**Optimización de Procesos 540.258**
**2022-1**

**Certamen 1**

**PAUTA DE CORRECCIÓN**

1. (2 ptos.) Se tiene un sistema de extracción líquido-líquido de tres etapas de equilibrio para recuperar un soluto valioso. Las variables relevantes en la operación se muestran en el diagrama.
El flujo de alimentación Q es de 1000 lb de solvente/h, con una concentración de soluto de 0.2 lb de soluto/lb de solvente. Esta corriente se va a poner en contacto con un solvente de lavado W. Se desea maximizar las utilidades.
El precio de venta del soluto extraído depende de la pureza de éste.

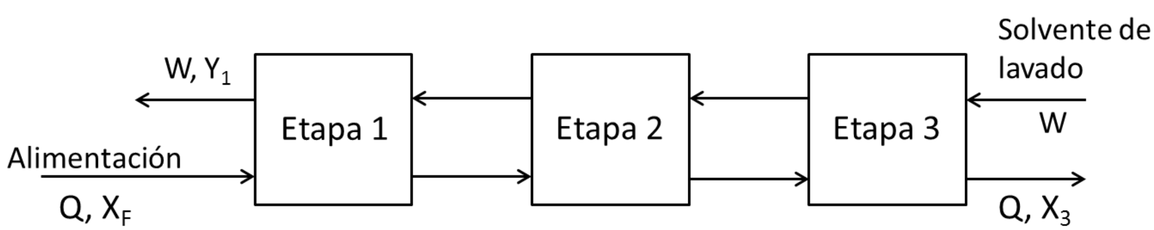
| Precio del soluto (US$/lb de soluto) | Pureza del soluto (lb de soluto/lb de solvente) |
|---|---|
| 1 | 0.5 |
| 0.8 | 0.4 |
| 0.6 | 0.3 |

El costo de solvente de lavado es 0.05 US$/(lb solvente de lavado).

La relación de equilibrio en las dos fases es Y = 0.5 X.
Con Y [lb soluto/lb de solvente de lavado] y X [lb de soluto / lb de solvente].

Considere que los solventes son inmiscibles.

Plantee el problema de optimización, especificando la función objetivo, todas las variables, las variables de decisión, las restricciones y los grados de libertad.




El soluto que se recupera con el solvente de lavado puede ser vendido, con lo cual existe una utilidad. Sin embargo, existe un costo por usar el solvente de lavado. En consecuencia, existiría un óptimo permite maximizar la utilidad (ingresos por ventas – costos).

La función objetivo será:

$$f = ingresos\ por\ ventas - costo\ del\ solvente\ de\ lavado$$

$$f\left(\frac{US\$}{h}\right) = precio\ \left(\frac{US\$}{lb\ soluto}\right) * soluto\ obtenido\ \left(\frac{lb\ soluto}{h}\right) - precio\ del\ solvente\ \left(\frac{US\$}{lb\ solv.lav.}\right) * flujo\ de\ solv.de\ lavado\ \left(\frac{lb\ solv.lav.}{h}\right)$$

Podemos expresar esta función objetivo en términos de las variables del proceso:
El precio del soluto depende de la concentración obtenida en el solvente de lavado, es decir lo que sale de la etapa 1. De la tabla, la relación, por inspección, es:

$$precio\left(\frac{US\$}{lb\ soluto}\right) = 2Y_1$$

El flujo de soluto obtenido es el flujo de soluto que sale de la etapa 1:

$$soluto\ obtenido\ \left(\frac{lb\ soluto}{h}\right) = W\left(\frac{lb\ solv.lav.}{h}\right) * Y_1\left(\frac{lb\ soluto}{lb\ solv.lav.}\right)$$

Entonces, la función objetivo que se tiene que maximizar es:

$$f = 2Y_1 * WY_1 - 0.05W$$
$$f = 2WY_1^2 - 0.05W$$

Tanto el flujo de solvente de lavado como la concentración de soluto a la salida de la etapa 1 dependen de los balances de materia en el equipo de extracción. Se debe resolver el balance de soluto en cada etapa, no el de los solventes porque estos son inmiscibles, entonces su flujo es constante en cada etapa.

