

TEMA 1: INTRODUCCIÓN A LA OPTIMIZACIÓN

- Introducción
- El problema y su solución
- Ejemplos de optimización

NOTA: Los apuntes de la asignatura son una adaptación del curso de Thomas Marlin de la Universidad Mc Master de Canadá.

INTRODUCCIÓN

Desarrollos claves para la optimización.

- **Fermat (1646)** $f(x)$ función de una sola variable
- **Newton (1670)** $\frac{df(x)}{dx} = 0$
- **Euler (1755)** $f(x)$ función vectorial
 $\nabla_x f(x) = 0$
- **Lagrange (1797)** $\min_x f(x)$ x vector
subject to : $g_k(x) = 0, \quad k = 1, \dots, m$

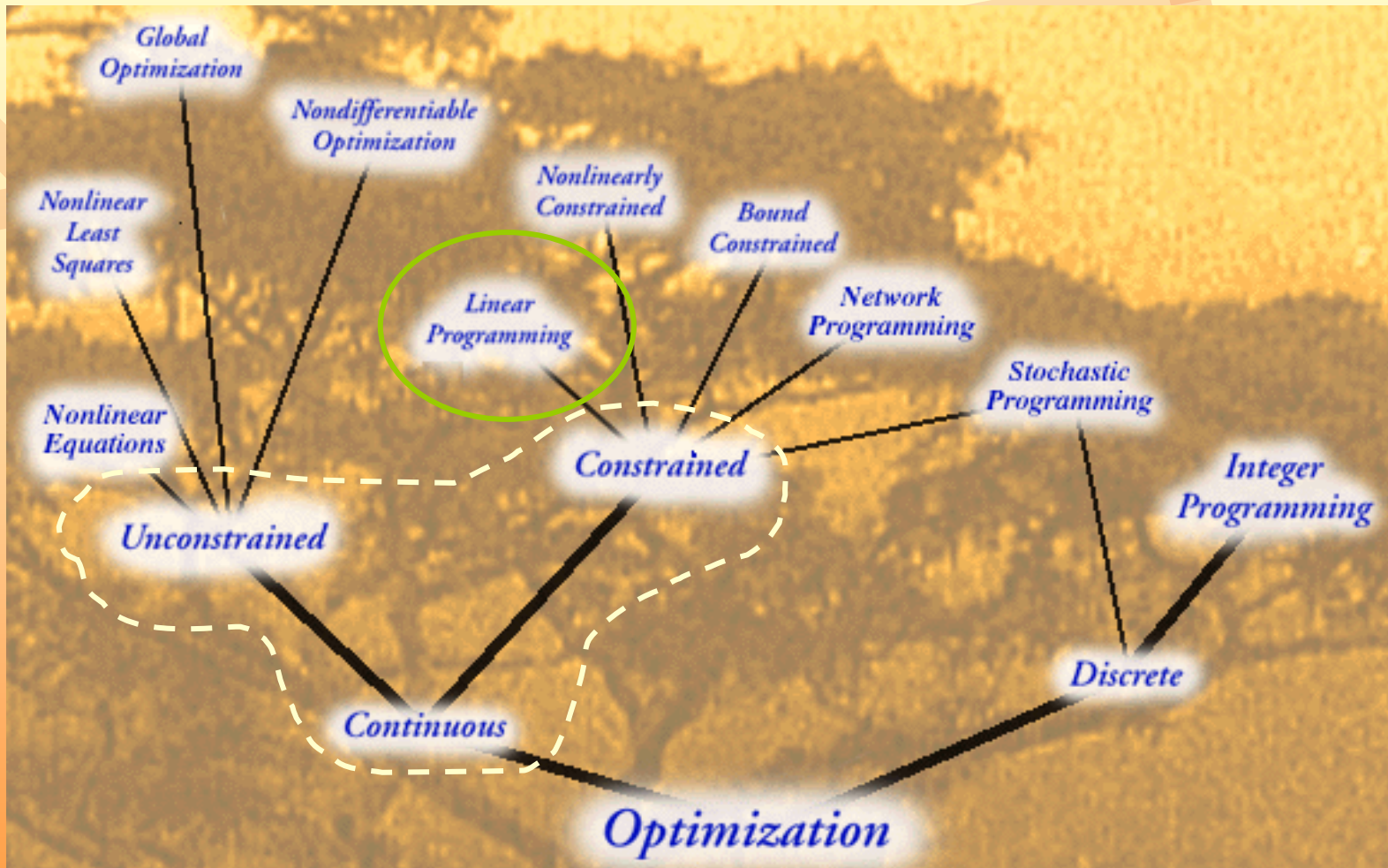
INTRODUCCIÓN

Desarrollos clave de la segunda mitad del siglo XX

- Dantzig (1947) Programación lineal
(Restricciones con desigualdades)
- Kuhn Tucker (1951)
Condiciones a satisfacer por una optimización no lineal
