Lección 2: Formulación del problema de optimización

- Variables
- La función objetivo
- Restricciones de igualdad
- Restricciones de desigualdad
- Grados de libertad
- Formulación del problema

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

Esta es la formulación general del problema

$$\max_{x} f(x)$$

$$s.t.$$

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

$$x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$$

$$\max_x f(x)$$
$$s.t.$$
$$h(x) = 0$$
$$g(x) \le 0$$
$$x_{\min} \le x \le x_{\max}$$

VARIABLES

$$x_{\min} \le x \le x_{\max}$$

Variables can be grouped into two categories

"decision" or "optimization" variables

These are the variables in the system that are changed independently to modify the behavior of the system.

dependent variables

whose behavior is determined by the values selected for the independent variables.

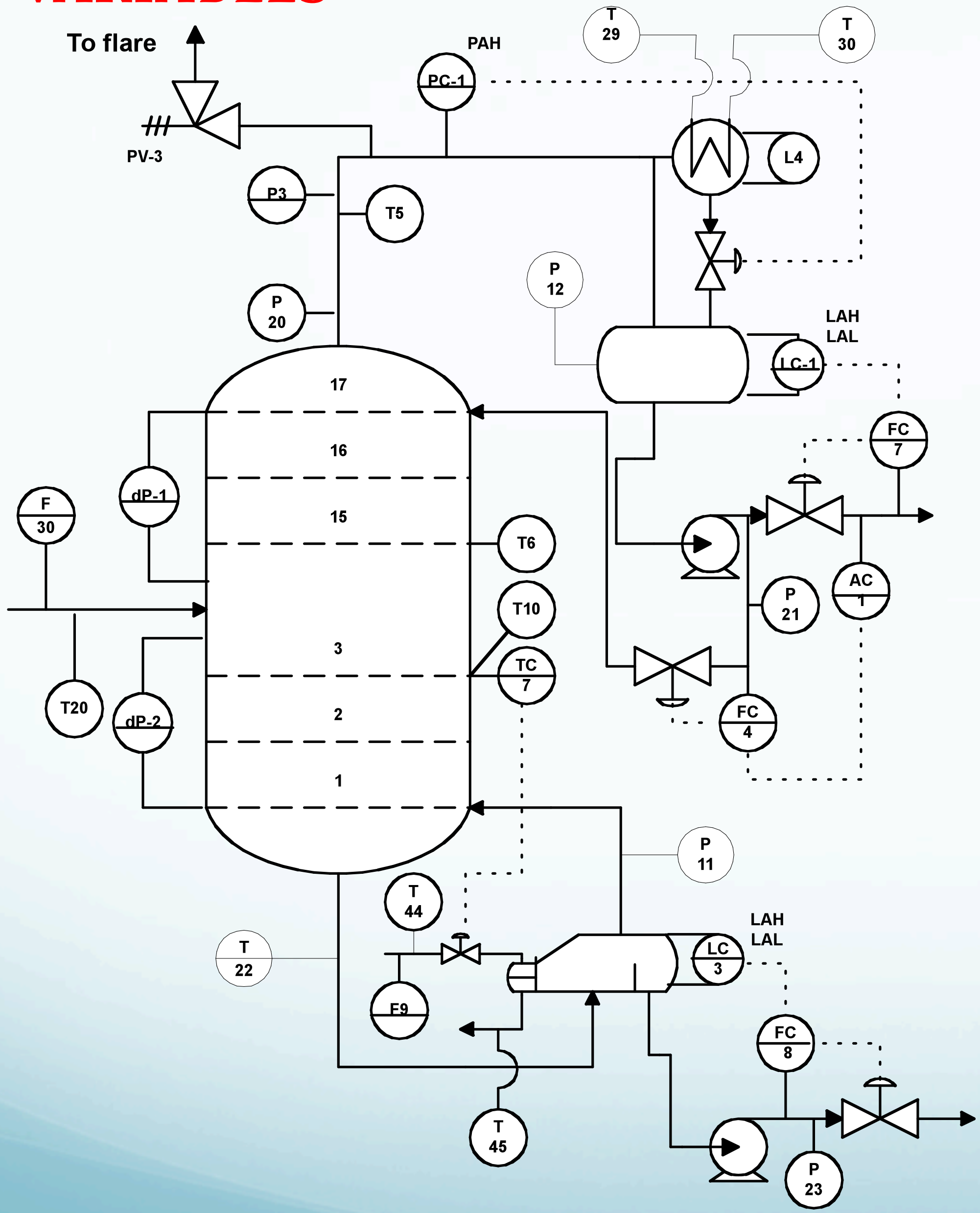
Although they can be grouped this way to help understanding, the solution method need not distinguish them. We need to solve a set of equations involving many variables.

