Certamen 1

Optimización de Procesos 2018-1

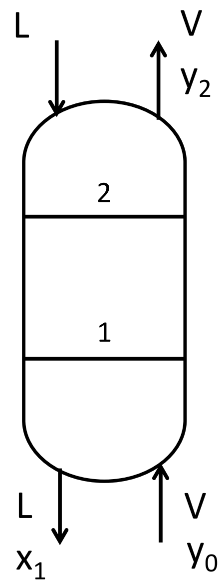
540.258

1. (3 ptos.) Se dispone de una columna de absorción para separar benceno de una corriente de hidrocarburos utilizando un solvente orgánico. La concentración de benceno en la corriente de gas de entrada a la columna es 0.2 %vol. Se puede considerar que el solvente que entra a la columna no contiene benceno. El equipo opera a presión atmosférica y a 25°C. Se puede suponer que los flujos de gas y líquido son constantes a lo largo en la columna, que la relación de equilibrio es $y = Kx$ con K = 0.12 y que el número de platos teóricos es 2. El flujo de vapores es 36.6 kmol/h.

El costo de operación, tomando en cuenta los costos de regeneración de solvente, es descrito por $C_{operación}\left(\frac{\$}{h}\right) = 0.9\,L$, con L flujo de solvente en kmol/h. Por otro lado, existe una penalización económica asociada a la emisión de benceno, cuyo costo es: $C_{emisiones}\left(\frac{\$}{h}\right) = 500\,F_B$, con F_B flujo de benceno en la corriente de gases de salida de la columna (kmol/h). Se desea minimizar el costo total.

a) Plantee el problema de optimización especificando la función objetivo, variables, ecuaciones y grados de libertad.

b) Determine las condiciones de operación que minimizan el costo. Minimice la función objetivo mediante el método de la sección áurea, con n = 6. Comience con el intervalo L = [10, 40]



a)

Balance molar de benceno en el plato 2:

$$V y_1 = V y_2 + L x_2 \qquad (1)$$

Balance molar de benceno en el plato 1:

$$V y_0 + L x_2 = V y_1 + L x_1 \qquad (2)$$

El balance global de benceno es la suma de las ecuaciones anteriores.

Adicionalmente, se considera que las corrientes que salen de cada etapa están en equilibrio:

$y_2 = Kx_2$ (3)

$y_1 = Kx_1$ (4)

Las variables del problemas son: **L, V, y_0, x_1, x_2, y_1** e **y_2**

Hay 7 variables y 4 ecuaciones. Se conoce el flujo de gas V = 36.6 kmol/h y la concentración de benceno en el gas de entrada y_0 = 0.002, por lo tanto el número de variables efectivas es 5.

G.L. = variables – ecuaciones = 1

Hay un grado de libertad por lo que existe espacio para optimizar.

La función objetivo está dada por la suma de los costos de operación más la penalización por emitir benceno:

$C\left(\frac{\$}{h}\right) = 0.9\,L + 500\,V\,y_2$ (5)

Por lo tanto el problema de optimización es: Minimizar (5) sujeto a (1-4)

b)

Se pueden reemplazar las ecuaciones 3 y 4 en los balances de materia:

$VKx_1 = VKx_2 + Lx_2$ (6)

$Vy_0 + Lx_2 = VKx_1 + Lx_1$ (7)

Reordenando la ecuación (6):

$x_1 = x_2(1 + \frac{L}{VK})$ (8)

Reordenando la ecuación (7):

$\frac{y_0}{K} + \frac{L}{VK}x_2 = x_1(1 + \frac{L}{VK})$ (9)

Introduciendo (8) en (9) y reordenando se obtiene:

$\frac{y_0}{K} + \frac{L}{VK}x_2 = x_2(1 + \frac{L}{VK})(1 + \frac{L}{VK})$

$x_2 = \frac{\frac{y_0}{K}}{\left(1+\frac{L}{VK}\right)^2 - \frac{L}{VK}}$ (10)

También:

$y_2 = \frac{y_0}{\left(1+\frac{L}{VK}\right)^2 - \frac{L}{VK}}$ (11)

Reemplazando los valores numéricos en la ecuación 11: y0 = 0.002, K = 0.12, V = 36.6

$$y_2 = \frac{0.002}{\left(1+\frac{L}{4.392}\right)^2 - \frac{L}{4.392}}$$

Entonces, la función objetivo es:

$$C\left(\frac{\$}{h}\right) = 0.9\,L + 500 \times\; 36.6 \times \frac{0.002}{\left(1+\frac{L}{4.392}\right)^2 - \frac{L}{4.392}}$$

$$C\left(\frac{\$}{h}\right) = 0.9\,L + \frac{36.6}{\left(1+\frac{L}{4.392}\right)^2 - \frac{L}{4.392}}$$

Se minimiza esta función mediante sección áurea con n = 6 intervalo inicial [10, 40]

$a_0 = 10$

$b_0 = 40$

$l_0 = 40 - 0.618(30) = 21.46$ (f = 20.54)

$r_0 = 10 + 0.618(30) = 28.54$ (f = 26.42)

Se elimina b_0.

$a_1 = 10$

$b_1 = 28.54$ (f = 26.42)

$r_1 = 21.46$ (f = 20.54)

$l_1 = 28.54 - 0.618(28.54 - 10) = 17.08$ (f = 17.20)

Se elimina b_1.

$a_2 = 10$

$b_2 = 21.46$ (f = 20.54)

$r_2 = 17.08$ (f = 17.20)

$l_2 = 21.46 - 0.618(21.46 - 10) = 14.377$ (f = 15.38)

Se elimina b_2.

$a_3 = 10$

$b_3 = 17.08$ (f = 17.20)

$r_3 = 14.377$ (f = 15.38)

$l_3 = 17.08 - 0.618(17.08 - 10) = 12.70$ (f = 14.42)

Se elimina b_3.

$a_4 = 10$

$b_4 = 14.377$ (f = 15.38)

$r_4 = 12.70$ (f = 14.42)

$l_4 = 14.377 - 0.618(14.377 - 10) = 11.67$ (f = 13.92)

El intervalo final es L = [10, 13,92]. El flujo de solvente óptimo sería L = 11.96 (promedio entre los dos valores).

El intervalo inicial no fue el correcto (no contenía al mínimo), ya que éste es L* = 8.54

2. (1.5 ptos.) Considere el siguiente problema:

Minimizar: $f(\underline{x}) = x_1^2 + x_2$

Sujeto a: $g_1(\underline{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 9 \leq 0$

$g_2(\underline{x}) = x_1 + x_2^2 - 1 \leq 0$

$g_3(\underline{x}) = x_1 + x_2 - 1 \leq 0$

Determine matemáticamente si la región definida por esas restricciones es convexa.

El problema de optimización es convexo? Justifique la respuesta.

Respuesta:

Escritas como $g_i \leq 0$, todas las restricciones deben ser funciones convexas para que la región lo sea.

g_1.

$\frac{\partial g_1}{\partial x_1} = 2x_1, \frac{\partial g_1}{\partial x_2} = 2x_2$

$\frac{\partial^2 g_1}{\partial {x_1}^2} = 2, \frac{\partial^2 g_1}{\partial {x_2}^2} = 2, \frac{\partial^2 g_1}{\partial x_1 x_2} = 0$

$H(g_1) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

Valores propios: $\left| \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right| = 0$

$(2 - \lambda)^2 = 0$

$\lambda_1 = \lambda_2 = 2$

Los valores propios son mayores que cero, luego g_1 es estrictamente convexa

g_2.

$\frac{\partial g_2}{\partial x_1} = 1, \frac{\partial g_2}{\partial x_2} = 2x_2$

$\frac{\partial^2 g_2}{\partial {x_1}^2} = 0, \frac{\partial^2 g_2}{\partial {x_2}^2} = 2, \frac{\partial^2 g_2}{\partial x_1 x_2} = 0$

$H(g_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

Valores propios: $\left| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right| = 0$

$-\lambda(2 - \lambda) = 0$

$\lambda_1 = 0;\ \lambda_2 = 2$

Los valores propios son mayores o iguales que cero, luego g_2 es convexa

g_3.