- Contribuciones (1960-80s) Algoritmos para optimización no lineal
- Khachain and Karmarkar (~1980) Nuevo métodos de puntos interiores
- Desarrollos continuados en diferentes problemas (optimización entera, estocástica, global, etc.) –
Actualmente sigue con un gran desarrollo

INTRODUCCIÓN

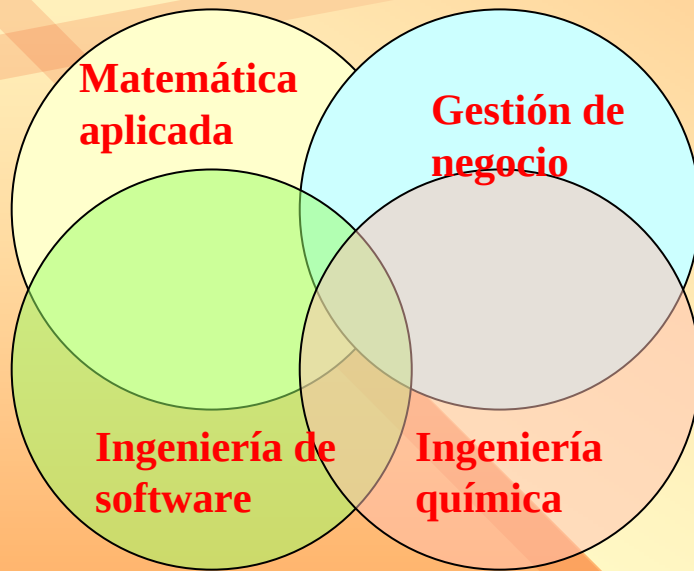
Principales categorías de optimización



Ajustar el método al problema

INTRODUCCIÓN

Quién hace optimización?



Y muchos más!

- **Programación matemática**
Investigación operativa
Incluye estadística, modelado, etc.
- **Optimización aplicada**
Todas las áreas de ingeniería
- **Planificación y logística**
Gestión de la cadena de suministro, gestión de recursos.

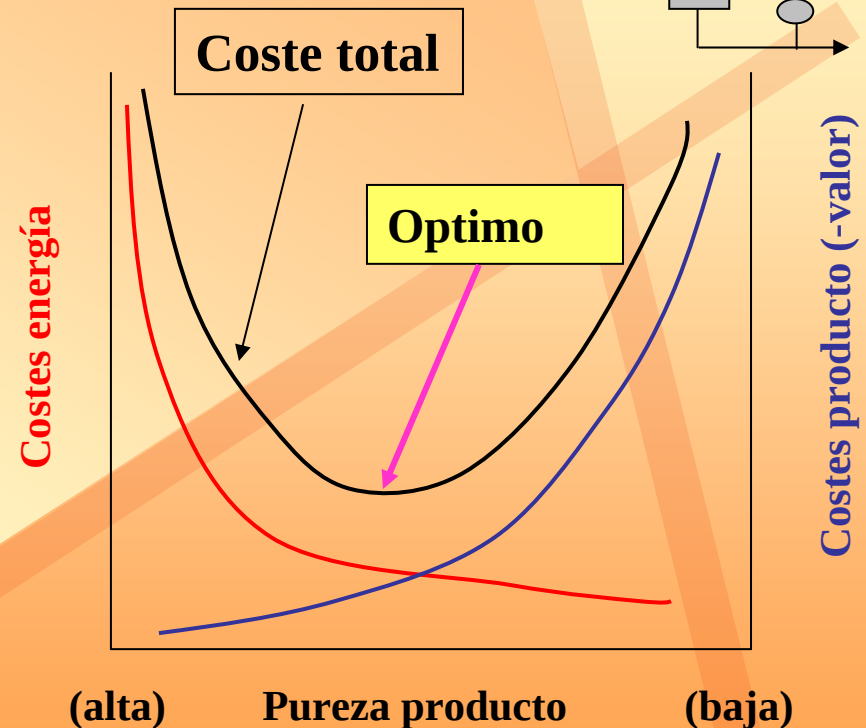
¿Cuál es la **característica principal** de los problemas de optimización?