DESIGN:

OPERATIONS:

MANAGEMENT:

VARIABLES



$$\max_x f(x)$$
$$s.t.$$
$$h(x) = 0$$
$$g(x) \leq 0$$
$$x_{min} \leq x \leq x_{max}$$

Some comments on variables

- Typically, we do not define the **"decision"** and **"dependent"** variables.

•Since we solve a set of simultaneous equations, all variables are evaluated together.

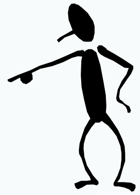
•We should always place **bounds** on variables.

$$\max_x f(x)$$
$$s.t.$$
$$h(x) = 0$$
$$g(x) \leq 0$$
$$x_{min} \leq x \leq x_{max}$$

FUNCIÓN OBJETIVO

$$\max_x f(x)$$

Este es el **objetivo**, ejemplos:
- maximizar beneficio (minimizar coste)
- minimizar uso de energía
- minimizar los residuos contaminantes
- minimizar el material para contruir un depósito



Formularemos **la mayoría de los problemas con una función objetivo escalar**

Debería representar el efecto total de las variables (x) en el objetivo.

$$\max_x f(x)$$
$$s.t.$$
$$h(x) = 0$$
$$g(x) \leq 0$$
$$x_{min} \leq x \leq x_{max}$$

FUNCIÓN OBJETIVO

Algunos comentarios sobre la función objetivo

- Aunque es preferible un objetivo escalar. Muchas veces nos encontramos con múltiples objetivos.
- Tener en cuenta que Max (f) es igual que Min (-f)

  - Por tanto, **no hay diferencia práctica ni fundamental entre problemas de maximizar y de minimizar**. El mismo software y algoritmo resuelve ambos.
- Hay dificultades cuando los modelos nos son muy exactos.
- Algunos aspectos son muy difíciles de modelar (respuesta del mercado a una mejora en la calidad del producto).
- Deseamos una función objetivo “suave”.

RESTRICCIONES DE IGUALDAD

$$\max_x f(x)$$
$$s.t.$$
$$h(x) = 0$$
$$g(x) \leq 0$$
$$x_{min} \leq x \leq x_{max}$$

$$s.t.$$
$$h(x) = 0$$

Esta expresión limita los valores posibles de x. Definen la **Región factible (feasible region)**

Algunas restricciones de igualdad:

Por convenio se escriben estas ecuaciones con un cero en la derecha de la igualdad (zero rhs –right hand side-)

Puede haber múltiples restricciones de igualdad, así que h(x) es un vector.

