

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE QUIMICA

APLICACION DEL METODO DE FLETCHER EN LA
OPTIMIZACION DE UN REACTOR QUIMICO

145

T E S I S
Q U E P A R A O B T E N E R
E L T I T U L O D E :
I N G E N I E R O Q U I M I C O
P R E S E N T A
M I G U E L F A R I A S H E R N A N D E Z



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

CLAS Tesis
AGE 1976 144
FECHA _____
PREC MH
S _____



QUINDÍO

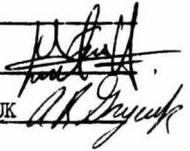
Jurado asignado originalmente
según el tema.

PRYSIDE FRANCISCO BARNES DE CASTRO
V O C A L " CARLOS MENA BRITO FLORES
SECRETARIO " ALEJANDRO RAMIREZ GRUCUK
1er. SUPLENTE " LUIS ROMERO CERVANTES
2o. SUPLENTE " ENRICO MARTINEZ SAENZ

Sitio donde se desarrollo el tema: FACULTAD DE QUIMICA, UNAM.

Nombre completo y firma del sustentante: MIGUEL FARIAS HERRERA DEZ

Nombre completo y firma del asesor del tema: ALEJANDRO RAMIREZ GRUCUK



A mis padres;
Agradeciendoles el apoyo
que me brindaron durante toda mi carrera.

A mis Hermanas.

A mi Abuelita Lolita;
Con cariño y respeto.

A mis Maestros y Amigos.

I N D I C E

- I.- INTRODUCCION.
- II.- GENERALIDADES.
- III.- METODO DE FLETCHER.
- IV.- PROGRAMACION DEL ALGORITMO.
- V.- FUNCION OBJETIVO PARA UN REACTOR QUIMICO.
- VI.- PROGRAMACION DE LA FUNCION Y DERIVADAS PARA EL SISTEMA.
- VII.- PRUEBAS Y RESULTADOS.
- VIII.- CONCLUSIONES.
- IX.- BIBLIOGRAFIA.

I N T R O D U C C I O N

Siempre ha sido una tendencia natural en todos los campos de actividades del hombre, tratar de obtener los mejores resultados que le sean posibles al resolver cualquier problema a que se enfrente, de acuerdo a las circunstancias especiales que rodeen a éste, habiendo -- utilizado diferentes procedimientos para lograrlo, dependiendo en épocas anteriores de su poder de observación o de sus conocimientos en el presente.

No siempre los problemas son sencillos de analizar y de resolver para obtener lo que nosotros necesitamos, y lo cierto es que la gran mayoría de los casos que representan un problema real o por lo menos lo simulan, se complican demasiado para poderlo resolver con armas elementales o intuitivas. Debido a esto, en los últimos años han sido ideadas técnicas por matemáticos como Broyden, Powell, Pearson y Fletcher entre otros, que permiten una mejor y más rápida solución a los diferentes problemas y que se conocen como Métodos de Optimización.

La mente humana puede enfrentar una tarea o problema e idear más de un plan de acción para resolverlo, efectuando a continuación un segundo paso, la selección de cual considera el mejor plan de acción, o sea el paso de decisión. El ejecutar los dos pasos juntos, reconocimiento de alternativas y decisión constituye la Optimización.

Como se puede entender la Optimización nació casi con el --- hombre, pues éste siempre ha tenido que enfrentarse a problemas y resolverlos. Teniendo en cuenta esto se puede enfocar a la Optimización de dos formas, una que es la Cualitativa porque se realiza por medio de la pura apreciación humana y otra, Cuantitativa que es la que se realiza por medios matemáticos y exactos.

La Industria Química ha sido siempre un gran campo de aplicación de la Optimización en cualquiera de sus formas, es por eso que en la formación del Ingeniero Químico se ha ido haciendo cada vez más y más necesario el conocimiento y estudio de los Métodos de Optimización propuestos por los matemáticos, para poder optar en un momento dado -- por su posible aplicación a los problemas que se presentan en su área de actividades.

El objeto de esta Tesis es precisamente, basandose en la descripción que hace Robert Fletcher de su Método, en el artículo publicado en "The Computer Journal" Volumen 13, número 3 de agosto de 1970, -- obtener éste y comparar su efectividad con la de otros métodos ya probados, para despues aplicarlo a un problema representativo de un proceso químico y ver cuales son las ventajas y desventajas de su aplicación

Así pues, el panorama que se intenta presentar es algo que, -- aunque en otros países ya se aplica en algunas actividades en forma -- sistemática, en nuestro país aun tiene un aspecto experimental y se realiza en muy pequeña escala, sin embargo, al profundizar un poco en su estudio, surge la pregunta de cuanto nos podría ayudar la utilización -- adecuada de esta tendencia casi natural en el hombre: La Optimización.

GENERALIDADES

El proceso de optimización en general es posible dividirlo en varios pasos, que comúnmente se siguen al tratar de resolver la mayoría de los problemas que se nos pueden presentar. De acuerdo a este criterio en primer lugar tenemos;

a).- PLANTEAMIENTO DE PROBLEMAS

Es de gran importancia considerar en el planteamiento de un problema que, el modelo que lo represente sea:

- Una aproximación del problema real,
- Una representación simplificada.
- Contiene los aspectos más relevantes.
- El problema planteado puede resolverse.

b).- FORMULACION DEL PROBLEMA

El problema general de programación no lineal se plantea de la siguiente manera:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(X) \\ \text{Sujeto a} & g_i(X) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, m_1 \\ & h_j(X) \geq 0 \quad j = 1, 2, \dots, m_2 \end{array}$$

Donde $X: (x_1, x_2, \dots, x_n)$ es el vector de variables y f, g, h son funciones de X a valores reales

f ; es no lineal

g, h ; pueden ser lineales o no lineales.

La formulación de un problema representa en sí, una dificultad que en muchos casos requiere de un enorme trabajo analítico para realizarla, aunque este trabajo es siempre útil no importa que al final de cuentas, no se lleve a cabo la optimización.

Las funciones representativas comúnmente denominadas "función - objetivo", pueden corresponder a dos clases de problemas: con restricciones y sin restricciones. Si el problema es sin restricciones se podrá --

resolver con los algoritmos en forma directa, pero si el problema es con restricciones se tendrá que hacer uso de técnicas especiales para tratarlo como a continuación se explica:

c).- MANEJO DE RESTRICCIONES.

Existen básicamente tres tipos de estrategias para el manejo de restricciones:

- Transformación de Variable
- Técnicas de Barrera y Penalización
- Algoritmos especiales que manejan implícitamente las restricciones

Transformación de Variable.

En ocasiones las restricciones lineales de cierto tipo pueden transformarse por un cambio de variable y manejarlas sin restricción, p ej:

<u>Tipo</u>	<u>Transformación</u>
$x_1 \geq 0$	$x_1 = y_1^2$
$0 \leq x_1 \leq 1$	$x_1 = \text{sen}^2 y_1$
$-1 \leq x_1 \leq 1$	$x_1 = \text{sen } y_1$

Estas transformaciones no introducen óptimos locales adicionales. La optimización se efectúa con respecto a las nuevas variables sin restricciones y del resultado de la optimización se obtienen los valores óptimos de las variables originales mediante la ecuación de transformación.

Técnicas de Penalización y Barrera.

Las técnicas de Penalización y de Barrera son procedimientos para aproximar problemas de optimización restringidos por una serie de problemas irrestrictos.

Técnica de Barrera.

El método más conocido y más empleado es el SUMT (Sequential Unconstrained Minimization Technique) que tiene la característica de que todos los puntos manejados son interiores y por tanto factibles.

$$P(X,r) = f(X) + r \sum_{j=1}^m 1/h_j(X)$$

P : función transformada

f: función original

r : parámetro $0 < r_{k+1} < r_k$ y $r_k \rightarrow 0$

Se requiere de un punto inicial X^0 factible y se resuelve una secuencia de problemas de optimización P(X,r) para $r = r_0, r_1, \dots, r_k$ - figura 1.

Técnica de Penalización.

También se conoce como técnica de punto exterior. En este método no se tiene limitación en la elección del punto inicial pero las soluciones intermedias no son factibles.

$$P(X,r) = f(X) + r^{-1} (\bar{g}_j(X), 0)^2.$$

Este caso se ilustra en la figura 2 .

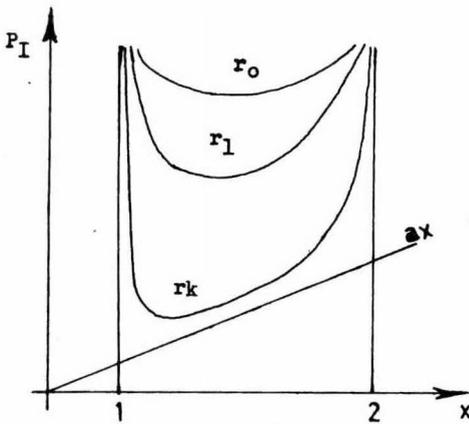


figura 1

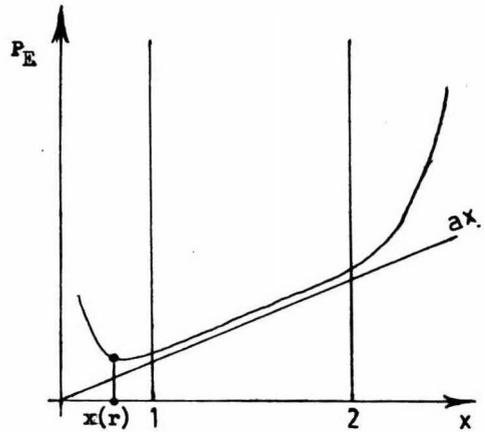


figura 2

d). ELECCION DEL ALGORITMO

A partir de este punto se tiene lo necesario para poder elegir el algoritmo que más convenga a los requerimientos de nuestra optimización, así es como a continuación, se da un panorama general de los métodos de optimización, describiendo en forma simple las características de cada uno.

MÉTODOS BÁSICOS DE DESCENSO

Estas técnicas ofrecen la alternativa más directa y simple para obtener soluciones cuando éstas no se pueden obtener en forma analítica.

Se empieza con un punto inicial y de acuerdo con cierta regla fija se establece la dirección de movimiento y se efectúa el movimiento en la dirección establecida hacia un mínimo relativo de la función objetivo. En el nuevo punto se repite el proceso.

Una vez seleccionada la dirección, todos los algoritmos requieren de un movimiento hacia el punto mínimo en la línea correspondiente, proceso que es llamado comúnmente busqueda en la línea (Minimización unidimensional) y que constituye la espina dorsal de esta clase de algoritmos de programación no lineal.

Esta búsqueda unidimensional se puede efectuar con los siguientes tipos de estrategia:

I.- Búsqueda secuencial.

Entre los métodos de este tipo se encuentra el de dicotomía -- que es el más simple, pues se basa en la reducción del intervalo de incertidumbre por medio de solo dos evaluaciones. Existen otros métodos semejantes para el mismo fin y con mayor eficiencia por ejemplo: Fibonacci y sección dorada.

II.- Búsqueda por ajuste cuadrático.

Este método se basa principalmente en que dados tres puntos conocidos y sus correspondientes valores de la función, se puede construir una cuadrática que pase por esos tres puntos de acuerdo a la fórmula: --

$$f(x) = ax^2 + bx + c$$

De acuerdo a la resolución del sistema de ecuaciones para los -- tres puntos, se puede determinar que el óptimo de esta función se encuentra en:

$$\frac{df(x)}{dx} = 2ax + b = 0$$

$$x = -b/2a$$

MÉTODOS MULTIVARIABLES

Los métodos fundamentales de minimización de funciones multivariab--
riables son:

- Método del Gradiente.
- Método de Newton.

Ambos métodos han servido de base para el desarrollo de una gran cantidad de algoritmos los cuales pretenden evitar algunos de los inconvenientes de éstos métodos.

Método del Gradiente.

Es el más antiguo y también el mejor conocido. Este algoritmo es iterativo, es decir que dado un punto inicial X_0 genera una secuencia de puntos X_1, X_2, \dots, X_k que converge a la solución. El proceso iterativo se define como sigue:

$$X_{k+1} = X_k - \alpha_k g_k$$

donde α_k es un escalar positivo que minimiza $f(X_k - \alpha g_k)$. Es decir a partir del punto X_k buscamos a lo largo de la dirección del gradiente negativo $-g_k$ hasta un punto mínimo en la línea; éste punto mínimo se toma como X_{k+1} y a partir de él se evalúa nuevamente el gradiente y se repite el procedimiento. Es necesario hacer notar que la α_k se determina con cualquiera de los métodos de búsqueda en la línea.

La siguiente interpretación geométrica en la figura 3, puede ayudar a entender mejor el método.

El vector de gradientes está definido como:

$$\nabla f(X) = \left(\frac{\partial f}{\partial X_1}, \frac{\partial f}{\partial X_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial X_n} \right)$$

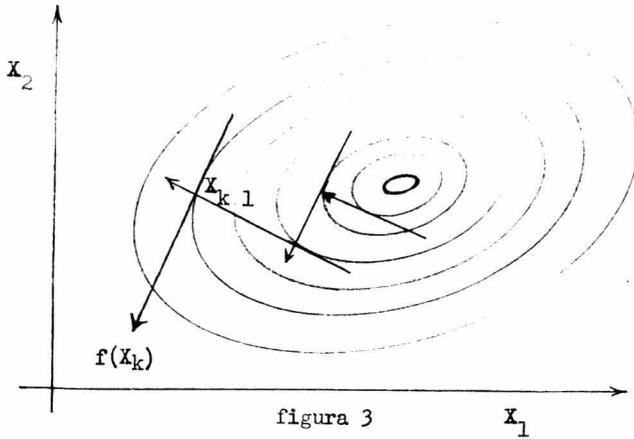


figura 3

Método de Newton.

La idea del Método de Newton es que la función f que se quiere minimizar se aproxima localmente con una función cuadrática y a esta se le determina el mínimo exacto. En la cercanías de X_k se aproxima f por una serie truncada de Taylor:

$$f(X) \approx f(X_k) + \nabla f(X_k)(X-X_k) + 1/2 (X-X_k)^t F(X_k)(X-X_k)$$

donde:

$$F(X_k) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{pmatrix}$$

$$y \quad X = X_k - [F(X_k)]^{-1} \nabla f(X_k)^t$$

En los puntos lejanos a la solución el algoritmo debe modificarse para garantizar la convergencia. La modificación consiste en introducir un parámetro de búsqueda α_k como sigue:

$$X_{k+1} = X_k - \alpha_k [F(X_k)]^{-1} \nabla f(X_k)^t$$

donde α_k se elige de tal manera que minimice f .

Este método tiene muy buenas propiedades de convergencia pero-

tiene el inconveniente de necesitar el cálculo y la inversión de la matriz (el Hessiano).

MÉTODOS QUE NO REQUIEREN DERIVADAS.

Método de descenso coordinado.

Este tipo de métodos son bastante atractivos ya que son de fácil implementación. Sus propiedades de convergencia son inferiores a las del método de gradientes.

La estrategia propuesta es la siguiente: dado $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ el descenso se efectúa sobre la coordenada x_i es decir:

$$\underset{x_i}{\text{Minimizar}} \quad f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Solo se permite el cambio de uno de los componentes x_i en la búsqueda.

Método de Powell.

Sus características más importantes son:

- No requiere cálculo de derivadas
- Converge a la solución en un número finito de iteraciones para funciones cuadráticas.

El algoritmo funciona de la siguiente manera:

- 1.- Dar un punto X_0 y un conjunto de n direcciones iguales a los ejes coordinados. $S_L = e_{L+1}$, $L=0, \dots, n-1$; donde e_j es el vector cuya componente j es igual a 1 y las demás son iguales a cero.
- 2.- Evaluar $f(X_k)$ para $k=0, \dots, n-1$ y guardar esta información para usarla en el paso 3.
- 3.- Resolver el problema de minimización en la línea, esto es encontrar α_k que satisfaga:

$$f(X_k + \alpha_k S_k) = \min f(X_k + \alpha_k S_k)$$

donde α_k puede tomar valores positivos o negativos.

- 4.- Calcular el paso de descenso

$$X_k = \alpha_k S_k$$

5.- Calcular el nuevo punto

$$X_{k+1} = X_k + \Delta X_k$$

6.- Si $k < n-1$, hacer $k = k+1$ y repetir a partir del paso 2; de lo contrario terminar el ciclo y pasar a 7.

7.- Si $|x_i^n - x_i^0| < \epsilon_i$, $i = 1, \dots, n$ terminar la iteración; de lo contrario pasar el paso 8 (ϵ_i es el vector de tolerancia)

8.- Encontrar una j entera, $1 \leq j \leq n$ tal que:

$$\delta = \left[f(X^{j-1}) - f(X^j) \right] = \max_{1 \leq i \leq n} \left[f(X^{i-1}) - f(X^i) \right]$$

9.- Hacer $f_1 = f(X_0)$ y $f_2 = f(X_n)$

$$\text{Calcular } f_3 = f(2X_n - X_0)$$

10.- Si $f_3 \geq f_1$ ó $(f_1 - 2f_2 + f_3)(f_1 - f_2) \geq 1/2 \delta (f_1 - f_2)^2$ usar de nuevo el mismo conjunto de direcciones en el nuevo ciclo, haciendo:

$X_0 = X_n$, $k=0$ y repetir a partir del paso 2; de lo contrario pasar a 11.

11.- Calcular $S = (X_n - X_0)$ y $\bar{\alpha}$, tal que minimice $f(X_n + \bar{\alpha}S)$ y hacer

$$X_0 = X_n + \bar{\alpha}S.$$

12.- Determinar el nuevo conjunto de direcciones. Hacer $k=0$ y repetir a partir de 2.

