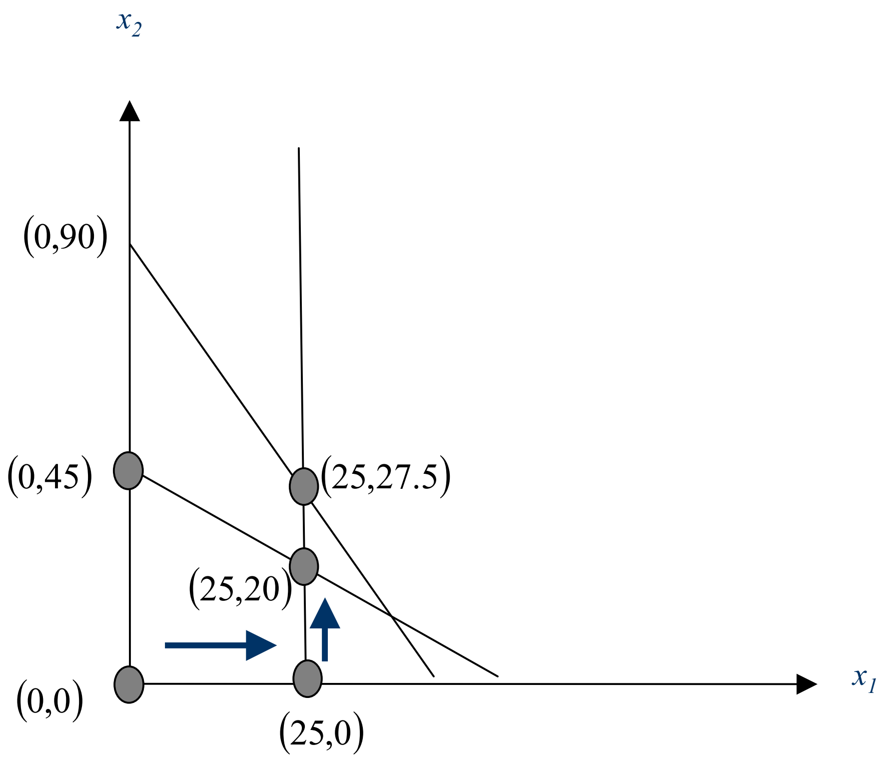
2. Las variables cuyo valor es cero se denominan **no básicas**

3. Cada punto de la trayectoria se dice que es una **solución básica**

4. El algoritmo concluye cuando ya no hay coeficientes negativos en el renglón de la función objetivo

Método Simplex

$$\begin{aligned} &Maximize \quad 300x_1 + 200x_2 \\ &sujeto\, a \quad 5x_1 + 2x_2 \le 180 \\ &\qquad\qquad 3x_1 + 3x_2 \le 135 \\ &\qquad\qquad x_1 \le 25 \end{aligned}$$



El óptimo en el punto (25,20)

Programación No Lineal

Condiciones de Optimalidad

Optimización Sin Restricciones

$$\min \; f(\underline{x})$$
$$\underline{x} \in R^n$$

Condición necesaria: $\vec{\underline{x}}$ es un punto crítico de *f(x)* si se cumple que

$$\nabla f(\vec{\underline{x}}) = \begin{bmatrix} \partial f / \partial x_1 \\ \vdots \\ \partial f / \partial x_n \end{bmatrix} = 0 \quad \longrightarrow$$

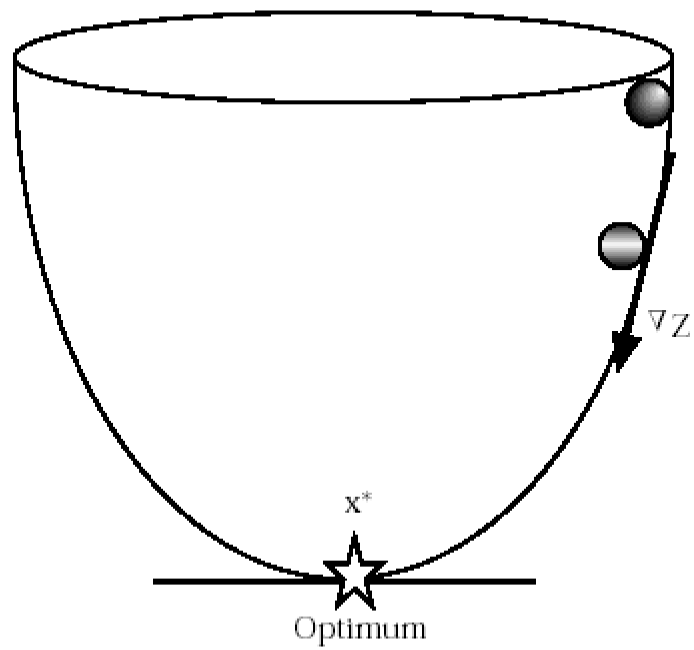
Se obtiene un sistema de n Ecuaciones con n Variables *x*

Condiciones de Optimalidad

Optimización Sin Restricciones

$$\min \ f(\underline{x})$$
$$\underline{x} \in R^n$$

$$\nabla f(\underline{\vec{x}}) = \begin{bmatrix} \partial f / \partial x_1 \\ \vdots \\ \partial f / \partial x_n \end{bmatrix} = 0$$



Condición suficiente: La **Matriz Hessiana** de la función objetivo es definida positiva

$$f(\underline{\vec{x}}+\Delta\underline{x}) = f(\underline{\vec{x}}) + \nabla f(\underline{\vec{x}})^T\,\Delta\underline{x} + \tfrac{1}{2}\Delta\underline{x}^T\,\underline{\underline{H}}\Delta\underline{x}$$

$$\underline{\underline{H}} = \begin{bmatrix} \partial^2 f/\partial x_1^2 & \partial^2 f/\partial x_1\,\partial x_2 \\ \partial^2 f/\partial x_2\,\partial x_1 & \partial^2 f/\partial x_1^2 \end{bmatrix}$$

Hessiana para el caso de **2 variables**

$$\tfrac{1}{2}\Delta\underline{x}^T\,\underline{\underline{H}}\Delta\underline{x} \geq 0$$

Optimización Sin Restricciones

$$\min \quad (x_1)^2 - 6x_1 + (x_2)^2 - 2x_2$$

$$\nabla f(\underline{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 - 6 \\ 2x_2 - 2 \end{bmatrix} = 0 \quad \longrightarrow \quad \begin{matrix} x_1 = 3 \\ x_2 = 1 \end{matrix}$$

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

H es positiva definida

Optimo Global

Condiciones de Optimalidad

Optimización Con m Restricciones de Igualdad

$$\min \ f(\underline{x})$$
$$s.t. \quad \underline{h}(\underline{x}) = 0$$
$$\underline{x} \in R^n$$

Función de Lagrange (función escalar):

$$L(x,\lambda) = f(x) + \lambda^T \ h(x) = f(x) + \sum_j^m \lambda_j \ h_j(x)$$

λ se denominan multiplicadores de Lagrange y constituyen m variables adicionales en el problema

Condición necesaria: Obtener un punto crítico (estacionario) para la **función de Lagrange**

$$\frac{\partial L(\underline{x},\lambda)}{\partial \underline{x}} = \nabla f(\underline{x}) + \sum_j \lambda_j \nabla h_j(\underline{x}) = 0$$

$$\frac{\partial L(\underline{x},\underline{\lambda})}{\partial \underline{\lambda}} = \underline{h}(\underline{x}) = 0$$

Se obtiene un sistema de n+m Ecuaciones con n+m Variables *x* y *λ*

Condición suficiente: La **Matriz Hessiana** de la **función de Lagrange** es definida positiva

Optimización con Restricciones de Igualdad

$$\min \quad (x_1)^2 - 6x_1 + (x_2)^2 - 2x_2$$
$$s.t. \quad x_1 - x_2 - 2 = 0$$

$$\nabla f(\underline{x}) + \sum_j \lambda_j \nabla h_j(\underline{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 - 6 \\ 2x_2 - 2 \end{bmatrix} + \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = 0$$

$$\underline{h}(\underline{x}) = x_1 - x_2 - 2 = 0$$

$$2x_1 - 6 + \lambda_1 = 0$$
$$2x_2 - 2 - \lambda_1 = 0$$
$$x_1 - x_2 - 2 = 0$$

Condiciones de Optimalidad

Optimización Con m Restricciones de Igualdad y r de Desigualdad

$$\min \; f(\underline{x})$$
$$s.t. \quad \underline{h}(\underline{x}) = 0$$
$$\underline{g}(\underline{x}) \leq 0$$
$$\underline{x} \in R^n$$

Función de Lagrange Aumentada (función escalar):

$$L(\underline{x},\underline{\lambda},\underline{\mu}) = f(\underline{x}) + \underline{\lambda}^T \underline{h}(\underline{x}) + \underline{\mu}^T \underline{g}(\underline{x}) = f(\underline{x}) + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j \, h_j(\underline{x}) + \sum_{k=1}^{r} \mu_k \, g_k(\underline{x})$$

μ se denominan multiplicadores de Karush-Kuhn-Tucker y constituyen r variables adicionales en el problema

Condición necesaria: Obtener un punto crítico (estacionario) mediante el **Teorema de Karush-Kuhn-Tucker**

$$\frac{\partial L(\underline{x},\underline{\lambda},\underline{\mu})}{\partial \underline{x}} = \nabla f(\underline{x}) + \sum_j \lambda_j \nabla h_j(\underline{x}) + \sum_k \mu_k \nabla g_k(\underline{x}) = 0$$

$$\frac{\partial L(\underline{x},\underline{\lambda},\underline{\mu})}{\partial \underline{\lambda}} = \underline{h}(\underline{x}) = 0$$

$$\mu_k(\underline{x}) \cdot g_k(\underline{x}) = 0$$

$$\mu_k(\underline{x}) \geq 0 \qquad g_k(\underline{x}) \leq 0$$

Se obtiene un sistema de n+m+r Ecuaciones con n+m+r Variables *x, μ y λ*

Condición suficiente: La **Matriz Hessiana** de la **función de Lagrange Aumentada** es definida positiva

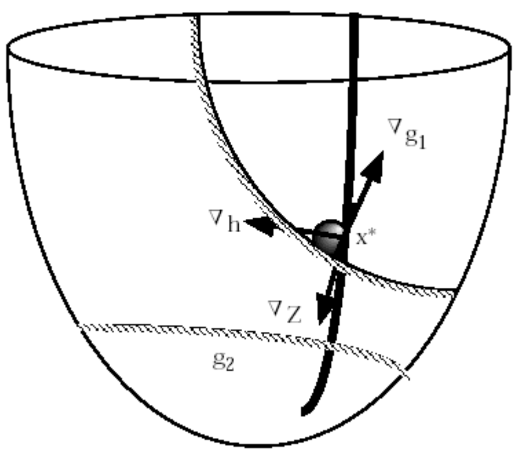
Condición necesaria:

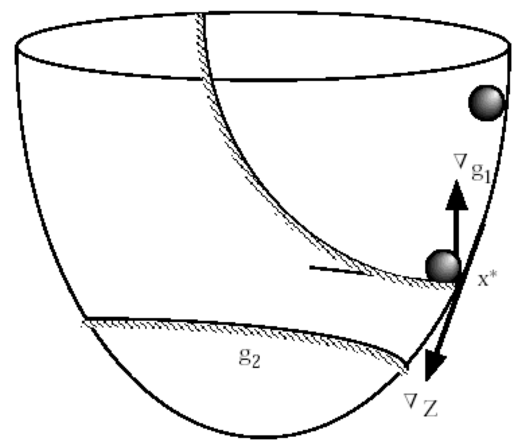
$$\frac{\partial L(\underline{x},\underline{\lambda},\underline{\mu})}{\partial \underline{x}} = \nabla f(\underline{x}) + \sum_j \lambda_j \nabla h_j(\underline{x}) + \sum_k \mu_k \nabla g_k(\underline{x}) = 0$$

$$\frac{\partial L(\underline{x},\underline{\lambda},\underline{\mu})}{\partial \underline{\lambda}} = \underline{h}(\underline{x}) = 0$$

$$\mu_k(\underline{x}) \cdot g_k(\underline{x}) = 0$$

$$\mu_k(\underline{x}) \geq 0 \qquad g_k(\underline{x}) \leq 0$$





Optimización con Restricciones de Desigualdad

$$\min\ f(\underline{x}) = \tfrac{1}{2}\left(x_1^2 + x_2^2\right) - 3x_1 - x_2$$

$$s.t. \quad g_1 = -x_1 + x_2 \le 0$$

$$g_2 = x_1 - \tfrac{1}{2}x_2 - 2 \le 0$$

Note:

$$\nabla f(\underline{x}) + \sum_k \mu_k\ \nabla h_k(\underline{x}) = \begin{bmatrix} x_1 - 3 \\ x_2 - 1 \end{bmatrix} + \mu_1 \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} + \mu_2 \begin{bmatrix} 1 \\ -1/2 \end{bmatrix} = 0$$

$$\Downarrow$$

$$x_1 - \mu_1 + \mu_2 = 3$$

$$x_2 + \mu_1 - \tfrac{1}{2}\mu_2 = 1$$

$$\mu_1\left(-x_1 + x_2\right) = 0$$

$$\mu_2\left(x_1 - \tfrac{1}{2}x_2 - 2\right) = 0$$

Programación No Lineal

Estrategia del Conjunto Activo (Active Set Strategy)

Solución al Conjunto de Ecuaciones KKT

$$\nabla f(\underline{x}) + \sum_j \lambda_j \nabla h_j(\underline{x}) + \sum_k \mu_k \nabla g_k(\underline{x}) = 0$$

$$\underline{h}(\underline{x}) = 0$$

$$\mu_k(\underline{x}) \cdot g_k(\underline{x}) = 0$$

$$\mu_k(\underline{x}) \geq 0 \qquad g_k(\underline{x}) \leq 0$$

Desigualdades

$$g_k(\underline{x}) = 0$$

Activa

$$g_k(\underline{x}) < 0$$

Inactiva

Programación No Lineal

Estrategia del Conjunto Activo

1) Definir conjunto activo. Inicialmente:

$$J_1 = \{k \mid g_k = 0\}$$

2) Formular ecuaciones KKT

$$J_1 = \varnothing \Rightarrow \quad g_k > 0 \quad \mu_k = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\nabla f(\underline{x}) + \sum_j \lambda_j \nabla h_j(\underline{x}) + \sum_{k \in J_1} \mu_k \nabla g_k(\underline{x}) = 0$$

$$\underline{h}(\underline{x}) = 0$$

$$g_k(\underline{x}) = 0 \quad k \in J_1$$

Programación No Lineal

Estrategia del Conjunto Activo

3) Si para toda k $\quad g_k(x) \leq 0 \quad y \quad \mu_k \geq 0$ OK

OK. Se ha obtenido la solución

Si cualquier $\quad g_k(x) > 0 \quad y/o \quad \mu_k < 0$

a) Eliminar de J_1 la restricción con el μ_i más negativo

b) Añadir a J_1 todas las restricciones violadas $\quad g_k(x) > 0$ para hacerlas activas

c) Regresar a 2)

Programación No Lineal

Estrategia del Conjunto Activo: Ejemplo

$$\min\ f(\underline{x}) = \tfrac{1}{2}\left(x_1^2 + x_2^2\right) - 3x_1 - x_2$$

$$s.t.\quad g_1 = -x_1 + x_2 \le 0$$

$$g_2 = x_1 - \tfrac{1}{2}x_2 - 2 \le 0$$

$$g_3 = -x_2 \le 0$$

Condiciones de Karush-Kuhn-Tucker (Iteración 1):

$$J_1 = \{k \mid g_k = 0\} \qquad \nabla f(\underline{x}) + \sum_j \lambda_j \nabla h_j(\underline{x}) + \sum_{k \in J_1} \mu_k \nabla g_k(\underline{x}) = 0$$

$$J_1 = \varnothing \Rightarrow \quad g_k > 0 \quad \mu_k = 0$$

$$\nabla f(\underline{x}) + \sum_k \mu_k \nabla h_k(\underline{x}) = \begin{bmatrix} x_1 - 3 \\ x_2 - 1 \end{bmatrix} = 0$$

$$x_1 = 3$$
$$x_2 = 1$$
$$\mu_1 = 0$$
$$\mu_2 = 0$$
$$\mu_3 = 0$$

$\Rightarrow$

Verificando restricciones y μ´s:

$$g_1 = -2 < 0$$
$$g_2 = 1/2 > 0 \quad !!!$$
$$g_3 = -1 < 0$$
$$\mu_1 = 0$$
$$\mu_2 = 0$$
$$\mu_3 = 0$$

$\Rightarrow$

Activar g_2

$$J_2 = \{2\}$$

Programación No Lineal

Programación Cuadrática Sucesiva (SQP)

$$
\begin{aligned}
& \min \; f(x) \\
s.t. \quad & h(x) = 0 \\
& g(x) \le 0 \\
& x \in R^n
\end{aligned}
$$

Condiciones de optimalidad
*(**Karush-Khun-Tucker**)*

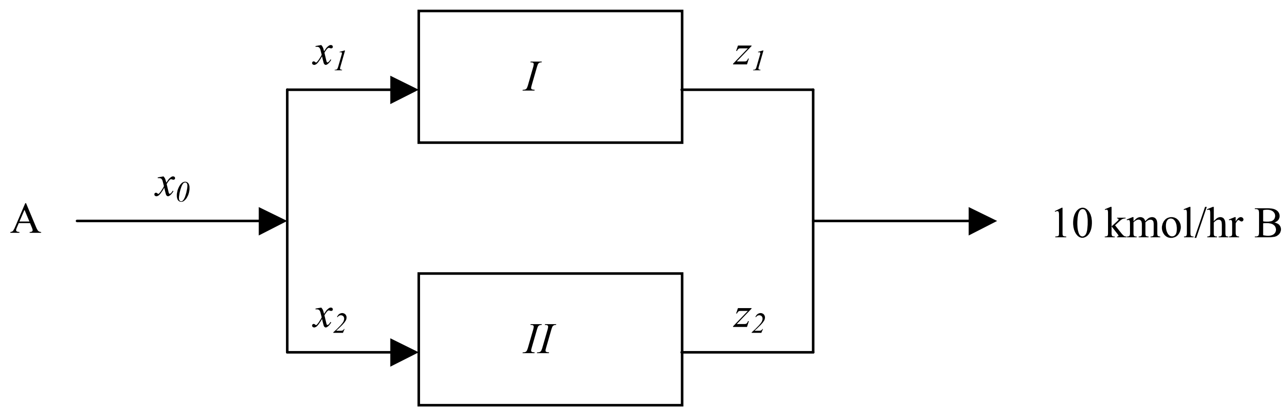
Sistema de Ecuaciones No Lineales

Iteración de Newton

Programa cuádratico

Programación Mixta-Entera

Representación de Procesos en Términos de Variables Binarias



$$y_1 = \begin{cases} 1 \; if \;\; reactor \; I \; is \; selected \\ 0 \; if \;\; reactor \; I \; is \; not \; selected \end{cases}$$

$$y_2 = \begin{cases} 1 \; if \;\; reactor \; II \; is \; selected \\ 0 \; if \;\; reactor \; II \; is \; not \; selected \end{cases}$$

$$\min C = 7.5y_1 + 6.4x_1 + 5.5y_2 + 6.0x_2$$

$$sujeto \; a \qquad 0.8x_1 + 0.67x_2 = 10$$

$$x_1 - 20y_1 \le 0 \quad x_2 - 20y_2 \le 0$$

$$x_1, x_2 \ge 0 \quad y_1, y_2 = 0,1$$

Relaciones Lógicas

1) NOT $\neg p_j$

$1 - y_j$

2) OR (exclusivo) $p_i \veebar p_j$

$y_i + y_j = 1$

3) OR (inclusivo) $p_i \vee p_j$

$y_i + y_j \geq 1$

4) AND $p_i \wedge p_j$

$y_j \geq 1, y_i \geq 1$

5) If-Then $p_i \rightarrow p_j \quad \neg p_i \vee p_j$

$1 - y_i + y_j \geq 1 \quad y_i \leq y_j$

6) Iff-Then $p_i \leftrightarrow p_j$

$y_i = y_j$

7) Teorema de Morgan

$$\neg(A \vee B) \Leftrightarrow \neg A \wedge \neg B$$

$$\neg(A \wedge B) \Leftrightarrow \neg A \vee \neg B$$

8) Distribución de AND

$$(A \wedge B) \vee C \Leftrightarrow (A \vee C) \wedge (B \vee C)$$

Representando Alternativas

Big - M

$$x_1 - 2x_2 \le M(1-y_1)$$
$$x_1 - 2x_2 \ge -M(1-y_1)$$
$$x_1 - 1 \le M(1-y_1)$$
$$y_1 + y_2 = 1$$
$$x_1 - 5x_2 \le M(1-y_2)$$
$$x_1 - 5x_2 \ge -M(1-y_2)$$
$$x_1 - 1 \ge -M(1-y_2)$$
$$x_1, x_2 \ge 0$$

Convex Hull

$$x_{11} + x_{12} = x_1$$
$$x_{21} + x_{22} = x_2$$
$$x_{11} \le My_1$$
$$x_{12} \le My_2$$
$$x_{21} \le My_1$$
$$x_{22} \le My_2$$
$$x_{11} - 2x_{21} = 0$$
$$x_{12} - 5x_{22} = 0$$
$$x_{11} \le y_1$$
$$x_{12} \ge y_2$$
$$y_1 + y_2 = 1$$
$$x_{11}, x_{12}, x_{21}, x_{22} \ge 0$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ x_1 = 2x_2 \\ x_1 \le 1 \\ x_1, x_2 \ge 0 \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} y_2 \\ x_1 = 5x_2 \\ x_1 \ge 1 \\ x_1, x_2 \ge 0 \end{bmatrix}$$

Programación Mixta-Entera Lineal

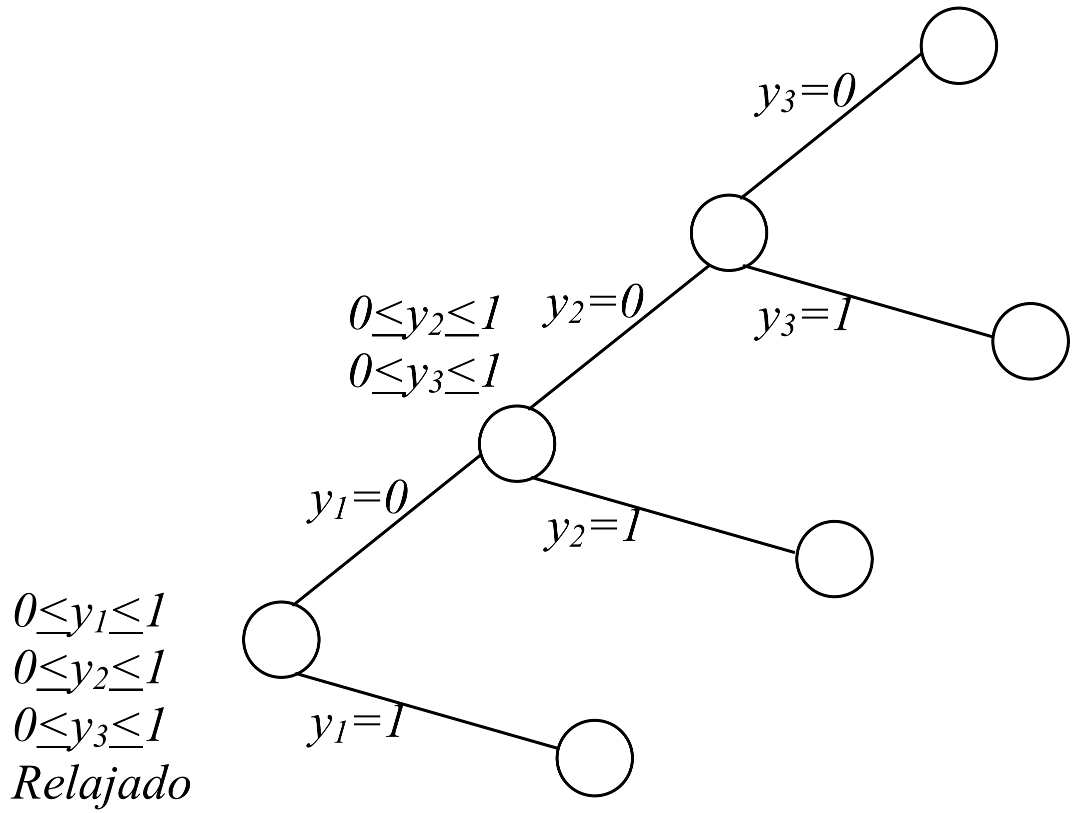
Método de "*Branch and Bound*" (Ramificación y Acotamiento)

Procedimiento:

1) Resolver el problema como si todas las variables fueran continuas (problema LP). Es decir, relajar las variables binarias. A este nivel se le conoce como "Root Node" (Nodo raíz)
   - El valor de la función objetivo en el nodo raíz es un límite inferior a su valor en la solución
   - Si la solución del nodo raíz es entera, tal solución es la solución del problema

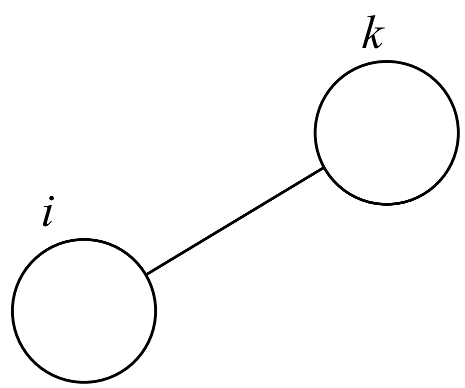
2) Realizar una búsqueda de ramificación ordenada mediante la adición de restricciones enteras

Método de "*Branch and Bound*" (Ramificación y Acotamiento)