RESTRICCIONES DE IGUALDAD

$$\max_x f(x)$$
$$s.t.$$
$$h(x) = 0$$
$$g(x) \leq 0$$
$$x_{min} \leq x \leq x_{max}$$

1. **Define Objetivos**
   - ¿Qué decisión?
   - ¿Qué variable?
   - Localización
2. **Prepara información**
   - Dibuja el proceso
   - Recopila los datos
   - Declara las suposiciones
   - Define el sistema
3. **Formula el modelo**
4. **Determina la solución**
5. **Analiza Resultados**
6. **Valida el modelo**

Balance: Component Material

$$\begin{Bmatrix}\text{Accumulation of} \\ \text{component mass}\end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix}\text{component} \\ \text{mass in}\end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix}\text{component} \\ \text{mass out}\end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix}\text{generation of} \\ \text{component mass}\end{Bmatrix}$$

Energy

$$\begin{Bmatrix}\text{Accumulation} \\ U + PE + KE\end{Bmatrix} = \{H + PE + KE \text{ in}\} - \{H + PE + KE \text{ out}\} + Q - W_s$$

¥ What type of equations do we use first?

Conservation balances for key variable

¥ How many equations do we need?

Degrees of freedom = NV - NE = 0

¥ What after conservation balances?

Constitutive equations, e.g.,

$Q = h\ A\ (\Delta T)$

$r_A = k_0\ e^{-E/RT}$

Normalmente la solución y la optimización se determinan simultáneamente

RESTRICCIONES DE IGUALDAD

Algunos comentario sobre las restricciones de igualdad

- Los balances se deben de cumplir estrictamente. Si no lo especificamos así, el optimizador encontrará como *¡crear masa y energía!*
- Los balances se pueden aplicar sobre diferentes entidades:
  - materia
  - tiempo
  - cajas en un almacén
  - gente trabajando en una unidad de una planta
- Los modelos pueden cambiar. Por ejemplo, un cambiador puede tener una o dos fases según el resultado de la optimización.

  Esto complica la resolución de la optimización.

$$\max_x f(x)$$
$$s.t.$$
$$h(x) = 0$$
$$g(x) \leq 0$$
$$x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$$

RESTRICCIONES DE DESIGUALDAD

$$s.t.$$
$$g(x) \leq 0$$

Son límites al sistema en una dirección:

¿Por ejemplo?

Hay que tener cuidado en no definir un problema de forma incorrecta y que no tenga región factible.

Multiplicando por (-1) podemos cambiar el signo de la desigualdad, así que ambas restricciones están contempladas.

$$\max_x f(x)$$
$$s.t.$$
$$h(x) = 0$$
$$g(x) \leq 0$$
$$x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$$

GRADOS DE LIBERTAD

La siguiente relación determina el número de grados de libertad (DOF)

DOF = (# variables) - (# ecuaciones)

¿Cómo deben ser los valores de los grados de libertad para Optimización?

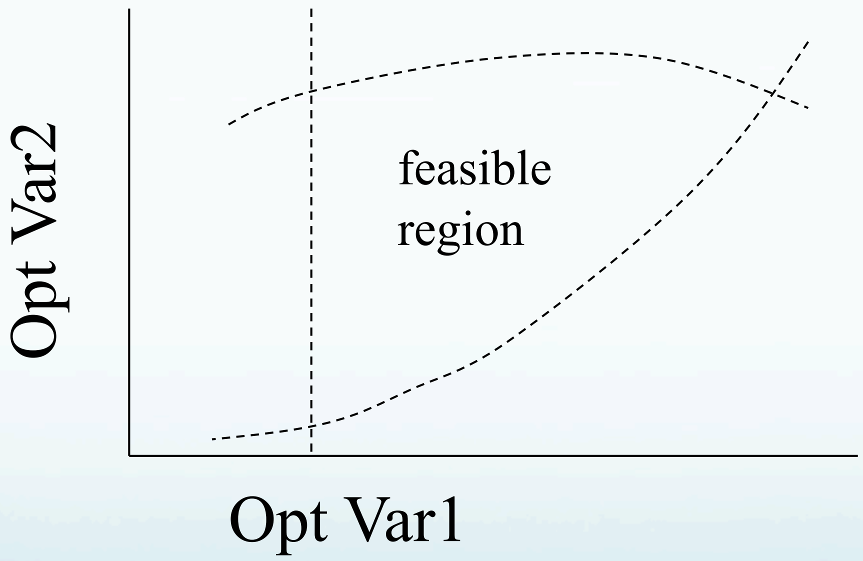
$$\max_x f(x)$$
$$s.t.$$
$$h(x)=0$$
$$g(x)\leq 0$$
$$x_{min}\leq x\leq x_{max}$$