Método de Hooke y Jeeves.

Este método efectúa dos tipos de movimientos; exploratorios y de patrón. Los movimientos de exploración se efectúan cambiando una sola variable a la vez. Se sabe que este procedimiento es bastante ineficiente, por esta razón Hooke y Jeeves proponen que los movimientos de exploración vayan seguidos por movimientos de patrón, es decir en la dirección aproximada del gradiente determinado por el movimiento de exploración.

Este método es una aproximación del método del gradiente con muchas de sus desventajas; su convergencia es lenta.

Los aspectos atractivos son:

- Fácil de programar
- No requiere derivadas.

CRITERIOS DE TERMINACION

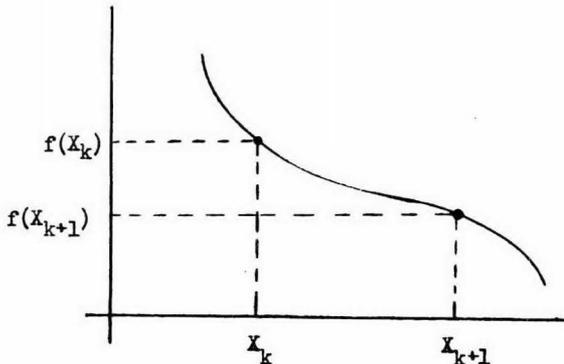
La gran mayoría de los algoritmos usan como criterios de fin de búsqueda los siguientes:

$$a) \frac{f(x^{k+1}) - f(x^k)}{f(x^k)} \leq \varepsilon$$

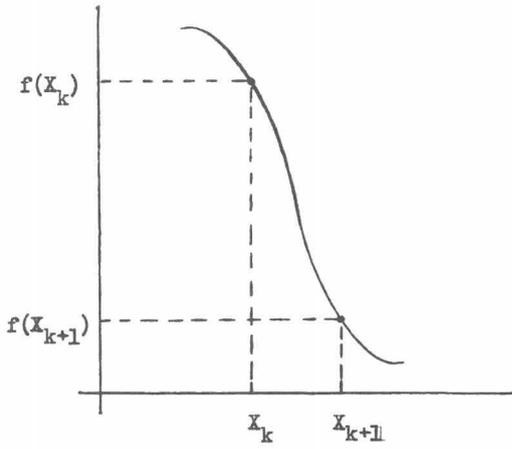
$$b) \frac{x^{k+1} - x^k}{x^k} \leq \varepsilon$$

Normalmente estas dos condiciones deben cumplirse simultáneamente para detener el proceso. El utilizar solo uno de los criterios puede causar las siguientes dificultades:

a) Aunque los valores sucesivos de la función estén muy cercanos, la función puede seguir descendiendo en forma constante como se ilustra a continuación.



b) La proximidad de dos argumentos sucesivos no podrá ser tomada como índice para la terminación cuando la función desciende repentinamente.



METODO DE FLETCHER

En este capítulo se hace una descripción del Método que Robert Fletcher propone en su artículo "A new approach to variable metric algorithms" publicado en The Computer Journal Volumen 13, número 3, de agosto de 1970, mencionando en forma detallada las propiedades y características que debe cumplir el algoritmo, para obtener de él un funcionamiento que garantice los fines de nuestra Optimización.

MOTIVACION.-

El artículo se ocupa del problema de minimizar una función $F(X)$ de n variables $X = (X_1, X_2, X_3, \dots, X_n)$ asumiendo que el vector de gradientes $\nabla_x F = g(x)$ está disponible explícitamente, pero que el Hessiano G no lo está ($G_{ij} = \frac{\partial^2 F}{\partial X_i \partial X_j}$). Un tipo de método del cual ha obtenido considerable éxito para resolver estos problemas es el Método de Variable Métrica (MVM), cuyo autor es Davidon (1959) y que fue simplificado por Fletcher y Powel en 1963. La principal característica del MVM es que se obtiene una aproximación de H a G^{-1} que es conservada en cada iteración usando la fórmula:

$$H^* = H + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \gamma} - \frac{H \gamma \gamma^T H}{\gamma^T H \gamma} \quad (1)$$

donde $\delta = x^* - x$ y $\gamma = g^* - g$ son los cambios en X y G hechos en esa iteración y el suscrito ($*$) denota la siguiente iteración. La corrección δ es tomada como un múltiplo α ($\alpha > 0$) de una dirección de búsqueda $S = -Hg$ escogida por analogía con el Método de Newton, de tal forma que:

$$\delta = \alpha S = -\alpha Hg$$

El múltiplo α es tomado como la λ que minimiza $F(X + \lambda S)$, esto es que la función es minimizada localmente en la dirección de búsqueda. El Método tiene un número de importantes propiedades,

por ejemplo si la matriz de aproximación H es escogida de tal forma que sea inicialmente positiva y definida, entonces esta propiedad es retenida en aproximaciones subsecuentes. Tambien si la función que será minimizada es de una forma cuadrática positiva definida, el algoritmo terminará a lo más en n iteraciones.

El algoritmo tiene, sin embargo, algunos inconvenientes. El principal es la necesidad de resolver el subproblema de encontrar α en cada iteración o sea la búsqueda lineal, esta se hace generalmente por evaluación de la función y gradientes para un número de diferentes valores de λ , interpolando de acuerdo con alguna estrategia hasta obtener un mínimo suficientemente exacto. La búsqueda en la línea puede tambien a menudo ser desventaja cuando hay restricciones presentes, -- porque entonces el mínimo en la línea puede no ser factible. Es importante por lo tanto, considerar como puede dispensarse el subproblema de la búsqueda lineal.

El primer punto a examinar por lo tanto, es como se puede probar la terminación del algoritmo de Variable Métrica, que no requiere búsqueda lineal. Para esto es necesario contar con otra fórmula aparte de (1) la cual satisfaga la propiedad hereditaria para las matrices H sucesivas, una fórmula de este tipo es:

$$H^* = H + \frac{(\delta - H\gamma)(\delta - H\gamma)^T}{\gamma^T(\delta - H\gamma)} \quad (2)$$

En la cual la corrección es de Rango I y evita la necesidad de hacer búsquedas en la línea e introduce una serie de efectos secundarios, los cuales son: no poder garantizar la reducción en F por mucho tiempo, la corrección es ilimitada aun para funciones cuadráticas, y por último, si se toma $\delta = -Hg$ dentro de la estrategia del algoritmo entonces, H^* es automáticamente singular o indeterminada.

En la búsqueda de un algoritmo simple y efectivo es necesario tener en cuenta que la retención de H positiva y definida es importante porque asegura una reducción de F en cada iteración. La aproximación -- que se considera, es por lo tanto, el hecho de abandonar la propiedad de terminación cuadrática, para que sea posible reemplazar el proceso de búsqueda lineal por uno más simple y esperadamente más eficiente para reducir la función en cada iteración. Esto no puede ser realizado tan libremente puesto que la terminación cuadrática es un hecho que garantiza la rápida convergencia de un algoritmo, de acuerdo a que H tienda a G^{-1} .

En su artículo, Robert Fletcher define como propiedad I, aquella que establece que para funciones cuadráticas, los valores propios de H deben tender monótonicamente a aquellos de G^{-1} . La fórmula (1) del MVM satisface la propiedad I, por lo tanto viene a ser un candidato para usarla en la clase de algoritmo que se ha enfocado.

Para asegurar la eficiencia de un algoritmo sin búsquedas en la línea, es necesario que solo una evaluación de F y g sea hecha en cada iteración, excepto en raras ocasiones. El cambio ΔF en F en una iteración de acuerdo a una serie de Taylor, se puede esperar que sea aproximadamente $g^T \delta$ cuando δ es pequeña, pero es mucho menor que $g^T \delta$ en valor absoluto cuando la posición del mínimo a lo largo de la línea es sobrestimado. El cambio en F relativo a g^T no puede resultar arbitrariamente pequeño si:

$$\frac{\Delta F}{g^T \delta} \geq \mu \quad 0 < \mu \ll 1 \quad (3)$$

donde μ es una cantidad pequeña fijada de antemano. De hecho si las correcciones son determinadas por $\delta = -\lambda Hg$ entonces probando valores de $\lambda = 1, W, W^2, W^3 \dots$ ($0 < W < 1$) producirán eventualmente una δ la cual satisfaga esta prueba. En la práctica se ha hecho la elección de $W = 0,1$ y

$$\mu = 0.0001$$

Cuando se converge hacia el mínimo de una función no cuadrática y cumple la propiedad I, entonces se tomará siempre $\lambda=1$ y la convergencia será super lineal. Para asegurar la convergencia a una solución, es también un requisito que la longitud de paso λ no tienda a cero.

Otra propiedad que es importante es la retención de la matriz positiva y definida. Aunque esto es consecuencia de la propiedad I cuando las funciones son cuadráticas, para funciones no cuadráticas, es necesario hacer la estimación sobre un intervalo δ para el cual $\delta\delta > 0$, de hecho aunque $\delta = -\lambda Hg$ donde $\lambda=1$ puede no satisfacer esta condición y se puede encontrar una δ probando valores de λ mayores de 1.

Un algoritmo basado en estas ideas fué integrado usando la original fórmula (1) del MVM a efecto de evaluar H, de acuerdo a que ésta posee la propiedad I. No obstante es necesario usar un medio más satisfactorio de evaluar H. que además de poseer la propiedad I elimine la tendencia a la singularidad, exhibida por la fórmula (1) sola.

2.- LA NUEVA FORMULA.-

La posibilidad de generar una nueva fórmula de evaluación fué realizada basándose en una idea relativamente simple. La fórmula (1) es una de las cuales fuerza a que la relación $H*\delta = \delta$ se lleve a cabo. Si

Γ es definida como H^{-1} , entonces las Γ y Γ^* correspondientes a H y H^* de la fórmula (1) pueden ser representadas por

$$\Gamma^* = \left(I - \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \delta} \right) \Gamma \left(I - \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \delta} \right) + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \delta} \quad (4)$$

una fórmula, la cual naturalmente obliga a $\Gamma^* \delta = \delta$. así como una posibilidad se obtiene de forzar la transformación de δ en δ , ahora llevando a cabo el simple intercambio $\delta \leftrightarrow \delta$, en (4), se obtiene una nueva fórmula que transforma δ en δ y que nos sirve para evaluar H, esta fórmula es:

$$\begin{aligned}
 H^* &= \left(I - \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \delta} \right) H \left(I - \frac{\gamma \gamma^T}{\gamma^T \gamma} \right) + \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \delta} \\
 &= H - \frac{\delta \delta^T H}{\delta^T \delta} - \frac{H \gamma \gamma^T}{\gamma^T \gamma} + \left(1 - \frac{\gamma^T H \gamma}{\gamma^T \gamma} \right) \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \delta}
 \end{aligned} \tag{5}$$

La nueva fórmula posee la propiedad I, mostrando que puede ser usada para minimizar funciones cuadráticas de la manera del Algoritmo — descrito en la sección previa. El mismo requerimiento, de que $\gamma^T \delta > 0$, garantiza la retención de H positiva y definida.

Por supuesto, la nueva fórmula también puede ser usada en la — forma convencional con búsquedas en la línea. En este caso es también — posible probar la terminación cuadrática. (Fue probada por Broyden en — 1970).

3.- IMPORTANCIA DE LA FORMULA DE RANGO 1.

Se puede decir que la clase de fórmula que se ha utilizado para evaluar H se puede expresar en forma general como:

$$H_{\phi}^* = (1 - \phi) H_0^* - \phi H_1^*$$

Para la cual si ϕ se define como $\delta^T \gamma / (\delta^T \gamma - \gamma^T H \gamma)$ resulta ser la fórmula de rango 1 (3), que tiene la propiedad de que si $\delta^T \gamma > \gamma^T H \gamma$ entonces $\phi > 1$ y si $\delta^T \gamma < \gamma^T H \gamma$ entonces $\phi < 0$, es decir que ϕ cae en el rango $[\infty, -\infty]$.

La fórmula de rango 1 juega interesante papel, ya que es una — fórmula que no restringe los valores propios de H^* en ninguna forma, y — por lo tanto permite una aproximación a cualquier G^{-1} tan cerca como sea — posible. Al reemplazar δ por $G^{-1} \gamma$ la relación $\delta^T \gamma \geq \gamma^T H \gamma$ se — convierte en $\gamma^T G^{-1} \gamma \geq \gamma^T H \gamma$ y si esto es verdad, indica que H es menor — que G^{-1} así que se usará la fórmula grande (5) para la evaluación de H. Si por el contrario $\gamma^T G^{-1} \gamma < \gamma^T H \gamma$, H es mayor que G^{-1} entonces se — utilizará la fórmula pequeña (1) para evaluar H. De hecho si se obtiene la igualdad se ha decidido usar la fórmula (5) en razón de la importan— cia de eludir la singularidad en H.

4.- EL ALGORITMO.

Un algoritmo basado en las correcciones descritas en la sección (1), y usando cualquiera de las fórmulas de evaluación (1) ó (5), dependiendo de la prueba descrita en sección 3, ha sido escrito y probado extensamente. Se han hecho otras 2 adiciones, las cuales no afectan la complicación del programa y si en cambio contribuyen a la eficiencia de éste.

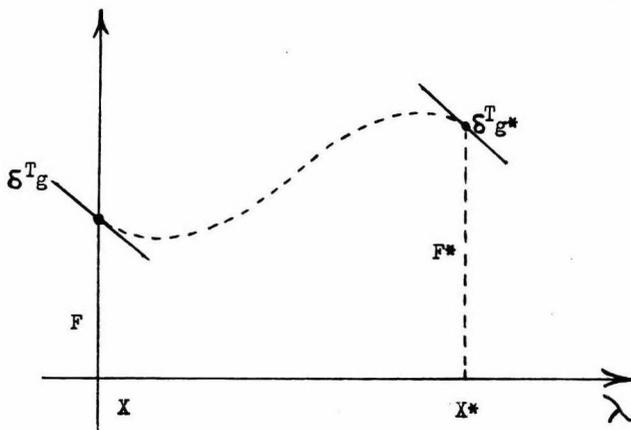
Una es, que si $\lambda=1$ no es la adecuada para reducir a F suficientemente, entonces una λ determinada por interpolación cúbica puede ser calculada y el mayor de este valor y 0.1 se usará en el cálculo. Por lo tanto la posibilidad de obtener un mínimo local en la línea es retenida, cuando por otras razones es necesario hacer más de una evaluación de F y g en una iteración. Este comportamiento también ayuda a dar un elemento de independencia a las δ sucesivas y por lo tanto mejora la aproximación de H.

Otro detalle se incluye a causa de que el algoritmo puede ser ineficiente si H se escoge inicialmente mucho mayor que la G^{-1} local, - entonces cualquier δ para reducir F puede ser considerablemente menor - que $-Hg$ y un gran número de evaluaciones extra de la función, pueden ser requerido en cada iteración. Se elige H que sea la matriz de identidad y se toma una longitud de paso λ , derivada del valor usado en la iteración previa, si esta λ es menor que la anterior, se usa de preferencia.

5.- TERMINACION

La terminación para el algoritmo se toma cuando $|\delta|$ es menor a un vector de tolerancia, el cual se ha escogido como 0.00005 en todas las pruebas. También hay dos salidas por errores, las cuales pueden ocurrir, ya sea cuando la tolerancia viene a ser demasiado pequeña relativa al efecto de redondeo o por mala programación de gradientes. Una

salida es cuando $\delta^T G \geq 0$ y la otra es una salida cuando para alguna δ -
 $\delta^T_{g^*} < 0$ y $F^* > F$ situación que es ilustrada en la siguiente figura:



y puede ser causada por variaciones imprevistas de la función en una iteración cercana, o por errores de redondeo en la región de la solución.

Por último, será tomada otra salida, en caso de que el número de iteraciones sobrepase a la cantidad n determinada de antemano.

PROGRAMACION DEL ALGORITMO

DEFINICION DE VARIABLES Y PARAMETROS UTILIZADOS.-

X(I) : Vector de variables
XSIG(I) : Vector de variables en el punto X(K+1)
H(I,J) : Matriz de identidad
HSIG(I,J): Valor de H en el punto X(K+1)
F : Valor de la función
G(I) : Vector de derivadas
AMDA : Longitud de paso
GAMA(I) : Vector diferencia de G(K+1)-G
DELTA(I) : Vector diferencia de X(K+1)-X
DF : Diferencia de F(K+1)-F
N : Número de variables
WI : Valor para comparación en la interpolación cúbica
MU : Valor de opción para la interpolación cúbica
IMP : Intervalo para impresión de resultados
LIMITE : Número máximo de iteraciones deseado
TOL : Tolerancia
RESULT : Resultado obtenido

Antes de proceder a la explicación detallada de cada uno de los - pasos que se han seguido para programar el algoritmo y obtener su diagrama de flujo general, es necesario definir que partes del cálculo se consideran como subrutinas debido a su frecuente utilización.

SUBROUTINAS USADAS

Subrutina INOUT

Esta subrutina es la que se ocupa de la lectura de datos y constantes y de la impresión de los resultados, ya sean parciales o el resultado final de la optimización.

Subrutina MFRI

Esta es la subrutina que desarrollan en sí el método de optimización de Fletcher descrito en el capítulo anterior.

Subrutina FUNCT

Es la subrutina que se ocupa del cálculo de la función, pudiendo incluir también el cálculo de las derivadas de la función.