Característica principal

Hay un **tradeoff** entre las variables y el objetivo.

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

Hay que entender el problema **cualitativamente** antes de resolverlo **cuantitativamente**.



INTRODUCCIÓN

Dos opciones para realizar la optimización

```
graph TD; A[Dos opciones para realizar la optimización] --> B[Optimización basada en modelos]; A --> C[Optimización empírica];
```

Optimización basada en modelos

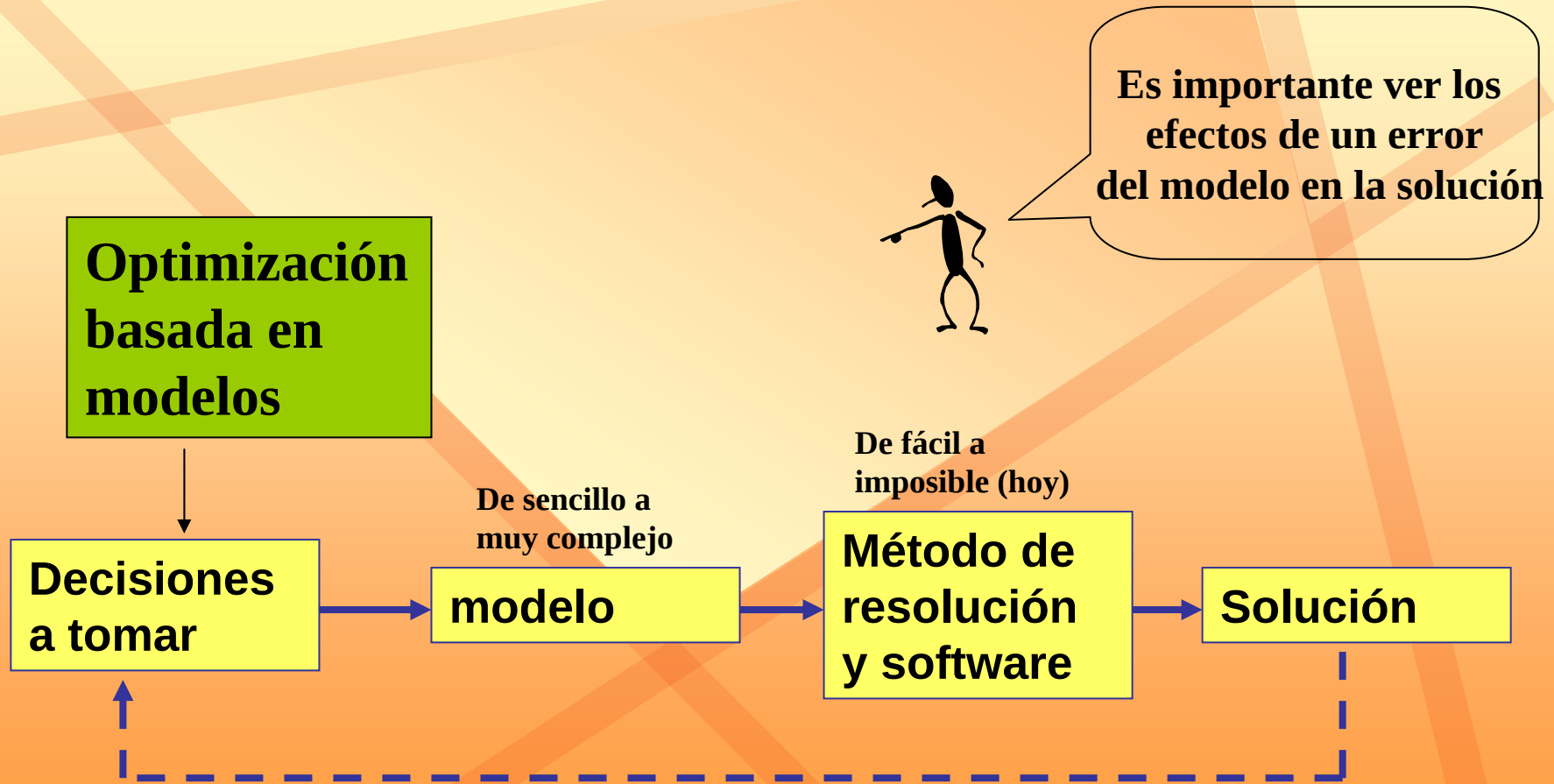
Aplicaciones típicas – sistemas para los que existe un buen modelo