GRADOS DE LIBERTAD (DOF)

Normalmente se piensa el problema de optimización como teniendo:

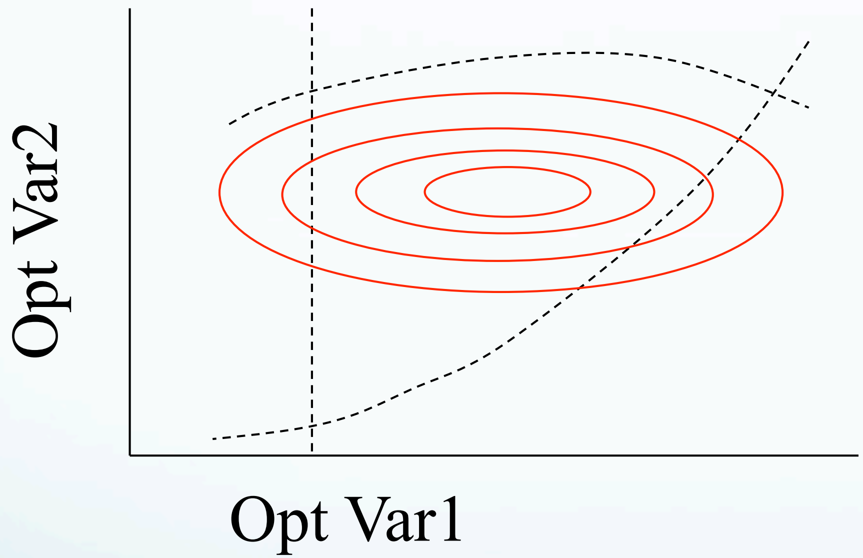
#Opt Var = # var - #equality constr.

En dos dimensiones el gráfico queda:

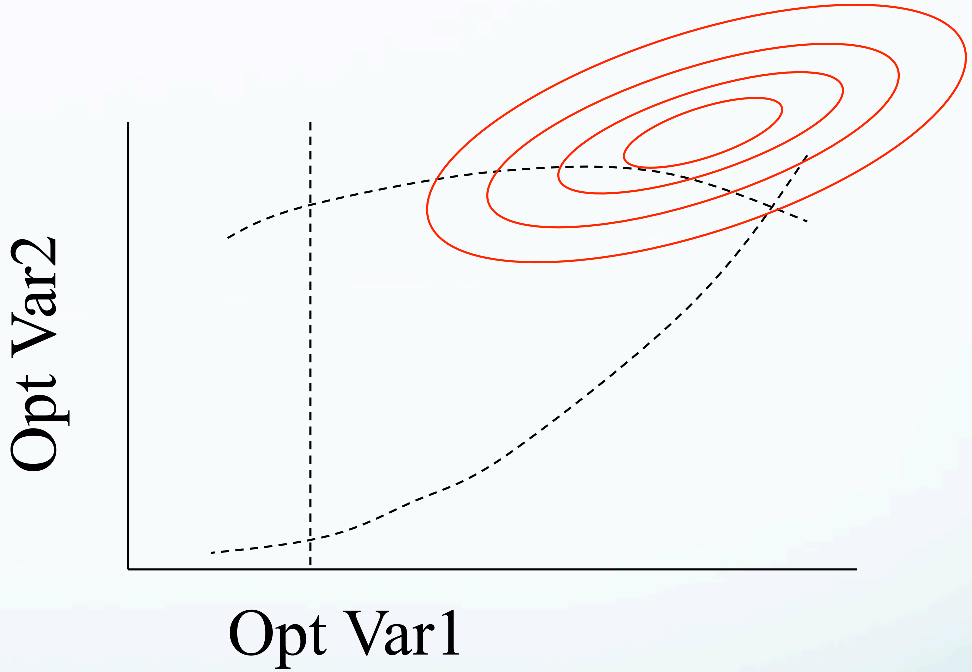


GRADOS DE LIBERTAD (DOF)

Podemos dibujar la función objetivo como contornos.