Para *m* variables binarias, el número de posibles nodos es $2^{m+1} - 1$

3 Reglas en el Método de "*Branch and Bound*":



1) La función objetivo en *i* es un límite inferior a la función objetivo en *k*.
2) Si algún nodo resulta en una solución entera, el valor de la función objetivo en tal nodo es un límite superior de la solución
3) Si *i* es infactible o ilimitado, entonces *k* también lo es

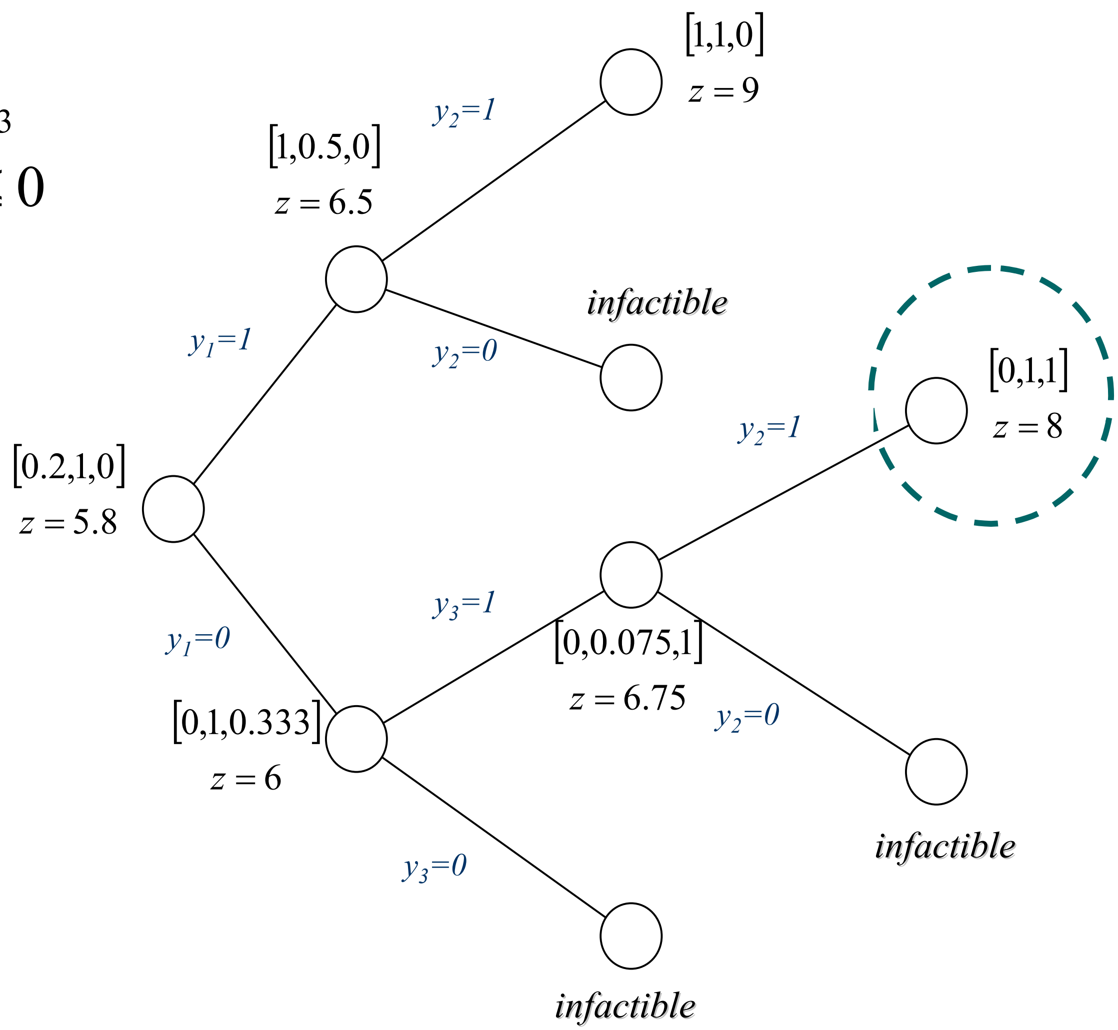
Método de "*Branch and Bound*": Ejemplo

$$\min z = x + y_1 + 3y_2 + 2y_3$$

$$s.t. \quad -x + 3y_1 + 2y_2 + y_3 \leq 0$$

$$-5y_1 - 8y_2 - 3y_3 \leq -9$$

$$x \geq 0, \quad y_1, y_2, y_3 \in \{0,1\}$$

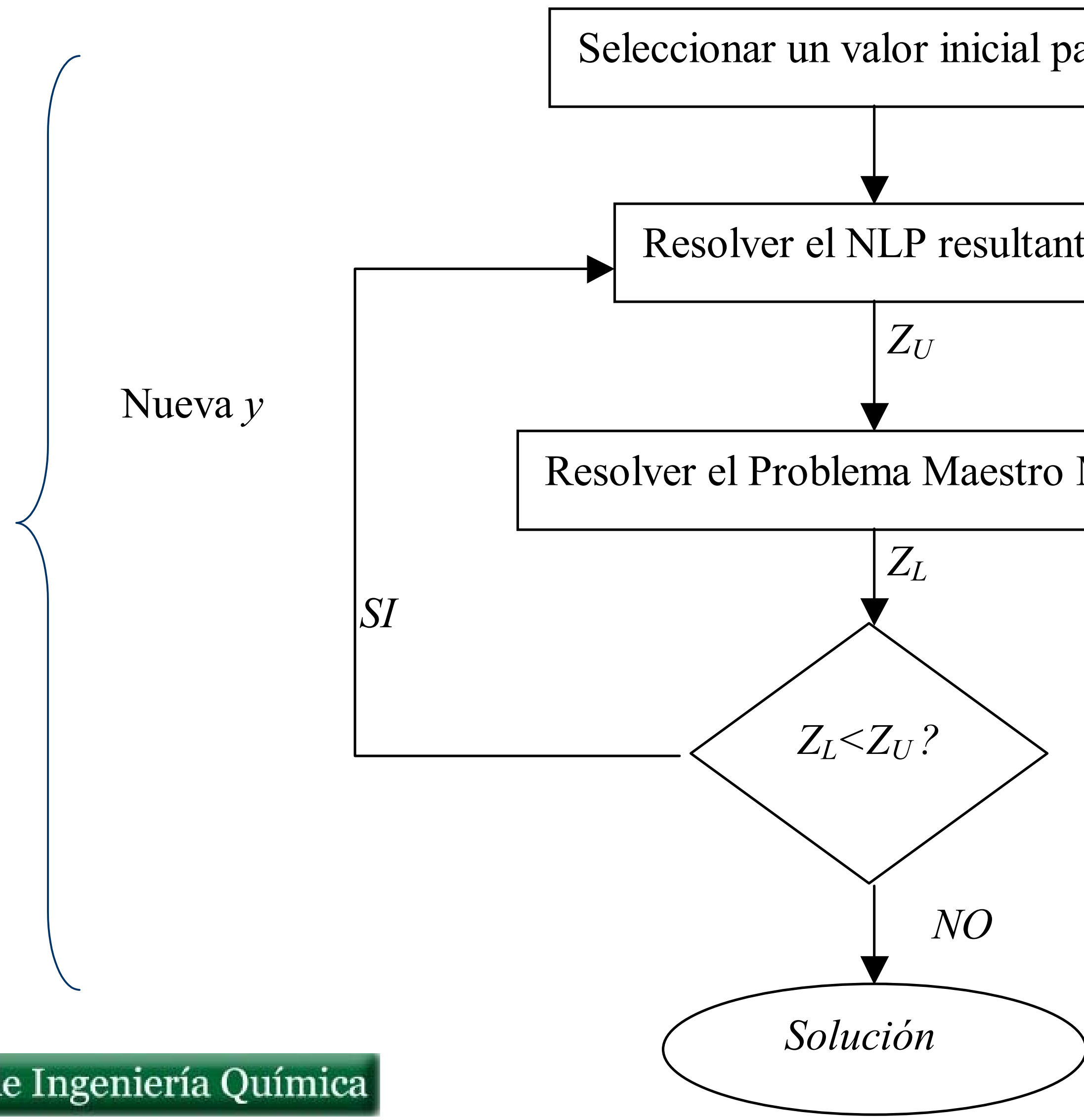


$$m = 3$$

$$2^{m+1} - 1 = 15$$

Programación Mixta-Entera No Lineal

Algoritmo General



Programación Mixta-Entera No Lineal

Algoritmo "*Outer Approximation*" (DICOPT+++)

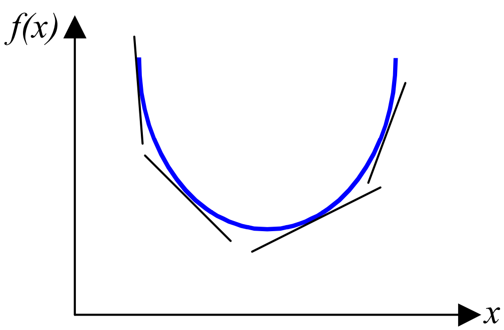
Problema Maestro

$$
\begin{gathered}
\min \underline{c}^T \underline{y} + f(\underline{x}) \\
\underline{g}(\underline{x}) + \underline{B}\,\underline{y} \le 0 \\
\underline{A}\,\underline{y} \le \underline{a} \\
\underline{y} \in \{0,1\}^m \quad \underline{x} \in R^n
\end{gathered}
$$

$\Rightarrow$

$$
Z = \min \alpha
$$

$$
\left.
\begin{gathered}
\textit{sujeto a} \quad \alpha \ge c^T y + f\left(x^k\right) + \nabla f\left(x^k\right)^T\left(x - x^k\right) \\
g\left(x^k\right) + \nabla g\left(x^k\right)^T\left(x - x^k\right) + By \le 0 \\
Ay \le a \\
y \in \{0,1\}^m \quad x \in R^n \\
\alpha \in R
\end{gathered}
\right\} \forall k \in T
$$



$$
T = \left\{ \begin{gathered} k \,|\, x^k \textit{ es la solución óptima de } S\left(y^k\right) \forall \\ \textit{los posibles valores de } y^k \end{gathered} \right\}
$$

Algoritmo "*Outer Approximation*"

Optimización Semi-Infinita: Problema Relajado

$$
\left.
\begin{aligned}
& Z = \min \alpha \\
\textit{sujeto a} \quad & \alpha \geq c^T y + f\left(x^k\right) + \nabla f\left(x^k\right)^T \left(x - x^k\right) \\
& g\left(x^k\right) + \nabla g\left(x^k\right)^T \left(x - x^k\right) + By \leq 0 \\
& Ay \leq a \\
& y \in \{0,1\}^m \quad x \in R^n \\
& \alpha \in R
\end{aligned}
\right\} k = 1 \ldots K
$$

$$\textit{Dada la solución de K subproblemas NLP } \left(x^k\right)$$

$$\textit{definidos por } y^k \textit{ tal que } k = 1 \ldots K$$

Programación Mixta-Entera No Lineal

"Outer Approximation": Ejemplo 1

$$\min z = y_1 + 1.5y_2 + 0.5y_3 + x_1^2 + x_2^2$$

$$\begin{array}{llll} s.t. \quad (x_1-2)^2 - x_2 \le 0 & x_1 - (1-y_1) \ge 0 & y_1 + y_2 + y_3 \ge 1 & \\ x_1 - 2y_1 \ge 0 & x_2 - y_2 \ge 0 & 0 \le x_1 \le 4 & y_1, y_2 \in \{0,1\} \\ x_1 - x_2 - 4(1-y_2) \le 0 & x_1 + x_2 \ge 3y_3 & 0 \le x_2 \le 4 & \end{array}$$

1) NLP $\boxed{y_1 = 1 \quad y_2 = 1 \quad y_3 = 1}$ $\longrightarrow$ $x_1 = 2 \quad x_2 = 2 \quad z_U = 11$

MILP $y_1 = 1 \quad y_2 = 0 \quad y_3 = 0 \quad x_1 = 2 \quad x_2 = 0 \quad z_L = 1$

2) NLP $y_1 = 1 \quad y_2 = 0 \quad y_3 = 0$ $\longrightarrow$ $x_1 = 2 \quad x_2 = 0 \quad z_U = 5$

MILP $y_1 = 0 \quad y_2 = 1 \quad y_3 = 0 \quad x_1 = 1 \quad x_2 = 0 \quad z_L = 1.5$

3) $\boxed{\text{NLP} \quad y_1 = 0 \quad y_2 = 1 \quad y_3 = 0 \longrightarrow x_1 = 1 \quad x_2 = 1 \quad z_U = 3.5}$

MILP $y_1 = 0 \quad y_2 = 0 \quad y_3 = 1 \quad x_1 = 2 \quad x_2 = 1 \quad z_L = 4.5$

Programación Mixta-Entera No Lineal

"Outer Approximation": Ejemplo 2, Iteración 1

$$\min\ z = -2.7y + x^2$$
$$s.t.\quad g_1 = -\ln(1+x) + y \le 0$$
$$g_2 = -\ln(x-0.57) + y - 1.1 \le 0$$
$$0 \le x \le 2 \qquad y \in \{0,1\}$$

1) Comenzar con $y=1$ y resolver NLP:

$$z = 0.2525 \quad x = 1.7183 \quad \mu_1 = 9.347 \quad \mu_2 = 0$$
$$(z_U)$$

2) Linealizar el problema MINLP en $x = 1.7183$ para obtener el problema maestro MILP:

$$z_{OA} = \min \alpha_{OA}$$
$$s.t.\quad \alpha_{OA} \ge -2.7y + 3.4366x - 2.9525$$
$$-0.36787x + y \le 0.36788$$
$$-0.87085x + y \le -0.2581$$
$$0 \le x \qquad y \in \{0,1\}$$

$$y = 0$$
$$z_{OA} = -1.939$$
$$(z_L)$$

$$z_L < z_U$$

Volver a paso 1 con nuevo valor $y=0$

El Entorno de Modelación GAMS y sus Resolvedores

Formas de Atacar el Problema de Modelación

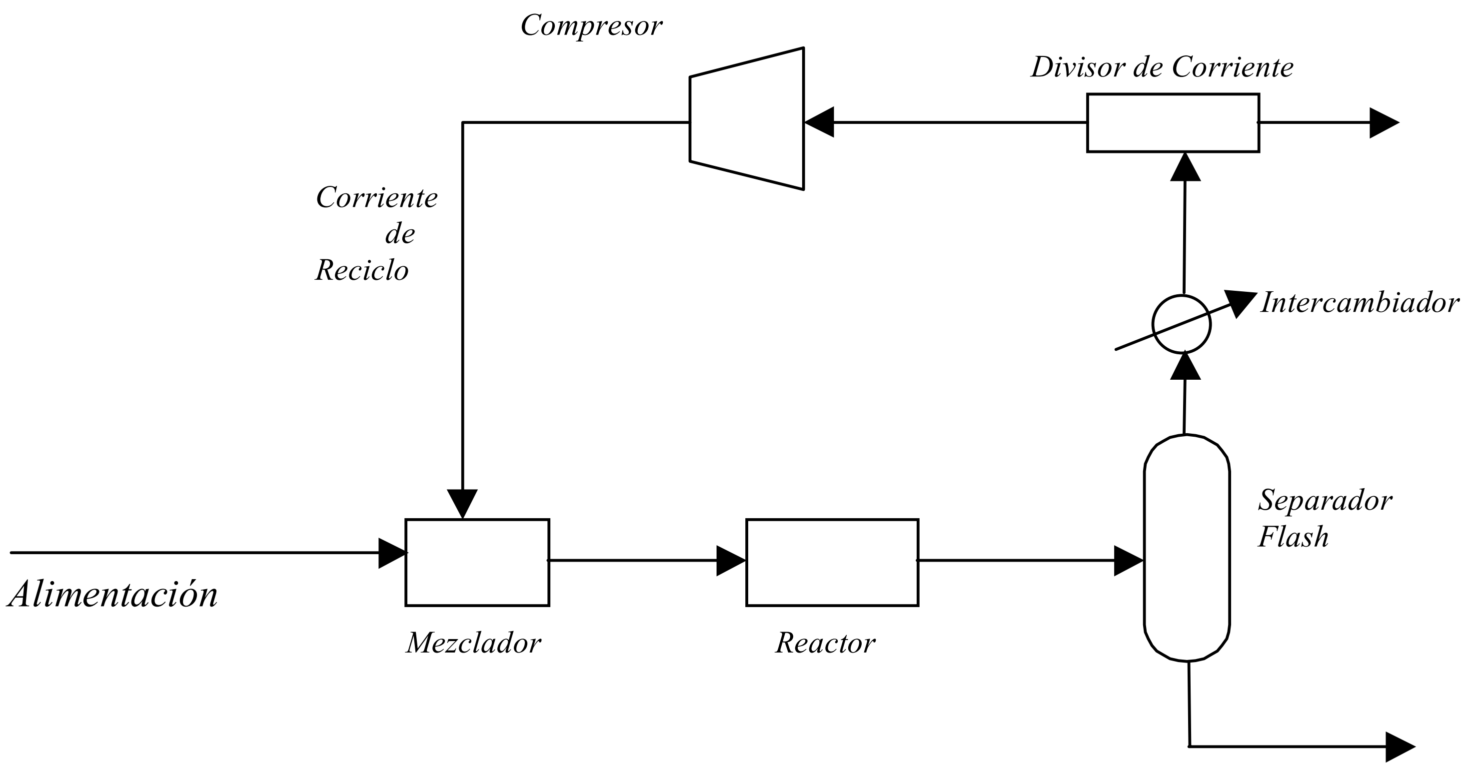
- **Corriente Modular Secuencial**

  * Cada unidad de proceso **(módulo)** calcula su salida dadas las entradas

    $\Downarrow$

    En cada unidad se resuelve un sistema de ecuaciones no lineales (subrutina que "convierte" valores de entradas en valores de salida)

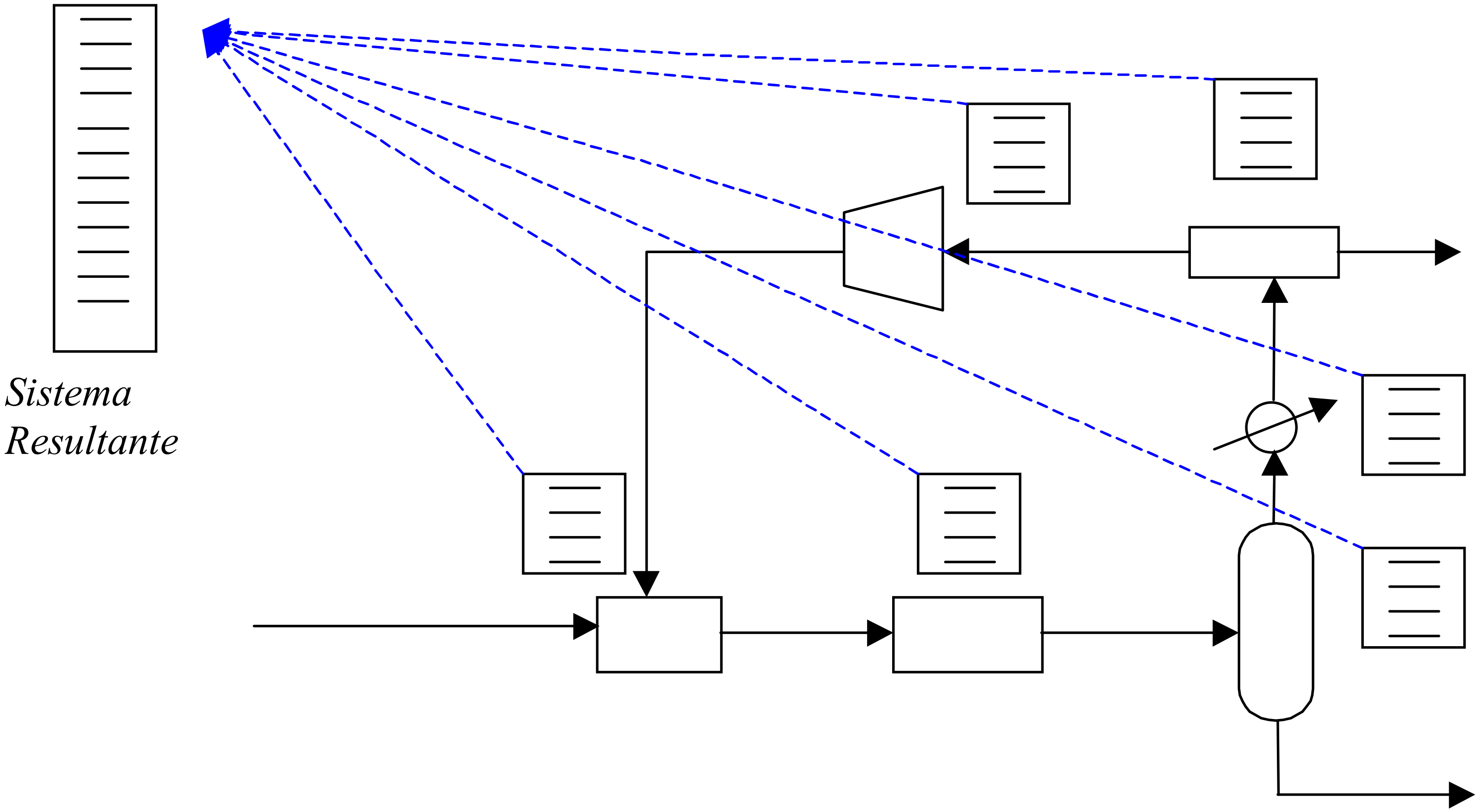
  * Las variables de las **corrientes de reciclo** se suponen inicialmente y constituyen la guía para proceso iterativo



* Se requieren algoritmos de **orden de precedencia** y **determinación de las corrientes de reciclo** a ser supuestas.

- **Corriente de Orientación a las Ecuaciones**

  * Cada unidad del sistema es representado por un sistema de ecuaciones (**lenguaje declarativo**: no restricciones en cuanto a especificación de variables)
  * Las ecuaciones son generalmente almacenadas en librerías
  * Para definir el problema, se colectan las ecuaciones que representan a cada unidad y a las conexiones entre ellas

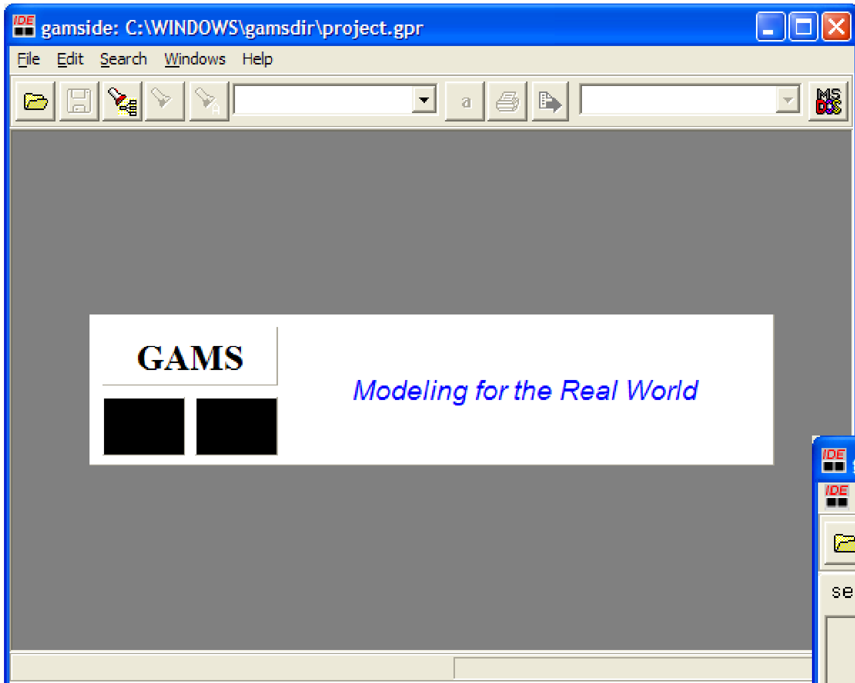


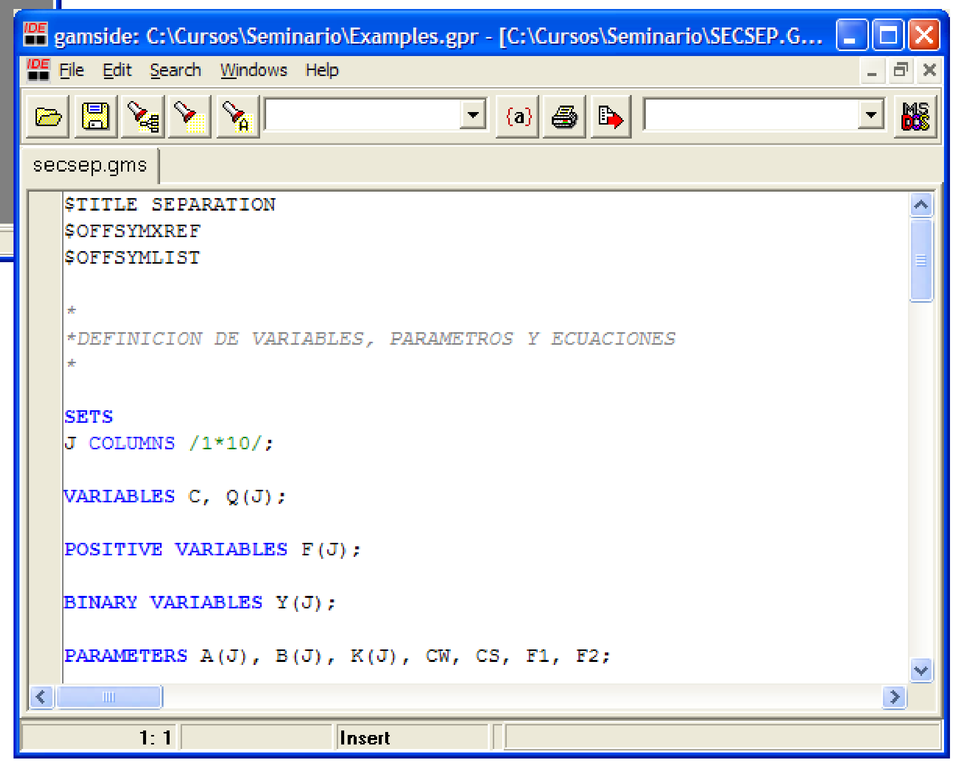
* El sistema resultante se resuelve **simultáneamente** (probablemente un problema de miles de ecuaciones)

