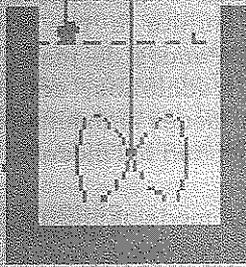


GIOVANNI MORALES*,
PEDRO MANUEL FERRADA**

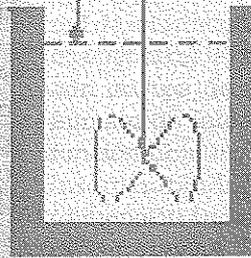
CA0



V1

A, B, C

CA1
CB1
CC1



A, B, C

CA2, CB2, CC2

OPTIMIZACIÓN NO LINEAL CON TERMINOS NO CONVEXOS ESPECIALES

*Ingeniero químico, Escuela de Ingeniería Química, Universidad
Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.
**Ingeniero de sistemas, Universidad de Santander, Bucaramanga, Colombia.



Giovanni Morales Medina

Resumen

Se aplica el método de Relajación convexa en la solución de dos problemas de optimización con monomios bilineales y cóncavos acelerando el algoritmo con la regla del filtro. Uno de los problemas es una red de intercambio calórico y el otro es una secuencia de reactores CSTR. Los ejemplos

obtuvieron diferentes desempeños dependiendo de las alternativas del árbol de búsqueda. Para la secuencia de reactores el mejor desempeño fue 27 nodos, con lo cual hay una mejora del 60% respecto a los reportados en la literatura.

Introducción

Los modelos de programación no lineal se emplean con frecuencia, en la optimización de sistemas, tanto en ingeniería como en la ciencia, por ejemplo: diseño y control de procesos químicos, diseño de circuitos eléctricos y en la termodinámica de átomos y moléculas. La optimización no lineal puede ser representada por:

$$\begin{aligned} \text{Min } f(x) \\ \text{Sujeto a } h_i(x) = 0, \quad g_j(x) \leq 0 \\ x \in X \subseteq \mathbb{R}^n \end{aligned} \quad (1)$$

Donde f , h , g son funciones no lineales, continuas y diferenciables. La función objetivo $f(x)$ puede representar el costo de inversión, la energía libre de Gibbs o cualquier otro ente al que se desee encontrar su menor valor. Esta función, esta sujeta a un conjunto de restricciones (Balances de masa y energía, sumatoria de fracciones, ecuaciones de equilibrio, restricciones ambientales, etc.) que aumentan la dificultad del modelo.

A menudo, estos modelos incluyen funciones con términos no-convexos, que hacen que el programa posea subóptimas soluciones (mínimos locales y puntos estacionarios) y que al aplicar un método estándar, el óptimo encontrado esté fuertemente influenciado por el punto inicial⁸.

Marco teórico: "El método de relajación convexa"

Pocos de los algoritmos existentes para la programación no-convexa, pueden ser aplicados a problemas de la ingeniería química; dentro de este grupo se encuentra el método de la relajación convexa y restricciones adicionales¹.

El método de relajación convexa se basa en la construcción de un problema convexo, a partir del problema original, cuya solución da una indicación de la ubicación del óptimo global.

Para construir un problema relajado convexo, se hace uso de los envolvente convexos o de la relajación convexa². De acuerdo con la clase de envolvente, las funciones se pueden clasificar en tres grupos³:

- a) Funciones convexas. Los envolventes de estas funciones son ellas mismas.
- b) Funciones no convexas especiales: bilineal, trilineal, fraccional, trilineal-fraccional y cóncavo de una variable.
- c) Funciones no convexas con estructura general: No poseen envolvente convexo.

La relajación para las funciones constituidas por monomios no-convexas especiales, se efectúa reemplazando al monomio por una variable y adicionando restricciones lineales provenientes del monomio original². Una vez relajado el problema original, es resuelto por un método de optimización local, obteniéndose el límite inferior del programa. A partir de este punto, se optimiza el problema original para obtener el límite superior. Si los dos límites se encuentran alejados, se usa el árbol de búsqueda (Branch and Bound) para acercar las dos fronteras y obtener así, el óptimo global⁵.

Árbol de búsqueda.