$\frac{\partial g_3}{\partial x_1} = 1, \frac{\partial g_3}{\partial x_2} = 1$

$\frac{\partial^2 g_2}{\partial {x_1}^2} = 0, \frac{\partial^2 g_2}{\partial {x_2}^2} = 0, \frac{\partial^2 g_2}{\partial x_1 x_2} = 0$

$H(g_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

Valores propios: $\left| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right| = 0$

$\lambda^2 = 0$

$\lambda_1 = 0;\ \lambda_2 = 0$

Los valores propios son nulos, luego g_3 es convexa y cóncava.

Dado que todas las funciones son convexas, la región definida por esas restricciones es convexa.

Se puede estudiar la convexidad de la función objetivo:

f.

$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 2x_1, \frac{\partial f}{\partial x_2} = 1$

$\frac{\partial^2 f}{\partial {x_1}^2} = 2, \frac{\partial^2 f}{\partial {x_2}^2} = 0, \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} = 0$

$H(f) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

Valores propios: $\left| \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right| = 0$

$-\lambda(2 - \lambda) = 0$

$\lambda_1 = 0;\ \lambda_2 = 2$

Los valores propios son iguales o mayores que cero, por lo que la función es convexa.

El problema de optimización es convexo, debido a que tanto la función como la región factible lo son.

3. (1.5 ptos.) Se dispone de datos experimentales de velocidad de reacción para la descomposición catalítica de etanol a distintas presiones parciales de reactivo.

P etanol (kPa)	R (mol gcat^{-1} h^{-1})
0.2	2.5
0.25	3
0.3	3.2
0.5	4

Se postula que la cinética de la reacción tiene la forma: $R = kP^b$, con b = 0.5. Se necesita encontrar el valor de k.

a) Defina una función objetivo que permita obtener el valor de k mediante minimización del error.

b) Utilice el método de Newton para resolver el problema. ¿Cuántas iteraciones se requieren para llegar al mínimo?

a)

Una función de error típica es la suma de los cuadrados de la diferencia entre los datos experimentales y los valores predichos por el modelo (mínimos cuadrados).

Minimizar:

$$f = \sum_i \left(R_{exp} - R_{modelo}\right)^2$$

$$f = (2.5 - k \times 0.2^{0.5})^2 + (3 - k \times 0.25^{0.5})^2 + (3.2 - k \times 0.3^{0.5})^2 + (4 - k \times 0.5^{0.5})^2$$

$$f = (2.5 - 0.447k)^2 + (3 - 0.5k)^2 + (3.2 - 0.548k)^2 + (4 - 0.707k)^2$$

b)

Método de Newton:

$$f' = -0.894(2.5 - 0.447k) - (3 - 0.5k) - 1.095(3.2 - 0.548k) - 1.414(4 - 0.707k)$$

$$f'' = 2.5$$

Como la función es cuadrática, el método de Newton garantiza que el punto estacionario se alcanza en una iteración. Por simplicidad $k^0 = 0$

$$k^1 = k^0 - \frac{f'(k^0)}{f''(k^0)}$$

$$k^1 = 0 - \frac{-14.395}{2.5}$$

$$k^1 = 5.758$$

Este valor corresponde al mínimo de la función (se debería probar con la concavidad de la función en este punto)

El modelo, por lo tanto, queda: $R = 5.758P^{0.5}$

Información adicional

Sección áurea: $C_n = (0.618)^{n-1}$ (n: número de evaluaciones de la función). $l_0 = b_0 - \tau(b_0 - a_0)$, $r_0 = a_0 + \tau(b_0 - a_0)$

Método de Newton: $x^{k+1} = x^k - \frac{f\prime(x^k)}{f\prime\prime(x^k)}$

AKB

9-mayo-2018