Simuladores y Optimizadores Comerciales

- ✓ Corriente Modular Secuencial: Simuladores de Procesos **ASPEN**, PRO/II, HySys
  - Modelado por **configuración**
- ✓ Corriente de Orientación a las Ecuaciones: Sistemas de Modelación gPROMS, SpeedUp, ABACO, ASCEND
- ✓ **GAMS**
  - **NLP**: CONOPT, MINOS, LACELOT, SRQP, LINGO
  - **MINLP**: DICOPT
  - **MILP, LP**: CPLEX, OSL, LINDO, SCICONIC, XA

GAMS la Interfase





Resolvedores en GAMS

Tipos de Problemas →

Algoritmos de Solución ↓

Options

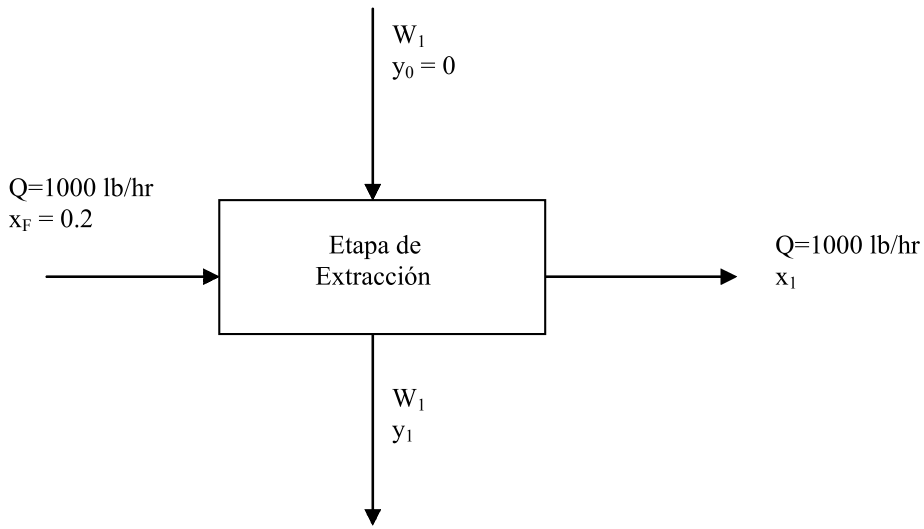
Editor | Execute | Output | Solvers | Licenses | Colors | File Extensions

Project Defaults | Reset | Legend

Solver	License	CNS	DNLP	LP	MCP	MINLP	MIP	MPEC	NLP	RMINLP	RMIP
BDMLP	Full			•			•				•
CONOPT	Full		•	•					•	•	•
CONOPT2	Full	•	•	•					X	X	•
CPLEX	Demo			•			•				•
CPLEXPAR	Demo			•			•				•
DECISC	Demo			-							
DECISM	Demo			-							
DICOPT	Full					X					
GAMSBAS	Full		-	-	-	-	-		-	-	-
GAMSCHK	Full		-	-	-	-	-		-	-	-
MILES	Full				•						
MILESE	Full				•						

OK | Cancel

GAMS: Ejemplo 1



$$Max \quad Q(x_F - x_1) - \lambda W_1$$

$$Qx_F = Qx_1 + Wy_1$$

$$y_1 = \frac{Hx_1}{(H-1)x_1 + 1}$$

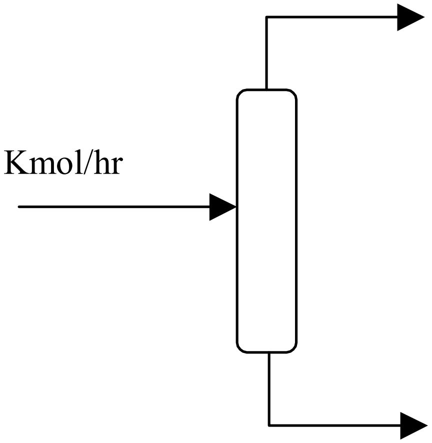
$$\lambda = 0.05$$

$$H = 1.2$$

GAMS: Ejemplo 2

$z_A = 0.6$
$z_B = 0.3$
$z_C = 0.1$

F = 1000 Kmol/hr



$x^D_A = 0.8$

$\alpha_{AC} = 2.3$

$\alpha_{BC} = 1.3$

$\alpha_{CC} = 1.0$

$q = 1.0$

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{\alpha_j \, z_j}{\alpha_j - \theta} = 1 - q$$

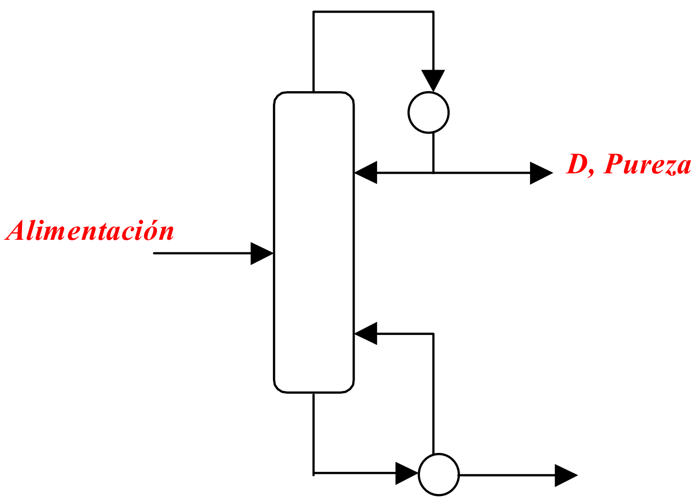
$$\sum_{j=1}^{N} \frac{\alpha_j \, x_j^D}{\alpha_j - \theta} = 1 + R_{\min}$$

$$\sum_{j=1}^{N} x_j^D = 1$$

Algunas Aplicaciones en Ingeniería Química

Optimización de Columnas y Secuencias de Destilación

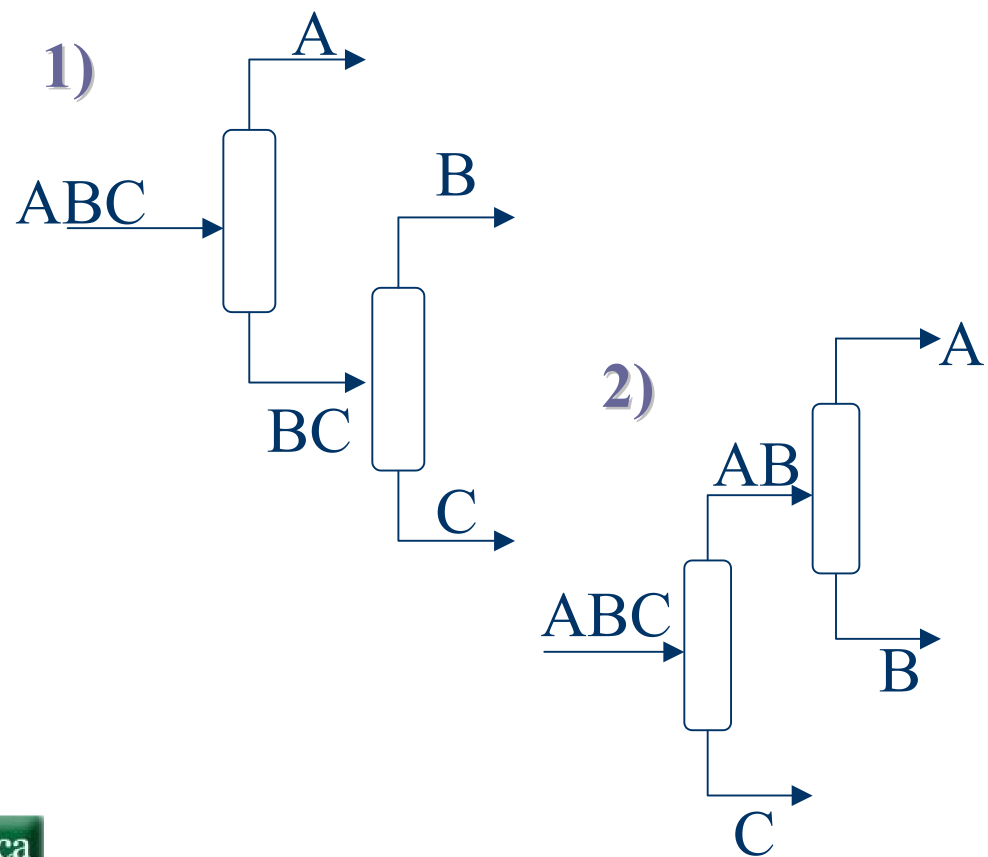
Diseño Óptimo de Columnas



Minimizar Costo

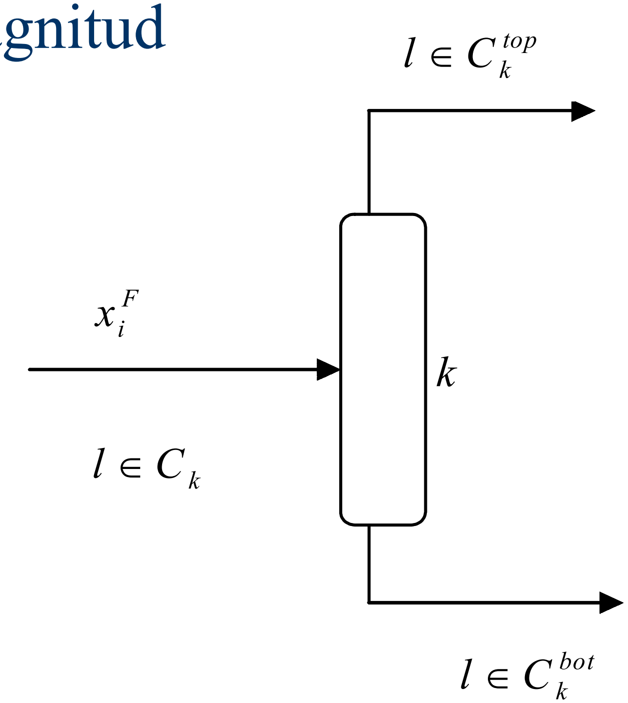
N=? R=? P=?

¿ Cómo separar una mezcla ABC ?



Modelo MILP para Secuencias de Separación

- ✓ Supone separaciones del 100% (**Sharp splits**)
- ✓ Supone que las cargas térmicas y costos de inversión son **funciones lineales** de la alimentación
- ✓ Supone que las cargas de los cambiadores son del mismo orden de magnitud



$$\xi_k^{top} = \frac{\sum_{l \in C_k^{top}} x_l^F}{\sum_{l \in C_k} x_l^F}$$

$$\xi_k^{bot} = \frac{\sum_{l \in C_k^{bot}} x_l^F}{\sum_{l \in C_k} x_l^F}$$

Datos de Caso de Estudio

Mezcla Cuaternaria ABCD

F=1000 Kmol/hr: 15% A, 30% B, 35% C, 20% D

Sistema	Fijo α_k (10^3 \$/año)	Variable β_k (10^3 \$ hr / Kgmol año)	Carga térmica K_k (10^6 KJ / Kgmol)
A/BCD	145	0.42	0.028
AB/CD	52	0.12	0.042
ABC/D	76	0.25	0.054
A/BC	125	0.78	0.024
AB/C	44	0.11	0.039
B/CD	38	0.14	0.040
BC/D	66	0.21	0.047
A/B	112	0.39	0.022
B/C	37	0.08	0.036
C/D	58	0.19	0.044

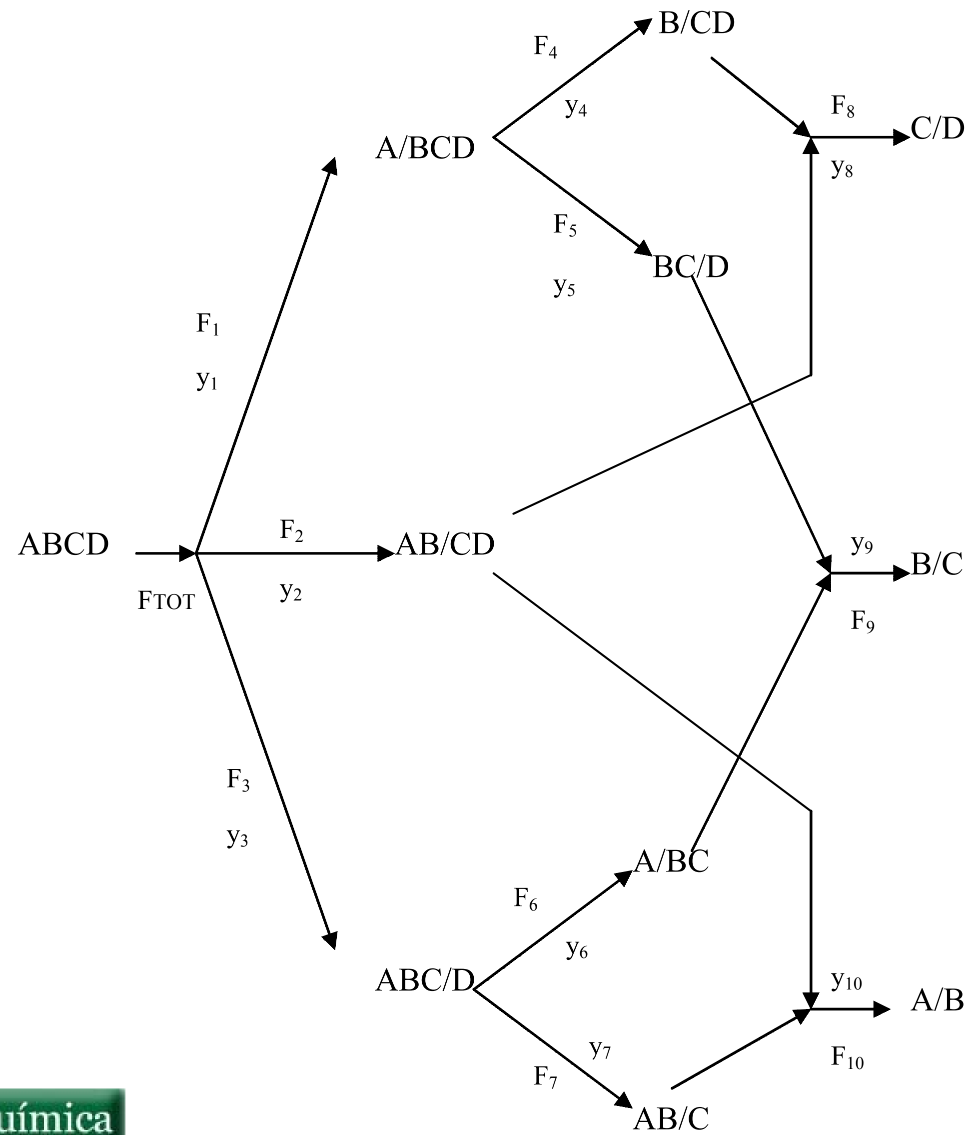
Costos de utilidades:

Agua de enfriamiento: CW = 1.3 (103\$ hr/ 106 KJ año)

Vapor: CH = 34 (103\$ hr/ 106 KJ año)

Superestructura

Superestructura con 4 Componentes



Modelo

Factores de separación	
$\xi_1^{A} = 0.15$	$\xi_6^{A} = 0.188$
$\xi_1^{BCD} = 0.85$	$\xi_6^{BC} = 0.812$
$\xi_2^{AB} = 0.45$	$\xi_7^{AB} = 0.5625$
$\xi_2^{CD} = 0.55$	$\xi_7^{C} = 0.437$
$\xi_3^{ABC} = 0.8$	$\xi_8^{C} = 0.636$
$\xi_3^{D} = 0.2$	$\xi_8^{D} = 0.364$
$\xi_4^{B} = 0.353$	$\xi_9^{B} = 0.462$
$\xi_4^{CD} = 0.647$	$\xi_9^{C} = 0.538$
$\xi_5^{BC} = 0.765$	$\xi_{10}^{A} = 0.333$
$\xi_5^{D} = 0.235$	$\xi_{10}^{B} = 0.667$

Balance Global

$$F_{TOT} = 1000 = F_1 + F_2 + F_3$$

Mezclas Intermedias

BCD $$F_4 + F_5 - 0.85F_1 = 0$$

ABC $$F_6 + F_7 - 0.8F_3 = 0$$

AB $$F_{10} - 0.45F_2 - 0.563F_7 = 0$$

BC $$F_9 - 0.765F_5 - 0.812F_6 = 0$$

CD $$F_8 - 0.55F_2 - 0.647F_4 = 0$$

Flujos (Big-M)

$$F_k - 1000y_k \le 0 \quad F_k \ge 0 \quad y_k = 0,1 \quad k = 1,\ldots,10$$

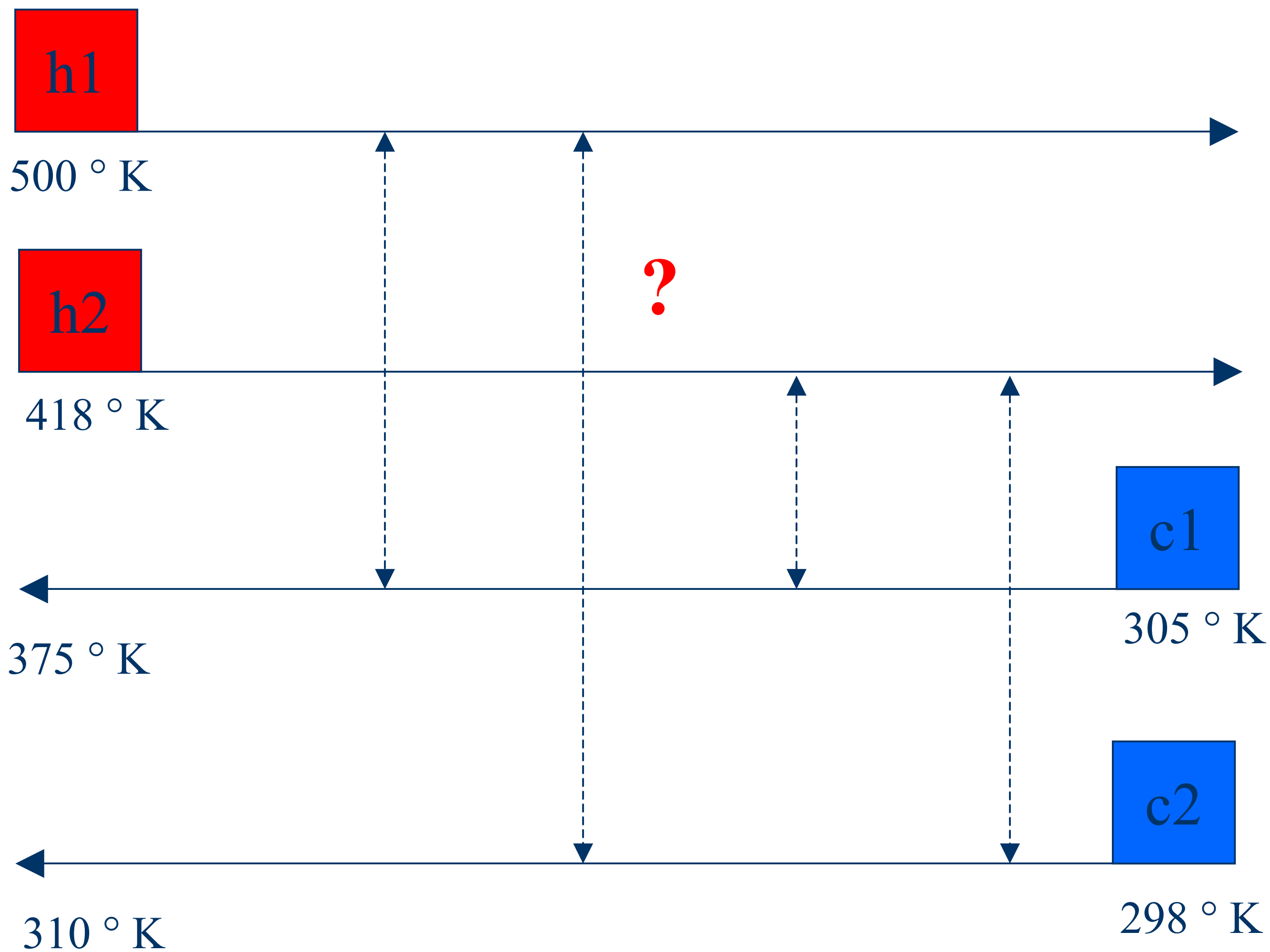
Cargas Térmicas

$$Q_k = K_k F_k \quad k = 1,\ldots,10$$

Función Objetivo

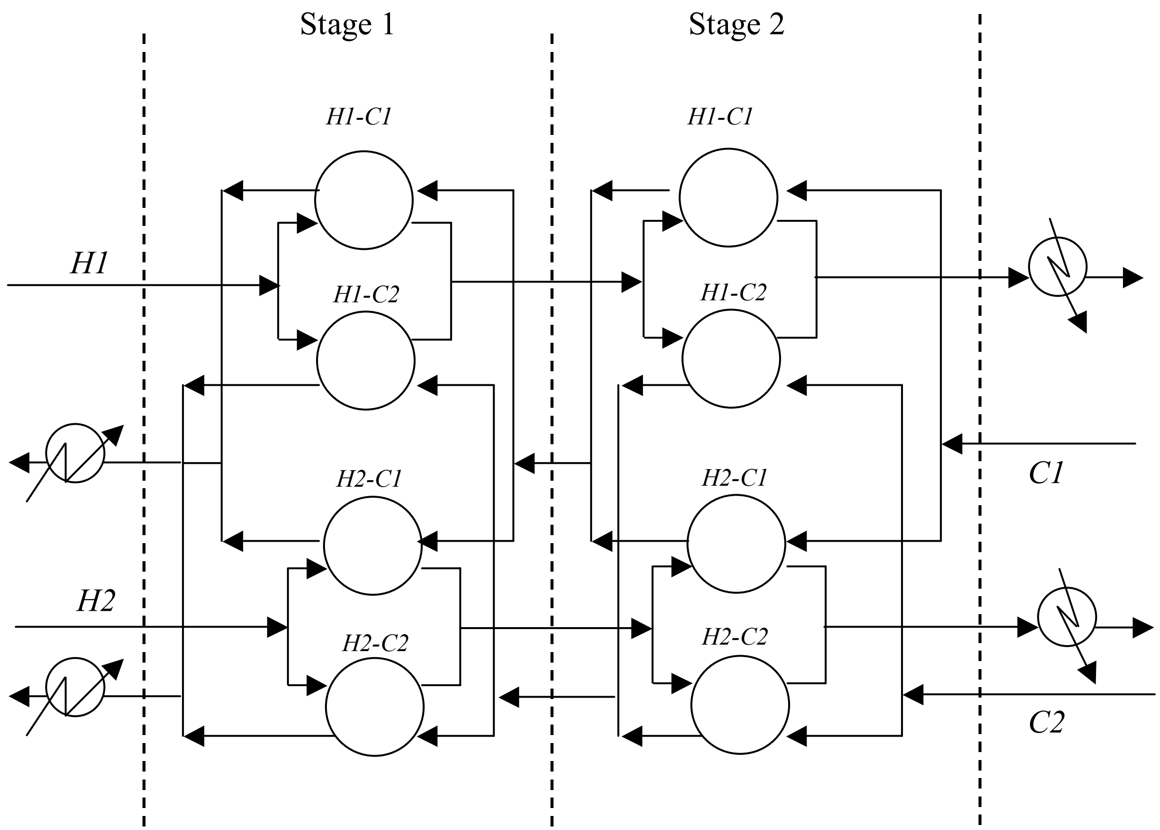
$$\min \quad C = \sum_{k=1}^{10}\left(\alpha_k y_k + \beta_k F_k\right) + (34 + 1.3)\sum_{k=1}^{10} Q_k$$

Síntesis de Redes de Intercambio de Calor



Modelo MINLP (SYNHEAT)

Estrategia de Optimización Simultánea



MODELO

Balance de calor total para cada corriente:

$$(TIN_i - TOUT_i)F_i = \sum_{k \in ST} \sum_{j \in CP} q_{ijk} + qcu_i, i \in HP$$

$$(TOUT_j - TIN_j)F_j = \sum_{k \in ST} \sum_{i \in HP} q_{ijk} + qhu_j, j \in CP$$

Balance de calor para cada etapa:

$$(t_{ik} - t_{i,k+1})F_i = \sum_{j \in CP} q_{ijk}, k \in ST, i \in HP$$

$$(t_{jk} - t_{j,k+1})F_j = \sum_{i \in HP} q_{ijk}, k \in ST, j \in CP$$

Asignación de las temperaturas de entrada a la superestructura:

$$t_{i,1} = TIN_i, i \in HP$$

$$t_{j,NOK+1} = TIN_j\ j \in CP$$

Factibilidad de temperaturas:

$$t_{ik} \geq t_{i,k+1}, k \in ST, i \in HP$$

$$t_{jk} \geq t_{j,k+1}, k \in ST, j \in CP$$

$$TOUT_i \leq t_{i,NOK+1}, i \in HP$$

$$TOUT_j \geq t_{j,1}, j \in CP$$

Carga de servicios de enfriamiento y calentamiento:

$$(t_{i,NOK+1} - TOUT_i)F_i = qcu_i, i \in HP$$

$$(TOUT_j - t_{j,1})F_j = qhu_j, j \in CP$$

Restricciones lógicas:

$$q_{ijk} - \Omega z_{ijk} \leq 0, i \in HP, j \in CP, k \in ST$$

$$qcu_i - \Omega zcu_i \leq 0, i \in HP$$

$$qhu_j - \Omega zhu_j \leq 0, j \in CP$$

$$z_{ijk}, zcu_i, zhu_j = 0,1$$

Cálculo de las diferencias de temperaturas:

$$dt_{ijk} \leq t_{ik} - t_{jk} + \Gamma(1 - z_{ijk}), k \in ST, i \in HP, j \in CP$$