Se puede definir varias alternativas:

1. Estrategias de ramificación. Se encuentran en la literatura las siguientes estrategias de ramificación⁶: máxima distancia entre el término y su estimador convexo, distancia al punto óptimo de la frontera convexa y contribución de cada variable al problema no convexo.
2. Punto de ramificación. El punto base de la ramificación puede escogerse en la bisección o en el punto óptimo de la frontera inferior (FI)⁶.
3. Técnicas de aceleración. El trabajo computacional depende de la calidad de la relajación convexa aplicada y, esta a su vez, de los límites de las variables. Debido a esto, se han desarrollado recientemente, técnicas que aceleran el algoritmo por medio de la contracción de las fronteras de las variables⁷.

La contracción del intervalo consiste en solucionar una secuencia de problemas convexas de la siguiente forma²:

$$\begin{aligned} \text{Min / Max } & x_i \\ \text{S.a. } & G(x) \leq 0, F(x) \leq LS - \epsilon \\ & x^L \leq x \leq x^U \end{aligned} \quad (2)$$

Donde G(x) son las restricciones relajadas, F(x) es la función objetivo convexificada, LS es el límite superior del árbol y E es la tolerancia.

La Regla del Filtro. La contracción se vuelve ineficiente cuando es aplicada sobre variables cuyo intervalo se encuentra muy reducido en comparación con el inicial (reducción de eje). Esta es la base para la regla del filtro, la cual efectúa la contracción del intervalo solo a aquella variable, cuya reducción de eje sea mayor a un valor predeterminado y que posea la mayor contribución al problema no convexo⁸.

Ejemplos de aplicación

Ejemplo I. Mínimo costo de inversión para una red de intercambio calórico (figura 2)⁹. El objetivo es encontrar la configuración óptima de una red con costos de servicios industriales fijos y número de intercambiadores también fijos. La función objetivo está dada por el costo de los intercambiadores, que es función del área (dimensión característica de un intercambiador) de la forma cA^b , donde $c=1300$ y $b=0,6$.

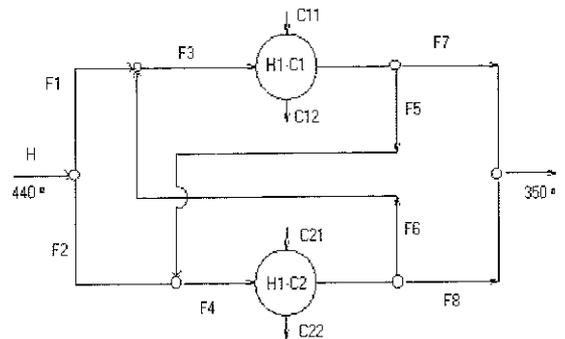


Figura 2. Superestructura de la red del ejemplo I.

Las restricciones del modelo se deben al balance de masa y energía en los separadores, en los divisores y en los intercambiadores.

Ejemplo II. Reactores CSTR en serie con capital fijo⁵ (figura 3). El ejemplo considera el diseño de una secuencia de dos reactores CSTR en serie, en donde se llevan a cabo las reacciones consecutivas de primer orden A→B→C. El objetivo es encontrar el volumen de cada uno de los reactores isotérmicos, tal que la concentración de B a la salida de la secuencia, sea la mayor posible. Los valores de las constantes de reacción son:

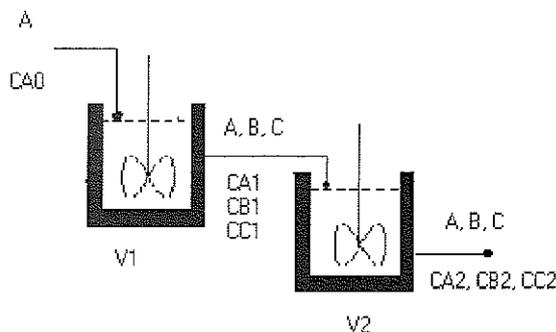
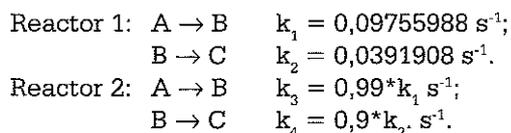


Figura 3. Reactores CSTR en serie.