Etapa 1: $QX_F + WY_2 = WY_1 + QX_1$
Etapa 2: $QX_1 + WY_3 = WY_2 + QX_2$
Etapa 3: $QX_F = WY_3 + QX_3$

Además, las corrientes de salida de cada etapa se suponen en equilibrio:

Etapa 1: $Y_1 = 0.5X_1$
Etapa 2: $Y_2 = 0.5X_2$
Etapa 3: $Y_3 = 0.5X_3$

Las variables del proceso son: Q, W, $Y_1$, $Y_2$, $Y_3$, $X_F$, $X_1$, $X_2$ y $X_3$. (9)

De las cuales se conocen: Q y $X_{F,}$ (2)

Por lo tanto las variables efectivas son 7.

Las restricciones de igualdad son 6, entonces el problema tiene un grado de libertad.

La variable de decisión para este caso es W, el flujo de solvente de lavado.

El problema de optimización entonces es:

Maximizar

$$f = 2WY_1^2 - 0.05W$$

Sujeto a:

$$QX_F + WY_2 = WY_1 + QX_1$$
$$QX_1 + WY_3 = WY_2 + QX_2$$
$$QX_2 = WY_3 + QX_3$$
$$Y_1 = 0.5X_1$$
$$Y_2 = 0.5X_2$$
$$Y_3 = 0.5X_3$$

Por inspección de la función objetivo y las restricciones, se trata de un problema de optimización no lineal con restricciones (NLRP).
Podrían eliminarse las variables sucesivamente para transformar el problema en uno sin restricciones de una variable, del tipo f = f(W).

2. (1.5 ptos.) Dado el siguiente problema de optimización:

Minimizar $f(\underline{x}) = 100(x_2 - {x_1}^2)^2 + (1 - x_1)^2$
Sujeto a: $x_1^2 + x_2^2 \leq 2$

El punto $\underline{x^*} = [1\ 1]^T$ se propone como punto de mínimo. Confirme si se trata de un mínimo y si éste es global.

En este caso se supone que el punto es efectivamente un mínimo y se evalúa si corresponde a un mínimo local o global. Para esto se debe estudiar si el problema de optimización es convexo. Si es el caso, este sería el único mínimo y por lo tanto el global.

Un problema convexo se define si la función es convexa (en el caso de minimización) y las restricciones de desigualdad también lo son (escritas como < 0)

Primero estudiemos la convexidad de la restricción, g(x). Su matriz Hessiana es:

$$H\left(g(\underline{x})\right) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Los determinantes de los menores principales de esta matriz son $D_1 = 2$ y $D_2 = 2*2-0*0 = 4$. Dado que los dos son positivos, $H\left(g(\underline{x})\right)$ es definida positiva y la restricción es estrictamente convexa.

Para la función objetivo, se sigue el mismo procedimiento. Su matriz Hessiana es:

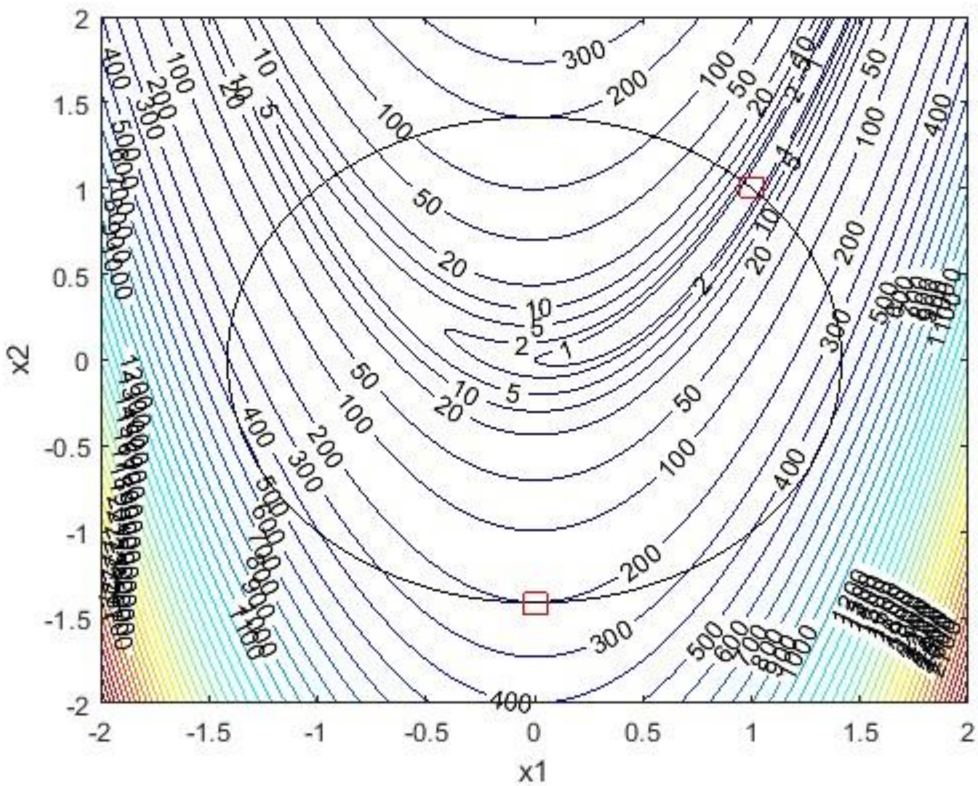
$$H\left(f(\underline{x})\right) = \begin{bmatrix} -400x_2 + 1200x_1^2 + 2 & -400x_1 \\ -400x_1 & 200 \end{bmatrix}$$

El determinante del primer menor principal es $D_1 = -400x_2 + 1200x_1^2 + 2$. Por inspección D1 puede ser negativo para valores altos de $x_2$ y bajos de $x_1$. Por lo tanto, la función objetivo no es convexa para todo $\underline{x}$.

Un análisis más detallado obliga a estudiar la convexidad de la función para $\underline{x}$ que estén dentro de la región factible, es decir, que cumplan con la restricción $x_1^2 + x_2^2 \leq 2$. Por ejemplo, si $x_1 = 0$ y $x_2 = 1$, se cumple la restricción y $D_1 = -398$. Entonces, la función objetivo no es convexa en la región factible.

Por lo tanto, el problema de optimización no es convexo y no se puede asegurar que $\underline{x^*} = [1\ 1]^T$ sea el mínimo global del problema.

Del gráfico del problema 2-D se observa que la región factible son los puntos dentro del círculo de radio $\sqrt{2}$ centrado en el origen. Por inspección, existen dos mínimos locales, el primero efectivamente en $\underline{x}^* = [1\ 1]^T$, y el segundo alrededor de $\underline{x}^* = [0\ \ -1.4]^T$. La existencia de dos mínimos locales indica que el problema no es convexo.




3. (1.5 ptos.) Se desea minimizar la función siguiente:

$$f(\underline{x}) = 3x_1^2 + 3x_2^2 + 3x_3^2$$

El algoritmo de minimización n-dimensional pide minimizar direccionalmente desde el punto $\underline{x}^0 = [1.0\ 2.5\ 4]^T$ en la dirección del negativo del gradiente.
Efectúe la minimización utilizando el método de Newton. Discuta sobre el número de iteraciones que necesita este algoritmo para minimizar la función parametrizada.

Para minimizar direccionalmente se parametriza la función dado un punto inicial y una dirección. El punto está dado, se necesita encontrar la dirección:

$$\nabla f = [6x_1 \quad 6x_2 \quad 6x_3]^T$$

$$-\nabla f(x_0) = [-6 \quad -15 \quad -24]^T$$

Entonces:

$$\underline{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2.5 \\ 4 \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} -6 \\ -15 \\ -24 \end{bmatrix}$$

Reemplazando en la función objetivo:

$$f(\lambda) = 3(1 - 6\lambda)^2 + 3(2.5 - 15\lambda)^2 + 3(4 - 24\lambda)^2$$

Esta función unidimensional se minimiza con el algoritmo de Newton, para ello se calculan f' y f''

$$f'(\lambda) = -36(1 - 6\lambda) - 90(2.5 - 15\lambda) - 144(4 - 24\lambda)$$
$$f''(\lambda) = 5022$$