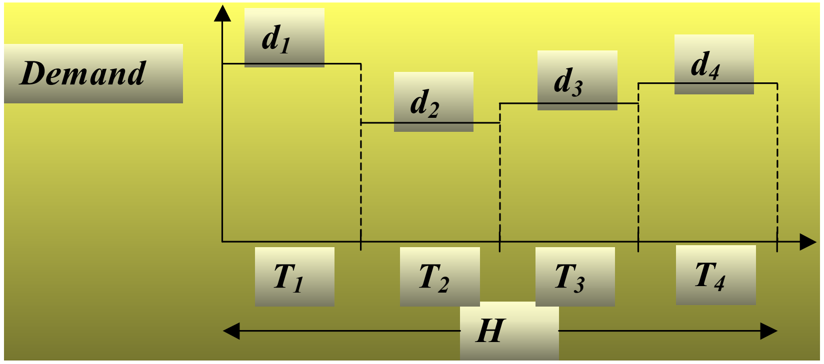
$$dt_{ij,k+1} \leq t_{i,k+1} - t_{j,k+1} + \Gamma(1 - z_{ijk}), k \in ST, i \in HP, j \in CP$$

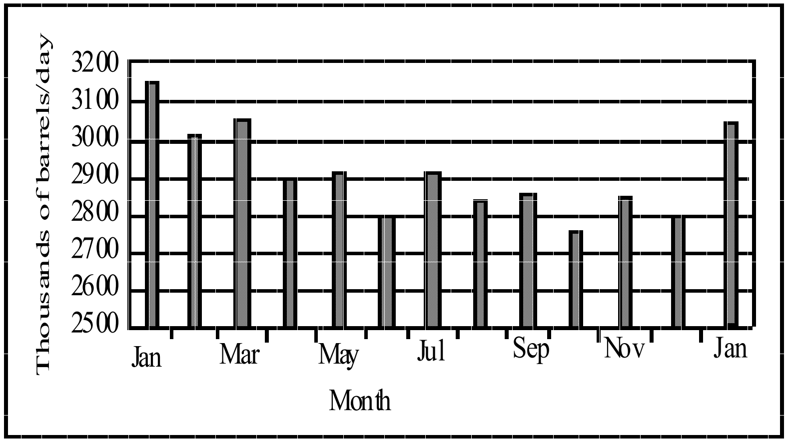
$$dtcu_i \leq t_{i,NOK+1} - TOUT_{cu} + \Gamma(1 - zcu_i), i \in HP$$

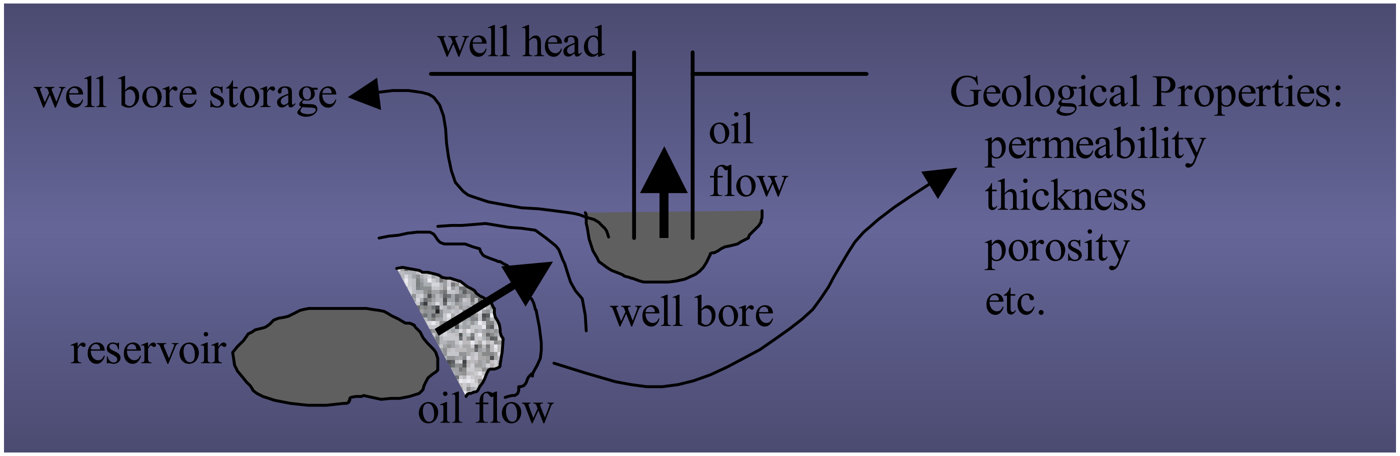
$$dthu_j \leq TOUT_{hu} - t_{j,1} + \Gamma(1 - zhu_j), j \in CP$$

Planeación de la Producción

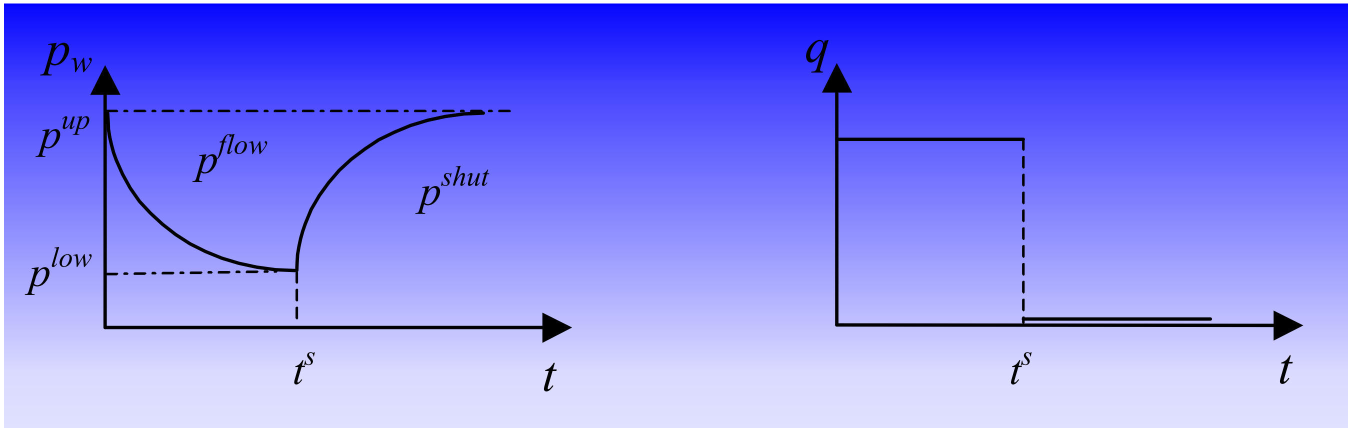
La Producción del Petróleo es un Problema Multiperiódico







La extracción produce una disminución de la presión del pozo con el tiempo



Modelos de Programación Mixta-Entera

El tiempo de operación H es dividido en NP periodos de tiempo. Dadas las demandas de producción del petróleo en cada periodo de tiempo y las constantes de caracterización de los pozos, determinar:

- **Los perfiles de producción y**
- **Los tiempos operación de cada pozo**

en cada periodo de tiempo.

Modelo MILP

$$Minimize \quad \sum_i \sum_j \gamma_{ij} q_{ij} T + \sum_i \sum_j \delta_{ij} y_{ij} T + \sum_i \sum_j \alpha_{ij} (1 - y_{ij}) T$$

$$\sum_i q_{ij} T \geq d_j \qquad \forall j \in P$$

$$\begin{bmatrix} Y_{ij} \\ p_{ij}^f = p_{ij}^{in} - D_{ij} \end{bmatrix} \vee \begin{bmatrix} & \neg Y_{ij} & \\ \begin{bmatrix} W_{ij1} \\ p_{ij}^f = p_{ij}^{in} + I_{ij} \\ p_{ij}^{in} + I_{ij} \leq p_i^{up} \end{bmatrix} & \vee & \begin{bmatrix} W_{ij2} \\ p_{ij}^f = p_i^{up} \\ p_{ij}^{in} + I_{ij} > p_i^{up} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \qquad \forall i \in W, j \in P$$

$$D_{ij} = q_{ij} \{c_1 [\ln(T) + c_2]\} \qquad \forall i \in W, j \in P$$

$$I_{ij} = q_i^s \{c_1 [\ln(T) + c_2]\} (1 - y_{ij}) \qquad \forall i \in W, j \in P$$

$$q_{ij}^{\max} \{c_1 [\ln(T) + c_2]\} = (p_{ij}^{in} - p_i^{low}) \qquad \forall i \in W, j \in P$$

$$q_{ij} \leq q_{ij}^{\max} \qquad \forall i \in W, j \in P$$

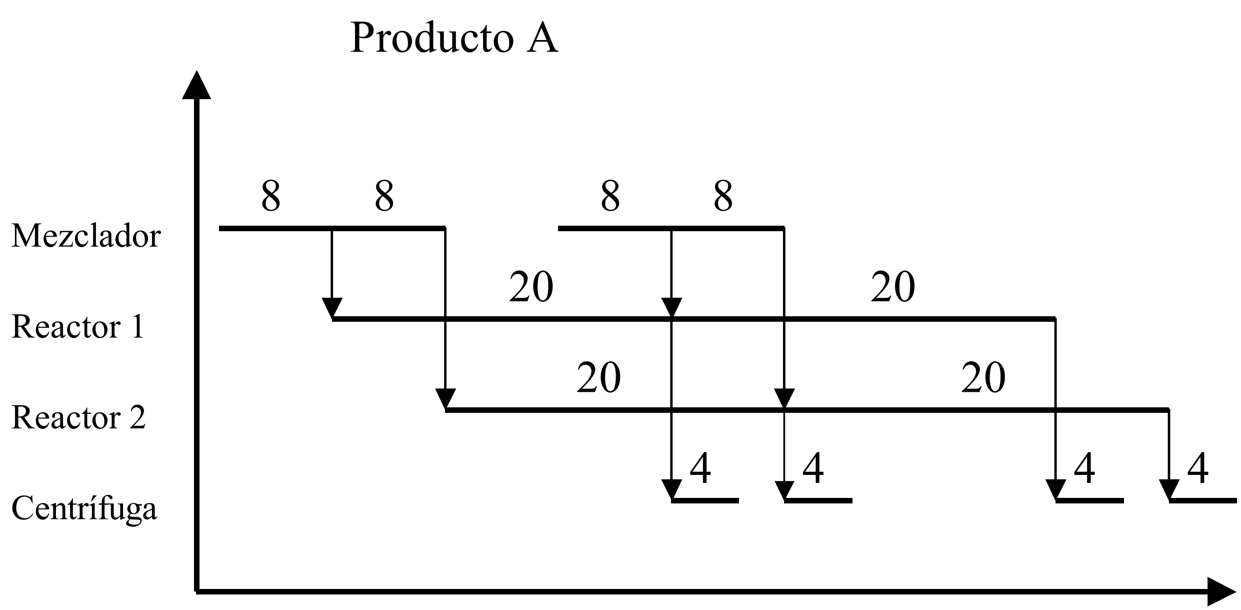
$$q_{ij} \leq q_i^{up} y_{ij} + q^{low} (1 - y_{ij}) \qquad \forall i \in W, j \in P$$

$$q_{ij} \geq q^{low} \qquad \forall i \in W, j \in P$$

$$p_{ij}^{in} = p_{ij-1}^f \qquad \forall i \in W, j \in P$$

Calendarización de Procesos por Lotes

Gráficas de Gant



- Determinar el Tamaño y número de unidades paralelas
- Determinar la Secuenciación de las unidades

Código GAMS

El código de GAMS se puede escribir con cualquier procesador de texto o a través de la interfase de GAMS. Si se utilizan procesadores especializados como Word, FrameMaker, PageMaker, etc., asegúrese de guardar el archivo sin formato (como texto, código ASCII).

Los archivos de GAMS deberán tener la extensión *.**gms**

Luego de la solución de algún modelo, GAMS crea un archivo de resultados también en formato de texto y con el mismo nombre que el archivo del código, pero con extensión *.**lst**

Como regla general, un modelo de GAMS debe contener las siguientes partes (se muestra un caso ilustrativo):

1) Título

```
$TITLE MULTIPRODUCTO
```

2) Declaración de Conjuntos

```
SETS
J COMPONENTES /1*3/
```

3) Declaración de Parámetros

```
PARAMETERS SA, SB, SC;
```

4) Declaración de Variables (positivas y generales)

```
VARIABLES P;
POSITIVE VARIABLES X7, X8, X9, X10, X11, X12;
```

5) Declaración de Ecuaciones

```
EQUATIONS RES1, RES2, RES3, INE1, INE2, INE3,OBJ;
```

6) Ecuaciones del Sistema

```
RES1..  X11 =E= 0.667*X8 + 0.667 *X9 + 0.5*X10;
```

Note que el identificador de la ecuación va precedido de dos puntos. En las ecuaciones el símbolo =E= significa igual, =G= significa mayor que y =L= significa menor que.

7) Definición de una función objetivo ("Dummy" o verdadera)

```
OBJ..   P =E= 0.025*X8 + 0.028*X9 + 0.028*X10 - 0.015*X11 -
              0.02*X12 - 0.025*X7;
```

8) Establecimiento de las ecuaciones que componen un modelo en particular

```
MODEL PLANTAS /ALL/;
```

9) Valores de parámetros, estimados iniciales, límites de las variables

```
SA = 40000;
TETA.L('1')= 1.05;
```

10) Llamado a la técnica de solución de acuerdo al tipo de problema

```
SOLVE PLANTAS USING MIP MAXIMIZING P;
```

Ejemplos Ilustrativos del Uso de GAMS

1. Resolver el problema de programación lineal de la planta multiproducto que se desarrolló en clase. Recodar que las ecuaciones son:

$$x_{11} = 0.667x_8 + 0.667x_9 + 0.5x_{10}$$
$$x_{12} = 0.333x_8 + 0.333x_9 + 0.167x_{10}$$
$$x_7 = 0.333x_{10}$$
$$x_{11} \leq 40000$$
$$x_{12} \leq 30000$$
$$x_7 \leq 25000$$

Mientras que la función objetivo está dada por:

$$P = 0.025x_8 + 0.028x_9 + 0.028x_{10} - 0.015x_{11} - 0.02x_{12} - 0.025x_7$$

Código GAMS del Ejemplo 1

```
$TITLE MULTIPRODUCTO
*
*DEFINICION DE VARIABLES, PARAMETROS Y ECUACIONES
*

VARIABLES P;

POSITIVE VARIABLES X7, X8, X9, X10, X11, X12;
*
* DATOS CONOCIDOS
*
PARAMETERS SA, SB, SC;
*
*ECUACIONES
*
EQUATIONS RES1, RES2, RES3, INE1, INE2, INE3,OBJ;

*
* DEFINICION DE LAS ECUACIONES QUE FORMAN PARTE DEL MODELO
*
RES1..  X11 =E= 0.667*X8 + 0.667 *X9 + 0.5*X10;
RES2..  X12 =E= 0.333*X8 + 0.333*X9 + 0.167 *X10;
RES3..  X7  =E= 0.333*X10;
INE1..  X11 =L= SA;
INE2..  X12 =L= SB;
INE3..  X7 =L= SC;
OBJ..     P  =E=  0.025*X8  +  0.028*X9  +  0.028*X10  -  0.015*X11  -
0.02*X12 - 0.025*X7;

MODEL PLANTAS /ALL/;

*
* ASIGNACION DE VALORES A LOS PARAMETROS
*
SA = 40000;
SB = 30000;
SC = 25000;

OPTION LIMROW=0;
OPTION LIMCOL=0;
*
* LLAMADO A LA TECNICA DE SOLUCION
*
SOLVE PLANTAS USING MIP MAXIMIZING P;
```

Resultados GAMS del Ejemplo 1

```
*DEFINICION DE VARIABLES, PARAMETROS Y ECUACIONES
*
VARIABLES P;
POSITIVE VARIABLES X7, X8, X9, X10, X11, X12;
*
* DATOS CONOCIDOS
*
PARAMETERS SA, SB, SC;
*
*ECUACIONES
*
EQUATIONS RES1, RES2, RES3, INE1, INE2, INE3,OBJ;
*
* DEFINICION DE LAS ECUACIONES QUE FORMAN PARTE DEL MODELO
*
RES1..  X11 =E= 0.667*X8 + 0.667 *X9 + 0.5*X10;
RES2..  X12 =E= 0.333*X8 + 0.333*X9 + 0.167 *X10;
RES3..  X7  =E= 0.333*X10;
INE1..  X11 =L= SA;
INE2..  X12 =L= SB;
INE3..  X7 =L= SC;
 OBJ..    P =E= 0.025*X8 + 0.028*X9 + 0.028*X10 - 0.015*X11 - 0.02*X12 - 0.025*X7;
MODEL PLANTAS /ALL/;
*
* ASIGNACION DE VALORES A LOS PARAMETROS
*
SA = 40000;
SB = 30000;
SC = 25000;
OPTION LIMROW=0;
OPTION LIMCOL=0;
*
* LLAMADO A LA TECNICA DE SOLUCION
*
SOLVE PLANTAS USING MIP MAXIMIZING P;

MODEL STATISTICS

BLOCKS OF EQUATIONS        7     SINGLE EQUATIONS        7
```

```
BLOCKS OF VARIABLES        7     SINGLE VARIABLES        7
NON ZERO ELEMENTS         20

GENERATION TIME      =      0.000 SECONDS    1.4 Mb      WIN200-121

EXECUTION TIME       =      0.000 SECONDS    1.4 Mb      WIN200-121

               S O L V E      S U M M A R Y

     MODEL   PLANTAS             OBJECTIVE  P
     TYPE    MIP                 DIRECTION  MAXIMIZE
     SOLVER  OSL2                FROM LINE  47

**** SOLVER STATUS     1 NORMAL COMPLETION
**** MODEL STATUS      1 OPTIMAL
**** OBJECTIVE VALUE              705.1354

 RESOURCE USAGE, LIMIT          0.070      1000.000
 ITERATION COUNT, LIMIT         3         10000

 OSL Version 2 Mar 21, 2001 WIN.O2.O2 20.0 007.043.039.WAT (Jan  )

Work space allocated           --    0.09 Mb

                       LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

---- EQU RES1            .         .         .       -0.032
---- EQU RES2            .         .         .       -0.020
---- EQU RES3            .         .         .       -0.026
---- EQU INE1          -INF  40000.000 40000.000     0.017
---- EQU INE2          -INF  13766.923 30000.000      .
---- EQU INE3          -INF  25000.000 25000.000     0.001
---- EQU OBJ             .         .         .        1.000

                       LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

---- VAR P             -INF    705.135     +INF       .
---- VAR X7              .    25000.000     +INF       .
---- VAR X8              .         .        +INF     -0.003
---- VAR X9              .     3691.848     +INF       .
---- VAR X10             .    75075.075     +INF       .
---- VAR X11             .    40000.000     +INF       .
---- VAR X12             .    13766.923     +INF       .


**** REPORT SUMMARY :        0     NONOPT
                             0 INFEASIBLE
                             0  UNBOUNDED
```

2. Para el sistema de extracción mostrado en la Figura, utilice el sistema de modelación GAMS para determinar los valores de las variables W_1 y x_1 que maximizan la función:

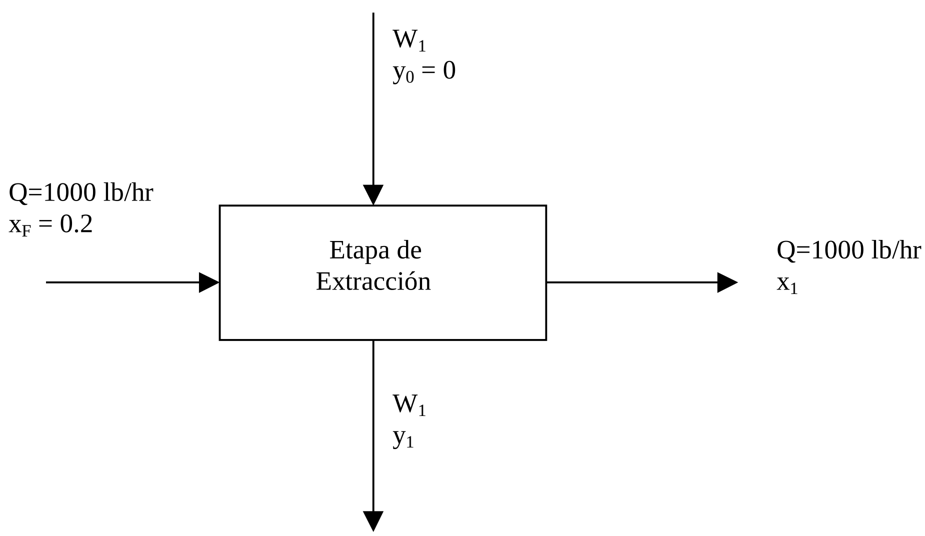
$$Q\left(x_F - x_1\right) - \lambda W_1$$

donde λ = 0.05. Considere que la relación de equilibrio entre y_1 y x_1 está dada por la expresión:

$$y_1 = \frac{Hx_1}{\left(H-1\right)x_1 + 1}$$

Use un valor de H = 1.2. Note también que el balance de masa en el sistema resulta en la ecuación:

$$Qx_F = Qx_1 + Wy_1$$



Figura

Código GAMS del Ejemplo 2

```
$TITLE EXTRACCION
$OFFSYMXREF
$OFFSYMLIST
*
*DEFINICION DE VARIABLES, PARAMETROS Y ECUACIONES
*
VARIABLES F;

POSITIVE VARIABLES X1, Y1, W1;

PARAMETERS Q, XF, LAMBDA, H;

EQUATIONS MASBAL, EQUILIBRIO, OBJ;

*
*ECUACIONES
*
MASBAL.. Q * XF =E=  Q * X1 + W1 * Y1;
EQUILIBRIO..  Y1 =E=  (H * X1)/(((H - 1.0) * X1) + 1.0);
OBJ.. F =E= Q * ( XF -X1) - LAMBDA * W1;

*
* DEFINICION DE LAS ECUACIONES QUE FORMAN PARTE DEL MODELO
*
MODEL EXTRACTOR /ALL/;
*
* ASIGNACION DE VALORES A LOS PARAMETROS
*

Q = 1000;
XF = 0.2;
LAMBDA = 0.05;
H = 1.2;
*
* LIMITES Y VALORES INICIALES
*

Y1.L = 0.1;
Y1.UP = 1.0;
X1.L = 0.1;
X1.UP = 0.2;
W1.L = 500;
OPTION LIMROW=0;
OPTION LIMCOL=0;
*
* LLAMADO A LA TECNICA DE SOLUCION
*
SOLVE EXTRACTOR USING NLP MAXIMIZING F;
```

Resultados GAMS del Ejemplo 2

```
COMPILATION TIME     =        0.000 SECONDS    0.7 Mb      WIN194-
116
Model Statistics    SOLVE EXTRACTOR USING NLP FROM LINE 55



MODEL STATISTICS

BLOCKS OF EQUATIONS        3     SINGLE EQUATIONS        3
BLOCKS OF VARIABLES        4     SINGLE VARIABLES        4
NON ZERO ELEMENTS          8     NON LINEAR N-Z          3
DERIVATIVE POOL            5     CONSTANT POOL          10
CODE LENGTH               40


GENERATION TIME      =        0.110 SECONDS    1.9 Mb      WIN194-
116


EXECUTION TIME       =        0.110 SECONDS    1.9 Mb      WIN194-
116


               S O L V E      S U M M A R Y

     MODEL   EXTRACTOR           OBJECTIVE  F
     TYPE    NLP                 DIRECTION  MAXIMIZE
     SOLVER  CONOPT              FROM LINE  55

**** SOLVER STATUS     1 NORMAL COMPLETION
**** MODEL STATUS      2 LOCALLY OPTIMAL
**** OBJECTIVE VALUE               58.1881

 RESOURCE USAGE, LIMIT          0.391     1000.000
 ITERATION COUNT, LIMIT        15        10000
 EVALUATION ERRORS              0            0


    C O N O P T     Wintel  version 2.043C-005-039
    Copyright (C)   ARKI Consulting and Development A/S
                    Bagsvaerdvej 246 A
                    DK-2880 Bagsvaerd, Denmark

 Using default control program.


 ** Optimal solution. Reduced gradient less than tolerance.
```

```
 CONOPT time Total                        0.219 seconds
   of which: Function evaluations         0.051 =  23.2%
             Derivative evaluations       0.000 =   0.0%

 Work length =    0.05 Mbytes
    Estimate =    0.05 Mbytes
    Max used =    0.04 Mbytes

                        LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

---- EQU MASBAL      -200.000  -200.000  -200.000     0.463
---- EQU EQUILIBRIO      .         .         .      464.178
---- EQU OBJ          200.000   200.000   200.000     1.000

                        LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

---- VAR F              -INF     58.188     +INF       .
---- VAR X1               .       0.092     0.200 -2.233E-6
---- VAR Y1               .       0.108     1.000      .
---- VAR W1               .    1002.840     +INF       .


**** REPORT SUMMARY :        0     NONOPT
                             0 INFEASIBLE
                             0  UNBOUNDED
                             0     ERRORS


EXECUTION TIME       =        0.060 SECONDS    0.7 Mb      WIN194-
116
```

3. Considere la separación de la mezcla ternaria que se muestra en la figura. En tal sistema, A es el componente clave ligero ($\alpha_{A,C}$ = 2.3), C es el componente clave pesado ($\alpha_{C,C}$ = 1.0) y B es el componente intermedio ($\alpha_{B,C}$=1.3). Las siguientes ecuaciones permiten la determinación del valor mínimo de la razón de reflujo y de las composiciones en el destilado de los componentes B y C a reflujo mínimo.