- Componentes gases y líquidos en industrias químicas y petroquímicas
- Aplicaciones de negocio para inventario, transporte,...
- En aquellos sitios donde no se permite experimentar

Optimización empírica

- Desarrollo rápido de procesos poco entendidos
- Farmacéutica
- Micro-electronica
- Aplicaciones pequeñas en operación de planta

EL PROBLEMA Y SU SOLUCIÓN



La formulación y el método de resolución permiten la solución?

EL PROBLEMA Y SU SOLUCIÓN

Opciones para la resolución de optimización basada en modelos

1. **Soluciones gráficas**
2. **Soluciones analíticas (Newton, Euler, etc.)**
3. **Métodos numéricos**

EL PROBLEMA Y SU SOLUCIÓN

Opciones para la resolución de optimización basada en modelos

Gráfica

Función objetivo, $f(x)$

Dónde está el óptimo



Variable, x

Comenta:

- **Ventajas**
- **Desventajas**

EL PROBLEMA Y SU SOLUCIÓN

Opciones para la resolución de optimización basada en
modelos
Analítica

$f(x)$ con x única variable

$$\frac{df(x)}{dx} = 0$$

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} > 0$$

Comenta:

- **Ventajas**
- **Desventajas**

EL PROBLEMA Y SU SOLUCIÓN

Opciones para la resolución de optimización basada en modelos

Numérica

$$\min_x f(x)$$

s.t.

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

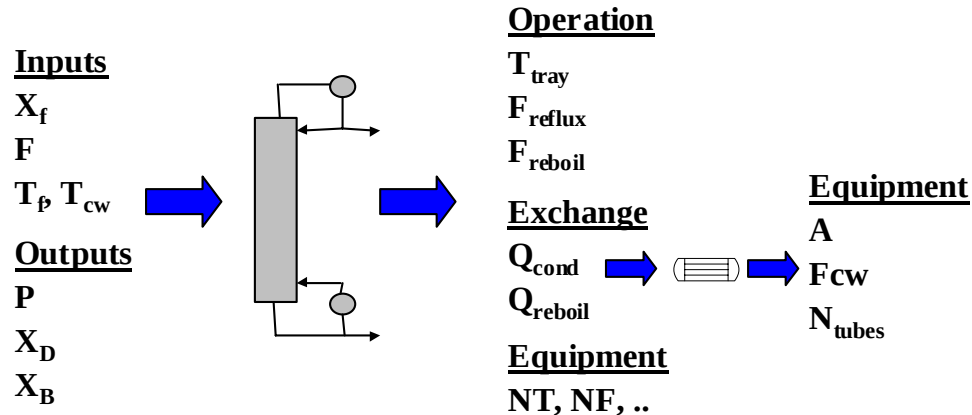
$$x_{\min} \leq x \leq x_{\max}$$

Comenta:

- **Ventajas**
- **Desventajas**

WHAT ARE EXAMPLES OF OPTIMIZATION?