El algoritmo entonces queda:

$$\lambda^{k+1} = \lambda^k - \frac{-36\left(1 - 6\lambda^k\right) - 90\left(2.5 - 15\lambda^k\right) - 144\left(4 - 24\lambda^k\right)}{5022}$$

El punto lógico de partida corresponde a $\lambda^0 = 0$, ya que implica partir del punto inicial de iteración. Entonces:

$$\lambda^1 = 0 - \frac{-837}{5022} = 0.1666$$

Este punto debe corresponder al óptimo porque la función es cuadrática entonces el método de Newton debe converger en una iteración.
De todas maneras, se puede calcular f'(0.1666) = 0, entonces el punto es un extremo y, dado que f''=5022 > 0, el extremo es un mínimo.

El mínimo direccional es:

$$\underline{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2.5 \\ 4 \end{bmatrix} + 0.1666 \begin{bmatrix} -6 \\ -15 \\ -24 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Que también corresponde al mínimo de la función objetivo 3D.

4. (1 pto.) Se tiene la siguiente función para minimizar:

$$f = (x - 1)(x - 2.5)$$

Encuentre el mínimo de la función utilizando el método de la sección áurea en el intervalo [0, 3]. Efectúe el número de iteraciones necesarias para obtener una solución con una incertidumbre máxima de ± 0.2.

Una incertidumbre máxima de ± 0.2 implica que el intervalo final no puede ser superior a 0.4, es decir al menos una reducción de 0.4/3 = 0.1333 ó 13.3%. Se debe obtener el número de evaluaciones de la función que permitirá esa reducción.

$$C_n = (0.618)^{n-1}$$

$$0.1333 = (0.618)^{n-1}$$

$$n = \frac{\ln 0.1333}{\ln 0.618} + 1 = 5.187$$

Por lo tanto se deben usar n = 6 evaluaciones de la función para garantizar la reducción al 13.3% del intervalo original.

El algoritmo comienza calculando $l_0$ y $r_0$:

$$l_0 = b_0 - \tau(b_0 - a_0) = 3 - 0.618(3 - 0) = 1.146$$
$$r_0 = a_0 + \tau(b_0 - a_0) = 0 + 0.618(3 - 0) = 1.854$$
$$f(l_0) = -0.197$$
$$f(r_0) = -0.5516$$

Suponiendo unimodalidad se debe eliminar el intervalo [$a_0$, $l_0$] = [0, 1.146]

Primera iteración:

$$l_1 = 1.854$$
$$r_1 = 1.146 + 0.618(3 - 1.146) = 2.291$$
$$f(l_1) = -0.5516$$
$$f(r_1) = -0.2689$$

Suponiendo unimodalidad se debe eliminar el intervalo [2.291, 3]

Segunda iteración:

$$l_2 = 2.291 - 0.618(2.291 - 1.146) = 1.5837$$
$$r_2 = 1.854$$
$$f(l_2) = -0.5348$$
$$f(r_2) = -0.5516$$

Suponiendo unimodalidad se debe eliminar el intervalo [1.146, 1.5837]

Tercera iteración:

$$l_3 = 1.854$$
$$r_3 = 1.5837 + 0.618(2.291 - 1.5837) = 2.0212$$
$$f(l_3) = -0.5516$$
$$f(r_3) = -0.4889$$

Suponiendo unimodalidad se debe eliminar el intervalo [2.0212, 2.291]

Cuarta iteración:

$$l_4 = 2.0212 - 0.618(2.0212 - 1.5837) = 1.7508$$
$$r_4 = 1.854$$
$$f(l_4) = -0.5625$$
$$f(r_4) = -0.5516$$

Suponiendo unimodalidad se debe eliminar el intervalo [1.854, 2.0212], con lo cual el intervalo final de búsqueda es: [1.5837, 1.854]

El intervalo de búsqueda se redujo a un 9%:

$$\frac{1.854 - 1.5837}{3 - 0} = 0.09$$

De esta manera se garantiza una reducción mayor al 13.3%. También, se podría informar el valor medio del intervalo como respuesta: 1.719 ± 0.135.