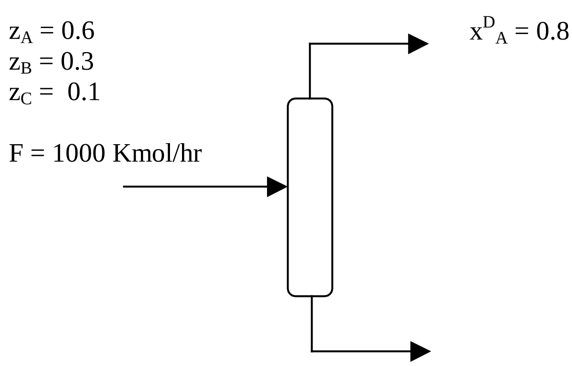
$$\sum_{j=1}^{N} \frac{\alpha_j \; z_j}{\alpha_j - \theta} = 1 - q \qquad (1)$$

Ec. De

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{\alpha_j \; x_j^D}{\alpha_j - \theta} = 1 + R_{\min}$$ Underwood (2)

$$\sum_{j=1}^{N} x_j^D = 1 \qquad (3)$$

Utilice el sistema de modelación GAMS para determinar las dos raíces para θ en la Ecuación (1), el valor mínimo de la relación de reflujo y los valores de $x^D{}_B$ y $x^D{}_C$. Suponga que q = 1.0.



Código GAMS del Ejemplo 3

```
$TITLE UNDERWOOD

$OFFSYMXREF
$OFFSYMLIST

*
*DEFINICION DE VARIABLES, PARAMETROS Y ECUACIONES
*

SETS
J COMPONENTS /1*3/,
I ROOTS /1*2/;
VARIABLES C;

POSITIVE VARIABLES TETA(I), XD(J), RMIN;

PARAMETERS ALFA(J), Z(J), Q;


*
*ECUACIONES
*

EQ1(I).. SUM(J,((ALFA(J)*Z(J))/(ALFA(J)-TETA(I))))=E= 1.0 - Q;
EQ2(I).. SUM(J,((ALFA(J)*XD(J))/(ALFA(J)-TETA(I))))=E= RMIN + 1.0;
EQ3..    SUM(J,XD(J))=E= 1.0;
OBJ..    C =E= 1.0;

*
* DEFINICION DE LAS ECUACIONES QUE FORMAN PARTE DEL MODELO
*

MODEL UNDEQN /ALL/;

*
* ASIGNACION DE VALORES A LOS PARAMETROS
*

ALFA('1')=2.3;
ALFA('2')=1.3;
ALFA('3')=1.0;

Z('1')=0.6;
Z('2')=0.3;
Z('3')=0.1;

Q = 1.0;
```

```
*
* VALORES INICIALES Y LIMITES INFERIOR Y SUPERIOR
*

TETA.L('1')= 1.05;
TETA.UP('1')= 1.299;
TETA.LO('1')= 1.001;
TETA.L('2')= 2.1;
TETA.UP('2')= 2.299;
TETA.LO('2')= 1.301;
XD.L('2')=0.1;
XD.UP('2')=1.0;
XD.L('3')=0.01;
XD.UP('3')=1.0;
XD.FX('1')=0.8;

OPTION LIMROW=0;
OPTION LIMCOL=0;
*
* LLAMADO A LA TECNICA DE SOLUCION
*
```

Resultados GAMS del Ejemplo 3

```
COMPILATION TIME     =        0.050 SECONDS    0.7 Mb      WIN200-
121
Model Statistics    SOLVE UNDEQN USING NLP FROM LINE 72



MODEL STATISTICS

BLOCKS OF EQUATIONS       4     SINGLE EQUATIONS        6
BLOCKS OF VARIABLES       4     SINGLE VARIABLES        7
NON ZERO ELEMENTS        16     NON LINEAR N-Z         10
DERIVATIVE POOL           8     CONSTANT POOL          12
CODE LENGTH             207


GENERATION TIME      =        0.050 SECONDS    1.9 Mb      WIN200-
121


EXECUTION TIME       =        0.110 SECONDS    1.9 Mb      WIN200-
121

               S O L V E      S U M M A R Y
```

```
     MODEL   UNDEQN              OBJECTIVE  C
     TYPE    NLP                 DIRECTION  MINIMIZE
     SOLVER  CONOPT              FROM LINE  72

**** SOLVER STATUS     1 NORMAL COMPLETION
**** MODEL STATUS      2 LOCALLY OPTIMAL
**** OBJECTIVE VALUE                1.0000

 RESOURCE USAGE, LIMIT          0.488      1000.000
 ITERATION COUNT, LIMIT         2         10000
 EVALUATION ERRORS              0             0


    C O N O P T     Windows NT/95/98  version 2.043F-008-043
    Copyright (C)   ARKI Consulting and Development A/S
                    Bagsvaerdvej 246 A
                    DK-2880 Bagsvaerd, Denmark

 Using default control program.


 ** Optimal solution. There are no superbasic variables.


 CONOPT time Total                         0.160 seconds
   of which: Function evaluations          0.000 =   0.0%
             Derivative evaluations        0.000 =   0.0%

 Work length =    0.05 Mbytes
    Estimate =    0.05 Mbytes
    Max used =    0.04 Mbytes


---- EQU EQ1

     LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

1      .         .         .         EPS
2      .         .         .         EPS


---- EQU EQ2

     LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

1     1.000     1.000     1.000      EPS
2     1.000     1.000     1.000      EPS
```

```
                          LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

---- EQU EQ3               1.000     1.000     1.000      EPS
---- EQU OBJ               1.000     1.000     1.000     1.000

                          LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

---- VAR C                 -INF      1.000     +INF       .


---- VAR TETA

     LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

1     1.001     1.039     1.299      .
2     1.301     1.539     2.299      .


---- VAR XD

     LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

1     0.800     0.800     0.800      EPS
2       .       0.167     1.000      .
3       .       0.033     1.000      .

                          LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL

---- VAR RMIN               .       0.450     +INF       .


**** REPORT SUMMARY :        0     NONOPT
                             0 INFEASIBLE
                             0  UNBOUNDED
                             0     ERRORS


EXECUTION TIME       =        0.000 SECONDS    0.7 Mb
```

Introducción a la Optimización Bajo Incertidumbre

Reflexión

- Compañía petrolera: ¿cuál será el precio y la demanda del petróleo en 6 meses?
- En un proceso continuo
  - Existirá variación en las demandas del producto
  - Calidad de Servicios?
  - Cadena de Suministro de Materias Primas?

El futuro no puede pronosticarse con exactitud

Necesario considerar incertidumbre en algunos procesos: Procesos Estocásticos

Tipos de Problemas de Optimización Estocástica

- Programación Lineal Estocástica (SLP)
- Programación Mixta Entera Lineal Estocástica (SMILP)
- Programación No Lineal Estocástica (SNLP)
- Programación Mixta Entera No lineal Estocástica (SMINLP)

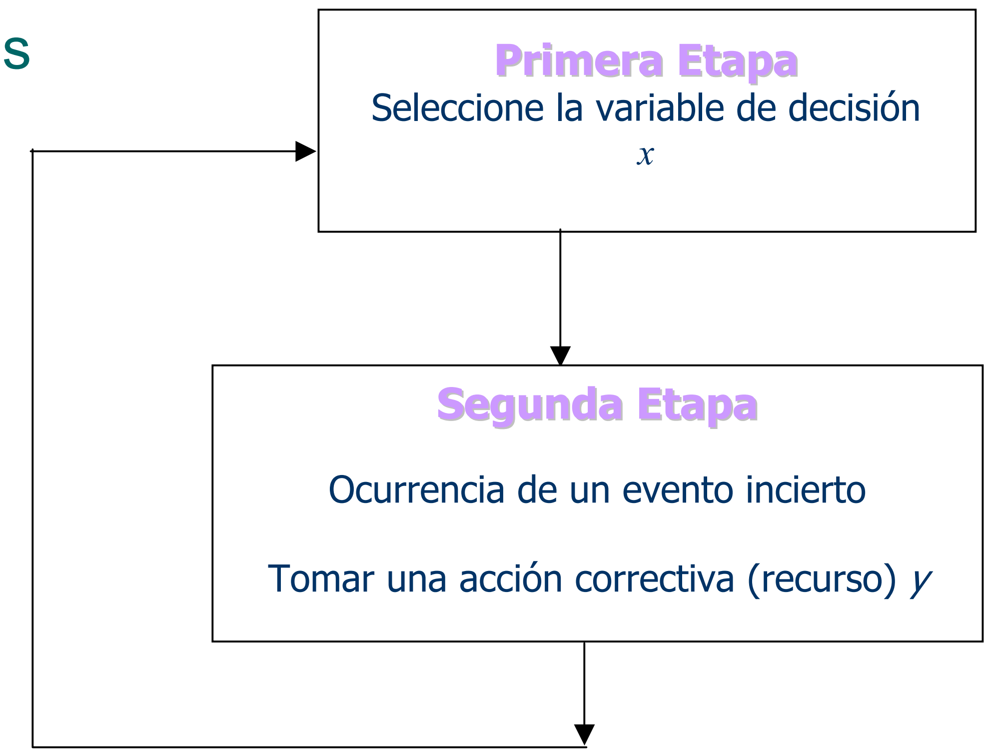
Otra Clasificación: Tipos de Problemas Bajo Incertidumbre

- "*Wait and see*" : Esperar ocurrencia de un evento incierto y entonces optimizar
- "*Here and now*" Optimización inmediata en base a alguna medida de probabilidad

La mayoría de los algoritmos de solución utilizan ambas estrategias

Problemas Estocásticos de 2 Etapas

- Idea fundamental: **Recurso**
- Recurso en 2 Etapas



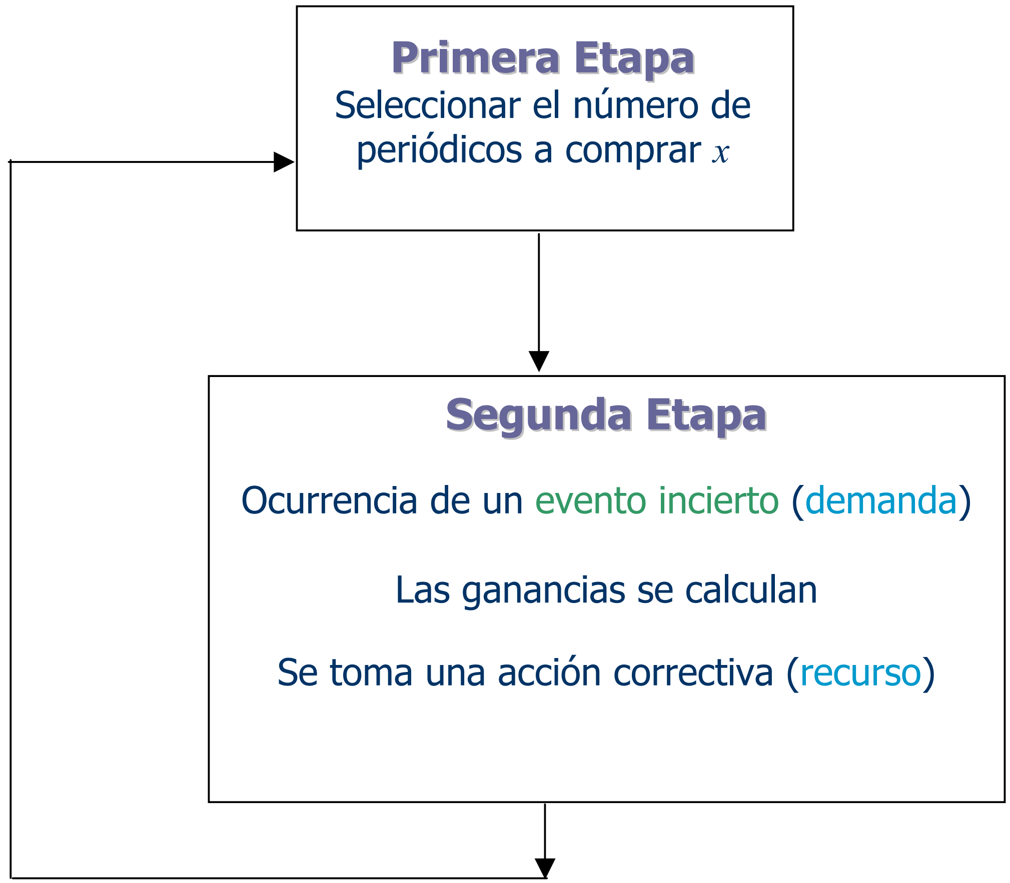
Un Ejemplo

El problema del vendedor de periódicos

- El vendedor compra *x* periódicos a un precio *c*
- Entonces vende tantos periódicos como puede a un precio *q*, el exceso representa una pérdida
- La demanda del periódico cambia día a día (incertidumbre)
- Cuando la demanda se conoce, se calculan las ganancias

Cuántos periódicos debe comprar el vendedor para maximizar sus ganancias ?

El Problema del Vendedor de Periódicos



Programación Estocástica Lineal con Recurso

Representación Matemática Estándar para Problemas Lineales (SLPwR)

Primera Etapa

$$\begin{cases} \min \quad c^T x + Q(x) \\ s.t. \quad Ax = b \\ x \geq 0 \end{cases}$$

Función de Recurso

donde $Q(x) = E_\omega\left[Q(x,\omega)\right]$ y

Segunda Etapa

$$\begin{cases} Q(x,\omega) = \min \quad q^T(\omega)\, y \\ s.t. \quad W(\omega)\, y = h(\omega) - T(\omega)x \\ y \geq 0 \end{cases}$$

Evento incierto

Matriz de Recurso

Clases Especiales de Problemas

Recurso Fijo

$$W(\omega) = W$$

Recurso Simple

$$W = (I, -I)$$

$$y^{+} - y^{-} = h(\omega) - T(\omega)x$$

Recurso Completo

$$W\ y \quad = \quad z \qquad \qquad \forall z, \quad y \geq 0$$

Reformulación

$$\begin{aligned} \min\ & c^T x + Q(x) \\ s.t.\ & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{aligned} \quad \Longrightarrow \quad \begin{aligned} \min\ & c^T x + \theta \\ s.t.\ & Q(x) \leq \theta \\ & Ax = b \\ & x \geq 0 \end{aligned}$$

Primera Etapa

donde $Q(x) = E_\omega\left[Q(x,\omega)\right]$

$$\begin{aligned} Q(x,\omega) = \quad \min\ & q^T(\omega)\, y \\ s.t.\ & W\, y = h - T\, x \\ & y \geq 0 \end{aligned}$$

Dos Tipos de Cortes en Algoritmos SLP

Corte de Optimalidad

- Aproximación Lineal de $Q(x)$
- Basado en el problema dual: proporciona límite inferior a $Q(x)$

Corte de Factibilidad

- Asegura que los valores de x (obtenidos en la primera etapa) no propician infactibilidades en la segunda etapa

Teorema de la Dualidad (LP)

Primo

Multiplicadores de Lagrange

Dual

$$\min \quad c^T y$$
$$s.t. \quad A\,y = b$$
$$y \geq 0$$

$$\max \quad \pi^T b$$
$$s.t. \quad \pi^T A \leq c$$

- Si el dual **no es acotado**, el primo es **infactible**
- Si el dual es infactible, el primo no es acotado
- El valor de la función objetivo del problema **dual** provee una **cota inferior** para la función objetivo del problema **primo**. En problemas convexos sus valores son iguales.

Problema de la Segunda Etapa

Primo

$$\min \quad q^T \; y$$

$$s.t. \quad W \; y \quad = \quad h - T\, x$$

$$y \geq 0$$

Multiplicadores de Lagrange

Dual

$$\max \quad \pi^T \left(h - T\, x\right)$$

$$s.t. \quad \pi^T \, W \quad \leq q$$

Ejemplo Ilustrativo

$$\min -0.75x + E_{\omega}\left[Q(x,\omega)\right]$$

$$s.t. \quad x \leq 5$$

$$x \geq 0$$

$$Q(x,\omega) = \min \quad -y_1 + 3y_2 + y_3 + y_4$$

$$s.t. \quad -y_1 + y_2 - y_3 + y_4 = \omega + 1/2\,x$$

$$-y_1 + y_2 + y_3 - y_4 = 1 + \omega + 1/4\,x$$

$$y_1, y_2, y_3, y_4 \geq 0$$

Ejemplo Ilustrativo

$$c = [-0.75] \qquad x = [x]$$

$$A = [1] \qquad \alpha \rightarrow \leq \qquad b = [5]$$

$$q = \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix}$$

Recurso Fijo

$$W = \begin{bmatrix} -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \qquad \alpha \rightarrow = \qquad h(\omega) = \begin{bmatrix} \omega \\ 1+\omega \end{bmatrix} \qquad T = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{4} \end{bmatrix}$$

Dual del Problema de la Segunda Etapa

$$Q(x,\omega) = \max \quad \pi_1(\omega + 1/2\, x) \quad + \pi_2(1 + \omega + 1/4\, x)$$

$$s.\,t. \quad -\pi_1 - \pi_2 \leq -1$$

$$\pi_1 + \pi_2 \leq 3$$

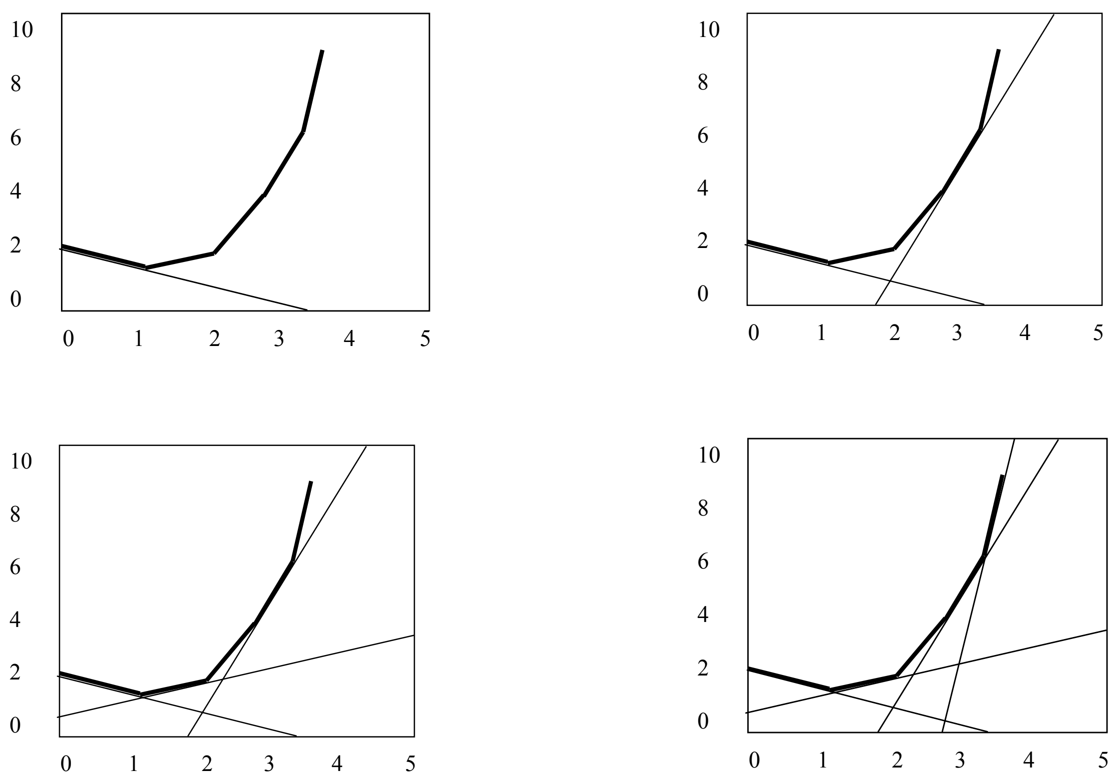
$$-\pi_1 + \pi_2 \leq 1$$

$$\pi_1 - \pi_2 \leq 1$$

Multiplicadores de Lagrange

Corte de Optimalidad: Aproximación Lineal a *Q(x)*

Soporte Lineal



Corte de Optimalidad

- El valor de la función objetivo del problema de la segunda etapa en cada iteración ν (tomando x^{ν} de la primera etapa) y para el *k-ésimo* valor de las variables inciertas, ω^k, es:

$$Q\left(x^{\nu},\omega^{k}\right)=\left(\pi_{k}^{\nu}\right)^{T}\left(h_{k}-T_{k}\ x^{\nu}\right)$$

(teorema de la dualidad)

Debido a la convexidad (dual es Límite inferior)

$$Q\left(x,\omega^{k}\right)\geq\left(\pi_{k}^{\nu}\right)^{T}\left(h_{k}-T_{k}\ x\right)$$

- Para una función de probabilidad discreta, teniendo el valor ω^k una probabilidad p^k, el valor esperado de la función objetivo:

$$Q\left(x^{\nu}\right)=E\left[\left(\pi^{\nu}\right)^{T}\left(h-T\ x^{\nu}\right)\right]=\sum_{k=1}^{K}p_{k}\left[\left(\pi_{k}^{\nu}\right)^{T}\left(h_{k}-T_{k}\ x^{\nu}\right)\right]$$

Corte de Optimalidad

Por lo tanto, debido
a la convexidad

$$Q(x) \geq \sum_{k=1}^{K} p_k \left[\left(\pi_k^{\nu}\right)^T \left(h_k - T_k\ x\right) \right] = \sum_{k=1}^{K} p_k \left(\pi_k^{\nu}\right)^T h_k - \sum_{k=1}^{K} p_k \left(\pi_k^{\nu}\right)^T T_k\ x$$

Definiendo $e = \sum_{k=1}^{K} p_k \left(\pi_k^{\nu}\right)^T h_k$ y $E = \sum_{k=1}^{K} p_k \left(\pi_k^{\nu}\right)^T T_k$

Se tiene $Q(x) \geq e - Ex$

y dado que $\theta \geq Q(x)$ entonces $Ex + \theta \geq e$

$$\theta \geq e - Ex$$

Corte de Factibilidad

- La decisión tomada en la primera etapa x^{ν} resulta en un problema factible en la segunda etapa si existe un vector finito y tal que las restricciones:

$$W\ y = h - T\ x^{\nu}$$

$$y \geq 0$$

se satisfacen. Note: si y es finito, entones $q^T y$ es finito y por lo tanto

$$Q(x) < \infty$$

Corte de Factibilidad

- Para verificar factibilidad, resolver el problema:

$$z = \min \quad e^T\left(y^+ + y^-\right)$$

$$s.t. \quad W\,y + y^+ - y^- = h - T\,x^\nu$$

$$y \geq 0,\ y^+ \geq 0,\ y^- \geq 0$$

- Cuyo problema dual es:

$$\max \quad \sigma^T\left(h - T\,x^\nu\right)$$

$$s.t. \quad \sigma^T W \leq 0$$

$$|\sigma| \leq e$$

Multiplicadores de Lagrange

- Note que $z \geq 0$. si $z=0$ entonces la segunda etapa es factible

Corte de Factibilidad

- Sin embargo, si $z>0$ entonces el problema primo:

$$\begin{aligned} \min \quad & q^T y \\ s.t. \quad & W y = h - T x^\nu \\ & y \geq 0 \end{aligned}$$

es infactible

- Por el teorema de la dualidad: Si el dual no está acotado, entonces el primo es infactible. Por lo tanto, el dual:

$$\begin{aligned} \max \quad & \pi^T \left(h - T x^\nu\right) \\ s.t. \quad & \pi^T W \leq q \end{aligned}$$

no estaría acotado

Note:

$\max \quad \pi^T \left(h - T x^\nu\right)$ no está acotado debido a que $\left(\sigma^\nu\right)^T \left(h - T x\right) \geq 0$

Corte de Factibilidad

- Por lo tanto, para asegurar la factibilidad del primo, la restricción:

$$(\sigma^{\nu})^{T}(h - T\,x) \leq 0$$ debe añadirse

Feasibility Cut

- Si para algún valor k (evento discreto) el primo es infactible, entonces se define:

$$D = (\sigma^{\nu})^{T}\,T_k$$

$$d = (\sigma^{\nu})^{T}\,h_k$$

- Y se incorpora el corte de factibilidad: $D\,x \geq d$

Algoritmos para Recurso Fijo

Método "*L-Shaped*"

- Usa función de probabilidad discreta para ω
- Cálculo exacto del límite inferior de $Q(x)$ (**Corte de Optimalidad**)

Descomposición Estocástica (SD)

- Muestreo de una función de probabilidad continua para ω
- Estimación del límite inferior de $Q(x)$ basado en esperanza matemática (**Corte de Optimalidad**)

Método "L-Shaped"

- Supone una función de probabilidad discreta para ω^k
- Note la estructura del problema determinístico equivalente:

$$\min\ c^T x + \sum_{k=1}^{K} p_k\, q_k^T\, y_k$$

$$\begin{aligned} s.t. \quad & A x = b \\ & W\, y_k = h_k - T_k x \qquad k = 1 \ldots K \\ & x \geq 0,\ y_k \geq 0 \end{aligned}$$

Estructura del primo

$$\begin{array}{lllll} A & & & & \\ T_1 & W & & & \\ T_2 & & W & & \\ \vdots & & & & \\ T_k & & \ldots & & W \end{array}$$

Estructura del Dual

$$\begin{array}{lllll} A^T & T_1^T & T_2^T & \ldots & T_k^T \\ & W^T & & & \\ & & W^T & & \\ & & & & \vdots \\ & & & & W^T \end{array}$$

Algoritmo "*L-Shaped*"

- Paso 0 Haga $r = s = v = 0$

- Paso 1 Haga $v = v+1$ y resuelva el problema (Current Problem CP)

$$\min z = c^T x + \theta$$

$$s.t. \quad Ax = b$$

Corte de Factibilidad $D_l \; x \geq d_l \qquad l = 1 \ldots r$

Corte de Optimalidad $E_l \; x + \theta \geq e_l \qquad l = 1 \ldots s$

x^v y θ^v conforman la solución óptima. Si no hay cortes (iteración 1), haga $\theta^v = -\infty$ y no la considere en el problema

Algoritmo "*L-Shaped*"

Paso 2 Para $k=1\ldots K$ (número de realizaciones de un evento incierto) resuelva el problema:

$$
\begin{aligned}
z = \min \quad & e^T y_k^{+} + e^T y_k^{-} \\
s.t. \quad & W\, y_k + y_k^{+} - y_k^{-} = h_k - T_k\, x^{\nu} \\
& y_k \geq 0,\ y_k^{+} \geq 0,\ y_k^{-} \geq 0
\end{aligned}
$$

Si para algún k el valor óptimo es $z>0$ añada un corte de factibilidad:

Multiplicadores de Lagrange del problema anterior

$$D_{r+1} = \left(\sigma_k^{\nu}\right)^T T_k$$

$$d_{r+1} = \left(\sigma_k^{\nu}\right)^T h_k$$

$$D_{r+1}\, x \geq d_{r+1}$$

Haga $r=r+1$ y regrese al Paso 1. De otro modo, vaya al paso 3.