Subrutina VECTOR

Esta subrutina obtiene el producto de una matriz por un vector, - siendo éste producto un nuevo vector que ha sido designado como V(I).

Subrutina ESCAL

Esta subrutina obtiene el producto de un vector transpuesto por - un vector, obteniéndose un escalar que se ha designado como E.

PROGRAMA PRINCIPAL

En el caso que se trata en esta Tesis, es conveniente la creación de un programa principal que maneje al algoritmo y a los cálculos repetitivos de éste como subrutinas, pues esto facilita enormemente su entendimiento y garantiza que se procede lógicamente en la optimización de cualquier problema.

Este programa principal se ha construido lo más conciso posible, - y la parte importante por destacar es la utilización del parámetro BB, que dependiendo del valor entero que tenga asignado, definirá la función de la subrutina INOUT.

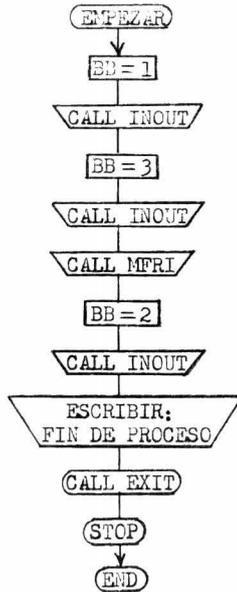
De acuerdo a lo anterior tendremos:

BB=1 : Lectura

BB=2 : Impresión periódica

BB=3 : Impresión al principiar el proceso

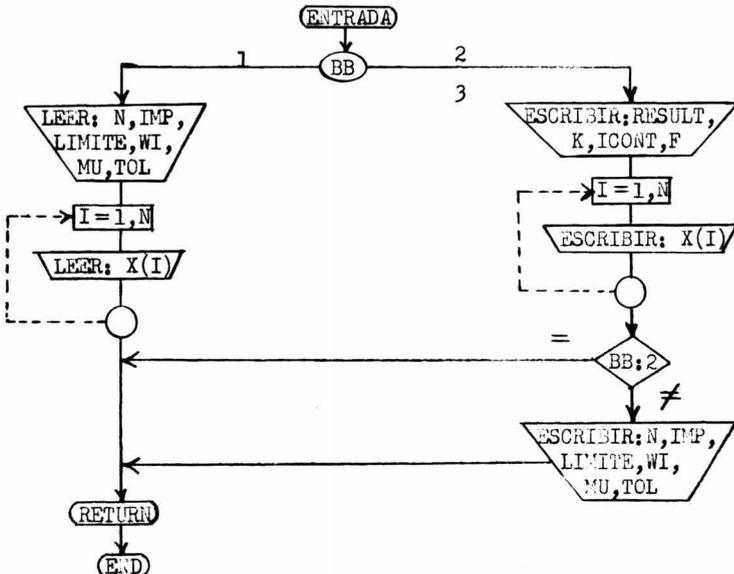
Diagrama de flujo



SUBROUTINA INOUT

La subrutina de lectura e impresión tiene como base de su desarrollo, la opción que representa el valor asignado al parámetro BB, para elegir su comportamiento.

Diagrama de flujo



SUBROUTINA MFRI

De acuerdo con un análisis realizado del artículo de Rbert Fletcher con el fin de poder programarlo, se ha considerado la siguiente secuencia de pasos como la que más facilita su programación, y como una de las que requieren menos tiempo de cálculo al realizar la optimización. Así pues a continuación se enumeran cada uno de estos pasos explicándolos, para después presentar el diagrama de flujo general del algoritmo.

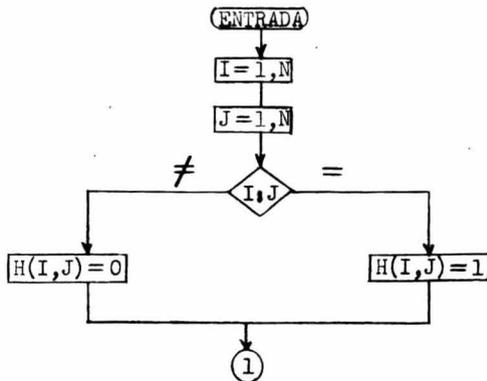
Secuencia lógica propuesta

1) Alimentación de datos y constantes

Por medio de la subrutina INOUT

2) Generación de la matriz de identidad

De acuerdo al artículo para principiar el cálculo se debe escoger que H sea la matriz de identidad, por lo cual se ha propuesto la siguiente rutina para generarla.



3) Establecer los controles necesarios

En el desarrollo del cálculo con el algoritmo es necesario definir ciertos parámetros que nos permitan llevar un control de todo lo que sucede dentro de éste. Los controles establecidos son: (Valor inicial)

Control de iteraciones $K=0$

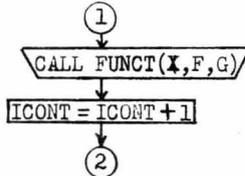
Evaluaciones de función $ICONT=0$

Intervalo de impresión: $WR = IMP$ (IMP es un dato)

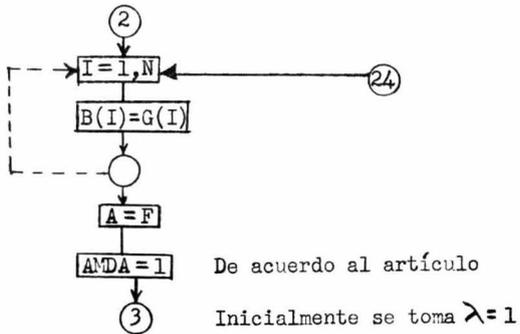
Interpolación cúbica: $P = 1$

Parámetro para indicar que se ha llegado al óptimo: $OK = 0$

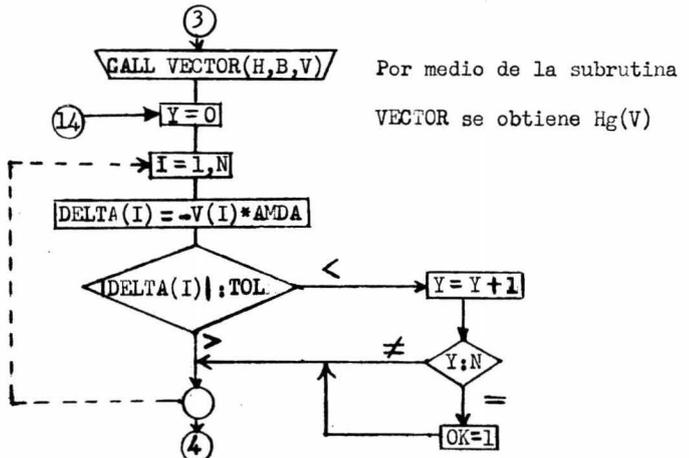
4) Cálculo de la función y derivadas



5) Retención de los valores iniciales de F y G y establecer λ



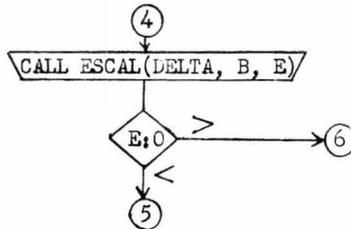
6) Calcular la dirección de descenso (DELTA) y comparar con la tolerancia



DELTA(I) es calculada de acuerdo a $\delta = -\lambda \text{Ng}$ y a continuación se investiga si la δ encontrada es menor que la tolerancia. Cuando todas las δ sean $< \text{TOL}$ el parámetro OK tomará el valor de 1 para indicar que se llegó al resultado y puede detenerse el proceso.

7) Cálculo de la derivada direccional y verificar que sea negativa

La derivada direccional la obtendremos por medio de la subrutina ESCAL que nos dará el producto $\delta^T \text{g}$ (E); el cual siendo negativo nos permitirá seguir el cálculo, de lo contrario se tendrá una salida por errores de redondeo

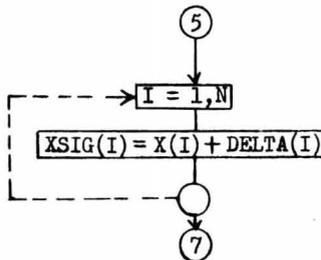


8) Obtención del nuevo vector de variables XSIG (X(K+1))

De acuerdo a la fórmula $\delta = X^* - X$ se obtiene que:

$$X^* = X + \delta$$

que es la relación que se utilizará para calcular XSIG.



9) Cálculo de F y G con XSIG, posible terminación y verificación de que F no varíe en forma imprevista.

I.- Se calculan F y G con XSIG y se incrementa el contador de evaluaciones (ICONT).

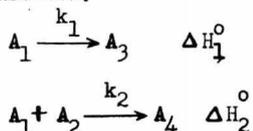
FUNCION OBJETIVO PARA UN REACTOR QUIMICO

Con el fin de ilustrar esta Tesis, se ha tomado como ejemplo el -
diseño de un reactor que se encuentra descrito en el artículo Chemical Reactor Design publicado por G.T. Westbrook y R. Aris en la revista "Industrial and Engineering Chemistry" Volumen 53, No. 3, de marzo de 1961.

El analisis descrito en este artículo consta de dos partes, la primera es el diseño del sistema para el reactor químico y la segunda es el estudio económico para ese sistema. De acuerdo a este analisis, es posible tener una función que represente al proceso, es decir la función objetivo a la cual, se le aplicará el método de Optimización de R. Fletcher con el fin de encontrar un posible máximo y compararlo con los resultados presentados en el artículo.

DEFINICIÓN DEL SISTEMA

Se tiene un sistema de reacciones en el cual las propiedades de --
los reactantes líquidos se asume que sean las mismas del benceno. Hay dos reacciones paralelas de las cuales por lo menos una es exotérmica, las reacciones son las siguientes:



Ambas reacciones son de primer orden y sus ecuaciones de velocidad son:

$$r_1 A_1^* = -k_1 A_1 \quad \text{moles/hr. gal.}$$

$$r_2 A_2^* = -k_2 A_2 \quad \text{moles/hr. gal.}$$

Donde $r_1 A_1^*$ es la velocidad de producción de A_1 en la reacción 1, y $r_2 A_2^*$ es la velocidad de producción de A_2 en la reacción 2.

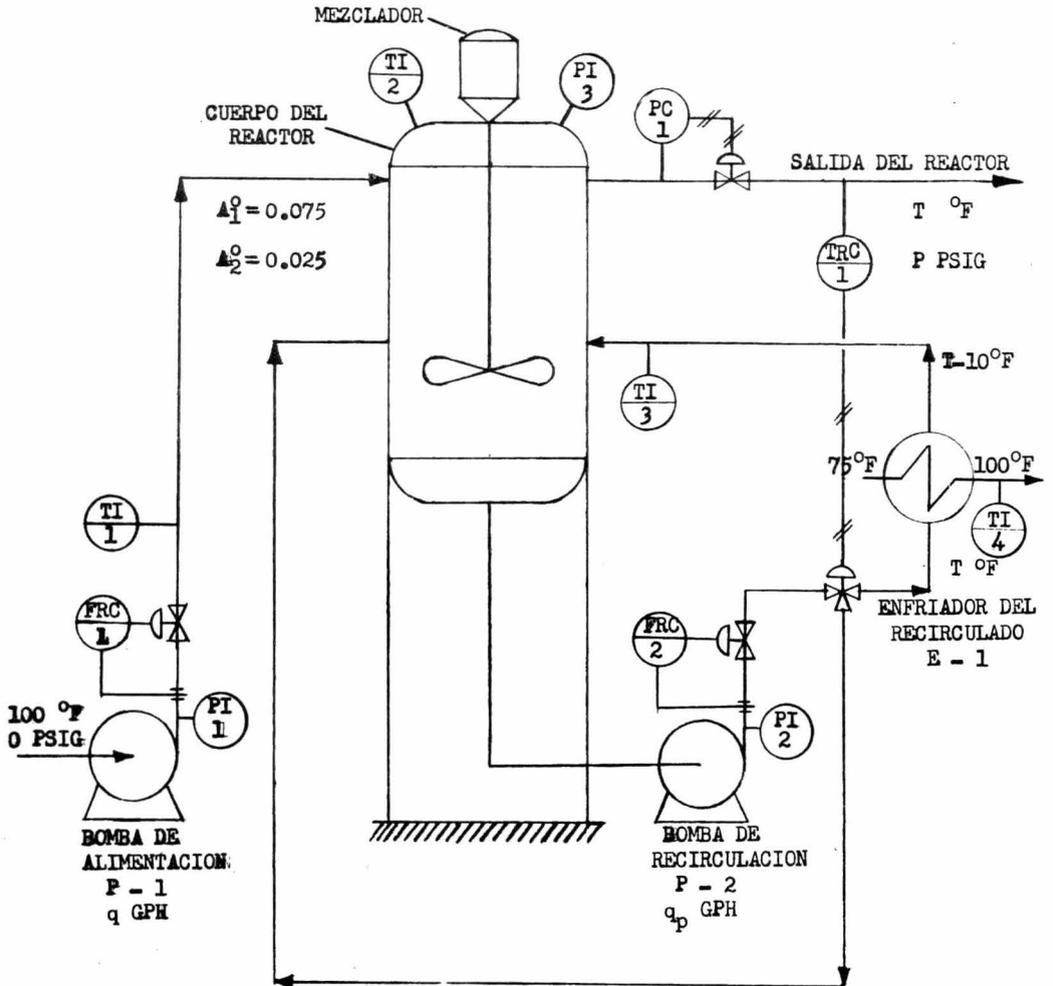
De acuerdo a la fórmula de Arrhenius las constantes de velocidad -
son:

$$k_1 = p_1 e^{-E_1/RT}$$

$$k_2 = p_2 e^{-E_2/RT}$$

Donde T' es la temperatura en grados °R.

Ecuaciones de Balance de materia



SISTEMA DEL REACTOR QUIMICO

$$A_2^0 - A_2 = A_4 - A_4^0$$

$$A_1^0 - A_1 = (A_3 - A_3^0) + (A_4 - A_4^0) \quad (2)$$

Para A_1 , $q(A_1^0 - A_1) + r_1 A_1^* V + r_2 A_2^* V = V(dA_1/dt)$ y

Para A_2 , $q(A_2^0 - A_2) + r_2 A_2^* V = V(dA_2/dt) \quad (3)$

Para este problema, A_3^0 y A_4^0 son cero, y A_1^0 y A_2^0 son constantes conocidas. Aún más para cualquier conjunto de condiciones del reactor (T, q) A_4 , k_1 y k_2 serán constantes.

ECUACION DE BALANCE DE ENERGIA

$$qC_p \rho (T_0 - T) + r_1 A_1^* V (-\Delta H_1^0) + r_2 A_2^* V (-\Delta H_2^0) - U_a (LMTD) = VC_p \rho dT/dt \quad (4)$$

DIMENSIONAMIENTO DEL RECTOR

En el estado estacionario, las ecuaciones 2, 3, y 4 se reducen a:

$$A_1^0 - k_1 \theta A_1 - k_2 A_2 \theta = 0 \quad (5)$$

$$A_2^0 - A_2 - k_2 \theta A_2 = 0 \quad (6)$$

$$y, \quad k_1 A_1 V (-\Delta H_1^0) + k_2 A_2 V (-\Delta H_2^0) = qC_p (T - T_0) + U_a (LMTD) \quad (7)$$

para las condiciones iniciales tomadas al principio,

$$k_2 \theta A_2 = A_2^0 - A_2 = A_4 \quad (8)$$

$$\text{ó} \quad \theta = A_4 / k_2 A_2 = A_4 / (k_2 (A_2^0 - A_4)) \quad (9)$$

de esta ecuación el volumen del reactor puede ser obtenido rápidamente.

Las ecuaciones 5 y 8 pueden ser combinadas para formar,

$$A_1 = \frac{A_1^0 - A_4}{k_1 \theta + 1} \quad (10)$$

CONDICIONES PARA EL DISEÑO DEL CAMBIADOR DE CALOR

- La presión de vapor del benceno está dada por

$$- \quad P = 3.3 \times 10^{-6} T^3 \quad \text{p.s.i.a.} \quad (11)$$

- La presión de diseño debe ser la mayor de 50 y $(25 + P)$ p.s.i.a

$$P_D = 50 \quad T < 200 \text{ } ^\circ\text{F}$$

$$P_D = 25 + 3.3 \times 10^{-6} T^3 \quad T > 200 \text{ } ^\circ\text{F}$$

- La caída de temperatura a través del enfriador es $10 \text{ } ^\circ\text{F}$, y para un valor del calor específico de $C_p = 0.50 \text{ B.t.u./lb. } ^\circ\text{F}$. Un balance de calor a través del enfriador nos dará

$$Q_p = WcC_p T$$

$$Wc = 0.20Q_p$$

- El agua de enfriamiento va de 75° a $100 \text{ } ^\circ\text{F}$.

- Se tiene una velocidad constante del agua de enfriamiento de 3 ft./sec. en los tubos.

Se tiene una masa velocidad de $50 \text{ lb./ft.}^2 \text{ sec.}$ para el medio de reacción en el cuerpo del reactor.