El flujo de entrada a la secuencia de reactores es 1 l/s; La concentración de A en la entrada de la secuencia es 1 mol/l. La función objetivo es la concentración negativa del producto B a la salida ($-C_{B2}$). Las restricciones del modelo son propias del balance molar y de la inversión en la red, la cual puede representarse en función del volumen de cada reactor:

$$V_1^\beta + V_2^\beta \leq \frac{\text{Inversión máxima}}{\alpha} \quad (3)$$

$$V_1^{0.5} + V_2^{0.5} \leq 4$$

Resultados

Los ejemplos descritos poseen monomios dentro del grupo de los no-convexos especiales (bilineal y cóncavo), por lo cual se solucionan con el método de relajación convexa. Los modelos se relacionan en 4 y 5. Las estrategias de ramificación se estudiaron en los dos puntos de corte y la aplicación de la técnica de aceleración se restringió por la regla del filtro, desde una reducción de eje de cero (en todos los nodos del árbol) hasta una reducción de uno (sólo en el primer nodo). En las tablas 1 y 2 se reportan los puntos óptimos globales encontrados.

A- Estrategia de distancia al estimador convexo (figura 4). En el ejemplo I se aprecia que en los dos puntos de corte se hallan zonas con desempeño constante producidas por reducciones de eje grande. Cuando la contracción se efectúa en $r=0$, sobre la variable con mayor contribución no se obtiene el mejor desempeño, ya que se eligen variables con tamaños de eje ya muy reducidos.

En el ejemplo II se aprecia un valor mayor en el número de nodos. Al igual que en el caso anterior el mejor desempeño no se presenta cuando se efectúa la contracción en $r=0$ sino, en valores intermedios. Los mejores desempeños obtenidos con esta estrategia de ramificación fueron:

- Ejemplo I (11 nodos): Corte en la Frontera inferior y reducción de eje en 0,2.
- Ejemplo II (43 nodos): Corte en la Bisección y reducción de eje en 0,6.

B- Estrategia de distancia al óptimo del problema convexo (figura 5). Ejemplo I: Los dos puntos de corte presentan zonas de desempeño constante. Al efectuar la contracción en $r=0$ escogiendo las variables con mayor contribución no se encontró el óptimo global para los dos puntos de corte, lo que muestra la importancia del tamaño del intervalo de la variable.

Para el Ejemplo II: Los dos puntos de corte poseen una tendencia similar pero difieren en el intervalo [0,4; 0,8], en donde la bisección

aumenta el desempeño y la FI lo disminuye. Para esta estrategia de ramificación los mejores desempeños fueron:

Ejemplo I. Costos de la red:

$$\text{Min } 1300(A_1^{0.6} + A_2^{0.6}) = 1300 \left[\left(\frac{1620}{LMTD_1} \right)^{0.6} + \left(\frac{720}{LMTD_2} \right)^{0.6} \right]$$

S.a.

Balances de materia : $f_1 + f_2 = 22, f_1 + f_6 = f_3, f_2 + f_5 = f_4$
 $f_5 + f_7 = f_3, f_8 + f_6 = f_4$

Balances de energía : $f_6 T_6 + 440 f_1 = f_3 T_3, f_5 T_5 + 440 f_2 = f_4 T_4$
 $1620 = f_3 (T_3 - T_5), 360 = f_4 (T_4 - T_6)$

Frontera de las variables : $0 \leq f_i \leq 22, T_{c11} \leq T \leq 440$

Definición de LMTD :

$$LMTD_1 = \frac{2}{3} [(T_3 - 430)(T_5 - 349)]^{0.5} + \frac{1}{3} \left[\frac{(T_3 - 430) + (T_5 - 349)}{2} \right]$$

$$LMTD_2 = \frac{2}{3} [(T_4 - 368)(T_6 - 320)]^{0.5} + \frac{1}{3} \left[\frac{(T_4 - 368) + (T_6 - 320)}{2} \right] \quad (4)$$

Tabla 1. Punto óptimo global para la red de intercambio calórico.

OBJETIVO	A ₁ (m ²)	A ₂ (m ²)	F ₁ (KW/K)	F ₂ (KW/K)	F ₃ (KW/K)	F ₄ (KW/K)	F ₅ (KW/K)	T ₄ (°C)	T ₅ (°C)	T ₆ (°C)
\$42180.96	162	56.7	20	2	8.149	6.149	13.85	378.9	359	334.7

Ejemplo II. Máxima conversión de salida:

Min $-C_{B2}$

S.a.