Algoritmo "*L-Shaped*"

- Paso 3

Para $k=1 \ldots K$ resuelva el problema

$$\min \quad q_k^T \, y_k$$

$$W \, y_k = \quad h_k - T_k \, x^\nu$$

$$y_k \geq 0$$

Y defina:

Multiplicadores de Lagrange del problema anterior

$$e_{s+1} = \sum_{k=1}^{K} p_k \left(\pi_k^\nu\right)^T h_k \qquad E_{s+1} = \sum_{k=1}^{K} p_k \left(\pi_k^\nu\right)^T T_k$$

$$\eta^\nu = e_{s+1} - E_{s+1} \, x^\nu$$

si $\quad \theta^\nu \geq \eta^\nu \quad$ Pare, x^ν es la solución óptima

Si no haga $s=s+1$, añada el corte de optimalidad

$$\theta = e_{s+1} - E_{s+1} \, x$$

Y regrese el paso 1

Descomposición Estocástica

- Se muestra en cada iteración a partir de una distribución de probabilidad continua ω^k
- Cálculo de límite inferior de $Q(x)$ es aproximado

L-Shaped

$$e_{s+1} = \sum_{k=1}^{K} p_k \left(\pi_k^{\nu}\right)^T h_k$$

$$E_{s+1} = \sum_{k=1}^{K} p_k \left(\pi_k^{\nu}\right)^T T_k$$

Descomposición Estocástica

$$e_{\nu} = \frac{1}{\nu} \sum_{k=1}^{\nu} \left(\pi_k^{\nu}\right)^T h_k$$

$$E_{\nu} = \frac{1}{\nu} \sum_{k=1}^{\nu} \left(\pi_k^{\nu}\right)^T T_k$$

Actualización:

$$e_k^{\nu} = \frac{\nu - 1}{\nu} e_k^{\nu-1} \quad E_k^{\nu} = \frac{\nu - 1}{\nu} E_k^{\nu-1} \quad k=1 \ldots \nu-1$$

Algoritmo de Descomposición Estocástica (Higle y Sen)

Recurso completo

- Paso 0 Haga $v = 0,\ \theta^v = -\infty$ Suponer x^1
- Paso 1 Haga $v = v+1$ y genere una observación de las variables estocásticas mediante **muestreo**

Algoritmo SD

- Paso 2 Determine $\theta_\nu(x)$ (ν-ésima aproximación lineal a $Q(x)$)

  a) Resuelva el problema de optimización lineal (dual de segunda etapa):

$$\begin{aligned} \max \quad & \pi^T \left(h_\nu - T_\nu\, x^\nu\right) \\ s.t. \quad & \pi^T W \le q \end{aligned}$$

Para obtener π_ν^ν (ν-ésima muestra y al ν-ésimo valor del vector x)

Similarmente resuelva el problema ν-1 veces:

$$\begin{aligned} \max \quad & \pi^T \left(h_k - T_k\, x^\nu\right) \\ s.t. \quad & \pi^T W \le q \qquad k = 1 \ldots \nu - 1 \end{aligned}$$

Para obtener π_k^ν (k-ésima muestra y al ν-ésimo valor de x)

Algoritmo SD

b) Calcule los coeficientes del *corte de optimalidad*

$$e_\nu^\nu = \frac{1}{\nu}\sum_{k=1}^{\nu}\left(\pi_k^\nu\right)^T h_k$$

$$E_\nu^\nu = \frac{1}{\nu}\sum_{k=1}^{\nu}\left(\pi_k^\nu\right)^T T_k$$

$$e_\nu^\nu - E_\nu^\nu x = \frac{1}{\nu}\sum_{k=1}^{\nu}\left(\pi_k^\nu\right)^T\left(h_k - T_k x\right)$$

c) Actualizar los coeficientes de previos cortes

$$e_k^\nu = \frac{\nu - 1}{\nu} e_k^{\nu - 1}$$

$$E_k^\nu = \frac{\nu - 1}{\nu} E_k^{\nu - 1}$$

$$k = 1 \ldots \nu - 1$$

Algoritmo SD

- Paso 3 Resuelva el problema de la primera etapa con los cortes de optimalidad:

$$\min \quad c^T x + \theta_\nu$$

$$s.\,t. \qquad Ax = b$$

$$Q(x)$$

$$\theta_\nu \geq e_k^\nu - E_k^\nu x \qquad \Longrightarrow \qquad \theta_\nu + E_k^\nu x \geq e_k^\nu$$

$$k = 1 \ldots \nu$$

Para obtener $x^{\nu+1}$. Vaya al paso 1

- El algoritmo se detiene si el cambio en la función objetivo es pequeño

Un Caso

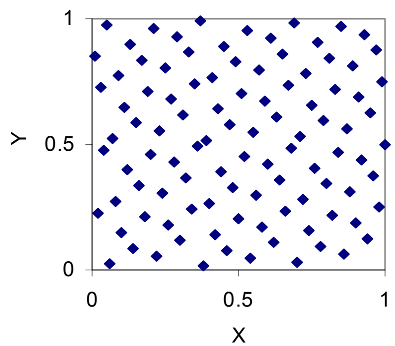
- Suponga que se tiene un SLPwR con **50 restricciones** y que se toman **N = 200 muestras** del valor de ω
  - Es necesario resolver **200 problemas** de optimización correspondientes a la primera etapa. El primero posee **50** restricciones, el segundo **51**… el último **250 restricciones**
  - Es necesario resolver el problema de la segunda etapa un número de veces igual a

$$\sum_{i=1}^{N} i = \mathbf{20100}$$

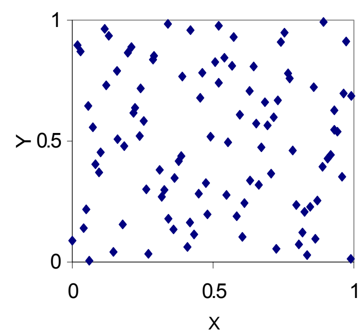
  - El número de restricciones en la segunda etapa no cambia.

Implementación del Algoritmo SD: Técnica de Muestreo HSS

- **Monte Carlo** puede presentar valores grandes de varianza
- **HSS** presenta mejores propiedades de uniformidad



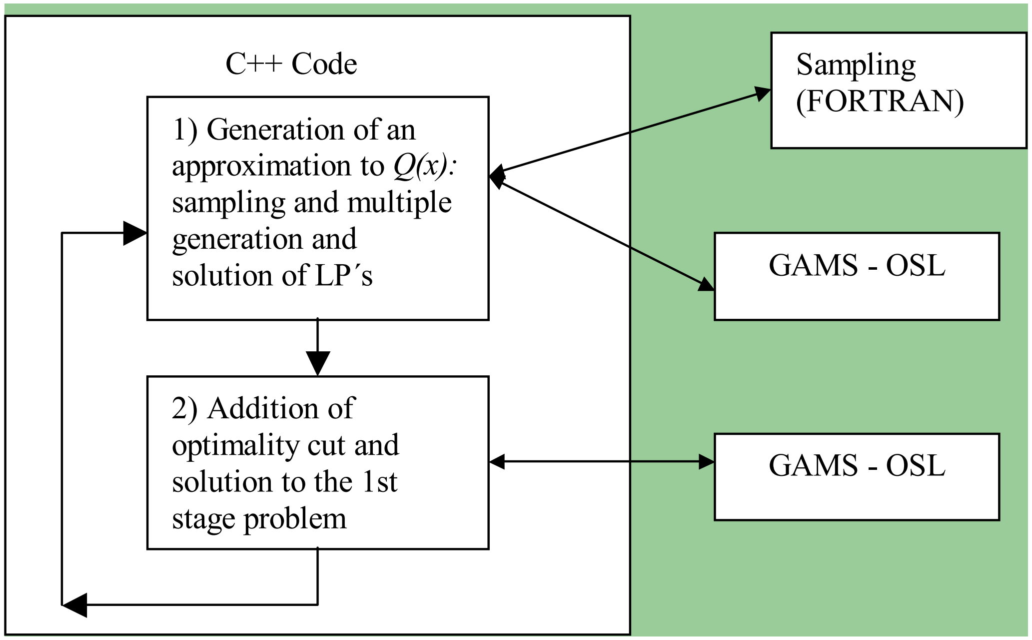
HSS



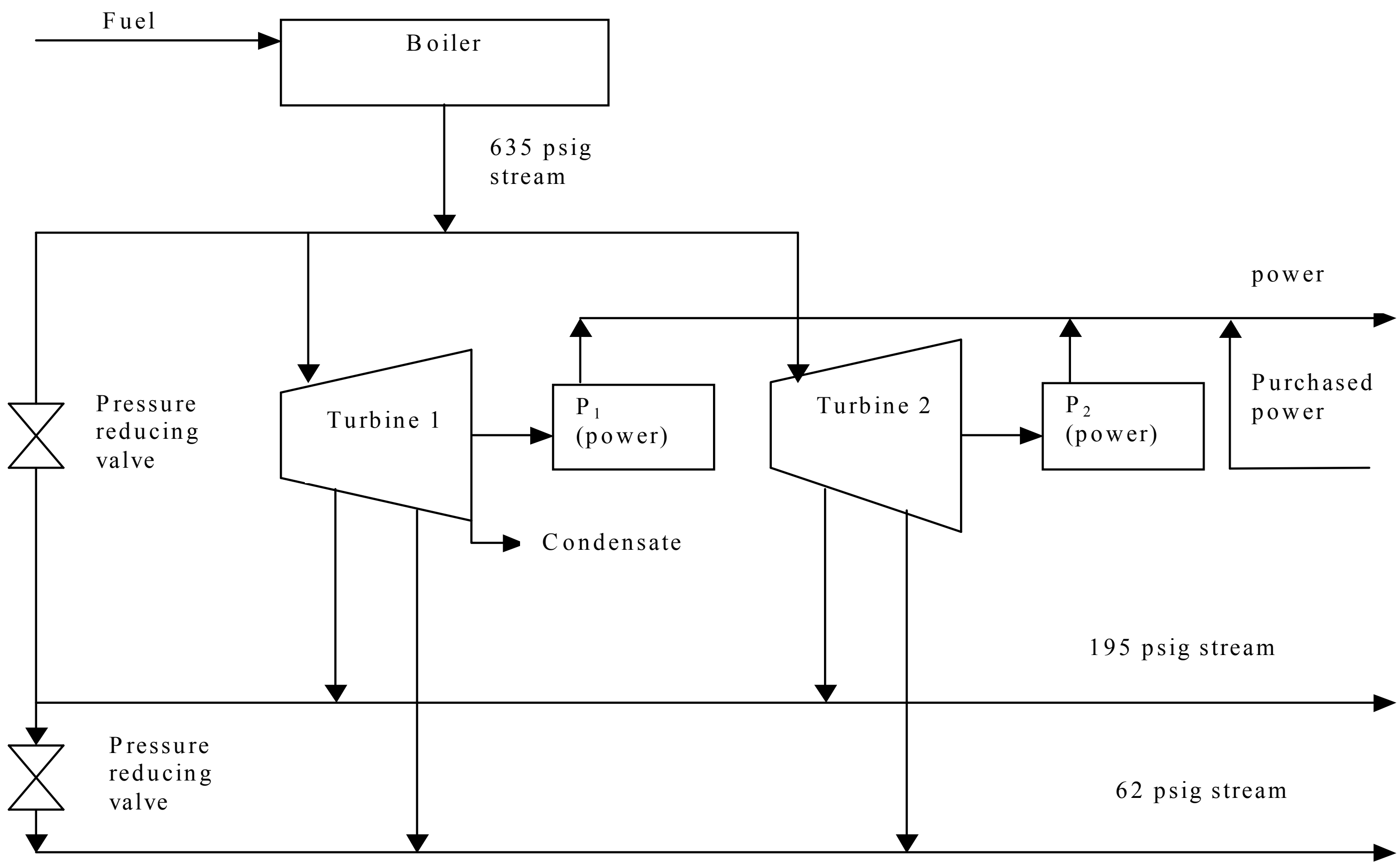
Monte Carlo

Implementación Computacional

- Integración del entorno de modelación GAMS, el código de la técnica de muestreo HSS (FORTRAN) y un programa en C++ como programa maestro



Aplicaciones a Ingeniería Química



Sistema Turbogenerador

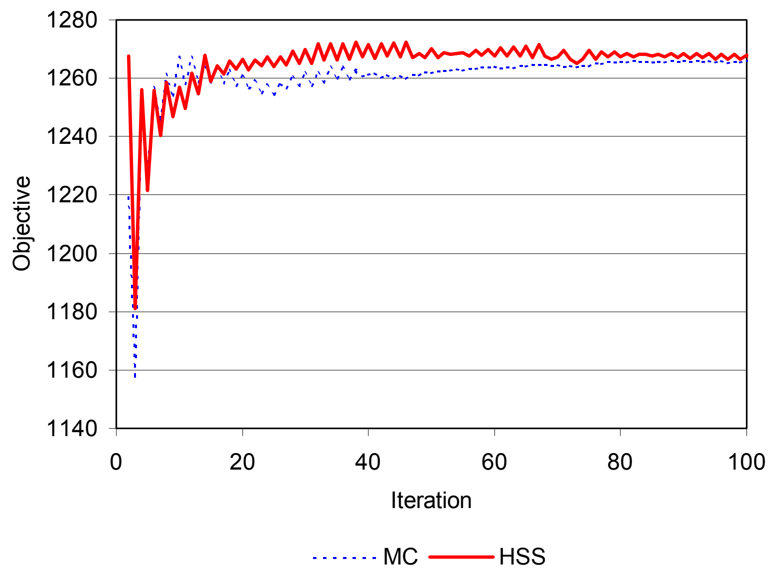
Aplicaciones a Ingeniería Química

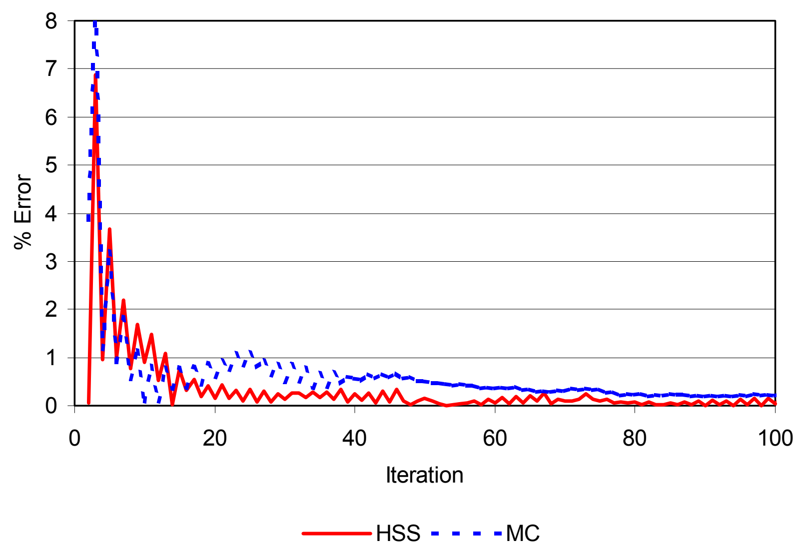
Caso de Estudio	PRIMERA ETAPA		Segunda Etapa		Variables
	Renglones	Columnas	Renglones	Columnas	Estocásticas
Sistema Turbogenerador	1	2	21	28	4
Planeación de una Refinería	4	5	12	13	8
Planeación de una Planta Petroquímica	1	2	11	15	11

Caso de Estudio	N (MISMO ERROR PROMEDIO)	
	HSS	MC
Sistema Turbogenerador	60	140
Planeación de una Refinería	190	275
Planeación de una Planta Petroquímica	175	160

Resultados

Sistema Turbo Generador





¿Cómo evaluar si el esfuerzo vale la pena?

- **Valor de la Solución Estocástica (VSS)** : Diferencia entre el valor obtenido para la función objetivo respecto del valor obtenido si se usan valores promedio para incertidumbres

- **Valor de la Información Perfecta (VPI)** Diferencia del resultado con el valor verdadero luego de la ocurrencia real del evento

Resultados

Caso de Estudio	VSS (%)
Sistema Turbogenerador	0.48
Planeación de una Refinería	6.85
Planeación de una Planta Petroquímica	2.22

Discusión

- A pesar de la limitación acerca de la linealidad de las restricciones, existen aplicaciones importantes en planeación y calendarización de procesos

- Extensión a casos entero y no lineal
  - BONUS (No lineal)
  - Desarrollo actual para casos de programación entera

Programación Estocástica Mixta Entera Lineal

Surgen Más Clasificaciones para Problemas Multi-Etapa

- *Variables Enteras en la Primera Etapa* : Se utilizan los mismos algoritmos que en programación lineal estocástica
- *Variables Enteras en la Segunda Etapa:* Se utilizan variaciones en el método de "*branch and bound*" para permitir la adición iterativa de los cortes de optimalidad y factibilidad

Problemas Enteros en la Primera Etapa: Aplicaciones a Otras Áreas

- **Seguridad en Redes de Agua Municipales**
  - Colocación óptima de sensores para disminuir el porcentaje de la población en riesgo tras un ataque químico a la red
- **Localización de Estaciones de Desinfección**
  - Colocación óptima de estaciones para conservar niveles de cloro bajo especificaciones para aguas municipales

Seguridad en Redes de Agua Municipales

$$\min \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{\beta_{ij}}{\delta_{ij}}x_{ij} + E_{\omega}\left[Q(x,\omega)\right]$$

$$s.t.\quad x_{ij} = x_{ji} \quad \forall i = 1\ldots n-1,\quad i \le j$$

$$\sum\nolimits_{(i,j),\ j\in E,\ i\le j} x_{ij} \le x_{\max}$$

$$x_{ij} \in \{0,1\} \quad \forall i,j \in E$$

$$q_{ipj} = \omega_{ip}\delta_{jp}$$

$$Q(x,\omega) = \quad \min \quad \sum_{i=1}^{n}\sum_{p=1}^{P}\sum_{j=1}^{n} q(\omega)_{ipj}\, y_{ipj}$$

$$s.t.\quad y_{ipi} = 1 \quad \forall i = 1\ldots n,\quad p = 1\ldots P$$

$$y_{ipk} - y_{ipj} \le x_{kj} \quad \forall (k,j) \in E \quad s.t.\ f_{kjp} = 1$$

Localización de Estaciones de Desinfección

$$\min \sum_{i=1}^{n_b} W_i\, x_i + E_\omega\left[Q(x,\omega)\right]$$

$$s.t. \quad \sum_{i=1}^{n_b} x_i \le n_b^{\max}$$

$$x_i \in \{0,1\}$$

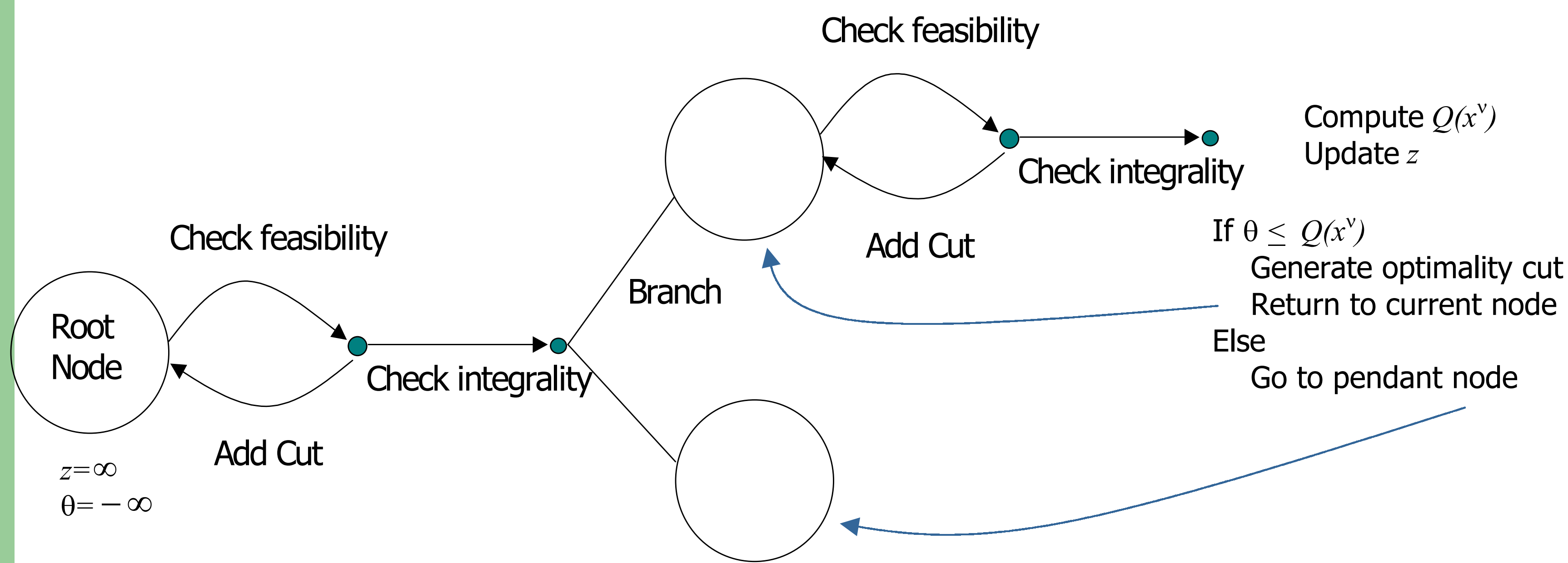
$$q_i^k = \omega_i^k$$

$$Q(x,\omega) = \quad \min \quad \sum_{i=1}^{n_b} \frac{1}{\Delta T_i} \sum_{k=1}^{n_i} q(\omega)_i^k\, y_i^k$$

$$s.t. \quad \left.\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n_b}\sum_{k=1}^{n_i} \alpha_{ij}^{km}\; y_i^k &\le u_j \\ -\sum_{i=1}^{n_b}\sum_{k=1}^{n_i} \alpha_{ij}^{km}\; y_i^k &\le -\ell_j \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} & j = 1 \ldots n_m \\ & m = M \ldots M + n_\alpha - 1 \end{aligned}$$

$$\left.\begin{aligned} y_i^k - Y_i^k x_i &\le 0 \\ y_i^k &\ge 0 \end{aligned}\right\} \quad \begin{aligned} & i = 1 \ldots n_b \\ & k = 1 \ldots n_i \end{aligned}$$

Programación Estocástica Mixta-Entera Lineal (Variables Enteras en la Segunda Etapa)



Otro Tipo de Problemas Estocásticos

Chance Constrained Programming

- Hay algunas restricciones para las que sólo existe cierta probabilidad de que se tengan que satisfacer
- Tales restricciones deben incluir las variables inciertas dentro de términos lineales

$$Minimize \quad Z = 4x_1 - x_2$$

Sujeto a:

$$2x_1 + x_2 \leq 8$$
$$P(x_2 \leq u) \leq \frac{3}{7}$$
$$x_1 - x_2 \leq 4$$
$$x_1, x_2 \geq 0$$