- Un factor de ensuciamiento del agua de $0.002 \text{ (B.t.u./lb. } ^\circ\text{F.ft.}^2)^{-1}$

- Un factor de ensuciamiento medio de la reacción de $0.005 \text{ (B.t.u./lb. } ^\circ\text{F.ft.}^2)^{-1}$

- Los tubos del cambiador son standard de 1 in, 16 BWG, de 16 ft. de largo

DIMENSIONAMIENTO DEL CAMBIADOR

- El calor que será removido por las bombas al rededor del circuito está dado por la expresión:

$$Q_p = Ua(LMTD) = q(k_1 A_1 \theta (-\Delta H_1^0) + A_4 (-\Delta H_2^0) - C_p \rho (T - T_0))$$

- Evaluación del coeficiente de transferencia de calor

$$1/U = \sum_{i=1}^5 R_i$$

donde: R_1 = película de resistencia del lado del tubo 0.00103

R_2 = resistencia de ensuciamiento del lado del tubo 0.00229

R_3 = resistencia de la pared del tubo 0.00022

R_4 = resistencia del ensuciamiento del lado del cuerpo 0.005

R_5 = resistencia de película del lado de la coraza = $1/h_o$

Aquí h_o es dependiente de la temperatura, y puede ser evaluada -- por métodos standard. Evaluando R_5 en términos de temperatura, y sumando--

$$U = 43 + 0.0452T$$

- Cálculo de LMTD (Temperatura Media Logarítmica)

$$LMTD = \frac{(T - 85) - (T - 100)}{\ln((T - 85)/(T - 100))} \quad (12)$$

ó $LMTD = T - 94$

- Cálculo del area de enfriamiento.

Para cualquier conjunto de condiciones (T,q)

$$a = \frac{Qp}{(43 + 0.0452T)(T - 94)} \quad (13)$$

ANALISIS DE COSTOS PARA EL SISTEMA

Costo del recipiente

La longitud del recipiente del reactor fué fijada anteriormente - para una relación l/d de 1.75. Una camisa del recipiente de 10 ft. de largo del mismo espesor y diámetro que el cilindro del reactor y se especificó una corrosión permisible de 1/8 in. La estimación del espesor de la lámina es:

$$t_c = (P_D d / 32,000) + 0.0104 \quad (\text{Paredes})$$

$$t_e = (P_D d / 64,000) + 0.0104 \quad (\text{tapas})$$

Se ha usado un valor de 16,000 p.s.i. para el esfuerzo permisible.

P_D , t_c , y t_e aumentan al incrementarse la temperatura del reactor.

El volumen del reactor es $v = q\theta$, teniéndose el 5% de este volumen en el circuito del sistema, el diámetro del reactor es:

$$d = \sqrt[3]{V/1.70}$$

donde v esta en GPH y V esta en ft^3 .

El peso total del acero en el recipiente es por lo tanto:

$$W = (0.0909d^3 + 0.482d^2)P_D + 36.6d^2 + 160.5d$$

y el costo para el metal será entonces:

$$C_v = 3.50 W^{0.782} \quad \$$$

Costo del aislamiento.

La temperatura del reactor y el area de la superficie del envase - determinan la cantidad de aislamiento necesario. El espesor del aislamiento será:

$$t_1 = 0 \quad T \leq 200^\circ\text{F}$$

$$t_1 = (T/150) - 1 \quad T > 200^\circ\text{F}$$

El costo del aislamiento por unidad de area depende de su espesor y el costo total para este término es:

$$C_i = (17.1 + 0.0133T)d^2 \quad T > 200^\circ\text{F}$$

Estos dos costos, del recipiente y del aislamiento pueden ser -- combinados y en forma global se obtendrá:

Para $T \leq 200^\circ\text{F}$.

$$C_1 = 3.5(4.56d^3 + 60.7d^2 + 160.5d)^{0.782}$$

Para $T > 200^\circ\text{F}$

$$C_1 = 3.5((0.0909d^3 + 0.482d^2)P_D + 36.6d^2 + 160.5d)^{0.782} + (17.2 + 0.0133T)d^2$$

Costos varios del reactor.

Plataformas, cimientos, etc., fueron estimados con esta fórmula:

$$C_2 = 1000 + 100d \quad \$$$

Mezclador del reactor.

La base utilizada para determinar este costo fué una energía constante de entrada (0.05 hp. por unidad de volumen). Así se tendrá una potencia para el mezclador $HP_1 = 0.05V$ de la cual obtendremos un costo dado por la relación siguiente:

$$C3 = 625(HP_1)^{0.30} = 255(V)^{0.30} \quad \$$$

Bomba de recirculación.

El flujo de la recirculación fué fijado como $W_p = 0.25 Q_p$, y un incremento razonable para la presión en esta bomba es 40 p.s.i. Asumiendo una eficiencia constante de 70% se tendrá:

$$HP_2 = 1.88 \times 10^{-5} Q_p$$

Dos diferentes costos fueron usados a causa del alto costo de los empaques para temperaturas arriba de 250°F.

$$C4 = 580(HP_2)^{0.467} \quad \$ \quad T \leq 250^\circ F$$

$$C4 = 922(HP_2)^{0.467} \quad \$ \quad T > 250^\circ F$$

Bomba de alimentación para el reactor.

Esta bomba levanta el gasto del reactor a 50 p.s.i. Asumiendo la misma eficiencia para la bomba y usando la ecuación 11 para P:

$$HP_3 = (6.95 \times 10^{-4} + 4.59 \times 10^{-11} T^3) q$$

Como la alimentación siempre estará 100°F el costo para esta bomba será:

$$C5 = 580(HP_3)^{0.467} \quad \$$$

Enfriador del recirculado.

El área de intercambio de calor está definida en la ecuación 13 - El área por cuerpo fue restringida a 50 a 4000 ft², con una presión mínima de diseño de 150 p.s.i.a. Esta presión no es suficiente arriba de --- 330°F y para este caso se requiere un factor de corrección que está definido como:

$$P_{CF} = 0.962 + 1.68 \times 10^{-9} T^3$$

Los costos aproximados para el cambiador son:

$$C6 = 193 n_2 a^{0.546} \quad T \leq 330^\circ F$$

$$C6 = 193 n_2 P_{CF} a^{0.546} \quad \$ \quad T > 330^\circ F$$

Inversión total para la planta.

El costo total para este proceso será entonces de:

$$C_D = n_1 \sum_{i=1}^6 C_i$$

Un margen extra es necesario para financiar tuberías, instrumentación, instalación, construcciones y contingencias. Se recomienda aumentar el costo del equipo por un factor de 5 veces por cada proceso:

$$I = 5C_D = 5n_1 \sum_{i=1}^6 C_i$$

COSTOS ANUALES DE OPERACION

Cuatro tipos de costos de operación fueron incorporados en este modelo:

Mano de Obra: Este proceso fué arbitrariamente considerado con el uso de 4 hombres-hora por turno a un promedio de 2.52\$ por hora. Con esta base los costos por mano de obra, L, pueden ser 11,000 \$ por año.

Deducciones: Para cuantificar estas deducciones se han hecho -- las consideraciones en por ciento de acuerdo a la inversión total de la planta.

Depreciación	10%
Impuestos	2%
Seguros	1%
Mantenimiento	4%
Suministros	<u>1%</u>
Total.	18%

Por lo tanto las deducciones resultantes se pueden expresar como:

$$B = 0.18 I$$

Servicios: La base utilizada para evaluar los cuatro costos por servicios fue de 1 centavo por Kw-hr de energ. 2 centavos por 1,000,000 de

galones de agua, y un tiempo de operación anual de 82,000 hr. Los costos por servicios serán entonces:

Electricidad.-

Mezclador: $C7 = 3.10 \text{ V; } \$/\text{año/reactor}$

Bomba de alimentación: $C8 = 61.10 \text{ HP}_3; \$/\text{año/reactor}$

Bomba de recirculación : $C9 = 1.15 \times 10^{-3} \text{ Qp; } \$/\text{año/reactor}$

Agua.-

Cambiador de Calor: $C10 = 0.79 \times 10^{-3} \text{ Qp; } \$/\text{hr/reactor}$

El total de costos por servicio será:

$$U_t = n_1 \sum_{i=7}^{10} C_i$$

Materias primas: Aunque la cantidad de producto A_4 producido — será constante, solo la cantidad de uno de los reactantes A_2 será constante también, la otra materia prima A_1 se consumirá en cantidades variables.

La ecuación de costos para este factor es:

$$R = 82000 \text{ q Pa}_1 (A_1^0 - A_1) + 164000 \text{ Pa}_2$$

habiendo sido utilizados estos precios ($\$/\text{mol}$)

$$Pa_1 = 0.05$$

$$Pa_2 = 0.50$$

$$Pa_3 = 0$$

$$Pa_4 = 3.00$$

BENEFICIOS Y RELACION DE GANANCIAS EN EL PROCESO

En principio el valor total de las ventas, S , del producto será de 492,000 \$ por año. Las ganancias netas (π) se toman como el 50% del producto grueso:

$$\pi = 0.50(S - O)$$

donde O corresponde a los costos de operación.

Finalmente la relación de ganancias capitalizadas en por ciento se podrá expresar por medio de la siguiente relación:

$$F = \frac{50(S - 0)}{I} = 100 \times \frac{\Pi}{I}$$

NOMENCLATURA USADA

A_1^0, A^0	Concentraciones de entrada. Moles/gal.
A_2, \dots, A_4	Concentraciones de salida. Moles/gal.
a	Area de enfriamiento. ft ² .
B	Deducciones, \$/año.
C_1, \dots, C_6	Costo del equipo, \$.
C_7, \dots, C_{10}	Costos de servicios, \$/año/reactor.
C_D	Inversión total en equipo, \$/año.
C_v	Costo del recipiente, \$
d	Diámetro del reactor, ft.
F	Relación de ganancias capitalizadas, %
HP ₁	Potencia del mezclador, hp.
HP ₂	Bomba para el circuito, hp.
HP ₃	Bomba de alimentación, hp.
I	Inversión fija para la planta, \$.
l	Longitud del reactor, ft
L	Costos de mano de obra, \$/año.
LMTD	Temperatura media logarítmica, °F.
n_1	Número de procesos (reactores).
n_2	Número de enfriadores, unidad/proceso.
O	Costos de operación totales por año.
P	Presión de operación del reactor, P.S.I.A.
P_{CF}	Factor de corrección para presión.
P_D	Presión de diseño para el reactor, P.S.I.A.
P_{A_k}	Precio del reactante A_k , \$/mole.
II	Ganancias netas anuales, \$.
Q_1	Alimentación al reactor, g.p.h.
Q_2	Gasto de la bomba del circuito, g.p.h.
Q_p	Calor removido en el sistema, b.t.u./hr.
$r_{A_k}^*$	Velocidad de producción de A_k en la reacción correspondiente.

R	Costo de Materias primas, \$/año.
S	Ventas efectuadas, \$/año.
T	Temperatura del reactor, °F.
t_c	Espesor de la pared del reactor, ft.
t_e	Espesor de las tapas, ft.
t_i	Espesor del aislamiento, in.
θ	Tiempo de residencia para el reactor, hr.
U	Coefficiente total de transferencia de calor, B.t.u./hr./°F./ft ²
V	Volumen del reactor, ft ³ .
v	Volumen del reactor, gal.
W	Peso del metal en el reactor, lb.

PROGRAMACION DE LA FUNCION Y DERIVADAS
PARA EL SISTEMA

Al realizar la programación del proceso para el reactor químico, es necesario dividirlo en varias partes para facilitar su tratamiento y comprensión. Las partes que se han considerado como las principales en este proceso son:

- 1) Alimentación de datos
- 2) Fijar las constantes del proceso
- 3) Analisis químico del proceso
- 4) Dimensionamiento del reactor y enfriador
- 5) Analisis de costos
- 6) Obtención del valor de la función
- 7) Cálculo de las derivadas

A continuación se desarrollará el diagrama de flujo de acuerdo a la división propuesta anteriormente.

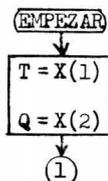
DEFINICION DE VARIABLES

T,Q	: Variables de optimización
P4	: Nivel de producción por hora
C1F	: Concentración inicial del reactivo 1
C2F	: Concentración inicial del reactivo 2
TF	: Temperatura final en el enfriador
TP	: Temperatura absoluta
DH	: Entalpía de la reacción
RO	: Densidad
CP	: Calor específico
N1	: Número de procesos
N2	: Número de enfriadores
K1,K2	: Constantes de velocidad de reacción
C1	: Concentración final del reactivo 1

C2 : Concentración final del reactivo 2
 QP : Calor removido por el enfriador
 VOL : Volumen expresado en GPH
 V : Volumen expresado en ft³
 D : Diámetro del reactor
 A : Area de intercambio de calor
 COST(I) : Vector de valores de los costos
 F : Valor de la función para las T y Q correspondientes

ALIMENTACION DE DATOS

La alimentación de datos se realizará por medio de un vector de variables X(I), cuyos valores de asignarán sucesivamente a T y Q, de la forma que se indica a continuación.



ESTABLECIMIENTO DE CONSTANTES EN EL PROCESO

Los parámetros que se enumeran a continuación son aquellos que mantienen su valor constante a lo largo del cálculo.

I.- La producción por hora será:

$$P_4 = \frac{\text{PRODUCCION ANUAL}}{8,200 \text{ hr/año}} = \frac{164,000}{8,200} = 20 \frac{\text{lb-mol}}{\text{hr}}$$

II.- Concentraciones iniciales:

De acuerdo al artículo de R. Aris las concentraciones iniciales se encuentran definidas como A_1^0 y A_2^0 y para su programación se ha elegido C1F y C2F respectivamente para representarlas.

$$C1F = 0.075$$

$$C2F = 0.025$$

III.- Temperatura máxima y entalpía:

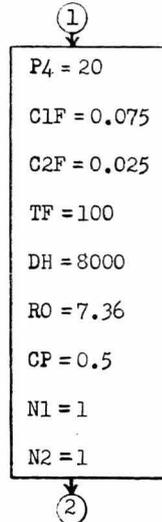
$$TF = 100^{\circ}F$$

$$H = -8,000 \text{ B.T.u/mol}$$

IV.- Propiedades físicas (se tomó como referencia el Benceno):

$$\rho = 7.36 \text{ lb/g.l.}$$

$$C_p = 0.5 \text{ B.t.u/lb.}^{\circ}F$$



ANALISIS QUIMICO DEL SISTEMA

Los datos necesarios para la evaluación de los costos son los siguientes:

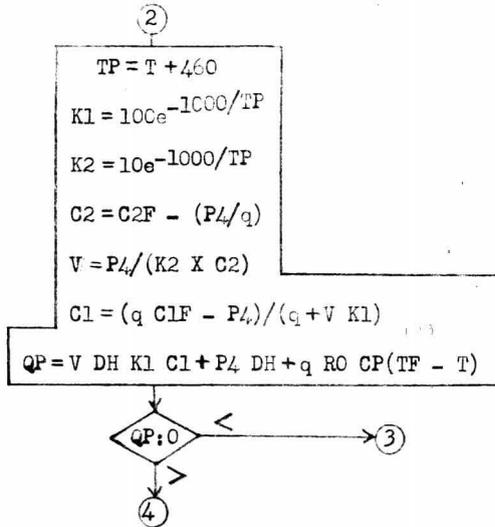
I.- Evaluación de las constantes de velocidad de reacción (K_1, K_2)

II.- Evaluación de las concentraciones finales para los reactivos A_1 y A_2 , expresadas para el fin de la programación como C_1 y C_2 .

III.- Cálculo del calor removido por el enfriador (Q_P). Si Q_P es negativo se saldrá del proceso y se probará con un nuevo conjunto de variables de acuerdo a la estrategia propuesta por el algoritmo.

Si Q_P es positivo se continuará el cálculo.

Diagrama de flujo.-

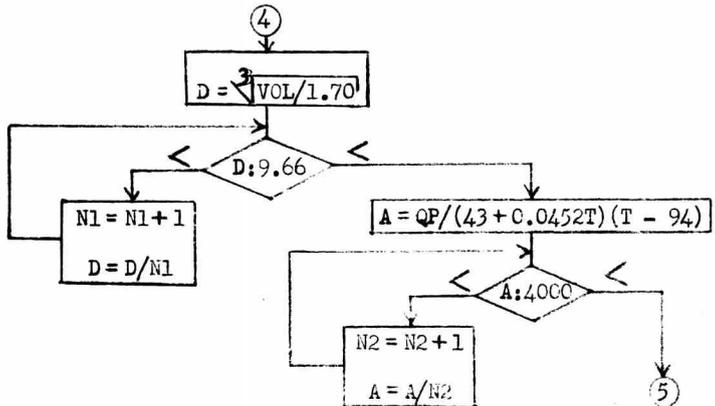


DIMENSIONAMIENTO DEL REACTOR Y ENFRIADOR

I.- Se determinará el diámetro del reactor y en caso de ser mayor de 9.66 ft. se dividirá en partes iguales hasta que sea menor que esa cantidad.

II.- Para el area del enfriador se efectuará la misma prueba, -- pero con respecto a 4000 ft².