1. Economics: Plant design



Tower decision

increase in NT

best NF

lower P

Exch A

XD, XB

capital cost

reduces energy

reduces energy

no refrigeration

smaller exchanger

-- separation cost and downstream processes --

operating cost

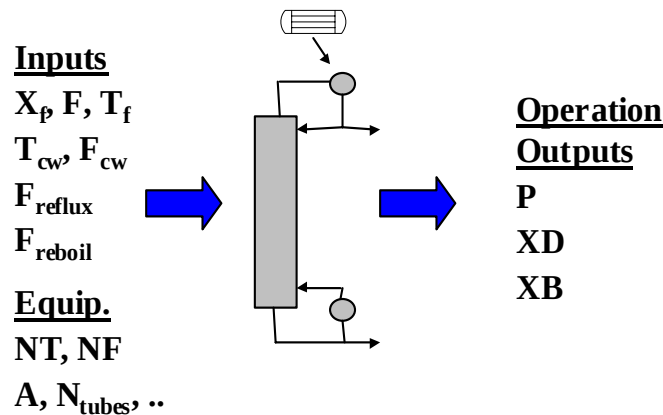
increases equipment

higher F_{cw} (?)

cooler T_{cw}

WHAT ARE EXAMPLES OF OPTIMIZATION?

2. Economics: Plant operations



Opt. P - must know condenser performance and limits

XD and XB - energy/yield tradeoff

T_f - tradeoff energy in feed/reboil; tray limitations

Feed rate - run at peak efficiency; meet sales requirements

PROCESS DECISIONS DETERMINED USING MODELS

What is similar and what is different in these two examples of modelling: **design and operations**?