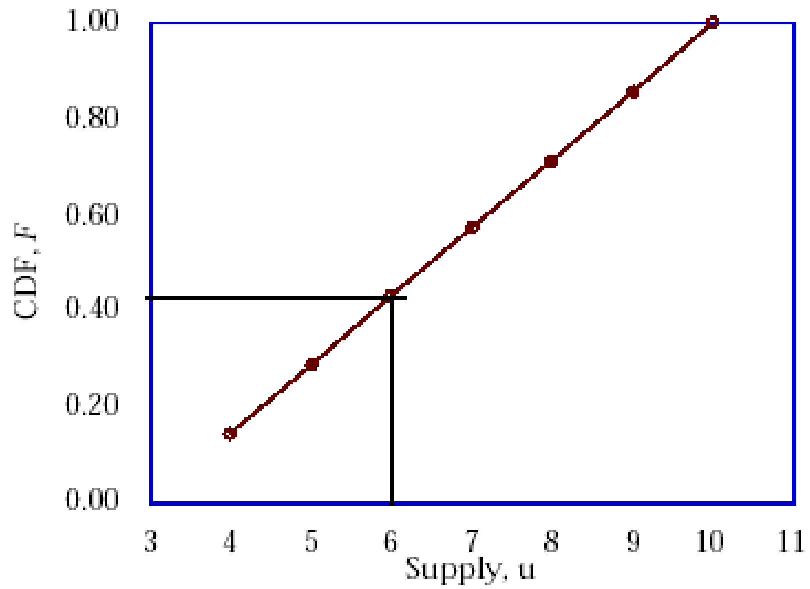
$\Rightarrow$

$$Minimize \quad Z = 4x_1 - x_2$$

Sujeto a:

$$2x_1 + x_2 \leq 8$$
$$x_2 \leq 6$$
$$x_1 - x_2 \leq 4$$
$$x_1, x_2 \geq 0$$

Chance Constrained Programming



Introducción a la Optimización Multiobjetivo

Optimización Multiobjetivo (MOP)

- Prácticamente en cualquier área y en una variedad de contextos se presentan problemas con múltiples objetivos que se contraponen entre sí
- A este tema se le conoce también como **Optimización Vectorial** y se clasifica en términos del tipo de variables y restricciones (**MOLP**, **MONLP**, etc.)

$$Maximizar \quad \overline{Z} = (Z_1, Z_2, Z_3, \ldots Z_k)$$

Sujeto a:

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

Un Ejemplo

Un estudiante desea seleccionar la mejor escuela de ingeniería con base a varios criterios:

Escuelas consideradas

School	Index
Massachusetts Institute of Technology	1
Stanford University	2
Carnegie Mellon University	3
Georgia Institute of Technology	4
University of Michigan- Ann Arbor	5
California Institute of Technology	6
Cornell University	7

Criterios de Selección

Criteria	Index
Academic Rank	1
Engineering Recruiters	2
Student Selectivity	3
Research Activity	4
Doctoral Student to Faculty Ratio	5

Rangos proporcionados por US News

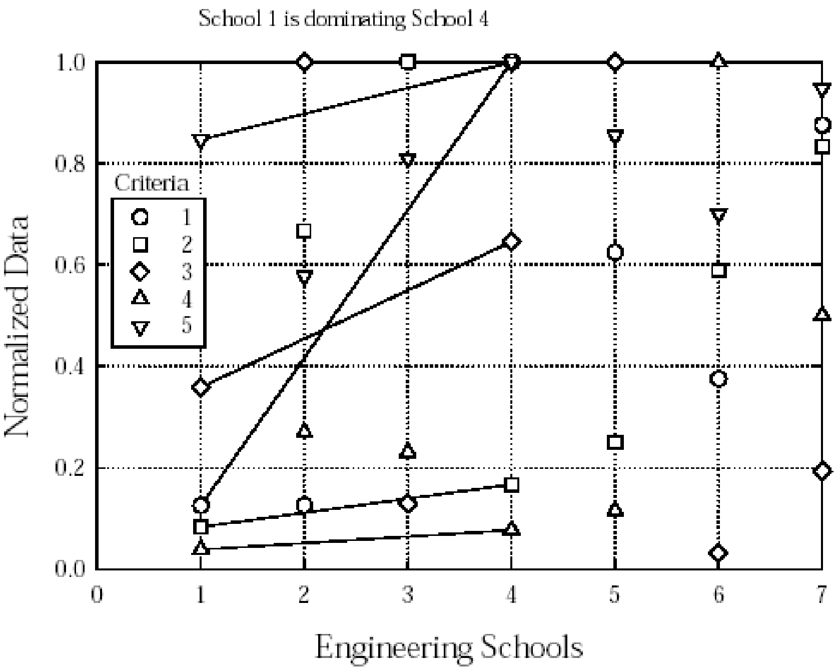
Schools	Criteria				
	1	2	3	4	5
1	1	1	11	1	3.21
2	1	8	31	7	4.71
3	8	12	4	6	3.36
4	8	2	20	2	2.72
5	5	3	31	3	3.18
6	3	7	1	26	3.88
7	7	10	6	13	2.87

Selección de Universidad

Valores normalizados

Schools	Criteria				
	1	2	3	4	5
1	0.1250	0.0833	0.3584	0.0385	0.8465
2	0.1250	0.6667	1.0000	0.2692	0.5769
3	1.0000	1.0000	0.1290	0.2308	0.8088
4	1.0000	0.1667	0.6452	0.0769	0.9990
5	0.6250	0.2500	1.0000	0.1154	0.8545
6	0.3750	0.5833	0.0322	1.0000	0.7004
7	0.8750	0.8333	0.1936	0.5000	0.9468

Análisis de Resultados



Conjunto Pareto

- MIT es mejor que Georgia Tech y que la Universidad de Michigan en todos los criterios considerados. Sin embargo, Stanford, Cal Tech, Cornell y Carnegie Mellon son mejores o no que MIT dependiendo del criterio.
- La solución a una problema MOP no es un solo valor, sino un conjunto de alternativas denominado **Conjunto Pareto**, Conjunto Preferido o Conjunto No Dominado
- Un grupo de **5 escuelas** conforman el Conjunto Pareto en el ejemplo
- **Conjunto Pareto:** Conjunto de alternativas que proporcionan soluciones potenciales y representan un compromiso entre los diferentes objetivos

Otro Ejemplo: Fabricación de Químicos

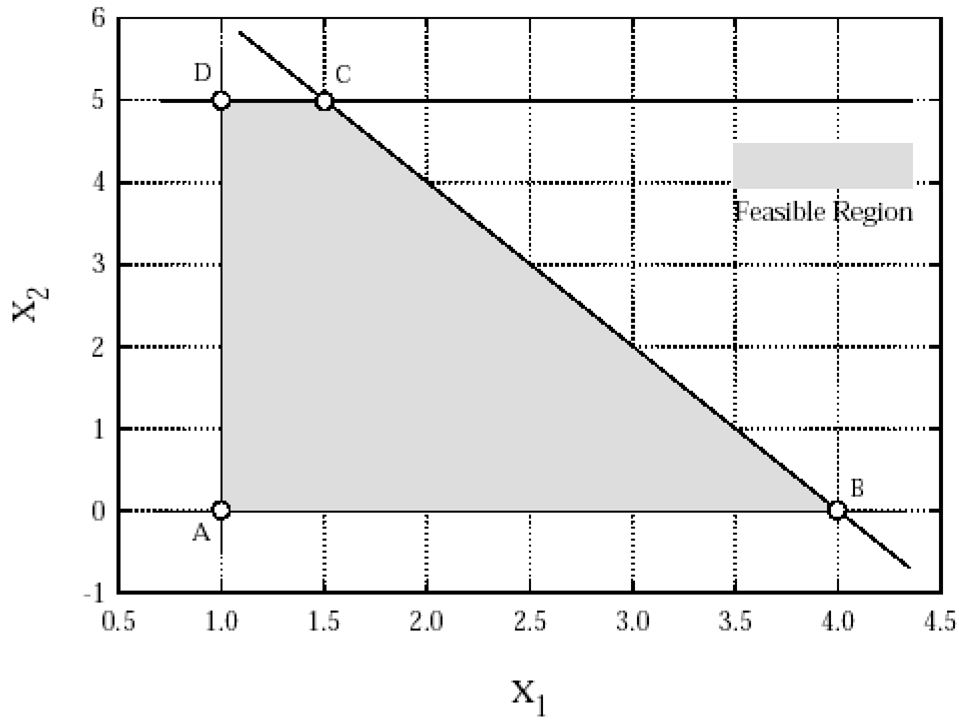
$$Minimize \quad Z_1 = 4x_1 - x_2$$ **Costo**

$$Minimize \quad Z_2 = -05x_1 + x_2$$ **Emisiones**

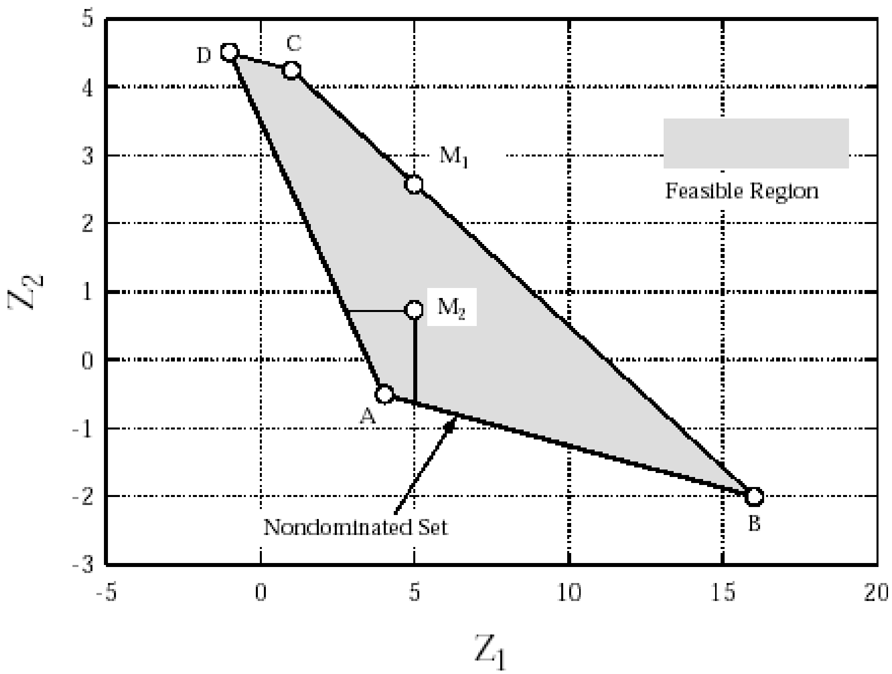
Sujeto a:

Durabilidad	$x_1 \geq 1$
Almacenamiento	$2x_1 + x_2 \leq 8$
Disponibilidad	$x_2 \leq 5$
Seguridad	$x_1 - x_2 \leq 4$
	$x_1, x_2 \geq 0$

Región Factible en espacio de Decisión



Otro Ejemplo: Fabricación de Químicos



Región Factible en espacio de Objetivos

Frontera BAD constituye el Conjunto Pareto

Valores en Puntos Extremos

Extreme Points	x_1	x_2	Z_1	Z_2
A	1	0	4	-0.5
B	4	0	16	-2.0
C	1.5	5	1	4.25
D	1	5	-1	4.0

Métodos de Solución para MOP

- "*Métodos Basados en la Preferencia*" : Determinan la solución que mejor satisface la preferencia de quien toma las decisiones. Reduce el tiempo y el número de alternativas pero sufren de subjetividad y falta de información
- "**Métodos Generadores**" Determinan el conjunto Pareto de manera formal

La mejor estrategia es utilizar un método generador para determinar el Conjunto Pareto y entonces usar un método basado en la preferencia para seleccionar la solución óptima final.

Método Generador: Método de los Coeficientes de Peso

- La idea es asociar cada función objetivo con un **coeficiente de peso** y minimizar la suma "pesada" de los objetivos
- El problema se convierte en una **serie de problemas** de optimización de **una sola función objetivo**

$$Optimizar \qquad Z_{mult} = \sum_{i=1}^{k} w_i Z_i$$

Sujeto a:

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

Método de los Coeficientes de Peso: Procedimiento

- Encuentre los óptimos individuales para cada objetivo. Tales puntos representan los extremos del Conjunto No Dominado.

$$\begin{array}{ll} Optimizar & Z_1 \\ Optimizar & Z_2 \\ \vdots & \\ Optimizar & Z_k \end{array}$$

- Escoja valores no negativos de los pesos y resuelva el problema:

$$Optimizar \quad Z_{mult} = \sum_{i=1}^{k} w_i Z_i$$

Sujeto a:

$$h(x) = 0$$
$$g(x) \leq 0$$

- Analice el espacio de la función objetivo y repita con nuevos pesos de forma que se mueva hacia la región del conjunto Pareto que se desea explorar

Ejemplo Ilustrativo

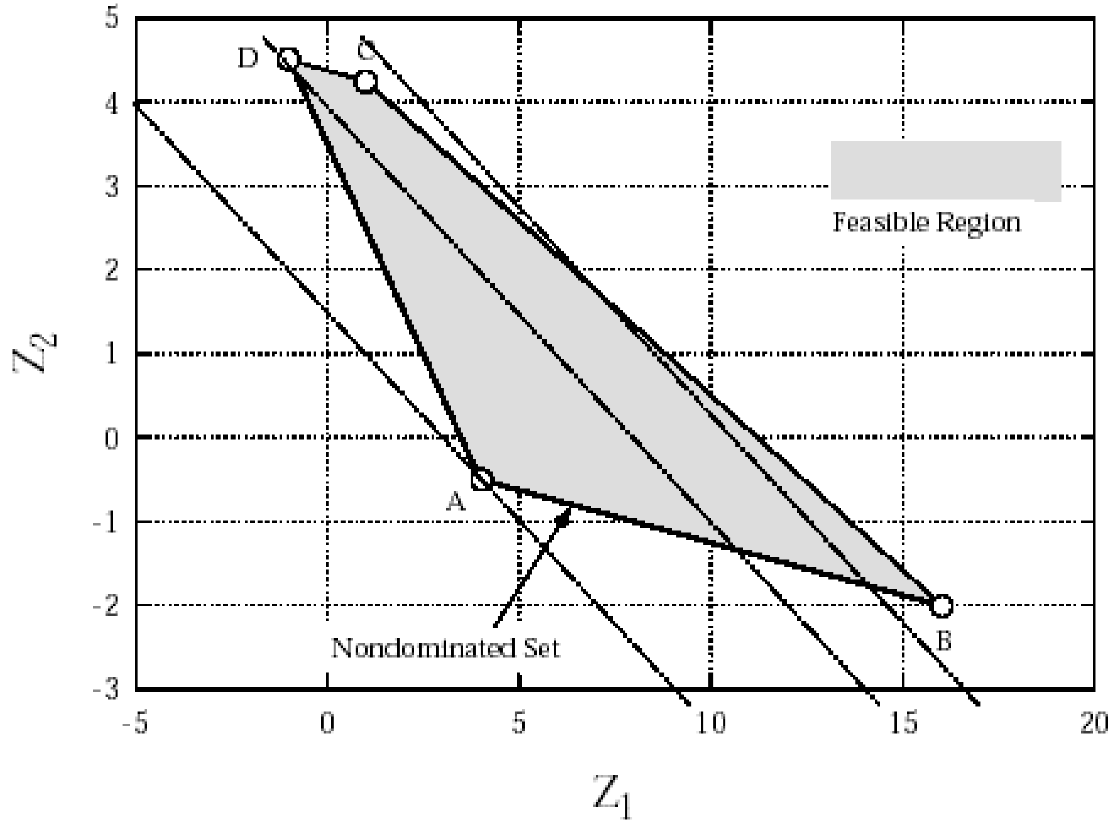
$$Z_2 = -\frac{w_1}{w_2} Z_1 + \frac{1}{w_2} Z_{mult}$$

$$Minimize \quad Z_{mult} = w_1 Z_1 + w_2 Z_2$$

Función objetivo "pesada"

Sujeto a:

$$x_1 \geq 1$$
$$2x_1 + x_2 \leq 8$$
$$x_2 \leq 5$$
$$x_1 - x_2 \leq 4$$
$$x_1, x_2 \geq 0$$



Método Generador: Método de Restricciones (Constraint Method)

- La idea otra vez es transformar el problema multiobjetivo a una serie de problemas de un solo objetivo
- Se selecciona una función objetivo que **se conserva** como tal y el resto se incluye como **restricciones de desigualdad**

$$Minimize \quad \overline{Z} = (Z_1, Z_2, Z_3, \ldots Z_k)$$

$$Minimize \quad Z_{mult} = Z_i$$

Sujeto a:

$$Z_j \leq \in_j \quad \forall j \neq i$$

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

Método de Restricciones

$$Minimize \quad Z_1 = 4x_1 - x_2$$
$$Minimize \quad Z_2 = -05x_1 + x_2$$

Sujeto a:

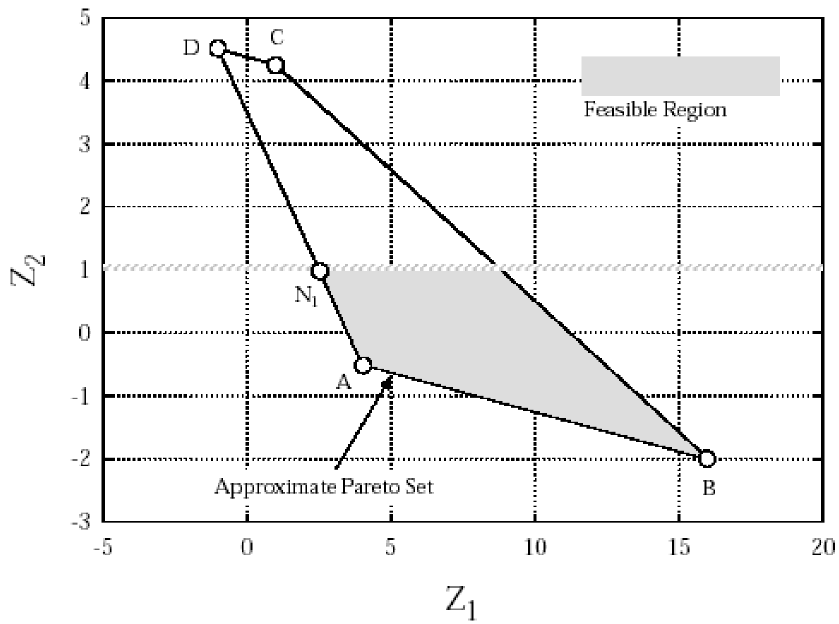
$$x_1 \geq 1$$
$$2x_1 + x_2 \leq 8$$
$$x_2 \leq 5$$
$$x_1 - x_2 \leq 4$$
$$x_1, x_2 \geq 0$$

$$Minimize \quad Z_1 = 4x_1 - x_2$$

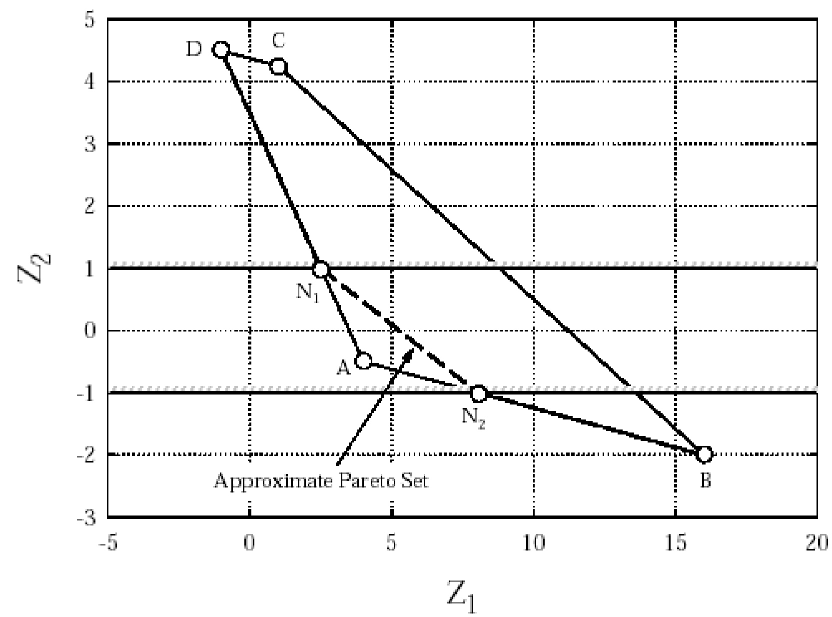
Sujeto a:

$$Z_2 = \boxed{-0.5x_1 - x_2 \leq \in_2}$$
$$x_1 \geq 1$$
$$2x_1 + x_2 \leq 8$$
$$x_2 \leq 5$$
$$x_1 - x_2 \leq 4$$
$$x_1, x_2 \geq 0$$

Método de Restricciones



$\in_2 = 1$



Point	ϵ_1	ϵ_2	Z_1	Z_2
B	∞	-	16	-2
D	-	∞	-1	4
N_1	-	1	2.5	1.0
N_2	-	-1	8.0	-1.0

Método Basado en la Preferencia: Optimización Mediante Metas (Goal Programming)

- Se define un valor como **meta para cada función objetivo**
- Se crea una sola función objetivo que **minimiza las desviaciones** respecto de las metas definidas

$$Minimize \quad \bar{Z} = (Z_1, Z_2, Z_3, \ldots Z_k)$$

Se establece una meta G_i para cada objetivo Z_i

$$\begin{cases} Minimize \quad Z_{goal} = \sum_i \left(\delta_i^+ + \delta_i^-\right) \\ Z_i - G_i = \delta_i^+ - \delta_i^- \quad \forall i \end{cases}$$

Sujeto a:

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

$$\delta_i^+, \delta_i^- \geq 0$$

Goal Programming

$$Minimize \quad Z_1 = 4x_1 - x_2$$
$$Minimize \quad Z_2 = -05x_1 + x_2$$

Sujeto a:

$$x_1 \geq 1$$
$$2x_1 + x_2 \leq 8$$
$$x_2 \leq 5$$
$$x_1 - x_2 \leq 4$$
$$x_1, x_2 \geq 0$$

$$G_1 = G_2 = -5$$

$$Minimize \quad Z_{goal} = \sum_{i=1}^{2} \left(\delta_i^+ + \delta_i^-\right)$$

Sujeto a:

$$4x_1 - x_2 + 5 = \delta_1^+ - \delta_1^-$$
$$-05x_1 + x_2 + 5 = \delta_2^+ - \delta_2^-$$
$$x_1 \geq 1$$
$$2x_1 + x_2 \leq 8$$
$$x_2 \leq 5$$
$$x_1 - x_2 \leq 4$$
$$x_1, x_2 \geq 0$$
$$\delta_i^+, \delta_i^- \geq 0$$

Solución:

$$Z_1 = -1 \quad Z_2 = 4$$

Control Óptimo y Optimización Dinámica

Problemas de Control Óptimo

- Proceso de solución consiste en encontrar los **perfiles** de la variable de control vs tiempo de modo que se optimice un índice particular de medida de desempeño del sistema

$$\underset{\theta}{Maximizar} \quad L = \int_0^T k(x,\theta)\, dt + S(T)$$

Sujeto a:

$$\frac{dx}{dt} = f(x,\theta) \qquad x(0) = x_0$$

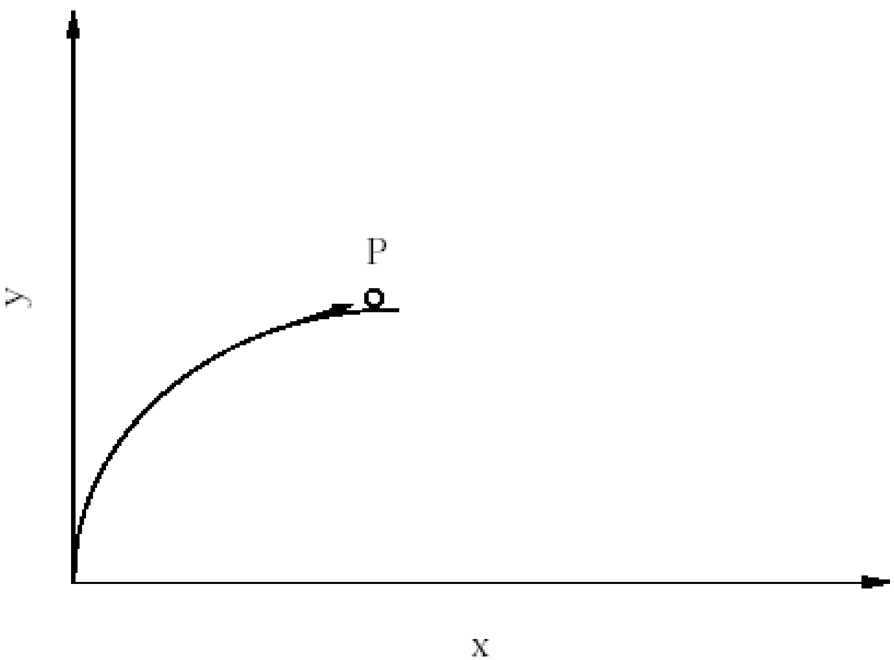
- Métodos de Solución Convencionales
  - El Principio del Máximo
  - Programación Dinámica
  - Cálculo de Variación

Problemas Históricos

- La reina Dido planteó el **problema isoperimétrico**: Encuentre el área mayor que puede ser cubierta con un cordel de longitud fija (L)

$$A = \int_o^X y(x)\,dx \qquad L = \int ds = \int \sqrt{(dy)^2 + (dx)^2} = \int_0^X \sqrt{1 + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2}\,dx$$

$$y \to x_1$$
$$x \to t$$



$$Maximize \quad A = \int_o^T x_1(t)\,dt$$

$$\frac{dx_1}{dt} = u \qquad x_1(0) = 0 \quad x_1(T) = 0$$

$$L = \int_0^T \sqrt{1+u^2}\,dt$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \sqrt{1+u^2} \qquad x_2(0) = 0 \qquad x_2(T) = L$$

Problemas Isoperimétrico

$$Maximize \quad A = \int_{o}^{T} x_1(t)\,dt$$

$$\frac{dx_1}{dt} = u \qquad x_1(0) = 0 \qquad x_1(T) = 0$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \sqrt{1+u^2} \qquad x_2(0) = 0 \qquad x_2(T) = L$$

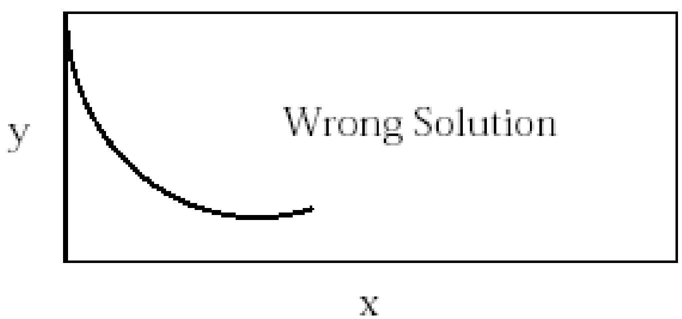
Brachistochrone (Tiempo Mas Corto)

Groningen,
January 1, 1697

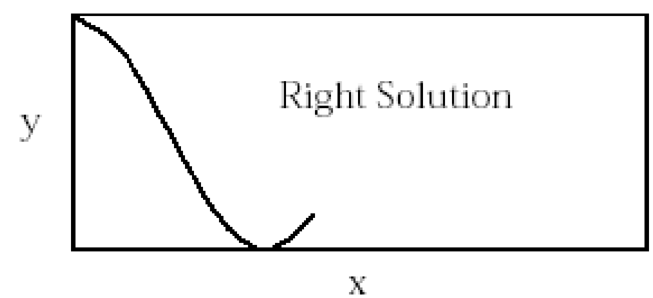
AN ANNOUNCEMENT

"I, Johann Bernoulli, greet the most clever mathematicians in the world. Nothing is more attractive to intelligent people than an honest, challenging problem whose possible solution will bestow fame and remains as a lasting monument. Following the example set by Pascal, Fermat, etc., I hope to earn the gratitude of the entire scientific community by placing before the finest mathematicians of our time a problem which will test their methods and the strength of their intellect. If someone communicates to me the solution of the proposed problem, I shall then publicly declare him worthy of praise."