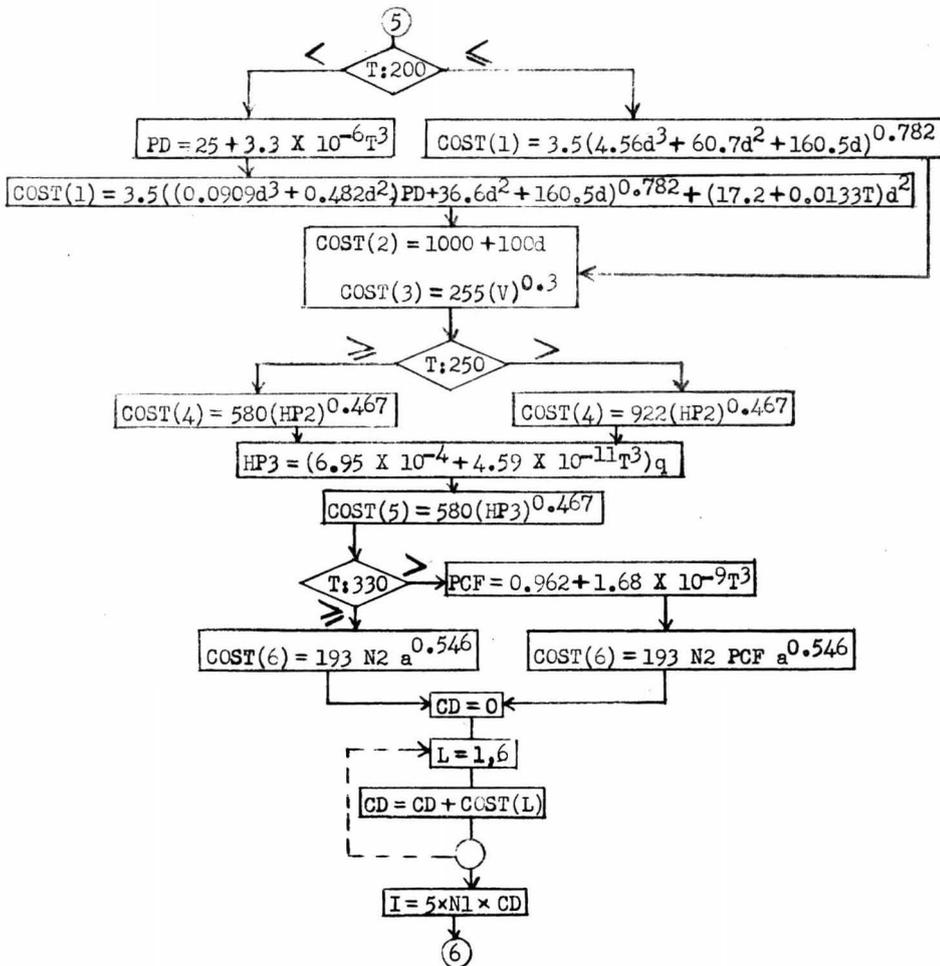
De acuerdo a lo anterior se tendrá:



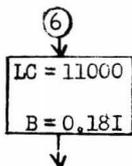
ANALISIS DE COSTOS

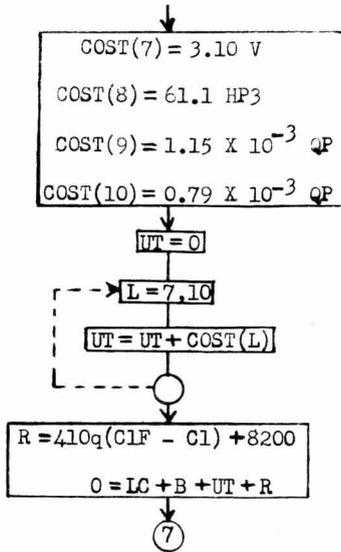
I.- Se determinará la inversión (I) calculando los costos del 1 -

al 6 de acuerdo a las fórmulas propuestas y al rango de temperaturas donde se trabaje.

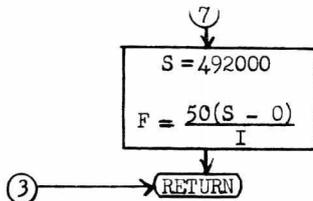


II.- Se determinarán los costos de operación (O), de acuerdo a las relaciones propuestas y a los costos del 7 al 10 correspondientes a los servicios.





III.- Con los datos anteriores y el valor de las ventas se podrá determinar el valor de la función



CALCULO DE LAS DERIVADAS.

El cálculo de las derivadas de la función se ha hecho por medio de un método de derivación numérica, ya que la función del reactor es demasiado complicada para poder efectuar con ella una derivación exacta.

La subrutina que se ha usado para efectuar la derivación numérica, requiere de tres o más valores de la variable a derivar igualmente espaciados, y de los respectivos valores de la función para estos puntos, por lo cual es necesario tener un programa anterior al uso de la derivación numérica, para crear los vectores de valores de argumentos y de valores de la función necesarios.

Programa inicial para la derivación.

Esta rutina que ha sido denominada DER, tendrá la siguiente función.

I.- Tomar una de las variables, manteniendo la otra constante y darle un incremento positivo y otro negativo de la misma magnitud, para obtener tres puntos igualmente espaciados de esta variable, siendo éste el vector de argumentos $XX(I)$

II.- Evaluar la función con la variable que mantiene su valor original y cada uno de los puntos obtenidos anteriormente para la otra variable, para obtener así el vector de valores de la función correspondiente $Y(I)$.

III.- Con los vectores $XX(I)$ y $Y(I)$ se llama el método de derivación numérica, el cual nos dará un vector de derivadas $Z(I)$ que corresponderán a cada uno de los puntos de la variable con respecto a la cual se está derivando.

IV.- Se repite el proceso para la otra variable.

Por las características de este programa, es necesario que éste y los programas para calcular la función y para la derivación numérica, sean subrutinas independientes para facilitar su manejo.

METODO DE DERIVACION NUMERICA

Se ha utilizado la subrutina DGT3 de manual de programas, sección Mathematics-Numerical Differentiation, que tiene el siguiente funcionamiento:

Subrutina DGT3.

Esta subrutina calcula un vector $Z = (Z_1, \dots, Z_n)$ de valores de derivadas, dados los vectores $X = (X_1, \dots, X_n)$ de valores de argumentos y $Y = (Y_1, \dots, Y_n)$ de correspondientes valores de la función.

Comportamiento.

Esta subrutina calcula Z_i de acuerdo a la relación siguiente: -

$$Z_i = \frac{Y_n - Y_{n-1}}{X_n - X_{n-1}} + \frac{Y_n - Y_{n-2}}{X_n - X_{n-2}} - \frac{Y_{n-1} - Y_{n-2}}{X_{n-1} - X_{n-2}}$$

I.- Si $n < 3$, no hay computación y el parámetro de error IER tomará el valor de -1.

II.- Si 2 de los 3 argumentos X_{j-2} , X_{j-1} , X_j son idénticos, --- $j = 3, \dots, n$ la derivación se suspende y el parámetro de error tomará el -- valor j . Sin embargo Z_1, \dots, Z_{j-1} es regresado si $j > 3$. En este caso Z_{j-1} es derivado tratando a X_{j-1} como el punto final del lado derecho de la relación.

III.- Si no hay error, IER toma el valor de Cero al final de la derivación.

PRUEBAS Y RESULTADOS

Al llevar a cabo la optimización de un reactor químico con el Método de Fletcher (MFRI), se han obtenido una serie de resultados, que pueden considerarse como buenos aunque no son totalmente satisfactorios.

A continuación se explicarán los inconvenientes que se presentaron en este trabajo, la forma en que se ha actuado sobre ellos y finalmente la interpretación que se le ha dado a los resultados, de acuerdo a la utilidad que pueda tener este Método en casos similares.

DESCRIPCION DE LA FUNCION.-

La función objetivo que representa al sistema tiene varios aspectos problemáticos para cualquier método de optimización y en especial para un método como el de Fletcher que aunque es efectivo, también es muy minucioso.

El primer problema que presenta la función, es su forma multimodal, con varios óptimos locales cercanos al óptimo verdadero, lo cual dificulta la acción del Método de Fletcher.

Otro problema para el método, es que la función tal y como está planteada es discontinua en varios puntos, que corresponden a las temperaturas de 200, 250 y 330°F. La causa de las discontinuidades es que en estos puntos se elige entre dos ecuaciones para determinar los costos 1,4 y 6 respectivamente. De estos puntos donde la curva es discontinua el que más afecta es el que se encuentra en 200°F ó sea el del costo 1, puesto que se localiza justo antes de llegar a la zona del óptimo, y al detectar el método la discontinuidad, toma la salida de variaciones imprevistas en la función deteniendo en este punto el proceso de optimización.

Otra dificultad que presenta la función es que aproximadamente a partir de la temperatura de 254 a 256°F no está definida siendo esto conse

cuencia de que el calor removido en el sistema (Q_p) resulta ser negativo, - lo cual impide el obtener valores para ciertos costos que involucran a Q_p - en funciones exponenciales.

En resumen la función, resulta bastante difícil de optimizar pues además de que carece de valores a partir de la temperatura antes indicada, - el óptimo está muy cercano a este límite, provocando que los métodos de optimización caigan en la zona indefinida de la función afectando su comportamiento normal.

INFLUENCIA DE LAS VARIABLES.-

De las dos variables de la función, la temperatura es la que más influye en el valor obtenido. El factor más importante para determinar la influencia de cada variable en este tipo de métodos, es la derivada de función con respecto a cada una de ellas, y en este caso la derivada con respecto a la temperatura es aproximadamente 100 veces mayor que la del gasto, característica que es constante a lo largo de casi toda la función, así que al calcular el método el incremento (δ) para los nuevos puntos, el valor correspondiente a la temperatura será considerablemente mayor que el correspondiente al gasto.

Esta influencia tan marcada en la temperatura, es determinante -- para el comportamiento del algoritmo, como se verá en los ejemplos que se presentan más adelante.

COMPORTAMIENTO DEL ALGORITMO.-

El método de Fletcher detecta todas las irregularidades que tiene la función, que ya se han descrito, responde en una forma específica para cada caso y se detiene.

En primer lugar el MTRI avanza rápidamente en la zona donde la -- función aumenta en forma continua, moviéndose en una relación aproximada de 100 a 1 de las temperaturas contra los gastos, es decir que se mueve casi -

exclusivamente en dirección de las temperaturas y puesto que este método - calcule los incrementos para cada variable en forma implícita, toma la relación exacta entre ellas para determinarlos.

Mientras el método obtenga mejores valores de la función en evaluaciones sucesivas, seguirá adelante en el proceso de optimización, manteniendo la misma longitud de paso con la que empezó, y así para el caso que se trata, en pocas evaluaciones llegará a la zona donde no está definida la función, lo cual no tiene previsto el método. Al llegar a esta zona se ha asignado a la función un valor de cero, que en cualquier caso viene a ser mayor que el obtenido anteriormente, puesto que estamos minimizando, lo cual hace que el método retenga el valor anterior y tome una longitud de paso menor ya sea por interpolación cúbica o por convergencia superlineal.

A pesar de que con el valor de $F > 0$, se logra regresar a la zona donde sí existen valores de la función, no se tendrá un comportamiento normal del algoritmo puesto que este paso no se realizó a partir de un valor real, sino de uno designado a priori, y al final de cuentas se tomará una salida ya sea por errores de redondeo ó por variaciones imprevistas de la función antes de llegar al óptimo.

En general este es el comportamiento del algoritmo en todas las corridas que se hicieron y aunque el punto donde se interrumpe el proceso es bastante bueno, no fué posible llegar al óptimo.

RESULTADOS.-

De acuerdo a los problemas que fueron descritos en los párrafos anteriores, se ha tenido que actuar de diferentes maneras, para poder evaluar en forma real el funcionamiento del algoritmo dentro de las limitaciones que presenta el ejemplo utilizado.

En primer lugar se adoptó que el punto donde se detenga el proceso por $RESUL=4$, se ha tomado como una buena aproximación al óptimo en esa

línea de gasto, debido que como ya se dijo las características de la función, solo permiten variaciones apreciables en la temperatura, permaneciendo el gasto casi invariable.

La segunda medida que se tomó, fué el suprimir la discontinuidad que se tenía para la temperatura de 200°F, eliminando la opción de elegir entre las dos ecuaciones que determinan el costo, que son las siguientes:

$$\text{COST}(1) = 3.5(4.56d^3 + 60.7d^2 + 160.5d)^{0.782}$$

y

$$\text{COST}(1) = 3.5((0.0909d^3 + 0.482d^2)PD + 36.6d^2 + 160.5d)^{0.782} + (17.2 + 0.0133T)d^2$$

y de las cuales, se utilizará únicamente la segunda ecuación, en la que -- está considerada la presión de diseño (PD), puesto que en caso de que la -- temperatura sea menor de 200°F el costo quedará un poco sobrado, pero de -- esta temperatura en adelante no habrá ningún problema, siendo esta zona don -- de principalmente se desarrollará todo el proceso de optimización.

Teniendo en cuenta las medidas antes citadas, se procedió a efectuar la optimización de este ejemplo obteniendo los resultados que a continuación se presentan.

I.-CORRIDA NORMAL

Utilizando el algoritmo como originalmente está descrito por --- Fletcher se obtuvieron los siguientes resultados:

Punto de arranque: T = 150°F, Q = 1600GPH

RESULT = 0 K = 0
 ICONT = 0 F = -.35028E 03

VECTOR DE VARIABLES X(I)

X(1) = .15000E+03
 X(2) = .16000E+04

N = 2
EP = 1
LIMITE = 200
WI = 0.1
IU = 0.0001
TOL = 0.00005

RESULT = 0 K = 1
ICONT = 2 F = $-.35624E+03$

VECTOR DE VARIABLES X(I)

X(1) = $.15245E+03$

X(2) = $.15999E+04$

PARA LOS PUNTOS T = 333 Q = 1596 QP ES (-)

RESULT = 0 K = 2
ICONT = 4 F = $-.39876E+03$

VECTOR DE VARIABLES X(I)

X(1) = $.17055E+03$

X(2) = $.15995E+04$

PARA LOS PUNTOS T = 607 Q = 1590 QP ES (-)

RESULT = 0 K = 3
ICONT = 6 F = $-.46555E+03$

VECTOR DE VARIABLES X(I)

X(1) = $.21417E+03$

X(2) = $.15985E+04$

RESULT = 0 K = 4
OCONT = 6 F = $-.48724E+03$

VECTOR DE VARIABLES X(I)

X(1) = $.23482E+03$

X(2) = $.15981E+04$

RESULT = 4 K = 4
ICONT = 7 F = $-.48724E+03$

VECTOR DE VARIABLES X(I)

X(1) = $.23582E+03$

X(2) = $.15981E+04$

FIN DE PROCESO

De acuerdo a los resultados de la primera corrida presentados anteriormente, se pueden destacar en forma importante los siguientes puntos:

I.- Los incrementos en la temperatura aumentan gradualmente en cada iteración, rebasando rápidamente el límite de temperatura establecido, mientras que el gasto tiene variaciones de un 0.03% en promedio, lo cual restringe el método a hacer la optimización para una sola variable.

II.- El incremento en la temperatura crece tanto que en segunda iteración T queda afuera del límite permitido, haciendo que el método regresara y reduzca λ por interpolación cúbica.

III.- El algoritmo funciona normalmente en la siguiente iteración pero inmediatamente vuelve a salirse, teniendo que reducir nuevamente la longitud de paso, ahora por convergencia superlineal a $\lambda = 0.1$.

IV.- Con este nuevo valor de λ , el método mejora una vez más la función y toma finalmente la salida RESULT = 4 correspondiente a errores de redondeo.

El punto de arranque para esta corrida, T = 150 y Q = 1600 fue elegido deliberadamente así para poder comparar el resultado con el óptimo que reporta el artículo de Aris y que se encuentra en T = 250 y Q = 1600.- La comparación se ilustra en la siguiente tabla:

TABLA No. I

	ARRANQUE	PUNTO OBTENIDO	OPTIMO
F	350.28	417.2	525.6
T	150	235.82	250
Q	1600	1598.1	1600

Como se ve, el punto obtenido tiene buena aproximación por lo que respecta a las variables (T,Q), pero no en el valor de la función, aunque ésta haya sido mejorada en forma notable.

CONSIDERACIONES PARA MEJORAR EL OPTIMO OBTENIDO

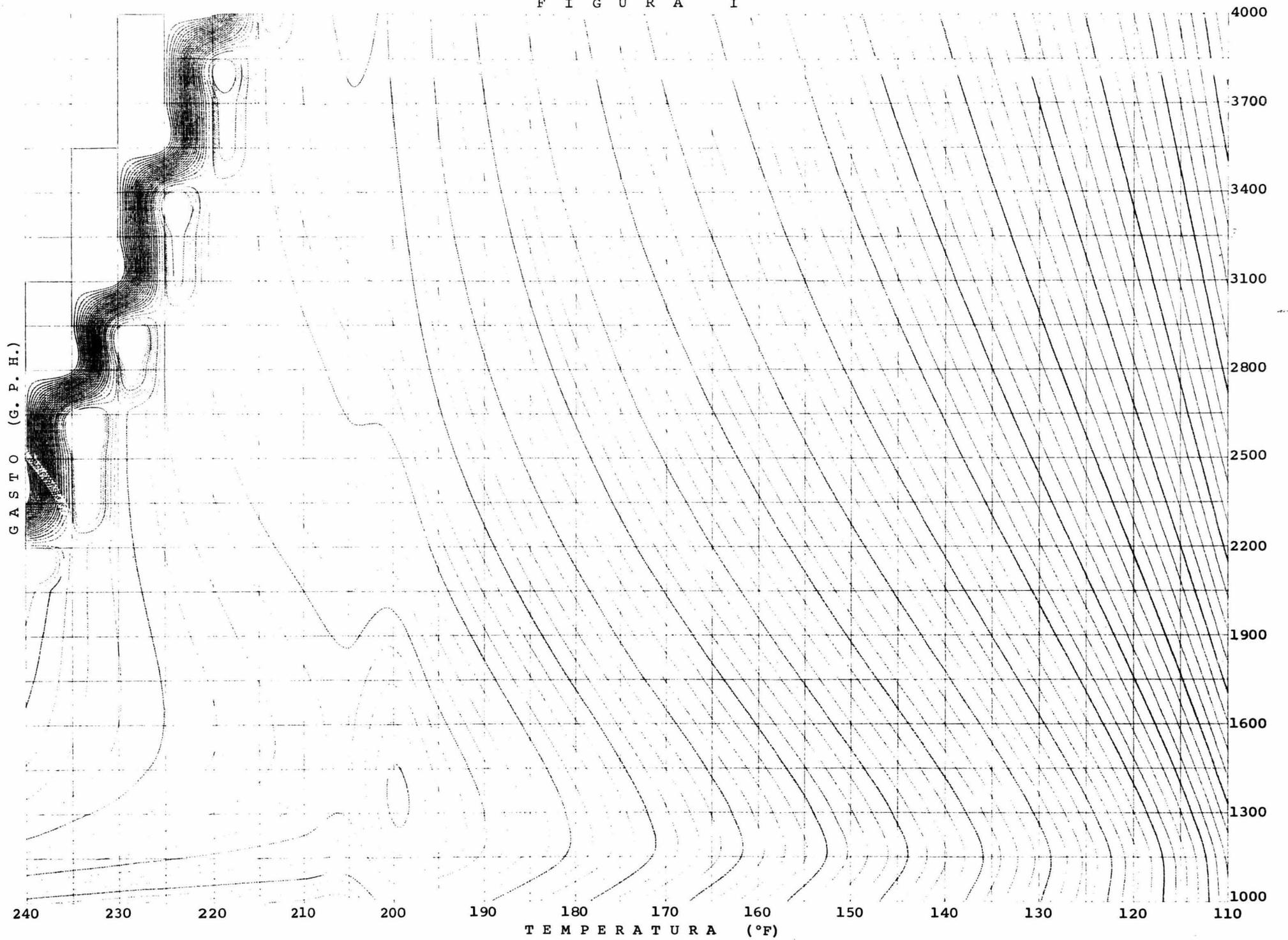
Normalmente en cualquier problema real de optimización, no es posible conocer la gráfica de función, por resultar demasiado costoso además de que esta gráfica solo podría obtenerse para problemas de una o dos variables. En nuestro caso, y con el fin de poder ilustrar este trabajo, se cuenta con la gráfica de la función (Figura I) y se conoce el punto considerado como óptimo, lo cual nos permite ver que el punto presentado en la tabla uno, al cual llega el método, no es satisfactorio.