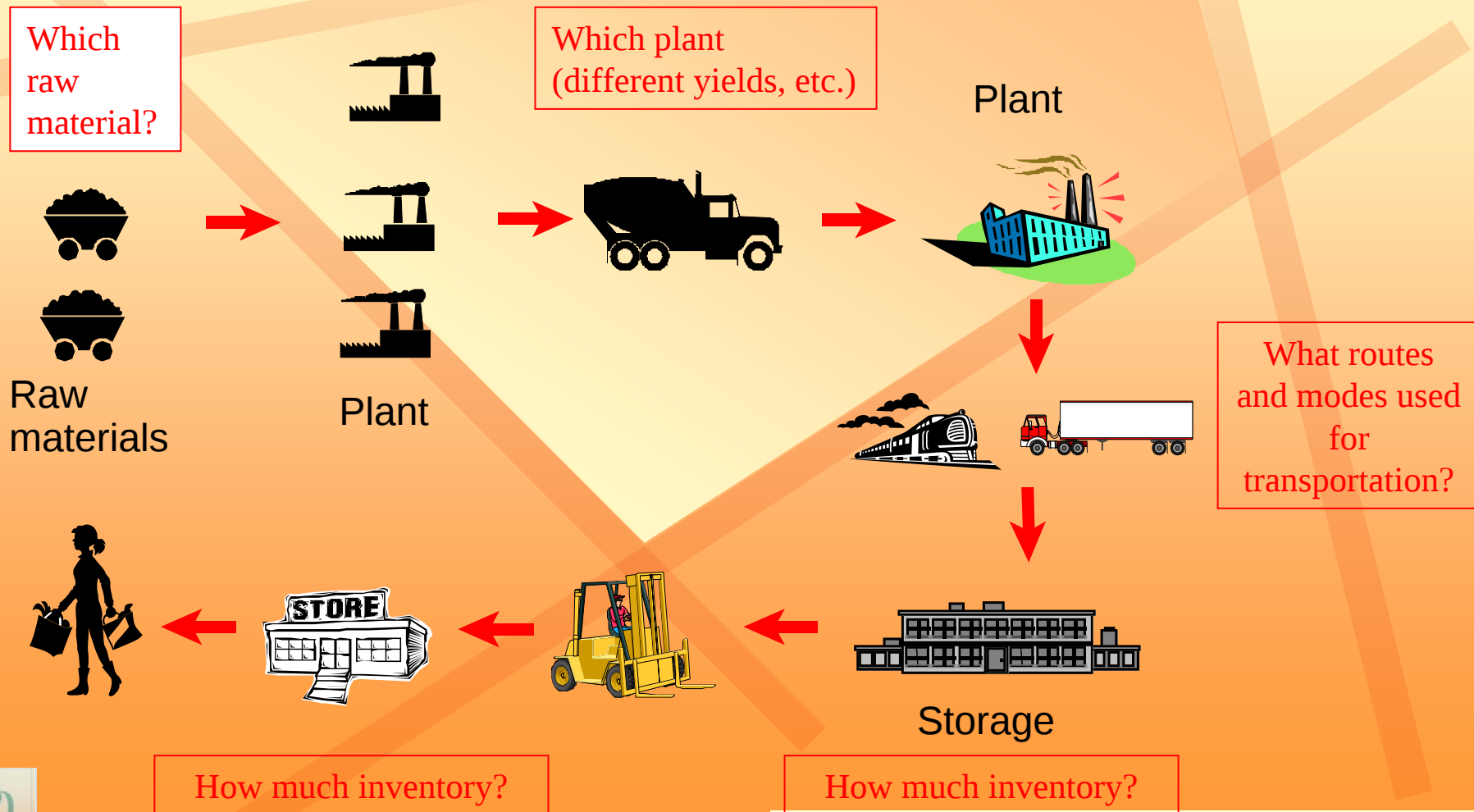
SIMILAR

DIFFERENT

How do we combine these factors to determine “best” solution for both?

WHAT ARE EXAMPLES OF OPTIMIZATION?

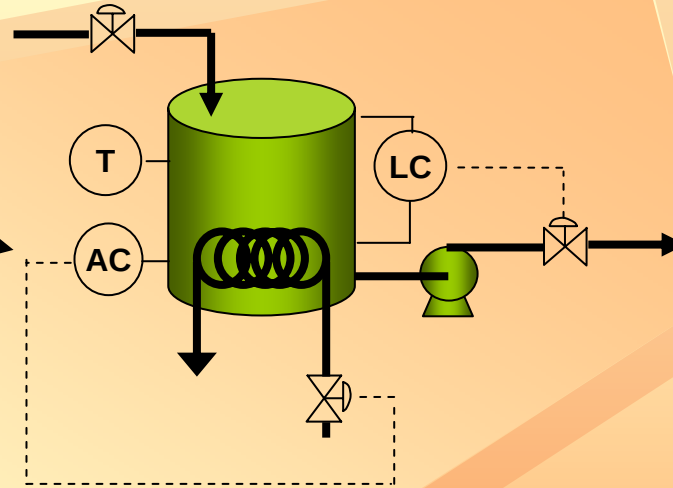
3. Economics: Company logistics / supply chain management



WHAT ARE EXAMPLES OF OPTIMIZATION?

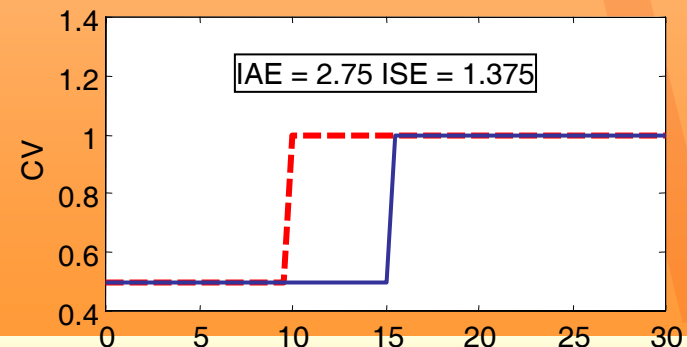
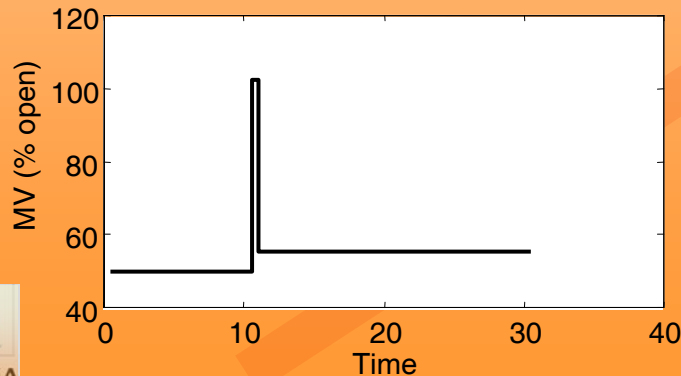
4. Process Control: Model Predictive Control

Not a PID algorithm!