$C_{A1} - I + k_1 C_{A1} V_1 = 0$

$C_{A2} - C_{A1} + k_2 C_{A2} V_2 = 0$

$C_{B1} + C_{A1} - I + k_3 C_{B1} V_1 = 0$

$C_{B2} - C_{B1} + C_{A2} - C_{A1} + k_4 C_{B2} V_2 = 0$

$V_5^{0.5} + V_6^{0.5} \leq 4$

$0 \leq x \leq (1, 1, 1, 1, 16, 16)$

(5)

Tabla 2. Punto óptimo global para los reactores CSTR en serie.

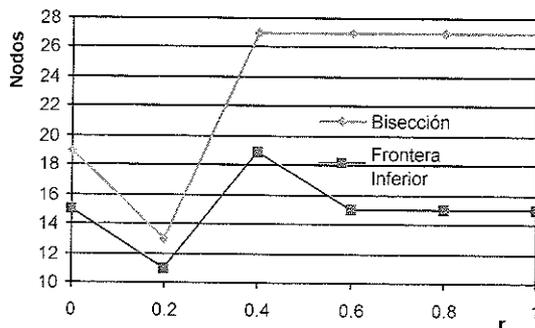
OBJETIVO	Ca ₁ (mol/l)	Ca ₂ (mol/l)	Cb ₁ (mol/l)	Cb ₂ (mol/l)	V ₁ (m ³)	V ₂ (m ³)
-0.388812	0.7714	0.517001	0.204282	0.388812	3.03756	5.094686

- Ejemplo I (5 nodos): Corte en la Bisección y reducción en $[0,4; 1]$.
- Ejemplo II (49 nodos): Corte en la Bisección y reducción en $0,6$.

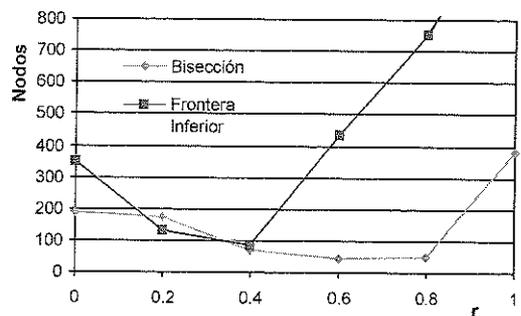
C- Estrategia de contribución al problema no-convexo (figura 6). Para el ejemplo I los dos puntos de corte difieren grandemente por el orden de los 300 nodos, pero la tendencia es la misma. En el ejemplo II la forma de variación de los dos puntos de corte es similar, al igual

que los desempeños obtenidos. Para los dos puntos de corte el no aplicar la regla del filtro ($r=0$) y aplicar la contracción a todas las variables en el primer nodo ($r=1$) conlleva a obtener desempeños muy bajos. Los mejores desempeños en esta estrategia de ramificación son:

- Ejemplo I (5 nodos): Bisección y reducción de eje $\{0, [0,4; 1]\}$.
- Ejemplo II (27 nodos): FI y reducción de eje en $0,8$.

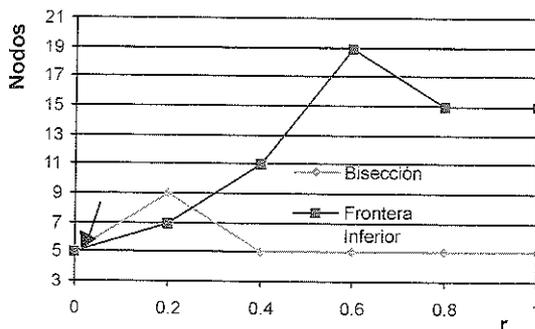


a) Ejemplo I.

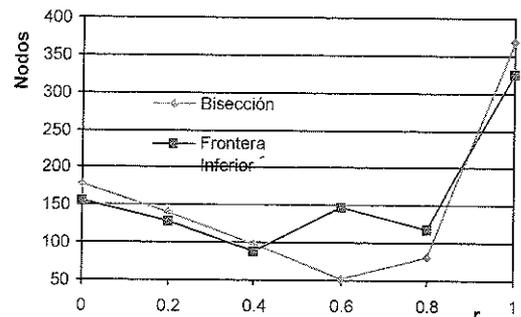


b) Ejemplo II.