Caso A



Caso B

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

¿Cómo seleccionamos el sistema para nuestra optimización?

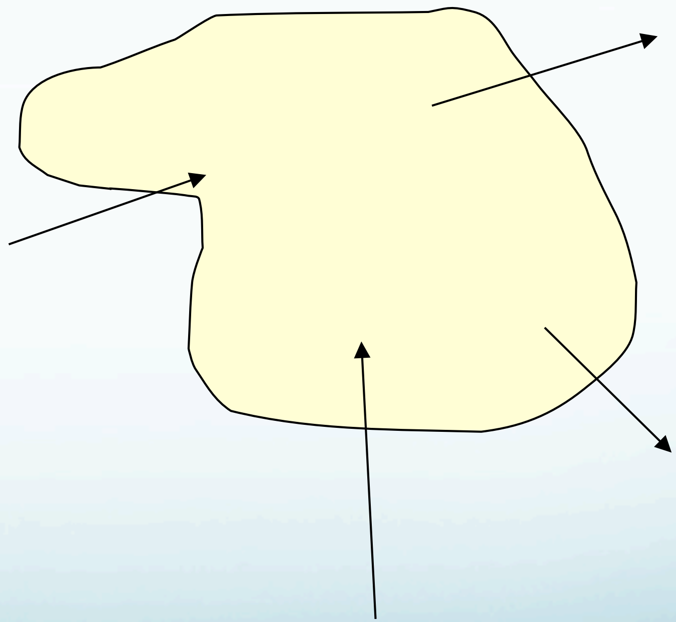
$$\max_{x} f(x)$$

$$s.t.$$

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \le 0$$

$$x_{\min} \le x \le x_{\max}$$



FORMULACIÓN DEL PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

$$\max_{x} f(x)$$

$$s.t.$$

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

$$x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$$

How do we define a scalar that represents performance, including

- **Economics**
- **Safety**
- **Product quality**
- **Product rates (contracts!)**
- **Flexibility**
- **……**

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

$$\max_{x} f(x)$$

$$s.t.$$

$$h(x) = 0 \longrightarrow$$

$$g(x) \leq 0$$

$$x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$$

Cómo de exacto debe ser el modelo del sistema físico?

- **Macroscopico**
- **1,2 3, dimensiones espaciales**
- **Dinámico o estado estacionario**
- **Propiesdades físicas**
- **Ecs. Constitutivas (U(f), $k_0e\text{-}^{E/RT}$, ..**

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

$$\max_{x} f(x)$$

$$s.t.$$

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

$$x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$$

Cuáles son los límites a las posibles soluciones?

- **Seguridad**
- **Calidad del producto**
- **Daños de equipos**
- **Operación de equipos**
- **Consideraciones legales/éticas**

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

$$\max_{x} f(x)$$

$$s.t.$$

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

$$x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$$

Factoid: Many process simulations and optimizations have a large number of variables and constraints. Why?