Así pues, se pensó en la posibilidad de introducir algún cambio que pudiera dar un mejor resultado sin modificar la mecánica original del algoritmo. El único lugar en el que se puede hacer esta modificación teniendo la seguridad de que será significativa y no cambiará al algoritmo sustancialmente, será en la forma de considerar la longitud de paso y con esta base se han propuesto dos opciones que se explican a continuación, presentando los resultados obtenidos en cada caso.

Primera Opción.-

La primera posibilidad que se consideró, fué la de principiar el cálculo con una longitud de paso menor a la que propone Fletcher, para evitar que se determinen incrementos demasiado grandes y mantener a las variables dentro del rango en el que puede trabajar con ellas, aunque esto implique que el método se acerque más lentamente a la zona del óptimo. Al hacer esta corrida se efectuó también otra con el algoritmo en forma original para poder comparar los resultados. A continuación se presentan los cuadros obtenidos para este caso.

F I G U R A I



1) Longitud de paso inicial = 1.0

K	ICONT	λ	Qp	T	Q	F	RESULT
0	0	1.0	+	100	1100		0
2	3	1.0	+	119.86	1099.9	287.35	0
4	5	1.0	+	188.5	1099.7	447.48	0
*	*	1.0	-	469	1099	*	*
6	8	0.58	+	237.84	1099.8	456.54	4

II) Longitud de paso inicial = 0.1

K	ICONT	λ	Qp	T	Q	F	RESULT
0	0	0.1	+	100	1100		0
2	3	0.1	+	101.91	1100	191.06	0
4	5	0.1	+	103.80	1100	206.99	0
6	7	0.1	+	106.19	1099.9	223.5	0
8	9	0.1	+	109.11	1099.9	240.71	0
10	11	0.1	+	112.75	1099.8	258.79	0
12	13	0.1	+	117.35	1099.7	278.05	0
14	15	0.1	+	123.28	1099.6	299.02	0
16	17	0.1	+	131.17	1099.5	322.69	0
18	19	0.1	+	142.32	1099.4	351.15	0
20	21	0.1	+	160.29	1099.2	390.66	0
22	23	0.1	+	215.83	1098.9	443.72	0
23	24	0.1	+	217.05	1099.	444.3	4

(*) Interpolación cúbica.

Los datos presentados anteriormente se pueden resumir de la --

siguiente manera; en la corrida normal ($\lambda = 1.0$), aunque se excedió en una ocasión el rango real de valores para la función, se obtuvo un valor de $F = 456.54$ efectuándose 8 evaluaciones en total, mientras que en la corrida de prueba ($\lambda = 0.1$) no obstante haber evitado el salirse del rango de la función, el valor obtenido fue $F = 444.3$ efectuándose 24 evaluaciones.

El análisis de resultados anterior nos indica que por el camino escogido de reducir el valor inicial de λ , a cambio de haber evitado que la función saliera del rango permisible de valores, no se obtuvo mejoría en F y si en cambio se elevó al triple el número de evaluaciones de la función, lo cual nos hace desechar inmediatamente esta opción.

Segunda Opción.-

La segunda posibilidad que se consideró, fue el reducir la longitud de paso en forma inversa, cuando la λ original genere un incremento δ demasiado grande y el método salga de la región factible.

La forma en que se efectúa esta reducción es la siguiente:

I).- Se principia el cálculo con la longitud de paso original ($\lambda = 1.0$) y se continua el proceso hasta que con alguna δ se obtenga un valor de Q_p negativo (fuera de la zona factible).

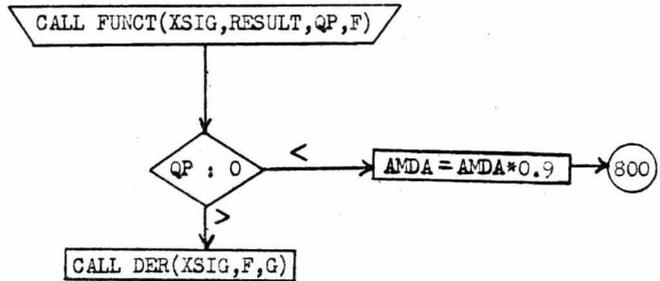
II).- Al ocurrir esto, se conserva el punto anterior y se calcula una λ menor, multiplicando el valor actual de esta por 0.9.

III).- Con el valor de λ obtenido se determinará nuevamente δ y el vector X_{SIG} y a partir de este nuevo punto se evalúa la función otra vez.

Si con estos nuevos puntos se obtiene un valor positivo para Q_p se continuará el cálculo; en caso contrario se usará el mismo crit

rio para reducir λ nuevamente hasta obtener un valor positivo de Q_p . -
 A partir de este punto se continuará el cálculo en forma normal.

El cambio antes descrito se representa en el diagrama de flujo siguiente:



La etiqueta 800 representa la sección donde se calculan
 y XSIG a partir de .

La codificación correspondiente será:

```

DO 14 I=1,N
XSIG(I)=X(I)+DELTA(I)
14 CONTINUE
CALL FUNCT(XSIG,RESULT,QP,F)

IF(QP.GE.0)GO TO 9
AMDA=AMDA*0.9
GO TO 800

9 CALL DER(XSIG,F,G)
ICONT=ICONT+1
etc.
  
```

Los resultados de las pruebas que se hicieron se representan -
 en la tabla número 2.

TABLA No. 2

VARIABLE	ARRANQUE	PUNTO OBTENIDO	
		CORRIDA NORMAL $\lambda = 1.0$	CORRIDA MODIFICADA (REDUCCION INVERSA)
T	150	188.55	255.61
Q	1200	1199.7	1199.2
F	368.7	451.84	491.66
K	0	3	2
ICONT	0	6	3
RESULT	0	4	4

De acuerdo a los resultados presentados en la tabla anterior, se observa que la modificación adoptada mejora en forma notable el resultado obtenido, puesto que en cada una de las variables consideradas como básicas para hacer la comparación se obtienen resultados mucho mejores que en la corrida normal y específicamente en el valor de la función, que se mejora de 451.8 a 491.66 efectuándose menos evaluaciones e iteraciones.

Después de estas pruebas, se eligió finalmente el método con la modificación explicada en la segunda opción para optimizar la función, variando en forma externa y progresiva los valores de los gastos, ya que como la función es multimodal, de la serie de corridas que se obtengan podrá escogerse el mejor punto considerándolo como una buena aproximación al óptimo verdadero.

La forma en que se realizará esta serie de corridas, es posible determinarla gracias a que se cuenta con la gráfica de la función, pues solamente así sabemos con seguridad que se está trabajando en la zona indicada.

A continuación se presentan en la tabla No. 3 los resultados.

TABLA NO. 3

PUNTO DE ARRANQUE			VALOR FINAL			K	ICONT
T	Q	F	T	Q	F		
150	1000	361.6	254.5	1007.3	435.0	2	3
"	1100	368.7	249.3	1101.3	467.6	2	8
"	1200	368.7	255.6	1199.2	491.6	2	3
"	1300	365.6	251.3	1298.3	485.3	2	3
"	1400	361.0	253.4	1397.9	516.7	3	8
"	1500	355.1	251.4	1497.7	313.6	3	8
"	1600	350.3	248.6	1597.7	516.4	2	3
"	1700	344.7	244.5	1697.8	506.8	2	3
"	1800	339.1	240.8	1798.0	499.4	2	3
"	1900	333.7	245.7	1897.9	526.5	3	8
"	2000	328.5	243.6	1998.0	518.8	2	3
"	2100	323.4	240.7	2098.2	507.7	2	3
"	2200	318.6	238.3	2198.3	500.7	2	3
"	2300	313.9	236.4	2298.4	495.9	2	3
"	2400	309.4	235.1	2398.5	493.3	2	3
"	2500	305.1	234.5	2498.5	493.7	2	3
"	2600	300.1	234.7	2598.6	499.9	2	3
"	2700	297.0	227.6	2698.8	472.0	2	3
"	2800	293.2	230.0	2798.8	481.6	2	3
"	2900	289.6	226.0	2898.9	468.2	2	3
"	3000	286.1	224.3	2999.0	463.4	2	3
"	3100	282.8	225.7	3099.0	469.6	2	3
"	3200	279.6	224.5	3199.0	466.6	2	3
"	3300	276.5	225.3	3299.1	473.3	2	3
"	3400	273.5	220.6	3399.2	454.2	2	3
"	3500	270.7	152.4	3500.0	276.6	1	2
"	3600	267.9	152.4	3600.0	273.9	1	2
"	3700	365.3	"	3700.0	271.2	1	2
"	3800	262.7	"	3800.0	268.7	1	2
"	3900	260.3	"	3900.0	266.3	1	2
"	4000	258.0	"	4000.0	263.9	1	2

T O T A L.-

59

107

En resumen los resultados finales son:

Punto de arranque:

T = 150

Q = 1000

F = 361.6

OPTIMO:

F = 526.5

$$T = 245.7$$

$$Q = 1897.9$$

Número de evaluaciones 107

Número de iteraciones 59

De acuerdo a estos resultados y a pesar de los problemas que se presentaron con la función, ha sido mejorado el óptimo que se reporta en el artículo de Aris.

CONCLUSIONES

A lo largo del desarrollo de este trabajo se han presentado situaciones tanto a favor como en contra del comportamiento que se había -- considerado inicialmente como probable para el algoritmo, lo cual naturalmente ha provocado el interés en analizar estas situaciones, obteniéndose conclusiones importantes para cada uno de los casos, las cuales se enuncian a continuación.

1).-En primer lugar y en forma muy importante, se puede concluir que todo proceso de optimización debe iniciarse investigando cual es el tipo de la función con la que se va a trabajar y de acuerdo a esta, seleccionar el algoritmo más indicado.

En nuestro caso, la función elegida nos limita en cierto modo -- el conocer en forma real la capacidad del algoritmo de Fletcher, puesto -- que como ya se ha dicho en capítulos anteriores, su forma multimodal y -- el hecho de tener discontinuidades no permitió en ninguno de los casos -- que el método finalice el proceso con $RESULT = 1$, es decir que llegue al óptimo, tomando siempre la salida $RESULT = 4$, con lo que se demuestra que no fué el método adecuado para optimizar esta función.

Se efectuó la optimización de esta función con un método apropiado para ella, que es el método de Hookey Jeeves, y se obtuvieron los siguientes resultados:

PUNTO DE ARRANQUE			OPTIMO			K	ICONT
T	Q	F	T	Q	F		
100	1000	112.5	245	1973.8	538.6	37	124
100	2000	132.91	252.5	1434.6	537.2	36	122
200	1500	453.48	245.0	1973.8	538.6	33	109

Los óptimos encontrados con el método de Hookey y Jeeves son mejores que los que se obtuvieron con el método de Fletcher, para esto se in-

dica necesariamente que el Hookey Jeeves sea mejor que el Fletcher, sino que en este caso es más adecuado para trabajar con la función que se tomó como ejemplo.

II).- Otro aspecto importante para comentar, es el hecho de que el método de Fletcher haya confirmado su comportamiento en relación a efectuar muy pocas evaluaciones de función por corrida, como lo demuestran -- los resultados presentados en el cuadro del inciso anterior, pues a pesar de haberse hecho una optimización forzada provocando la variación de los gastos por fuera del método en un rango bastante amplio (100-400GPH), el número total de evaluaciones de función noexcede en ningún caso a cualquiera de las corridas hechas con el método de Hookey Jeeves, lo cual hace muy atractivo al método de Fletcher para el caso de trajar con funciones que ocupen mucho tiempo de máquina al evaluarlas, pero que por supuesto sean factibles de optimizarse con este método.

III).- Finalmente y en resumen, podemos concluir que se ha trabajado con un algoritmo que al reunir las características principales de un buen método de optimización y además poseer notables ventajas sobre -- algunos métodos comunmente usados, constituyen un instrumento de optimización muy útil para atacar problemas ya sea en el campo técnico, económico, social o cualquier otro que lo amerite, si se utiliza con conocimiento y en forma adecuada.

Así pues, al concluir este trabajo, se tiene la certeza de haber obtenido resultados positivos, a pesar de los problemas que se presentaron, pero que a su vez provocaron el deseo de tener un mayor conocimiento del campo en el que se trabajó y dedicar un estudio más profundo a la OPTIMIZACION.

B I B L I O G R A F I A

-- "ITERATIVE METHODS FOR NONLINEAR OPTIMIZATION PROBLEMS"

S.L.S. Jacoby
J.S. Kowalik
J.T. Pizzo
Prentice-Hall. Inc.

-- "ELEMENTARY CHEMICAL REACTOR ANALYSIS"

Rutherford Aris.
Prentice-Hall. Inc.

-- "A NEW APPROACH TO VARIABLE METRIC ALGORITHMS"

R. Fletcher
The Comp. J. Vol. 13 No. 3
Agosto 1970

-- "CHEMICAL REACTOR DESIGN"

G.T. Westbrook and R. Aris
Ind. and Engineering Chem. Vol. 53 No. 3
Marzo 1961.

-- "A RAPIDLY CONVERGENT DESCENT METHOD FOR MINIMIZATION"

Fletcher, R. and Powell, M.J.D.
The Comp. J. Vol. 6 163
1963

-- "SUBROUTINES FMFP AND DFMP"

IBM - System/360
Scientific Subroutine Package (360A-C11-03X)
Version II, Section Mathematics

C	SUBROUTINA MFRI	MFRI 10
C	DEL ARTICULO:	MFRI 20
C	"A NEW APPROACH TO VARIABLE METRIC ALGORITHMS"	MFRI 30
C	R. FLETCHER	MFRI 40
C	THE COMPUTER JOURNAL. VOL. 13, NUM. 3, AGOSTO DE 1970	MFRI 50
C		MFRI 60
	SUBROUTINE MFRI(X,N,IMP,LIMITE,WI,MU,TOL,RESULT,K,ICONT,F)	MFRI 80
	DIMENSION X(10),XSIG(10),G(10),B(10),DELTA(10),GAMA(10),V(10),	MFRI 90
1	VT(10)	MFRI 100
	DIMENSION H(10,10),HSIG(10,10),M(10,10),Z(10,10),ZT(10,10),	MFRI 110
1	POR(10,10),C(10,10),VZ(10,10)	MFRI 120
	DOUBLE PRECISION X,XSIG,F,A,G,B,M,H,HSIG,DELTA,GAMA,Z,ZT,POR,	MFRI 130
1	C,VZ,V,VT,DF,DY,W,T,D,DV,R,DVM,E	MFRI 140
	REAL M,MU	MFRI 150
C		MFRI 160
C	GENERACION DE LA MATRIZ DE IDENTIDAD	MFRI 170
	DO 10 I=1,N	MFRI 180
	DO 11 J=1,N	MFRI 190
	IF(I.EQ.J)GO TO 100	MFRI 200
	H(I,J)=0.0	MFRI 210
	GO TO 11	MFRI 220
100	H(I,J)=1.0	MFRI 230
11	CONTINUE	MFRI 240
10	CONTINUE	MFRI 250
C		MFRI 260
C	ESTABLECIMIENTO DE CONTROLES PARA ITERACIONES, EVALUACIONES DE	MFRI 270
C	FUNCION, INTERVALO DE IMPRESION E INTERPOLACION CUBICA	MFRI 280
	K=0	MFRI 290
	ICONT=0	MFRI 300
	WR=INP	MFRI 310
	P=1	MFRI 320
	OK=0	MFRI 330
C		MFRI 340
C	CALCULO DE LA FUNCION Y DERIVADAS	MFRI 350
	CALL FUNCT(X,F,G)	MFRI 360
	ICONT=ICONT+1	MFRI 370
C		MFRI 380
C	RETENCION DE LOS VALORES INICIALES DE F Y G	MFRI 390
700	DO 12 I=1,N	MFRI 400
	B(I)=G(I)	MFRI 410
12	CONTINUE	MFRI 420
	A=F	MFRI 430
	AMDA=1.0	MFRI 440
C		MFRI 450
C	CALCULO DE LA DIRECCION DE DECENSO (DELTA) Y COMPARACION CON LA	MFRI 460
C	TOLERANCIA	MFRI 470
	CALL VECTOR(H,B,V)	MFRI 480
800	Y=0	MFRI 490
	DO 13 I=1,N	MFRI 500
	DELTA(I)=-V(I)*AMDA	MFRI 510
	IF(DABS(DELTA(I)).GT.TOL)GO TO 13	MFRI 520
	Y=Y+1	MFRI 530
	IF(Y.EQ.N)OK=1	MFRI 540
13	CONTINUE	MFRI 550
C		MFRI 560
C	CALCULO DE LA DERIVADA DIRECCIONAL Y VERIFICACION DE QUE SEA (-)	MFRI 570
	CALL ESCAL(DELTA,B,E)	MFRI 580