Figura 4. Ramificación por distancia al estimador convexo vs reducción del eje.

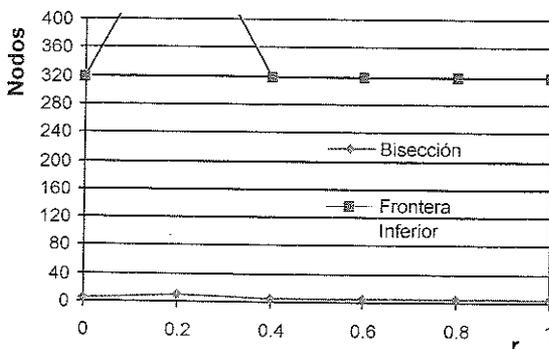


a) Ejemplo I.

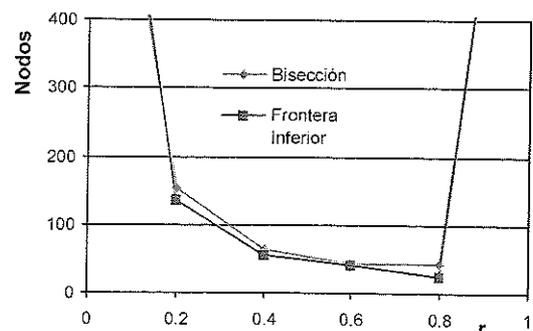


b) Ejemplo II.

Figura 5. Ramificación por distancia al óptimo de la frontera convexa vs reducción del eje.



a) Ejemplo I.



b) Ejemplo II.

Figura 6. Ramificación por contribución al problema no-convexo vs reducción del eje.

Comparación de resultados

Ejemplo I. La presencia de zonas con igual desempeño, refleja el hecho de que en la primera contracción del intervalo, la mayoría de las variables quedan tan reducidas, que sólo se cambia la variable en valores de reducción bajos. En general, las mejores estrategias fueron la 2 y la 3 con el punto de ramificación en la bisección y reducciones de eje entre 0,4 y 1. El hecho de que los valores de reducción de eje difieran a los aplicados comúnmente ($r = 0$ y $r = 1$), comprueba la mejora que hace al algoritmo, la regla del filtro propuesta en este trabajo.

Ejemplo II. Cuando no se aplica el filtro, las variables V_1 y V_2 son escogidas en todo el árbol para realizar la contracción, con lo cual en algunos nodos la contracción es baja, al haberse eliminado las infactibilidades con anterioridad. Debido a esto el no utilizar el filtro, con lleva a obtener desempeños bajos.

La mejora que ocasiona la regla del filtro se debe a que se encuentra un mayor número de nodos cortados y cerrados. Esto sucede con mayor énfasis en $r \geq 0,5$ para la bisección, debido a la partición uniforme. Para la FI, los mejores

desempeños se encuentran en $r < 0,5$, por dejar ramas de tamaños grandes. Respecto a los resultados reportados en la literatura (Tabla 3), la estrategia 1 alcanza una reducción de 36%, con la estrategia 2 el 27% y con la estrategia 3 la reducción en el número de nodos llega al 60%.

Tabla 3. Comparación de resultados ejemplo II.

	Ref. 6	Ref. 5	A	B	C
Nodos totales	67	91	43	49	27

CONCLUSIONES

Al modificar la aplicación de la técnica de contracción con la regla del filtro, se acelera la convergencia del algoritmo al encontrar ramas no factibles (cortadas) y ramas con valores subóptimos (cerradas). La estrategia de ramificación que presenta los mejores resultados cuando se utiliza la contracción de variables con la regla del filtro es la de la contribución al problema no convexo. En general los mejores desempeños se obtienen al utilizar la reducción de eje con valores por encima de 0,5 para la ramificación en la bisección y, en valores inferiores para la ramificación en el óptimo de la frontera inferior.