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

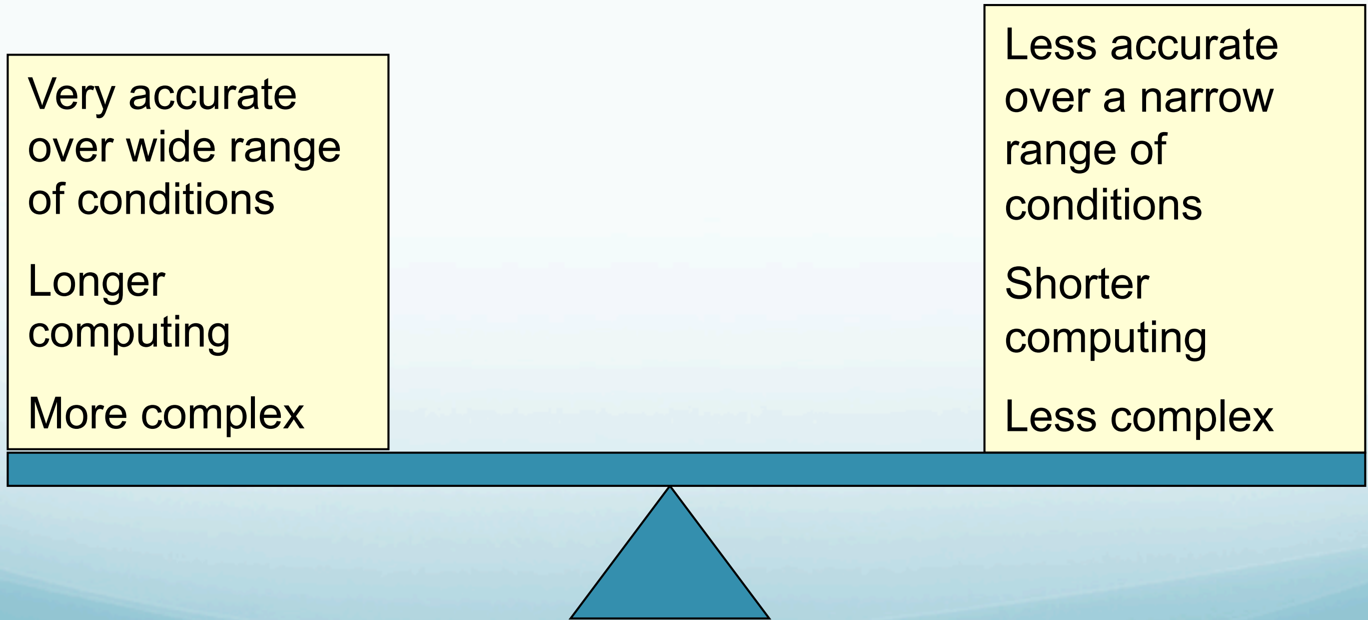
We use the term "tractable" to describe whether we can

1. Solve the mathematical optimization problem
2. Achieve desired accuracy in the "Real World"

   - This prevents us from using a useless, simple model
3. Calculate the solution in an acceptable time. The allowable time depends on the problem.

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

The engineer must select the appropriate balance for each problem. The problem must be tractable. Intractable problems have to be reformulated.



Optimization Formulation: Workshop #1

We want to schedule the production in two plants, A and B, each of which can manufacture two products: 1 and 2. How should the scheduling take place to maximize profits while meeting the market requirements based on the following data:

	Material processed (kg/day)		Profit (€/kg)	
Plant	1	2	1	2
A	M_{A1}	M_{A2}	S_{A1}	S_{A2}
B	M_{B1}	M_{B2}	S_{B1}	S_{B2}

How many days per year should each plant operate processing each kind of material?