	IF(E.GT.0)GO TO 300	MFRI 590
C		MFRI 600
C	OBTENCION DEL NUEVO VECTOR DE VARIABLES X(K+1)	MFRI 610
	DO 14 I=1,N	MFRI 620
	XSIG(I)=X(I)+DELTA(I)	MFRI 630
	14 CONTINUE	MFRI 640
G		MFRI 650
C	CALCULO DE F Y G CON XSIG Y DE DF Y GAMA Y VERIFICACION DE QUE	MFRI 660
C	NO HAYA VARIACIONES IMPREVISTAS DE LA FUNCION EN LA ITERACION	MFRI 670
C	CORRESPONDIENTE	MFRI 680
	CALL FUNCT(XSIG,F,G)	MFRI 690
	ICONT=ICONT+1	MFRI 700
	IF(OK.EQ.1)GO TO 650	MFRI 710
	CALL ESCAL(DELTA,G,E)	MFRI 720
	DF=F-A	MFRI 730
	IF(DF.GT.0.AND.E.LT.0)GO TO 400	MFRI 740
	DO 15 I=1,N	MFRI 750
	GAMA(I)=G(I)-B(I)	MFRI 760
	15 CONTINUE	MFRI 770
C		MFRI 780
C	COMPROBACION DE QUE LA REDUCCION EN F SEA SIGNIFICATIVA Y ELEC-	MFRI 790
C	CION ENTRE LA INTERPOLACION CUBICA O LA CONVERGENCIA SUPERLINEAL	MFRI 800
	CALL ESCAL(B,DELTA,E)	MFRI 810
	Q=DF/E	MFRI 820
	IF(Q.GT.MU)GO TO 120	MFRI 830
	IF(P.EQ.0)GO TO 130	MFRI 840
C		MFRI 850
C	INTERPOLACION CUBICA	MFRI 860
	DY=E	MFRI 870
	CALL ESCAL(G,DELA,E)	MFRI 880
	OZ=3*(A-F)/AMDA+E+DY	MFRI 890
	W=OZ**2-E*DY	MFRI 900
	W=DSQRT(W)	MFRI 910
	ALFA=AMDA*(1-(E+W-OZ)/(E-DY+2*W))	MFRI 920
	AMDA=ALFA	MFRI 930
	IF(AMDA.GT.WI)GO TO 800	MFRI 940
	P=0	MFRI 950
C		MFRI 960
C	CONVERGENCIA SUPERLINEAL	MFRI 970
	S=1	MFRI 980
	150 AMDA=WI**S	MFRI 990
	GO TO 800	MFRI1000
	130 S=S+1	MFRI1010
	GO TO 150	MFRI1020
C		MFRI1030
C	CALCULO DE PARAMETROS COMUNES A LAS ECUACIONES 1 Y 5 PARA CALCU-	MFRI1040
C	LAR HSIG	MFRI1050
	120 CALL ESCAL(DELTA,GAMA,E)	MFRI1060
	T=E	MFRI1070
	DO 27 I=1,N	MFRI1080
	VT(I)=0.0	MFRI1090
	DO 28 J=1,N	MFRI1100
	VT(I)=VT(I)+GAMA(J)*H(J,I)	MFRI1110
	28 CONTINUE	MFRI1120
	27 CONTINUE	MFRI1130
	CALL ESCAL(VT,GAMA,E)	MFRI1140
	D=E	MFRI1150

	DV=D/T	MFRI1160
	DO 16 I=1,N	MFRI1170
	DO 17 J=1,N	MFRI1180
	ZT(I,J)=DELTA(I)*DELTA(J)	MFRI1190
	ZT(I,J)=ZT(I,J)/T	MFRI1200
17	CONTINUE	MFRI1210
16	CONTINUE	MFRI1220
	CALL VECTOR(H,GAMA,V)	MFRI1230
C		MFRI1240
C	ELECCION DE LA ECUACION	MFRI1250
	IF(T.GE.D)GO TO 500	MFRI1260
C		MFRI1270
C	CALCULO CON LA ECUACION 1	MFRI1280
	R=1.0/D	MFRI1290
	DO 18 I=1,N	MFRI1300
	DO 19 J=1,N	MFRI1310
	POR(I,J)=V(I)*VT(J)	MFRI1320
	POR(I,J)=POR(I,J)*R	MFRI1330
	HSIG(I,J)=H(I,J)+ZT(I,J)-POR(I,J)	MFRI1340
19	CONTINUE	MFRI1350
18	CONTINUE	MFRI1360
	GO TO 600	MFRI1370
C		MFRI1380
C	CALCULO CON LA ECUACION 5	MFRI1390
500	DO 21 I=1,N	MFRI1400
	DO 21 J=1,N	MFRI1410
	Z(I,J)=DELTA(I)*GAMA(J)	MFRI1420
	M(I,J)=V(I)*DELA(J)	MFRI1430
21	CONTINUE	MFRI1440
22	CONTINUE	MFRI1450
	DO 30 L=1,N	MFRI1460
	DO 40 I=1,N	MFRI1470
	C(L,I)=0.0	MFRI1480
	DO 50 J=1,N	MFRI1490
	C(L,I)=C(L,I)+Z(L,J)*H(J,I)	MFRI1500
50	CONTINUE	MFRI1510
40	CONTINUE	MFRI1520
30	CONTINUE	MFRI1530
	DVM=1.0+DV	MFRI1540
	R=1.0/T	MFRI1560
	DO 22 I=1,N	MFRI1570
	DO 23 J=1,N	MFRI1580
	Z(I,J)=C(I,J)*R	MFRI1590
	POR(I,J)=M(I,J)*R	MFRI1600
	VZ(I,J)=ZT(I,J)*DVM	MFRI1610
	HSIG(I,J)=H(I,J)-Z(I,J)-POR(I,J)+VZ(I,J)	MFRI1620
23	CONTINUE	MFRI1630
22	CONTINUE	MFRI1640
C		MFRI1650
C	INCREMENTO EN LA ITERACION Y COMPARACION CON EL LIMITE	MFRI1660
600	K=K+1	MFRI1670
	IF(K.EQ.LIMITE)GO TO 900	MFRI1680
	S=0	MFRI1690
C		MFRI1700
C	RETENCION DE LOS NUEVOS VALORES DE X Y H PARA CONTINUAR EL CALCULO	MFRI1710
	DO 24 I=1,N	MFRI1720
	DO 25 J=1,N	MFRI1730
	H(I,J)=HSIG(I,J)	MFRI1740

25	CONTINUE	MFR11750
24	CONTINUE	MFR11760
650	DO 26 I=1,N	MFR11770
	X(I)=XSIG(I)	MFR11780
26	CONTINUE	MFR11790
	IF(OK.EQ.1)GO TO 200	MFR11800
C		MFR11810
C	COMPARACION CON EL INTERVALO PARA ESCRIBIR RESULTADOS	MFR11820
	IF(K.NE.WR)GO TO 700	MFR11830
	WR=WR+IMP	MFR11840
	BB=2	MFR11850
	CALL INOUT(BB,N,IMP,LIMITE,WI,MU,TOL,X,RESULT,K,ICONT,F)	MFR11860
	GO TO 700	MFR11870
C		MFR11880
C	ESTABLECIMIENTO DEL RESULTADO OBTENIDO E IMPRESION	MFR11890
200	RESULT=1	MFR11900
	GO TO 999	MFR11910
300	RESULT=4	MFR11920
	GO TO 999	MFR11930
400	RESULT=3	MFR11940
	GO TO 999	MFR11950
900	RESULT=2	MFR11960
999	RETURN	MFR11970
	END	MFR11980

SUBROUTINA VECTOR

C		VECT 10
	SUBROUTINE VECTOR(A,B,V)	VECT 20
	DIMENSION A(10,10),B(10),V(10)	VECT 30
	DOUBLE PRECISION A,B,V	VECT 40
	COMMON N	VECT 50
	DO 10 I=1,N	VECT 60
	V(I)=0.0	VECT 70
	DO 20 J=1,N	VECT 80
	V(I)=V(I)+A(I,J)*B(J)	VECT 90
20	CONTINUE	VECT 100
10	CONTINUE	VECT 110
	RETURN	VECT 120
	END	VECT 130

SUBROUTINA ESCAL

C		ESCA 10
	SUBROUTINE ESCAL(A,B,E)	ESCA 20
	DIMENSION A(10),B(10)	ESCA 30
	DOUBLE PRECISION A,B,E	ESCA 40
	COMMON N	ESCA 50
	E=0.0	ESCA 60
	DO 10 I=1,N	ESCA 70
	E=E+A(I)*B(I)	ESCA 80
10	CONTINUE	ESCA 90
	RETURN	ESCA 100
	END	ESCA 110

SUBROUTINA FUNCT PARA EL PROCESO

C		FUNC 10
	SUBROUTINE FUNCT(X,F,VOL,D,A,N1,N2)	FUNC 20
	DIMENSION X(10),COST(10)	FUNC 30
	DOUBLE PRECISION X,T,Q,COST,F,A,D	FUNC 40
	REAL K1,K2,I,O	FUNC 50
C		FUNC 60
C	ALIMENTACION DE DATOS	FUNC 70
	T=X(1)	FUNC 80
	Q=X(2)	FUNC 90
C		FUNC 100
C	ESTABLECIMIENTO DE CONSTANTES DEL PROCESO	FUNC 110
	P4=20	FUNC 120
	C1F=0.075	FUNC 130
	C2F=0.025	FUNC 140
	TF=100	FUNC 150
	DH=8000	FUNC 160
	RO=7.36	FUNC 170
	N1=1	FUNC 180
	N2=1	FUNC 190
	CP=0.50	FUNC 200
C		FUNC 210
C	ANALISIS QUIMICO DEL SISTEMA	FUNC 220
	TP=T+460	FUNC 230
	K1=100*EXP(-1000/TP)	FUNC 240
	K2=10*EXP(-1000/TP)	FUNC 250
	C2=C2F-(P4/Q)	FUNC 260
	VOL=P4/(K2*C2)	FUNC 270
	C1=(Q*C1F-P4)/(Q+VOL*K1)	FUNC 280
	QP=VOL*DH*K1*C1+P4*DH+Q*RO*CP*(TF-T)	FUNC 290
	IF(QP.GE.0)GO TO 40	FUNC 300
	WRITE(6,55)T,Q	FUNC 310
55	FORMAT(1H ,10X,20HPARA LOS PUNTOS T = ,I4,3X,4HQ = ,I4,3X,	FUNC 320
1	9HQP ES (-)//)	FUNC 330
	GO TO 5	FUNC 340
C		FUNC 350
C	DIMENSIONAMIENTO DEL REACTOR Y ENFRIADOR	FUNC 360
40	V=VOL*0.13368	FUNC 370
	D=(V/1.70)**0.333	FUNC 380
50	IF(D.LT.9.66)GO TO 60	FUNC 390
	N1=N1+1	FUNC 400
	D=D/N1	FUNC 410
	GO TO 50	FUNC 420
60	A=QP/((43+0.0452*T)*(T-94))	FUNC 430
70	IF(A.LT.4000)GO TO 80	FUNC 440
	N2=N2+1	FUNC 450
	A=A/N2	FUNC 460
	GO TO 70	FUNC 470
80	IF(A.LT.50)A=50	FUNC 480
C		FUNC 490
C	ANALISIS DE COSTOS	FUNC 500
	PD=25+(T**3)*3.3E-6	FUNC 510
	COST(1)=3.5*((0.0909*D**3+0.482*D**2)*PD+36.6*D**2+160.5*D)**	FUNC 520
1	0.782)+(17.2+0.0133*T)*(D**2)	FUNC 530
	GO TO 100	FUNC 540
90	COST(1)=3.5*((4.56*D**3+60.7*D**2+160.5*D)**0.782)	FUNC 550
100	CCOST(2)=1000+100*D	FUNC 560

	COST(3)=255*(V**0.3)	FUNC 570
	HP2=QP*1.88E-5	FUNC 580
	IF(T.LE.250)GO TO 110	FUNC 590
	COST(4)=922*(HP2**0.467)	FUNC 600
	GO TO 120	FUNC 610
110	COST(4)=580*(HP2**0.467)	FUNC 620
120	HP3=Q*(6.95E-4+(T**3)*4.59E-11)	FUNC 630
	COST(5)=580*(HP3**0.467)	FUNC 640
	IF(T.LE.330)GO 130	FUNC 650
	PCF=0.962+(T**3)*1.68E-9	FUNC 660
	COST(6)=193*N2*PCF*(A**0.546)	FUNC 670
	GO TO 140	FUNC 680
130	COST(6)=193*N2*(A**0.546)	FUNC 690
140	CD=0	FUNC 700
	DO 6 I=1,6	FUNC 710
	CD=CD+COST(L)	FUNC 720
6	CONTINUE	FUNC 730
	I=5*N1*CD	FUNC 740
	LC=11000	FUNC 750
	B=0.18*I	FUNC 760
	COST(7)=3.10*V	FUNC 770
	COST(8)=61.10*HP3	FUNC 780
	COST(9)=0.00115*QP	FUNC 790
	COST(10)=QP*0.79E-3	FUNC 800
	UT=0	FUNC 810
	DO 7 L=7,10	FUNC 820
	UT=UT+COST(L)	FUNC 830
7	CONTINUE	FUNC 840
	R=410*Q*(C1F-C1)+8200	FUNC 850
	O=LC+B+UT+R	FUNC 860
		FUNC 870
C	OBTENCION DEL VALOR DE LA FUNCION	FUNC 880
	S=492000	FUNC 890
	PI=0.50*(S-C)	FUNC 900
	F=100*PI/I	FUNC 910
5	RETURN	FUNC 920
	END	FUNC 930

DERIVACION NUMERICA

		DER	10
	SUBROUTINE DER(X,F,G)	DER	20
	DIMENSION X(10),S(10),XX(10),Y(10),Z(10),G(10)	DER	30
	DOUBLE PRECISION X,A,F,G,D	DER	40
	H=0.01	DER	50
	NDIM=3	DER	60
	Y(2)=F	DER	70
	DO 5 J=1,2	DER	80
	XX(2)=X(J)	DER	90
	X(J)=S(J)-H	DER	100
	CALL FUNCT(X,F,VOL,D,A,N1,N2)	DER	110
	XX(1)=X(J)	DER	120
	Y(1)=F	DER	130
	X(J)=S(J)+H	DER	140
	CALL FUNCT(X,F,VOL,D,A,N1,N2)	DER	150
	XX(3)=X(J)	DER	160
	Y(3)=F	DER	170
	X(J)=S(J)	DER	180
	CALL DGT3(XX,Y,Z,NDIM,IER)	DER	190
	G(J)=Z(2)	DER	200
5	CONTINUE	DER	210
	F=Y(2)	DER	220
	RETURN	DER	230
	END	DER	240
		DGT3	10
	SUBROUTINE DGT3(X,Y,Z,NDIM,IER)	DGT3	20
	DIMENSION X(10),Y(10),Z(10)	DGT3	30
	IER=-1	DGT3	40
	IF(NDIM-3)8,1,1	DGT3	50
1	A=X(1)	DGT3	60
	B=Y(1)	DGT3	70
	I=2	DGT3	80
	DY2=X(2)-A	DGT3	90
	IF(DY2)2,9,2	DGT3	100
2	DY2=(Y(2)-B)/DY2	DGT3	110
	DO 6 I=3,NDIM	DGT3	120
	A=X(I)-A	DGT3	130
	IF(A)3,9,3	DGT3	140
3	A=(Y(I)-B)/A	DGT3	150
	B=X(I)-X(I-1)	DGT3	160
	IF(B)4,9,4	DGT3	170
4	DY1=DY2	DGT3	180
	DY2=(Y(I)-Y(I-1))/B	DGT3	190
	DY3=A	DGT3	200
	A=X(I-1)	DGT3	210
	B=Y(I-1)	DGT3	220
	IF(I-3)5,5,6	DGT3	230
5	Z(1)=DY1+DY3-DY2	DGT3	240
6	Z(I-1)=DY1+DY2-DY3	DGT3	250
	IER=0	DGT3	260
	I=NDIM	DGT3	270
7	Z(I)=DY2+DY3-DY1	DGT3	280
8	RETURN	DGT3	290
9	IER=I	DGT3	300
	I=I-1	DGT3	310
	IF(I-2)8,8,7	DGT3	320
	END	DGT3	330

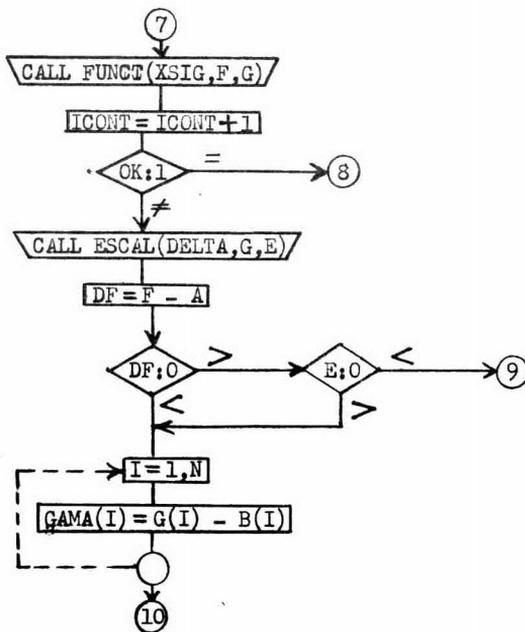
II.- Los valores de F, G y XSIG serán el resultado en caso de estar en el óptimo, por lo tanto si $OK=1$ se terminará el proceso.