Bibliografía

- 1 C.A. Floudas. Deterministic Global Optimization: Theory, Methods and Applications. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht., Holanda, 2000.
- 2 C.A. Floudas. Nonlinear and Mixed-Integer Optimization: Fundamentals and applications. Oxford University Press, New York, 1995.
- 3 C.S. Adjiman et All. A global optimization method, aBB, for general twice-differentiable constrained NLPs - I. Theoretical advances Comput. Chem. Engng., 22, p.1137-1158, 1998.
- 4 G. Morales, P. Ferrada. Software Para Programación No Lineal Con Términos No-Convexos Especiales (Bilineal, Trilineal, Fraccional y Trilineal-Fraccional). Tesis de grado. UIS, Colombia, 2002.
- 5 H.S. Ryoo, N.V. Sahinidis. Global optimization of nonconvex NLPs and MINLPS with applications in process design. Comput. Chem. Engng., Vol. 19, p. 551-566, 1995.
- 6 I.P. Androulakis, C.D. Maranas and C.A. Floudas. aBB: A Global Optimization Method for General Constrained Nonconvex Problems. Journal of Global Optimization Vol. 7, p. 337-363, 1995.
- 7 J.M. Zamora and I.E. Grossmann. Continuous Global Optimization of Structured process Systems Models. Comput. Chem. Engng., Vol. 22, p. 1749-1770, 1998.
- 8 N.V. Sahinidis. BARON, Branch And Reduce Optimization Navigator. User's Manual Version 4.0. University of Illinois at Urbana-Champaign. Junio de 2000. <http://archimedes.scs.uiuc.edu>.
- 9 T. G. W. Epperly. Global Optimization of Nonconvex Nonlinear Programs Using Parallel Branch and Bound. A dissertation submitted for the degree of Ph.D. at the University of Wisconsin - Madison. 1995.

Autor:

Giovanni Morales Medina

Ingeniero Químico de la Universidad Industrial de Santander- UIS. Actualmente, adelanta estudios de Doctorado en Ingeniería Química en la UIS con el apoyo de COLCIENCIAS en la línea de investigación de simulación molecular.



CDT de GAS

**CENTRO DE DESARROLLO
TECNOLÓGICO DEL GAS**

Somos una organización creada con el esfuerzo de ECOPELROL-ICP y la Universidad Industrial de Santander para la promoción del mercado de servicios tecnológicos, formulación de proyectos de investigación y desarrollo tecnológico, innovación y transferencia de tecnología, capacitación de personal, servicios de información, gestión y articulación de recursos financieros, físicos y humanos disponibles en el país para que el SECTOR GAS sea más competitivo.

- Realización de proyectos estratégicos en investigación y desarrollo de las tecnologías del Gas.
- Asistencia y capacitación a usuarios, operadores, directivos y empresas interesadas en el manejo, transporte, almacenamiento, distribución, control de calidad de equipos y accesorios, mantenimiento, detección de fugas, mediciones, evaluación de materiales, protección ambiental y planes de contingencia en el sector.
- Control de la calidad de Equipos y Accesorios utilizados en la distribución del gas en Colombia: (ICONTEC- Normas internacionales)
 - **Cilindros** para GLP NTC- 522, Cilindros para alta presión NTC- 2699
 - **Equipo de cocción** NTC 2832-1, Equipos comerciales NTC- 4082
 - **Reguladores de presión** de gas natural NTC- 3727 y NTC 3293, de presión de GLP NTC- 3873
 - **Calentadores de agua** de paso NTC- 3531, y tipo acumulador
 - **Evacuación de gases** de combustión NTC- 3833, 3649
 - **Válvulas metálicas** para control de paso de gas NTC- 1908, 3538, 3740
 - **Calibración de medidores** de gas (gasómetros, diafragmas, turbinas, rotatorios, boquillas, másticos y rotámetros)
- Evaluación de sistemas de medición de gas, hasta el ajuste operacional de la unidad de consumo de gas (caldera, horno etc.)

CONTACTOS

CDT de GAS, SEDE UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

OSCAR VANEQAS ANGARRA: Director Ejecutivo
Carrera 19 N° 35 02 Oficina 239 Teléfonos (7) 642 9617 642 8844
Bucaramanga

CDT de GAS, SEDE CENTRO DE INVESTIGACIONES UIS GUATIGUARA

HENRY ABRIL BLANCO: Director Laboratorio
Centro de Investigaciones de Guatiguara Teléfonos (7) 654 2266 654 3800
Piedecuesta - Santander