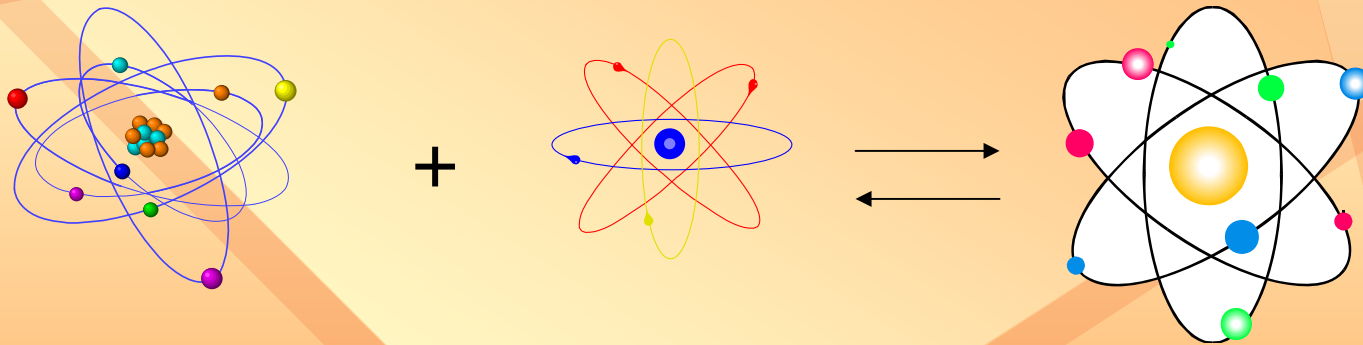
- The controller calculates the entire transient response.
- Is this good control performance?

- How can we make the CV follow the set point (---) as closely as possible?
- Why isn't control perfect?



WHAT ARE EXAMPLES OF OPTIMIZATION?

5. Technical: Model equilibrium as minimizing Free Energy

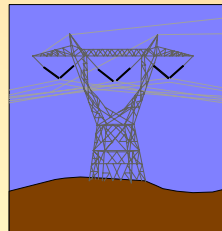


**Equilibrium at constant T and P is
Minimum Free Energy**

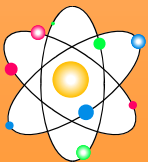
WHAT ARE EXAMPLES OF OPTIMIZATION?

6. Policy: Generate the desired electricity with minimum “pollution”

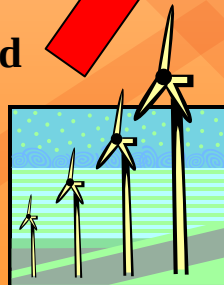
- Define “pollution”
- What is the cost for the policy?
- What other pollution is produced?



nuclear



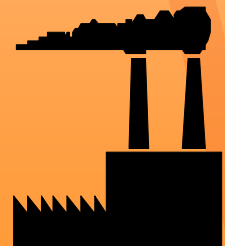
wind



gas



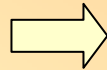
coal



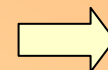
WHAT ARE EXAMPLES OF OPTIMIZATION?

7. Model calibration: Statistics

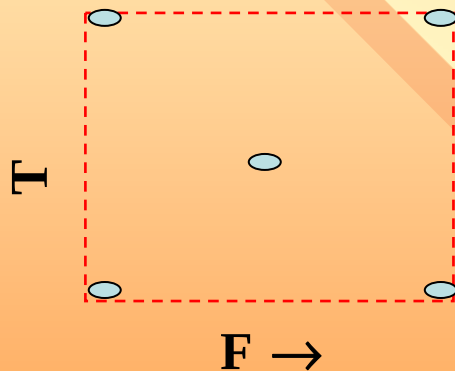
Get the right
data (experimental
design)



Select model structure
& estimate parameters
using the data



Evaluate the
reliability of
conclusions



$A \rightarrow B$

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

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

$$k_{02} = \dots$$

Max (information)

Min (uncertainty)

Min |predicted-measured|

- sum of squares
- maximum deviation
- sum of absolute values