Galileo



Bernoulli



Ingeniería Química: Problema de Destilado Máximo

$$\underset{R_t}{Maximizar} \quad L = \int_0^T \frac{dD}{dt} dt = \int_0^T \frac{V}{R_t + 1} dt$$

Sujeto a:

$$\frac{dx_t^1}{dt} = -\frac{V}{R_t + 1} \qquad x_0^1 = Bo = F$$

$$\frac{dx_t^2}{dt} = \frac{V}{R_t + 1} \frac{(x_t^2 - x_D^{(1)})}{x_t^1} \qquad x_0^2 = x_F^{(1)}$$

Pureza promedio

$$x_D^* = \frac{\int_0^T x_D^{(1)} \frac{V}{R_t + 1} dt}{\int_0^T \frac{V}{R_t + 1} dt}$$

El Principio del Máximo

- La función objetivo se reformula en la **forma lineal de Mayer**
- Requiere la incorporación de ecuaciones diferenciales ordinarias adicionales (**ecuaciones adjuntas**) que representan la dinámica de las variables adjuntas (también agregadas al problema)
- Se define una función **Hamiltoniana** (invariante en el tiempo)
- El perfil óptimo se obtiene derivando la función Hamiltoniana con respecto a la **variable de control**
- El sistema resultante es un **problema de valores en la frontera**

El Principio del Máximo

Forma Lineal

$$\underset{\theta}{Maximizar} \quad L = \int_0^T k(x,\theta)\, dt \quad \longrightarrow \quad \underset{\theta}{Maximizar} \quad J = c^T\, x(T) = \sum_{i=1}^{n} c_i\, x_i(T)$$

$$\frac{dx}{dt} = f \quad x(0) = x_0 \qquad \qquad \frac{dx}{dt} = f \quad x(0) = x_0$$

Hamiltoniano

$$H = \mu^T f = \sum_{i=1}^{n} \mu_i\, f_i$$

Ecuaciones y Variables Adjuntas

$$\frac{d\mu}{dt} = -\mu^T f_x = -\sum_{j=1}^{n} \mu_j \frac{\partial f_j}{\partial x_i} \qquad \mu(T) = c$$

$$\frac{dx}{dt} = f \quad x(0) = x_0$$

Problema de Destilado Máximo: Principio del Máximo

Función objetivo es re-escrita en forma Lagrangiana

$$\underset{R_t}{Maximizar} \quad L = \int_0^T \frac{V}{R_t+1}\left[1-\lambda\left(x_D^* - x_D^{(1)}\right)\right]dt$$

Sujeto a:

$$\frac{dx_t^1}{dt} = -\frac{V}{R_t+1} \qquad x_0^1 = Bo = F$$

$$\frac{dx_t^2}{dt} = \frac{V}{R_t+1}\frac{(x_t^2 - x_D^{(1)})}{x_t^1} \qquad x_0^2 = x_F^{(1)}$$

Problema de Destilado Máximo: Principio del Máximo

Para obtener forma lineal de Mayer

$$x_3^t = \int_0^t \frac{V}{R_t+1}\left[1-\lambda\left(x_D^* - x_D^{(1)}\right)\right]dt$$

$$\underset{R_t}{Maximize} \quad x_3^T$$

Sujeto a:

$$\frac{dx_t^1}{dt} = -\frac{V}{R_t+1} \qquad x_0^1 = Bo = F$$

$$\frac{dx_t^2}{dt} = \frac{V}{R_t+1}\frac{(x_t^2 - x_D^{(1)})}{x_t^1} \qquad x_0^2 = x_F^{(1)}$$

$$\frac{dx_t^3}{dt} = \frac{V}{R_t+1}\left[1-\lambda\left(x_D^* - x_D^{(1)}\right)\right]$$

Problema de Destilado Máximo: Principio del Máximo

Hamiltoniano

$$H_t = -\mu_t^1 \frac{V}{R_t+1} + \mu_t^2 \frac{V\left(x_t^2 - x_D^{(1)}\right)}{\left(R_t+1\right)x_t^1} + \mu_t^3 \frac{V}{R_t+1}\left[1-\lambda\left(x_D^* - x_D^{(1)}\right)\right]$$

Ecuaciones y Variables Adjuntas

$$\frac{d\mu_t^1}{dt} = \mu_t^2 \frac{V\left(x_t^2 - x_D^{(1)}\right)}{\left(R_t+1\right)\left(x_t^1\right)^2}, \quad \mu_T^1 = 0$$

$$\frac{d\mu_t^2}{dt} = -\mu_t^2 \frac{V\left(1-\dfrac{\partial x_D^{(1)}}{\partial x_t^2}\right)}{\left(R_t+1\right)x_t^1} - \mu_t^3 \lambda \frac{V}{\left(R_t+1\right)}\left(\frac{\partial x_D^{(1)}}{\partial x_t^2}\right), \quad \mu_T^2 = 0$$

$$\frac{d\mu_t^3}{dt} = 0, \quad \mu_T^3 = 1$$

Perfil óptimo

$$R_t = \frac{\left[\dfrac{\mu_t^2}{x_t^1}\left(x_t^2 - x_D^{(1)}\right) - \mu_t^1 - \lambda\left(x_D^* - x_D^{(1)}\right) + 1\right]}{\dfrac{\partial x_D^{(1)}}{\partial R_t}\left(\lambda - \dfrac{\mu_t^2}{x_t^1}\right)} - 1$$

$$\frac{\partial H}{\partial R_t} = 0$$

Programación Dinámica

- **Condición de Optimalidad**: Aplicación del Principio de Optimalidad de Bellman da como resultado una ecuación diferencial parcial conocida como Ecuación Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB)

$$0 = \underset{\theta_t}{Maximize} \left[\frac{\partial L}{\partial t} + k(\bar{x}_t, \theta_t) + \sum_i \frac{\partial L}{\partial x_t^i} \frac{dx_t^i}{dt} \right]$$

$$0 = \underset{\theta_t}{Maximize} \left[\frac{\partial L}{\partial t} + k(\bar{x}_t, \theta_t) + \sum_i \frac{\partial L}{\partial x_t^i} f_i \right]$$

$$0 = \underset{\theta_t}{Maximize} \left[L_t + k + L_x f \right]$$

Problema de Destilado Máximo: Programación Dinámica

Ecuación HJB

$$0 = \frac{\partial L}{\partial t} + \underset{R_t}{Maximize} \left\{ \frac{V}{R_t + 1}\left[1 - \lambda\left(x_D^* - x_D^{(1)}\right)\right] + \frac{\partial L}{\partial x_t^1}\left[-\frac{V}{R_t + 1}\right] + \frac{\partial L}{\partial x_t^2}\left[\frac{V}{R_t + 1}\frac{(x_t^2 - x_D^{(1)})}{x_t^1}\right]\right\}$$

Perfil óptimo

$$0 = \left[1 - \lambda(x_D^* - x_D^{(1)}) - \frac{\partial L}{\partial x_t^1} + \frac{\partial L}{\partial x_t^2}\left(\frac{x_t^2 - x_D^{(1)}}{x_t^1}\right)\right]\left[-\frac{V}{(R_t + 1)^2}\right] + \left[\frac{V}{R_t + 1}\right]\left[\lambda\frac{\partial x_D^{(1)}}{\partial R_t} - \frac{\partial L}{\partial x_t^2}\frac{1}{x_t^1}\frac{\partial x_D^{(1)}}{\partial R_t}\right]$$

$$R_t = \frac{\partial L \big/ \partial x_t^2 \left(\frac{x_t^2 - x_D^{(1)}}{x_t^1}\right) - \frac{\partial L}{\partial x_t^1} - \lambda\left(x_D^* - x_D^{(1)}\right) + 1}{\frac{\partial x_D^{(1)}}{\partial R_t}\left[\lambda - \frac{\partial L \big/ \partial x_t^2}{x_t^1}\right]} - 1$$

Mismo perfil que en el principio del máximo si las variables adjuntas son iguales a las derivadas de la función objetivo (L) con respecto a las variables de estado (x)

Problemas Estocásticos de Control Óptimo

- No es posible despreciar incertidumbres en algunas aplicaciones prácticas de problemas de control óptimo:
  - En parámetros del modelo
  - En condiciones iniciales
- El problema estocástico de control óptimo resultante puede ser analizado utilizando "***Teoría de Opción Real***":
  - Caracterizando incertidumbres dependientes del tiempo como Procesos de Ito
  - Usando el **Lema de Ito**
  - Usando las condiciones de optimalidad de **Programación Dinámica Estocástica**

Procesos de Ito

- Las variables estocásticas cambian con el tiempo en una forma incierta
- El denominado **proceso Wiener** se utiliza como base para modelar una amplia gama de procesos estocásticos más complicados. Posee 3 propiedades:
  - ✓ Satisface la propiedad de **Markov**
  - ✓ Presenta incrementos independientes
  - ✓ Sus cambios en el tiempo se distribuyen normalmente
- Un **proceso de Ito** representa el incremento de una variable estocástica en el tiempo de acuerdo con:

$$dx = a(x,t)\,dt + b(x,t)\,dz$$

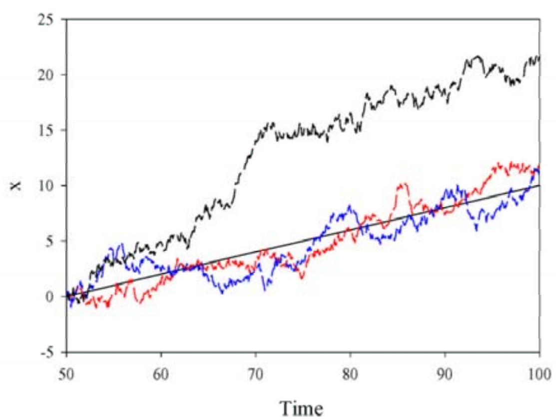
a y *b* son funciones conocidas y *dz* es el incremento de un proceso Wiener. Note que $E[dz]=0$ y $E[dz^2]=dt$

Procesos de Ito

Algunos parámetros ingenieriles pueden representarse como procesos de Ito:

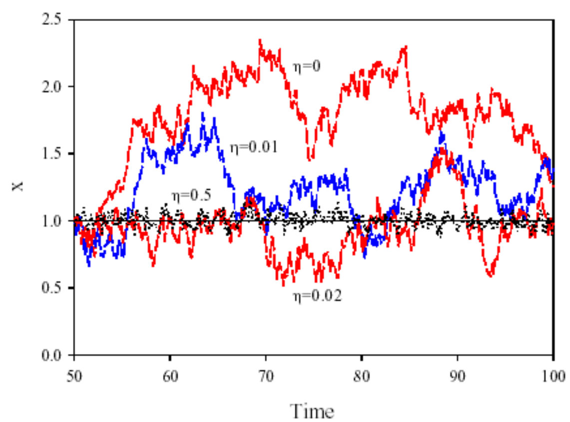
- Movimiento Browniano

$$dx = \alpha\, dt + \sigma\, dz$$



- *"Mean reverting process"*

$$dx = \eta\left(x_{avg} - x\right) dt + \sigma\, dz$$



- Movimiento Geométrico Browniano

$$dx = \alpha\, x\, dt + \sigma\, x\, dz$$

Lema de Ito

- **Teorema Fundamental** del Cálculo Estocástico
- Permite derivar e integrar funciones de variables estocásticas que se comportan como procesos de Ito

$$dx = a(x,t)\,dt + b(x,t)\,dz$$

$$dF = \frac{\partial F}{\partial t}dt + \frac{\partial F}{\partial x}dx + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}(dx)^2$$

$$dF = \left[\frac{\partial F}{\partial t} + a(x,t)\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{1}{2}b^2(x,t)\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right]dt + b(x,t)\frac{\partial F}{\partial x}dz$$

- No se desprecian algunas contribuciones de segundo orden dado que ***E[dz²]=dt***

Programación Dinámica Estocástica

- Se ha desarrollado una extension a las condiciones de optimalidad de programación dinámica para el caso estocástico:

$$\underset{\theta_t}{Maximize} \quad L = \int_0^T k\left(\bar{x}_t, \theta_t\right) dt$$

Sujeto a: $$dx_t^i = f_i\left(\bar{x}_t, \theta_t\right)dt + \boxed{\sigma_i \, dz}$$ **Procesos de Ito**

Condiciones de Optimalidad:

$$0 = \underset{\theta_t}{Maximize} \left[k(\bar{x}_t, \theta_t) + \frac{1}{dt} E(dL) \right]$$

$$0 = \underset{\theta_t}{Maximize} \left[\frac{\partial L}{\partial t} + k(\bar{x}_t, t) + \sum_i \frac{\partial L}{\partial x_t^i} f_i(\bar{x}_t, t) + \boxed{\sum_i \frac{\sigma_i^2}{2} \frac{\partial^2 L}{(\partial x_t^i)^2} + \sum_{i \neq j} \sigma_i \sigma_j \frac{\partial^2 L}{\partial x_t^i \partial x_t^j}} \right]$$

Principio del Máximo para Problemas Estocásticos

- Con base en las condiciones de optimalidad para programación dinámica, se pudieron derivar las expresiones correspondientes al método del principio del máximo

- *Las variables adjuntas* (μ) en el principio del máximo son equivalentes a las *derivadas parciales de la función objetivo con respecto a las variables de estado* (L_x) de programación dinámica

- El principal resultado del análisis es la derivación de las *ecuaciones adjuntas*

- *Las derivadas de segundo orden* **de la función objetivo con especto a las variables de estado** (L_{xx}) en programación dinámica estocástica tiene que ser también incluidas y se incorporan en la formulación a través de las ***variables adjuntas*** adicionales, ω

Principio del Máximo para Problemas Estocásticos

- Se utiliza representación escalar aunque el análisis es válido para el caso vectorial

$$H = \mu f$$

$$\frac{dx}{dt} = f \quad x(0) = x_0$$

$$\frac{d\mu}{dt} = -\mu f_x \quad \mu(T) = c$$

Determinístico

$$H = \mu f + \boxed{\frac{\sigma^2}{2}\omega}$$

$$dx = f\,dt + \boxed{\sigma\,dz} \quad x(0) = x_0$$

$$\frac{d\mu}{dt} = -\mu f_x \boxed{- \frac{1}{2}\left(\sigma^2\right)_x \omega} \quad \mu(T) = c$$

$$\boxed{\frac{d\omega}{dt} = -2\omega f_x - \mu f_{xx} - \frac{1}{2}\left(\sigma^2\right)_{xx} \omega \quad \omega(T) = 0}$$

Estocástico

Versión Estocástica del Problema de Destilado Máximo

$$\underset{R_t}{Maximize} \quad L = \int_0^T \frac{dD}{dt}dt = \int_0^T \frac{V}{R_t+1}dt$$

Sujeto a:

$$x_{Dave} = \frac{\int_0^T x_D^{(1)} \frac{V}{R_t+1}dt}{\int_0^T \frac{V}{R_t+1}dt} = x_D^*$$

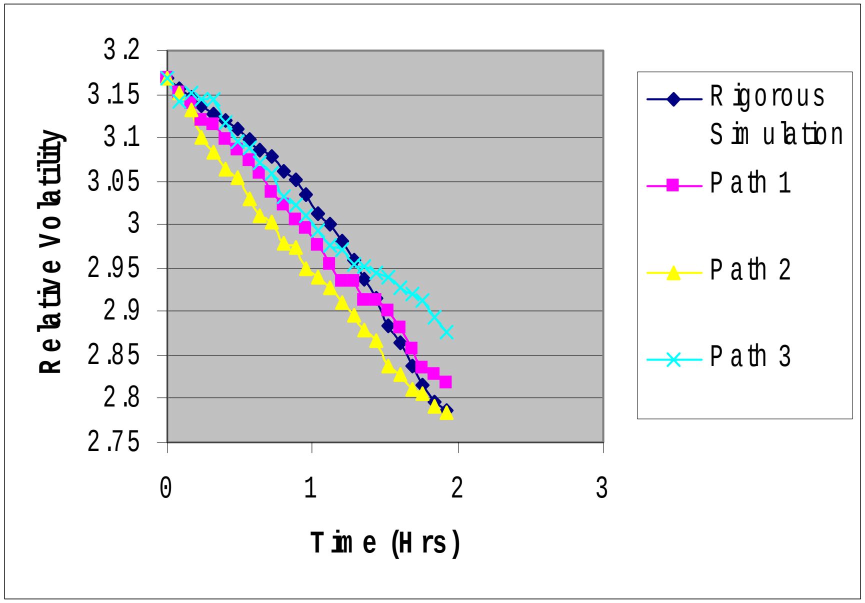
$$\frac{dx_t^1}{dt} = -\frac{V}{R_t+1} \qquad x_0^1 = Bo = F$$

$$dx_t^2 = \frac{V}{R_t+1}\frac{(x_t^2 - x_D^{(1)})}{x_t^1}dt + x_t^2 \sigma_2 dz_2 \qquad x_0^2 = x_F^{(1)}$$

Restricción externa usada como criterio de convergencia

Proceso Ito

Volatilidad Relativa como un Proceso de Ito



Ocasiona un comportamiento incierto en las variables de estado

Principio del Máximo

Ecuaciones Adjuntas

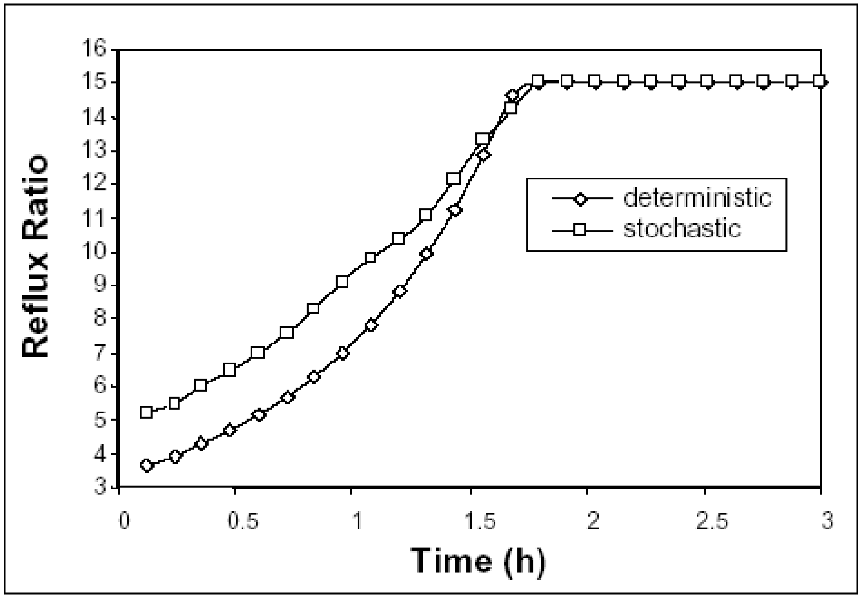
$$\frac{d\mu}{dt} = -\mu^2 \frac{V\left(x_t^2 - x_D^{(1)}\right)}{(R_t+1)\left(x_t^1\right)^2} - \mu \frac{V\left(1 - \frac{\partial x_D^{(1)}}{\partial x_t^2}\right)}{(R_t+1)x_t^1} - \sigma_2^2 \, x_t^2 \, \omega$$

$$\frac{d\omega}{dt} = -2\omega \frac{V\left(1 - \frac{\partial x_D^{(1)}}{\partial x_t^2}\right)}{(R_t+1)x_t^1} + \mu \frac{V \frac{\partial^2 x_D^{(1)}}{\left(\partial x_t^2\right)^2}}{(R_t+1)x_t^1} - \sigma_2^2 \, \omega - \omega\mu \frac{V\left(x_t^2 - x_D^{(1)}\right)}{(R_t+1)\left(x_t^1\right)^2}$$

Perfil óptimo

$$R_t = \frac{x_t^1 - \mu\left(x_t^2 - x_D^{(1)}\right)}{\frac{\partial x_D^{(1)}}{\partial R_t}\mu} + \boxed{\frac{x_t^1\left[\sigma_2 \frac{\partial \sigma_2}{\partial R_t}\left(x_t^2\right)^2 \omega\right]\left[\frac{(R_t+1)^2}{V}\right]}{\frac{\partial x_D^{(1)}}{\partial R_t}\mu}} - 1$$

Perfil Óptimo de la Razón de Reflujo



- Se requieren valores de reflujo más grandes debido a la disminución en el valor de la volatilidad relativa con el tiempo
- La desviación respecto al caso determinístico también cambia con el tiempo debido al efecto de las incertidumbres

Nuevamente el Problema Isoperimétrico

- Considere ahora la **versión estocástica** del problema isoperimétrico

Determinístico

$$\underset{u}{Maximize} \quad x_3(T)$$

$$\frac{dx_1}{dt} = u \qquad x_1(0) = 0 \quad x_1(T) = 0$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \sqrt{1+u^2} \qquad x_2(0) = 0 \quad x_2(T) = L$$

$$\frac{dx_3}{dt} = x_1 \qquad x_3(0) = 0$$

$$L = 16$$

Estocástico

Movimiento Browniano

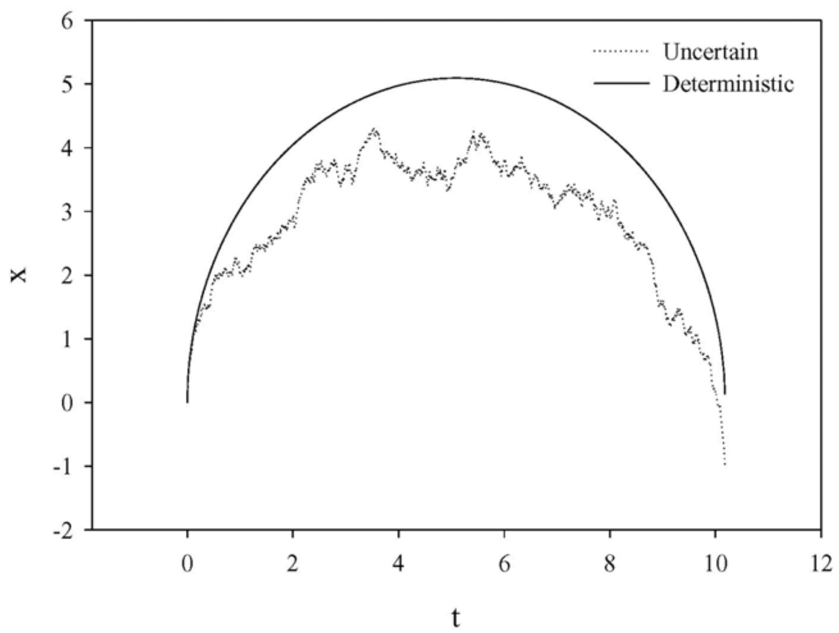
$$dx_1 = u\,dt + \sigma dz \quad x_1(0) = 0 \quad x_1(T) = 0$$

$$\sigma = 0.5$$

Suposición meramente académica

Soluciones al Problema Isoperimétrico

$$\mu_1 = -t + c_1$$
$$\mu_2 = c_2$$
$$\mu_3 = 1$$
$$\omega = 0$$
$$\mu_1 + \frac{u}{\sqrt{1+u^2}}\mu_2 = 0$$



Bibliografía

1. Teoría de optimización (determinística) y Aplicaciones en Ingeniería Química

a) Practical Methods of Optimization; R. Fletcher, 2nd. Ed., Wiley

b) Optimization of Chemical Processes; Edgar, Himmelblau and Larson, 2nd. Ed., McGraw-Hill

c) Nonlinear Programming, Theory and Algorithms; Bazaraa, Sherali and Shetty, Wiley

d) Systematic Methods for Chemical Process Design; Biegler, Grossmann and Westerberg, Prentice Hall

e) Linear Programming; Chvatal Vasek, Ed. W. H. Freeman and Co.

2. Programación MultiObjetivo

a) Introduction to Applied Optimization, Diwekar, Kluwer Academic Publishers

Bibliografía

3. Programación Estocástica

a) Stochastic Programming, Kall and Wallace, Wiley

4. Control óptimo

a) Batch Distillation, Simulation, Optimal Design and Control; Diwekar, Ed. Taylor and Francis

b) Optimal Control Theory; Sethi and Thompson, Kluwer Academic Publishers

c) Investment Under Uncertainty; Dixit and Pindyck, Princeton University Press