Objective function

Constraints

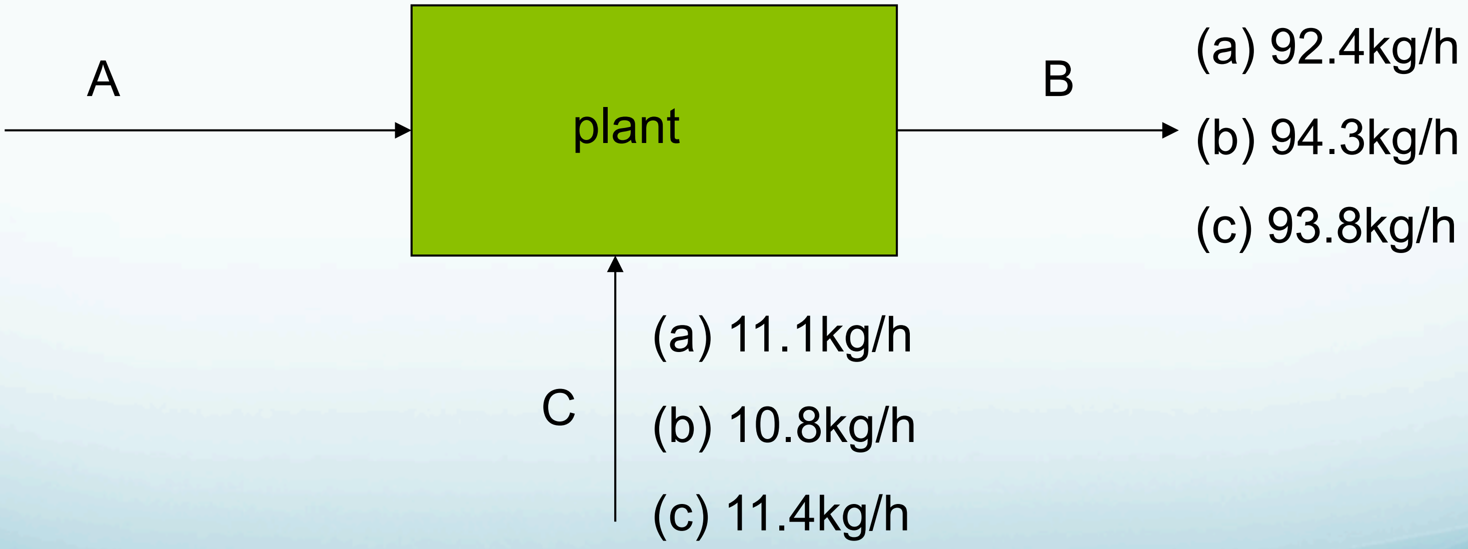
Equalities

Inequalities

Optimization Formulation: Workshop #2

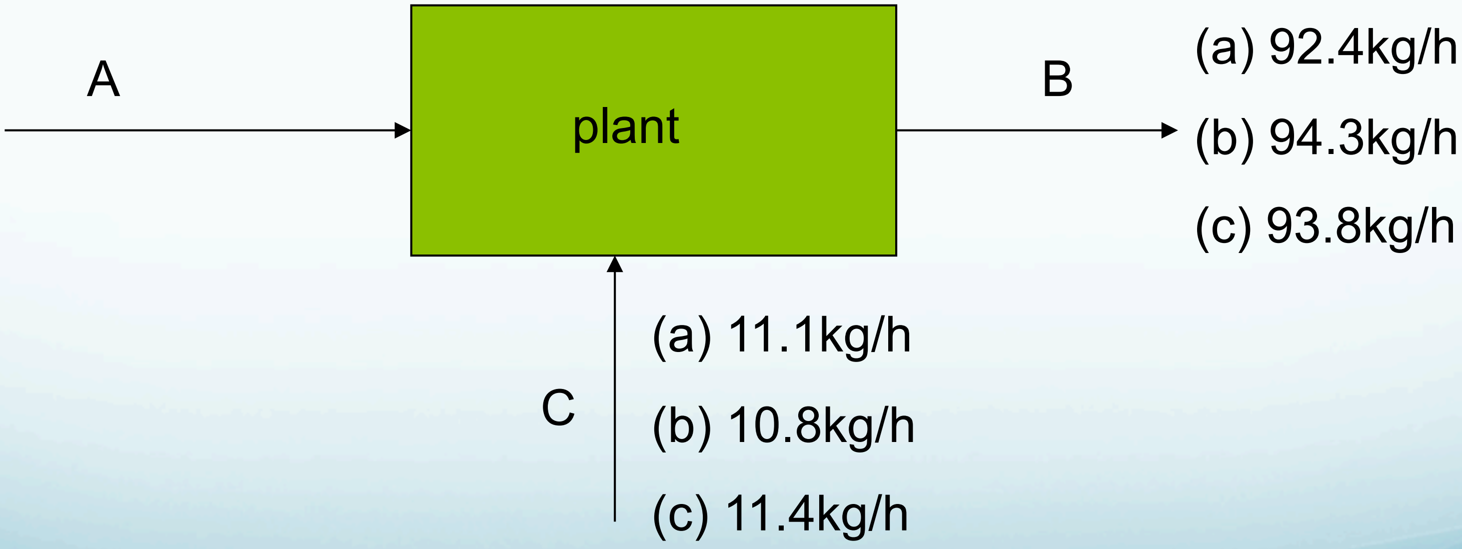
Material reconciliation

Suppose the flow rates entering and leaving a process are measured periodically. Determine the best value for stream A in kg/h for the process shown from the three hourly measurements indicated of B and C in the figure, assuming steady-state operation at a fixed operating point.



Objective function

Constraints

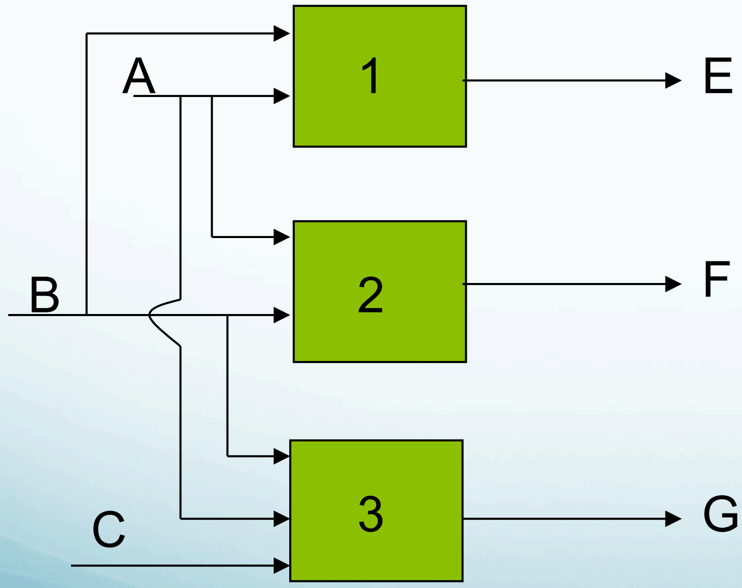


Optimization Formulation: Workshop #3

Material flows allocation

Consider the process diagram of the figure where each product (E,F,G) requires different amounts of reactants according to the table shown in the next slide.

The table below show the maxium amount of reactant available per day as well as the cost per kg.



Raw material	Maximum available (kg/day)	Cost (€/kg)
A	40000	1.5
B	30000	2.0
C	25000	2.5

Optimization Formulation: Workshop #3 (cont'd)

Formulate the optimization problem. The objective function is to maximize the total operating profit per day in units of €/day

Process	Product	Reactants requirements (kg/kg product)	Processing cost (product) (€/kg)	Selling price (product) (€/kg)
1	E	2/3A,1/3B	1.5	4.0
2	F	2/3A,1/3B	0.5	3.3
3	G	1/2A,1/6B,1/3C	1.0	3.8

Objective function

Constraints

Equalities

Inequalities

Optimization Formulation: Workshop #4

Hallar la relación óptima (L/D) para la construcción de un depósito de modo que se minimicen los costes.

Suposiciones:

- Los extremos son planos
- Las paredes tienen un espesor constante, x. La densidad es ρ.
- El espesor es independiente de la presión
- El coste, S, de fabricación de los extremos y del cilindro es el mismo (€/kg fabricado)
- No se desperdicia nada de material durante la fabricación del depósito.

Objective function

Constraints

¿Grados de libertad?