III.- Por medio de la subrutina ESCAL se determina $\delta^T g(E)$ y se encuentra la diferencia de F^* y F (DF) si estos dos valores no cumplen: -

$$\delta^T g^* < 0; DF > 0$$

se podrá seguir el cálculo, de lo contrario se tendrá una salida por error en la programación de gradientes.

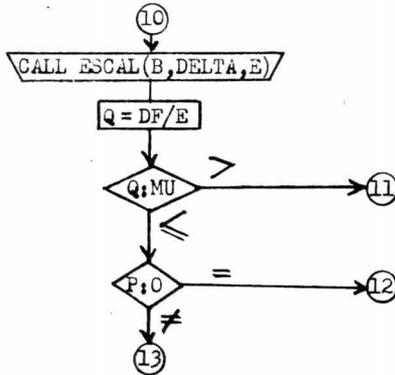
IV.- Se calcula por último la diferencia de gradientes (GAMA)



10) Verificación de que la reducción en F sea significativa

Se calculará con la subrutina ESCAL el producto $g^T \delta(E)$ y de acuerdo a la relación $Q = \Delta F / g^T \delta$, si $Q > \mu$ la reducción será aceptada y si $Q \leq \mu$, se irá a una reducción del valor de λ ya sea, por interpolación cúbica o por convergencia superlineal (para reducir λ más de una vez).

(Diagrama de flujo en la siguiente página)



11) Interpolación cúbica

La siguiente secuencia para la interpolación cúbica, fue extraída del artículo "A rapidly convergent descent method for minimization" - publicado en 1963 en el Comp. J.

$$OZ = \frac{-3\Delta F}{\lambda} + g^T \delta + g^{*T} \delta$$

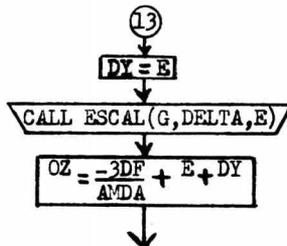
$$W = \sqrt{OZ^2 - (g^{*T} \delta)(g^T \delta)}$$

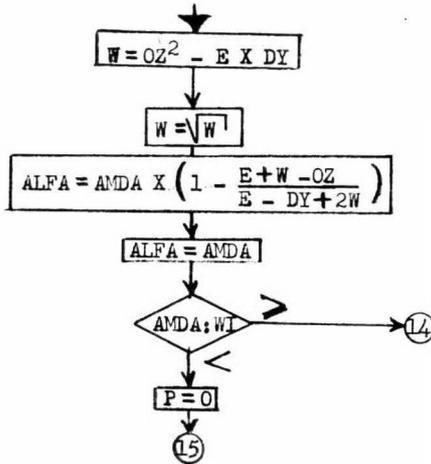
$$\alpha = \lambda \frac{(1 - g^{*T} \delta + W + OZ)}{g^{*T} \delta - g^T \delta + 2W}$$

donde α será el valor propuesto.

En el paso anterior ya se ha determinado $g^T \delta$, de modo que utilizando de nueva cuenta la subrutina ESCAL se determinará $g^{*T} \delta$ y a partir de estos valores se podrá efectuar la interpolación.

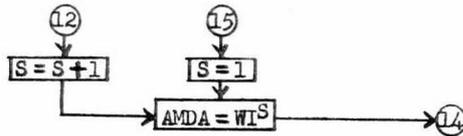
Por último, si el valor propuesto por la interpolación cúbica no es mayor que 0.1 entonces se utilizará 0.1 ó la convergencia **superlineal** para continuar el cálculo.





12) Convergencia superlineal

La convergencia superlineal consistirá en probar para $W=0.1$, -- valores de $\lambda = W, W^2, W^3, \dots$, hasta encontrar una λ que reduzca F satisfactoriamente.



13) Cálculo de parámetros comunes a las ecuaciones para calcular

HSIG

Los siguientes factores son necesarios en ambas ecuaciones, 1 y 5 y por lo tanto se determinarán antes para evitar repetir su cálculo:

I.- Con la subrutina ESCAL se determina $\delta^T \gamma$

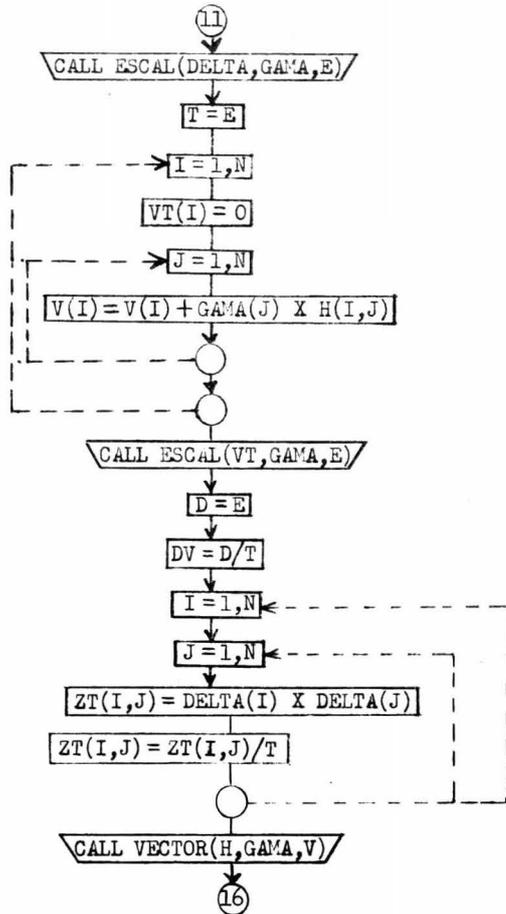
II.- Se construye una rutina para determinar γ^{TH} que es un vector transpuesto.

III.- Con la subrutina ESCAL y el producto anterior se obtiene -- $\gamma^{TH} \delta$.

IV.- Con los productos de I y III se obtiene $\gamma^{TH} \delta / \delta^T \gamma$.

V.- Se construye una rutina para calcular $\delta \delta^T$ y con el producto de I se obtiene $\delta \delta^T / \delta^T \gamma$.

VI.- Con la subrutina VECTOR se calcula $H\delta$.

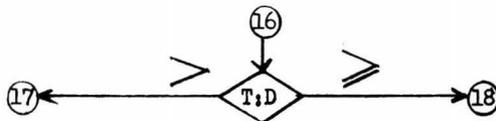


14) Elección de la ecuación

La elección de la ecuación depende de la siguiente relación:

$$\delta^T \delta \geq \delta^T H \delta$$

Si se cumple, se usará la ecuación grande(5), de lo contrario - se usará la ecuación 1.



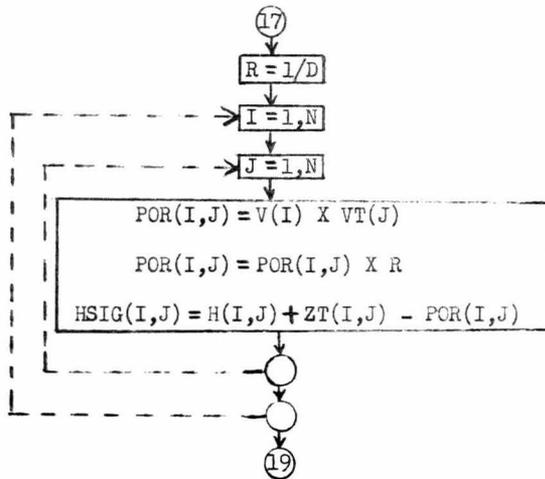
15) Cálculo con la ecuación 1

I.- Con el producto obtenido en 13III se obtiene $1/\delta^T H \delta$.

II.- Se construye una rutina, por medio de la cual con los productos de 13II y 13IV se obtiene $H \delta \delta^T H$ y este producto se multiplica -- por $1/\delta^T H \delta$.

III.- Se aplica la fórmula 1:

$$HSIG = H \frac{\delta \delta^T}{\delta^T \delta} - \frac{H \delta \delta^T H}{\delta^T H \delta}$$



16) Cálculo con la ecuación 5

Para realizar el cálculo con la ecuación 5 se desarrollarán los siguientes pasos.

I.- Creación de una rutina para obtener con δ y δ el producto -- $\delta \delta^T$ y con 13VI y δ obtener $H \delta \delta^T$.

II.- Con la matriz $\delta \delta^T$ y H obtener por medio de otra rutina especial el producto de ambas matrices $\delta \delta^T H$.

III.- Con el producto de 13IV se obtiene $1 + \delta^T H \delta / \delta^T \delta$.

IV.- Con el producto de 13I se obtiene $1/\delta^T \delta$.

V.- Se crea una rutina para obtener:

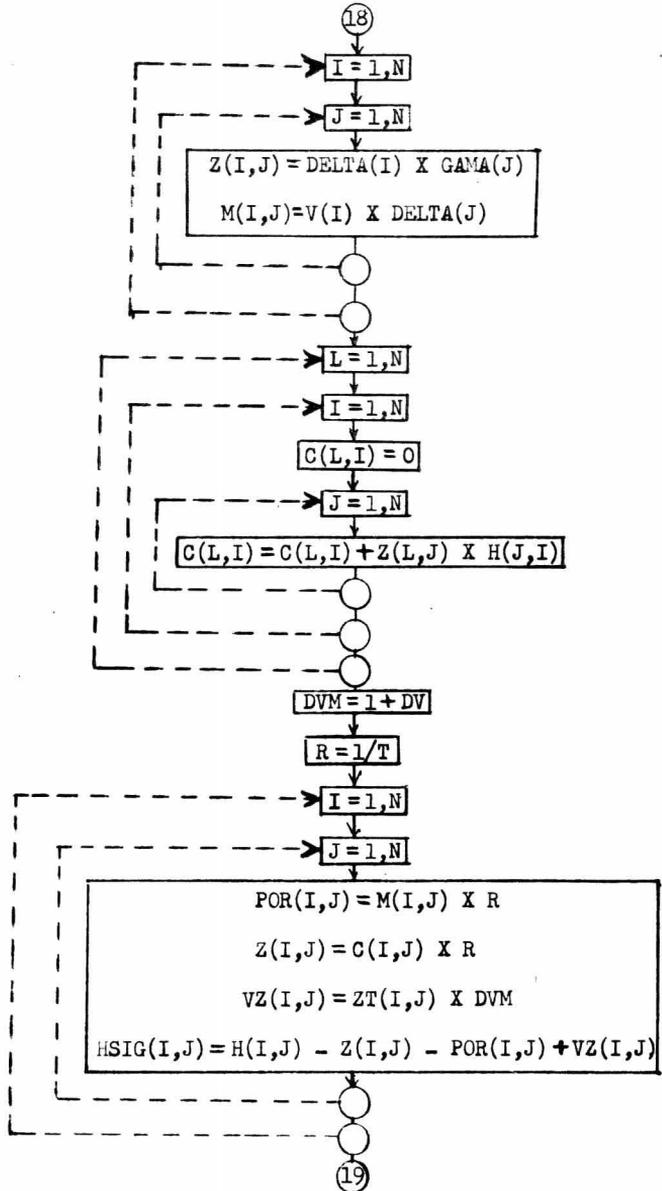
El producto de II y IV $\delta \delta^T H / \delta^T \delta$.

El producto de I y IV $H\delta\delta^T/\delta^T\delta$.

El producto de III y 13V $(1+\gamma^T\delta\delta/\delta^T\delta) \times (\delta\delta^T/\delta^T\delta)$

y se aplica la ecuación 5.

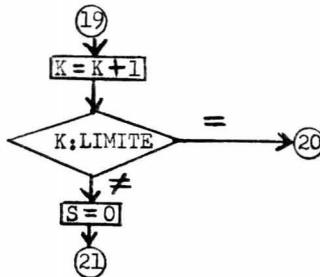
$$HSIG = H - \frac{\delta\delta^T\gamma}{\delta^T\delta} - \frac{H\delta\delta^T}{\delta^T\delta} + \left(1 + \frac{\gamma^T\delta\delta}{\delta^T\delta}\right) \frac{\delta\delta^T}{\delta^T\delta}$$



17) Incremento en la iteración y comparación con el límite

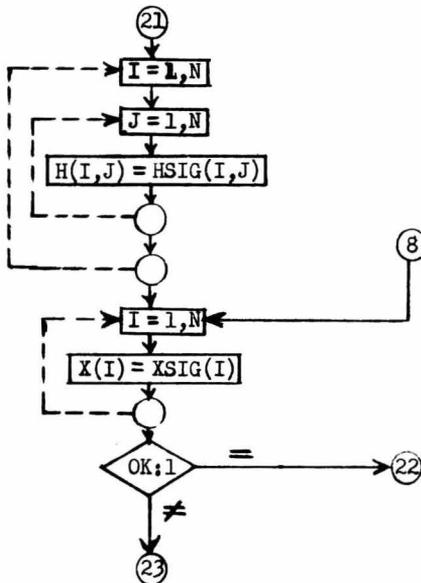
Se incrementa el contador de iteraciones (K) y se compara con el límite fijado; en caso de llegar al límite se tendrá una salida indicando que no se obtuvo la convergencia antes de éste.

Se fija $S = 0$ para que al volver a utilizar la convergencia superlineal se comience con exponente igual a 1.



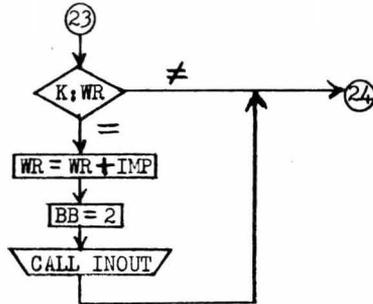
18) Retención de los nuevos valores de X y H para continuar el -- cálculo

Por medio de dos rutinas se igualan H a HSIG y X a XSIG y si el parámetro OK es igual a 1 se toma una salida para indicar la convergencia y terminación del proceso.



19) Impresión periódica de resultados

Se hace una comparación de la iteraciones acumuladas con el intervalo previamente fijado para escribir resultados parciales (WR), con el fin de observar el desarrollo del cálculo antes de llegar al resultado final.



20) Establecimiento del resultado obtenido e impresión final

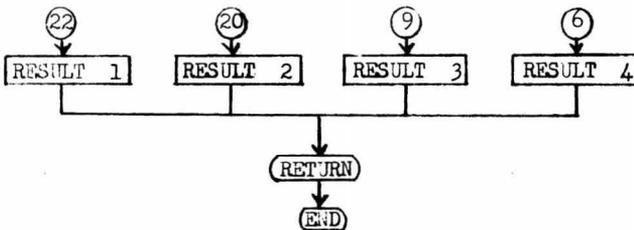
Se ha escogido la siguiente simbología para expresar el resultado del proceso:

RESULT = 1 : Se obtuvo la convergencia

RESULT = 2 : No se obtuvo la convergencia antes del límite

RESULT = 3 : Error en la programación de gradientes

RESULT = 4 : Errores de redondeo

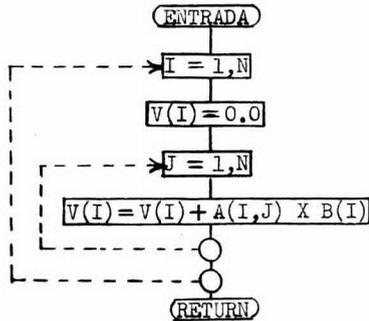


SUBROUTINA VECTOR

La subrutina VECTOR realiza la multiplicación de una matriz por un vector, obteniendo como resultado otro vector de la manera que lo muestra el siguiente ejemplo:

$$\begin{array}{c} \text{A} \qquad \qquad \text{B} \qquad \qquad \qquad \text{V} \\ \left[\begin{array}{cc} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{array} \right] \times \left[\begin{array}{c} B_1 \\ B_2 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} (A_{11} \times B_1) + (A_{12} \times B_2) \\ (A_{21} \times B_1) + (A_{22} \times B_2) \end{array} \right] \end{array}$$

De acuerdo a esto, el diagrama de flujo para esta subrutina será:



SUBROUTINA ESCAL

La subrutina ESCAL realiza la multiplicación de un vector transpuesto por otro vector, obteniéndose como resultado un escalar, de la forma que se muestra en el siguiente ejemplo:

$$\begin{array}{c} \text{A} \qquad \qquad \text{B} \\ \left[\begin{array}{cc} A_1 & A_2 \end{array} \right] \times \left[\begin{array}{c} B_1 \\ B_2 \end{array} \right] = \left[(A_1 \times B_1) + (A_2 \times B_2) \right] = E \end{array}$$

De acuerdo a esto, el diagrama de flujo sera:

