

01168

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO



DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO,
FACULTAD DE INGENIERIA

TÉCNICAS DE APROXIMACIONES SUCESIVAS EN LA INDUSTRIA
DEL PETRÓLEO

TRABAJO DE TESIS QUE PRESENTA:

RAÚL MANZO CHARDOME

PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRÍA EN
INVESTIGACIÓN DE OPERACIONES

TRABAJO DIRIGIDO POR EL DR. SERGIO FUENTES MAYA

CIUDAD DE MÉXICO, NOVIEMBRE DEL 2000



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.

MIEMBROS DEL JURADO:

DR . MARCO ANTONIO MURRAY LASSO
DR. SERGIO FUENTES MAYA
DRA. IDALIA FLORES DE LA MOTA
DR. RICARDO ACEVES GARCIA
M.I. ISABEL PATRICIA AGUILAR JUAREZ

Agradecimientos

Simplemente no es posible culminar un trabajo sin el esfuerzo de una gran multitud de participantes. Entre los mismos se pueden distinguir 3 categorías: Los afectivos, los técnicos y una combinación de ambos. Queda entendido que la elaboración de un trabajo no se puede resumir en la impresión de unas hojas, sino en el cúmulo de experiencias morales, intelectuales, espirituales, y aun aquellas consideradas no gratas. Por lo tanto, tampoco se puede dar gracias sólo en función al entorno presente de los seres que me rodean. Dada la gama de personas que contribuyeron a que terminara la presente obra, no me es posible en tan pocas líneas manifestar mi más profundo agradecimiento. Por lo tanto, y sin afectar susceptibilidades de los no incluidos en papel, aun cuando están presentes en mi vida cotidiana, simplemente me remitiré a reconocer el gran esfuerzo que siempre han mostrado mis padres, el Sr. Gumersindo Manzo y la Sra. Ethelvina Chardome pues gracias a ellos recibí la mejor educación, aprendí a reconocer el valor de la responsabilidad, la honestidad y la integridad. Por todo ello, este trabajo tiene sus raíces profundas en la dedicación incondicional que han mostrado mis padres en preparar a este individuo para afrontar los retos presentes y futuros. En esta categoría no se puede excluir a mi esposa, Rosy, la cual me brindó la energía y el ánimo suficientes para concluir el trabajo, además de que sus pláticas interminables han dado un nuevo sentido y optimismo en la forma en la que percibo la vida, todo ello complementado por el amor incondicional que profesa por el susodicho. También quiero agradecerle por el maravilloso hijo que tenemos, Sebastián, el cual ha heredado sus mejores cualidades. Por otro lado, no puedo olvidar a mis cinco grandes amigos, los cuales siempre han estado presentes en los momentos más difíciles de mi vida, me han dado brillantes consejos y han transmitido lo mejor de sus experiencias. Ellos son Paúl Sosa, Odón Ángeles, Rafael García, Cecilia Díaz y Gerardo Luyando.

Quiero agradecer profundamente al profesor Eleazar Puente, quien fue un gran maestro de matemáticas. Si no me hubiera topado con él, es probable que mi rumbo no sería el de la ingeniería. También quiero agradecer las enseñanzas del Dr. Thomas E. Marlin. Gracias a él surgió mi interés por este tema; además, él me enseñó de manera profunda y sencilla lo que es el Control de Procesos y me mostró su apoyo en todo momento. También quiero agradecer al Dr. Sergio Fuentes Maya y al Dr. Marco Antonio Murray por sus consejos a lo largo de la realización de este trabajo.

En un lugar especial se ubica Teresita Martínez la cual me ha apoyado a lo largo de mi trayecto profesional, ha soportado mi mal genio durante varios años y, contribuyó en la corrección de estilo y escritura de este manuscrito.

Resumen del Trabajo

Este estudio trata de resumir e implementar algunos de los trabajos que se han realizado en el área de programación no lineal; en específico, la aplicación de técnicas agrupadas bajo el término Aproximación Lineal Sucesiva (ALS). A pesar de que estos algoritmos se han aplicado con éxito a las industrias del petróleo y petroquímica, desde 1960, hay algunos resultados que han generado controversia, pues según algunos investigadores en el ramo, las soluciones obtenidas cuando se han empleado técnicas lineales a sistemas no lineales, no han sido del todo alentadoras. Por lo tanto, uno de los objetivos del presente trabajo se centrará en descubrir las bondades y deficiencias de los métodos lineales más representativos, sin descuidar los aspectos relativos a la implementación, eficiencia y confiabilidad de los resultados obtenidos.

Las técnicas lineales aquí expuestas centran su eficiencia y distinción, de modo directo o indirecto, en la forma en la que se van ajustando los límites¹ impuestos en los deltas² de una iteración con respecto a la anterior. De los algoritmos existentes, hay un grupo que modifica arbitrariamente los límites. Hay otros que los ajustan mediante la introducción de modificaciones a la función objetivo, similar a lo que se hace en las técnicas de penalización utilizadas en problemas no lineales con restricciones. Otros algoritmos combinan pasos heurísticos con funciones penales. Los más complejos tratan de incorporar métodos de búsqueda en una dimensión para encontrar el escalar que se debe emplear en las técnicas que combinan elementos de las funciones penales. Por último, algunos investigadores han ampliado sus algoritmos lineales con elementos del gradiente en el espacio reducido, con lo cual se pierde la simpleza de la aproximación lineal.

El fin último que persigue la imposición de límites en los deltas, o movimiento de las variables, es evitar que los valores adoptados por las variables en la iteración actual violen alguna o un conjunto de restricciones en el problema no lineal, con lo que éste último sería no factible. Este trabajo se centrará en tres metodologías que tratan de agrupar las variantes más importantes en el manejo de los límites impuestos en los deltas; además, éstos tratan de resolver los problemas no lineales en forma verdaderamente lineal.

La primera técnica modifica los límites en forma heurística; éste fue el primer método propuesto que usa las técnicas de aproximaciones sucesivas. El segundo método trata de controlar el ajuste en los movimientos de las variables a través de la reducción en la suma de no factibilidades en aquellas restricciones violadas en cada iteración del proceso. Finalmente, el último procedimiento siempre trata de mantener la solución aproximada dentro de una región factible, ajustando los límites impuestos en los deltas en la forma correspondiente.

Al final, se pretende dar una conclusión de la efectividad de tales técnicas cuando éstas se comparan con un algoritmo no lineal, el cual, en la mayoría de las aplicaciones industriales, tiene gran aceptación³. Para ello, tanto las técnicas lineales como las no-lineales se aplicarán en la solución de un problema de mezclado para la producción de gasolina, donde el proceso incluirá una unidad de alquilación, la cual introduce elementos altamente no lineales por sus características propias y por el equipo auxiliar que se requiere para su operación. El fin último de este trabajo será mostrar que las técnicas lineales no sólo son adecuadas en las aplicaciones de la industria del petróleo, sino que se pueden extender a cualquier tipo de aplicaciones donde problemas no lineales se encuentren involucrados.

¹ El término para describir estos límites en inglés se le conoce como *Step Bounds*.

² De aquí en adelante, el delta se refiere al monto en el cual las variables independientes cambian su valor con respecto a la iteración anterior.

³ Este trabajo usará el algoritmo para optimizar problemas no lineales bautizado como MINOS.

Abstract

This study tries to summarize and implement some of the work that has been done in the area of nonlinear programming when techniques known as Successive Linear Programming (SLP) are applied. There is some controversy about the methodology in the sense that not many good results have been reported; but, on the other hand, it is also known that these tools have been implemented in the crude oil and petrochemical industries since 1960. That is the reason why this work will try to prove the effectiveness and deficiencies of the most popular linear techniques used in the solution of non-linear problems. Particular attention will be given to aspects related with implementation of the algorithms, efficiency and reliability of the results obtained via these procedures.

It seems that the key to all proposed algorithms is related, directly or indirectly, to the course of action followed to calculate the step bounds in any particular iteration. There are methods that arbitrarily reduce the bounds. There are others that adjust the bounds through modifications in the objective function, resembling the work of penalty functions. Another kind of algorithms tries to combine the linear search in order to find the correct scalar that multiplies the penalty function. Finally, the most sophisticated techniques use the concepts of reduced space.

The study will analyze three algorithms with different effects in the bounds. The first one modifies the bounds in a heuristic way; this method was the origin of all the algorithms of this kind. The second one controls the step bounds reducing the sum of infeasibilities in each step taken in the approximations. The last one always tries to remain feasible adjusting the bounds accordingly.

In order to obtain some conclusions about the techniques, several cases for a blending process that produces gasoline will be solved. The blending process includes a simplified alkylation plant that contains highly nonlinear equations. The results will be compared with solutions obtained from the well-known nonlinear optimizer, MINOS. At the end, the final goal will be to provide the basis for extension of the SLP algorithms to other areas where optimization is needed.

INTRODUCCIÓN	i
1. TÉCNICAS DE OPTIMIZACIÓN	1
1.1. PROGRAMACIÓN NO LINEAL	2
1.2. PROGRAMACIÓN LINEAL	9
1.3. CRITERIOS DE OPTIMALIDAD	12
2. APROXIMACIÓN LINEAL SUCESIVA	14
2.1. GENERALIDADES	15
2.2. MÉTODO DE APROXIMACIONES SUCESIVAS (MAP)	19
2.3. MÉTODO DE APROXIMACIÓN SUCESIVA RESTRINGIDA (ASR)	20
2.4. MÉTODO DE APROXIMACIÓN SUCESIVA CON PENALIZACIÓN (ASP)	23
3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE MEZCLADO Y PLANTA DE ALQUILACIÓN	25
3.1. PLANTA DE ALQUILACIÓN	25
3.2. PROCESO DE MEZCLADO	29
3.3. CASOS DE ESTUDIO	31
4. ESTRATEGIAS DE SOLUCIÓN	40
4.1. IMPLANTACIÓN DE ALGORITMOS	40
4.2. ANÁLISIS DE RESULTADOS	43
4.3. ASPECTOS COMPUTACIONALES	51
CONCLUSIONES	54
BIBLIOGRAFÍA	55
ANEXOS	56

En la mayoría de los aspectos cotidianos, el ser humano se ha enfrentado a la toma de decisiones, donde, algunas de éstas, por lo general acarrearán un beneficio o desincentivo con dependencia intrínseca en la selección. La selección se puede formular como la imputación de valores a un conjunto de variables que definen un objetivo, el cual puede ser de naturaleza económica, social, política o estructural. De alguna manera, este objetivo brindará la pauta para alcanzar el mejor de los resultados posible entre una variedad de los mismos. Por lo tanto es necesario desarrollar un conjunto de técnicas o criterios, los cuales permitan asegurar, con cierto grado de probabilidad, que la posible solución al objetivo planteado representa la mejor decisión. Entre este conjunto de técnicas se encuentran aquellas agrupadas bajo lo que se conoce como Investigación de Operaciones, cuyo fin se centra en dar la mejor solución a problemas de planeación, diseño, operación y mejoras de cualquier proceso o conjunto de los mismos.

De aquellos procedimientos de solución se pueden distinguir los que se relacionan con los de optimización, los cuales buscan encontrar el conjunto de condiciones requeridas para alcanzar el mejor resultado dadas ciertas propiedades y características del sistema bajo estudio. Estas técnicas se pueden agrupar por el tipo de problema a resolver, por ejemplo, las hay lineales, no lineales, discretas, estocásticas, entre otras. Dada la importancia en la actividad cotidiana de estas técnicas, a través del tiempo se han tratado de desarrollar nuevos y más eficientes procedimientos de solución a los problemas de optimización, concentrándose en aquellos de naturaleza no lineal y con un conjunto muy grande de ecuaciones.

En particular, este trabajo se centrará en algunos de los problemas encontrados en la industria del petróleo, que por su naturaleza, son vitales para el desarrollo del sector económico. Esta industria se puede catalogar como una de transformación, donde insumos de baja utilidad energética, como el petróleo, son transformados en productos de alta capacidad para la generación de trabajo, digamos, sin limitar, que entre los más importantes se encuentran el gas LP, las gasolinas, el jet/kero, el diesel y el combustóleo. Además de reunir ciertos requisitos en la operación de las refinерías, los productos terminados deben de cumplir con estrictas especificaciones de calidad, las cuales se establecen con base en la eficiencia que pueden proporcionar dependientes de su uso, restricciones ambientales y condiciones requeridas en su transporte.

De los problemas reportados en el sector petrolífero se pueden mencionar aquellos relacionados con los de planeación, que involucran la selección de materias primas, el volumen a producir de materiales terminados, el tiempo idóneo para efectuar mantenimientos, la distribución de producto, entre otros. También se pueden resaltar aquellos que tienen que ver con los procesos de mezclado, donde un conjunto de materiales se tienen que combinar de forma que el producto resultante reúna ciertas propiedades fisicoquímicas. Otros problemas involucran mejoras a los procesos existentes o la adquisición de nuevas tecnologías con ciertos fines dentro de las refinерías; por ejemplo, con las nuevas regulaciones ambientales se tiene que producir gasolina de bajo azufre, por lo que los refinadores se han visto en la necesidad de seleccionar unidades con el fin de disminuir el azufre en los constituyentes que conforman estos combustibles. Todos estos problemas pueden ser resueltos mediante procedimientos de optimización, pues a final de cuentas, el decisor tendrá que seleccionar el mejor conjunto de variables de modo que su costo sea el menor posible o, sus ingresos le proporcionen el mejor valor agregado.

Algunas de las relaciones que se necesitan plantear para representar el sistema de refinación son no lineales, donde gran número de éstas deben su naturaleza no lineal a los procesos de mezclado¹. Por otro lado, el número de ecuaciones que se necesitan para describir el sistema, por pequeño que este sea, es muy grande y, además, es un problema con un conjunto extenso de

¹ En muchas ecuaciones de mezcla hay un producto de dos variables, por ejemplo, la calidad y el volumen.

restricciones. Dadas las características de un proceso como el anterior, es necesario desarrollar técnicas *ad hoc* que puedan resolver en forma eficiente los problemas que se presentan en este sector. Por ejemplo, a pesar de que los problemas a resolver se pueden catalogar como no lineales, no sería conveniente aplicar los algoritmos desarrollados para estructuras puramente no lineales debido a que en la mayoría de los casos, se necesitan cómputos muy extensos, además, la implementación de los mismos es complicada; del mismo modo, no es posible dar una buena interpretación a los resultados de las técnicas no lineales debido a su naturaleza estrictamente numérica.

Este trabajo tiene como objetivo resumir e implementar aquellos procedimientos agrupados bajo Aproximaciones Sucesivas Lineales, donde lo que se pretende es aproximar el problema medianamente no lineal, en uno lineal que pueda ser resuelto en forma sucesiva hasta llegar a la solución correcta. Del mismo modo, se busca probar que este tipo de algoritmos es muy convenientes y eficientes para resolver problemas de naturaleza no lineal; de fácil implementación, cuando se cuenta con las herramientas para resolver problemas lineales y; el potencial de poder interpretar económicamente los resultados, sobre todo, cuando la solución al problema no lineal se encuentra en uno de los vértices formados por las restricciones. Además, se quiere terminar con la controversia que ha surgido por supuestos malos resultados obtenidos por el uso de estas técnicas cuando los problemas que se pretenden resolver son altamente no lineales; lo anterior con el propósito de sugerir la extensión de estas técnicas de solución a problemas encontrados en otros sectores.

Para aplicar este tipo de algoritmos se seleccionará un problema típico de la industria del petróleo: el proceso de mezclado, donde se incluirá una unidad de alquilación que le proporcionará elementos que pueden ser de naturaleza altamente no lineal. Este problema se caracteriza por presentar varios de los elementos a los que se enfrenta un refinador, a saber, planeación, selección de las mejores condiciones de operación y los procesos de mezclado.

A pesar de que los métodos de aproximaciones sucesivas tienen sus raíces hace cerca de cuarenta años, su desarrollo, implementación y uso se ha aplicado casi exclusivamente a la industria química, y en particular al sector del petróleo y petroquímica. La primera referencia sobre este tipo de desarrollos se encuentra en 1961 en un artículo presentado por Griffith y Stewart [13]. Ellos llaman a su procedimiento *Mathematical Approximation Programming* (MAP). En su trabajo, describen al algoritmo tal y como lo aplican en problemas que se presentaban en la industria del petróleo, en la compañía Shell Oil, en ese tiempo. El elemento innovador del trabajo se centra en el uso de la aproximación lineal del problema no lineal mediante el uso de la expansión en series de Taylor, para después usar las técnicas conocidas de programación lineal, que al resolver el subproblema lineal, proporcione los incrementos o deltas, en las variables independientes donde, con el movimiento sucesivo de éstas, se pretende buscar mejores valores en la función objetivo hasta que se llega a un óptimo que corresponde al óptimo del problema no lineal. En su trabajo también se recalca la importancia de reducir los límites impuestos en los deltas una vez que se está cerca de la solución óptima, esto con el fin de minimizar y controlar las oscilaciones en el valor de la función objetivo de una iteración a otra², y para forzar la convergencia.

En 1971, Buzby [4] describe un sistema muy similar a MAP usado por la compañía Union Carbide en la optimización de un proceso químico con un conjunto de ecuaciones no lineales muy extenso. Los resultados por él presentados muestran que el algoritmo es muy eficiente, al menos para ese tipo de problemas.

² El término usado en inglés para designar a este fenómeno se le conoce como *Cycling*

Boddington et al. [2] hicieron modificaciones al algoritmo original de MAP, para después implementarlo en la compañía Chevron Oil Co. Este algoritmo se usó extensivamente en la resolución de problemas de mezclado, los cuales por su naturaleza, pueden ser medianamente no lineales, o en su defecto, altamente no lineales. También, la técnica se aplicó a la solución de problemas de planeación que involucraban la optimización de sus complejos de refinación.

Beale describió una variante de ALS, en la cual incorpora elementos del método de Gradiente Reducido con el objetivo de acelerar el proceso de convergencia. Su algoritmo se ha aplicado a problemas de planeación que incluyen un número grande de ecuaciones; también se implantó en las operaciones de extracción del petróleo [3].

Simons y Azma [9] sintetizan las experiencias que la compañía Exxon Oil Co. ha tenido con problemas de naturaleza lineal, como aquellos que se presentan en los niveles de planeación, y los no lineales en los procesos de mezclado. También proponen un algoritmo modificado de ALS donde, el valor adquirido por las variables independientes de una iteración con respecto a la anterior, se controla a través del límite en los deltas sin permitir que ninguna restricción en el problema no lineal sea no factible. Este artículo se complementa con aquél de Thomas Baker y Leon Lasdon [14] debido a que describen las experiencias de Exxon en el uso de Aproximaciones Sucesivas.

En 1982, F. Palacios Gómez et al. presentaron un algoritmo que trata de minimizar la suma de restricciones que no son factibles cuando se calcula un nuevo punto y, también proporcionan un teorema de convergencia para el problema lineal restringido y dan algunos resultados computacionales. El artículo describe algunas alternativas de implementación de los algoritmos ALS [6].

Jianzhong Zhang et al. [10,11] describen un nuevo algoritmo ALS llamado *Penalty Successive Linear Programming* (PSLP), para el cual se proporciona una prueba de convergencia. Es importante destacar que hay una multitud de artículos publicados donde las técnicas lineales se han implementando exitosamente en la resolución de problemas propios de la industria eléctrica, específicamente en problemas relacionados con la distribución y la generación de electricidad. También se tienen registros del uso de estos algoritmos en la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales que surgen en los problemas del equilibrio líquido-vapor y sistemas reactivos, empleados en la simulación de procesos químicos. Dado que este trabajo se encuentra limitado a identificar las bondades de tres técnicas lineales cuando éstas se aplican a un problema específico, no se hará referencia a los estudios previamente mencionados.

El presente trabajo se divide en cuatro capítulos. En el primero se da una referencia de las técnicas de optimización usadas de manera común en la industria, a saber, programación no lineal, lineal y los criterios que deben ser analizados para conocer la naturaleza de la solución, es decir, si es un mínimo, máximo o, ninguno de los anteriores. Dado que este capítulo es de naturaleza genérica, puede ser omitido si el lector cuenta con conocimientos en la materia, sin embargo, puede ser una guía muy útil para aquellos interesados en recordar o revisar todos los elementos que se necesitan tomar en cuenta cuando se pretenden resolver problemas de optimización. El segundo capítulo se centra propiamente en los algoritmos implementados en este trabajo. Aquí se proporcionan los elementos matemáticos de cada uno de ellos y los pasos que se deben seguir en la implementación de los mismos. Entre los algoritmos analizados se describe el original propuesto por Griffith y Stewart [13], también se abordan las técnicas de Aproximaciones Sucesivas Restringidas [6,10] y el método de Aproximación Sucesiva Penal propuesto por Exxon [9, 14]. El capítulo tres abarca la descripción del proceso bajo estudio, es decir, el mezclado de componentes para la obtención de gasolinas. Se proporciona una

descripción de lo que es una mezcla y, en qué consiste la planta de alquiler. De igual modo, en este capítulo se explican los casos que se resolverán mediante el empleo de las técnicas propuestas en el capítulo tres. Para concluir, en el capítulo cuatro se plantea la estrategia de implantación seguida para cada uno de los algoritmos en la herramienta conocida como GAMS [1]. Se presentan los resultados de los diversos casos planteados y se proporciona un análisis completo de los mismos.

En el ámbito cotidiano es necesario contar con procedimientos en la toma de decisiones. Entre los ampliamente usados se encuentran aquellos agrupados bajo lo que se conoce como técnicas de optimización. Estas técnicas consisten en un conjunto de algoritmos que pretenden encontrar la mejor solución al problema planteado. Cada algoritmo tiene su origen en la resolución de un problema en particular, y con el tiempo y la investigación, la aplicación de dicho algoritmo se ha tratado de extender a un conjunto mucho mayor de situaciones.

Para entender las técnicas de optimización, el primer paso consiste en conocer la estructura del problema que se pretende resolver. En estos términos es esencial diferenciar entre simulación y optimización. El primero tiene que ver con la solución de un conjunto de ecuaciones, con la peculiaridad de tener cero grados de libertad, es decir, el número de relaciones es igual al número de variables. En este sentido, el problema consiste en resolver, analítica o numéricamente el conjunto de ecuaciones planteadas. El segundo, por el contrario, se caracteriza por contener un número mayor de variables que de relaciones. Por ende, en este tipo de problemas puede haber un número infinito de soluciones. Sin cierto criterio de selección, la solución de un problema de esta naturaleza probablemente no tendría un sentido práctico. Dado lo anterior es necesario imponer un criterio en la selección de los valores que pueden adoptar las variables, es decir, algún objetivo con el que deba de cumplir la posible gama de soluciones al problema planteado. Este objetivo en optimización recibe el nombre de función objetivo y tiene la característica de ser otra relación matemática adicional o propia al problema, que establece algún criterio económico, tecnológico o social, el cual involucra encontrar el mejor valor ante un conjunto de posibilidades.

Para clarificar los puntos anteriores, imagine que tiene la ecuación de Estado de Gas Ideal, en la que se establece la relación entre la presión, temperatura y volumen. Se sabe que dadas dos propiedades de las antes mencionadas, entonces la tercera está determinada. A si, en este problema, no se tienen grados de libertad, pues hay una variable y una ecuación, donde una de las variables es función de las otras dos. En este caso, sólo bastará con despejar la ecuación en términos de la variable de interés y, el problema estará resuelto. Por otro lado, un problema de optimización típico sería como el siguiente: suponga que se quiere encontrar el espesor de un tanque que almacena gas. Esta variable es función de la presión, la cual, a su vez, depende de la temperatura y volumen del tanque. Para este problema habrá un número infinito de soluciones, pues para cada condición de presión crítica se puede seleccionar un espesor determinado. Sin embargo, si el problema se modifica ligeramente en su planteamiento, y en lugar de preguntar el espesor del tanque, se pregunta: cuál es el menor costo posible en la construcción del tanque, si se sabe que la temperatura puede fluctuar entre tal y cual valor para una superficie dada, entonces, sólo habrá un valor de presión y espesor para el cual el costo de construcción del tanque sea el mínimo.

Otra parte de la estructura del problema consiste en saber si éste presenta o no restricciones. Es decir, se puede plantear una función objetivo donde ninguna de las variables esté restringida o, en caso contrario, puede haber una serie de ecuaciones asociadas al problema y a las variables de modo que se impongan límites superiores e inferiores a la solución adoptada por el problema. Un ejemplo típico de restricciones se encuentra en la oferta o demanda de un producto adquirido o vendido en el mercado, también se les puede encontrar en las condiciones propias de proceso, donde hay restricciones en los rangos de temperatura y presión a los que se puede trabajar y, restricciones propias de los balances de materia y energía. La función objetivo de un problema restringido siempre será menor – en caso de maximización – a aquél sin restricciones, pues la región de búsqueda se ve limitada. De esta estructura dependerá que tipo de algoritmo se debe de utilizar para la solución del problema.

Finalmente, en la estructura se puede englobar la forma de las ecuaciones que se tienen que resolver para llegar a la solución deseada. Tanto las restricciones como la función objetivo se pueden catalogar en lineales y no lineales. Esto es muy importante, pues de esta estructura se puede escoger el algoritmo apropiado de solución. Por ejemplo, puede haber problemas donde tanto la función objetivo como las restricciones sean lineales, en este caso, el algoritmo adecuado de solución es llamado Programación Lineal. Si el problema general involucra una situación donde todas las restricciones y el objetivo son no lineales, en este caso se tienen que usar las múltiples técnicas agrupadas bajo programación no lineal. Entre el conjunto posible de problemas, los que mayor interés han recibido son aquellos donde la función objetivo es cuadrática y las restricciones lineales, o la función objetivo es lineal y las restricciones no lineales. En estos casos se han desarrollado algoritmos especializados para cada una de estas situaciones. El problema más fácil de resolver y donde hay un desarrollo matemático sólido es el lineal; además, los resultados obtenidos mediante la aplicación de las técnicas de programación lineal tienen una interpretación económica útil. En contraposición, se tienen aquellas técnicas de programación no lineal, donde a pesar de contar con bases matemáticas teóricas, la mayor parte de los algoritmos hacen uso de reglas heurísticas desarrolladas a partir de la solución de distintos problemas. Por otro lado, en este tipo de problemas no se puede estar seguro si la solución encontrada representa el óptimo global, dada la complejidad de las funciones involucradas.

La estructura de las restricciones es sumamente importante en optimización, de ello dependerá la complejidad en la búsqueda de la solución. Por ejemplo hay restricciones que imponen valores enteros a las variables. En este caso, la técnica empleada en la solución tiene que ser cambiada a aquellas agrupadas bajo la programación entera. También hay restricciones en las que a una variable se le puede imponer una limitación probabilística, en este caso se tiene que usar programación estocástica. Cada una de las técnicas antes mencionadas se pueden consultar en los excelentes libros de optimización disponibles en la literatura.

1.1. Programación No Lineal

El primer paso en la optimización consiste en el planteamiento del problema que se quiere resolver. Cualquier problema no lineal, en su forma general, se puede representar por:

PNG

$$\text{Minimizar } f(\mathbf{x}) \tag{1}$$

Sujeto a

$$g(\mathbf{x}) = 0$$

$$h(\mathbf{x}) \leq 0$$

$$l \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{u} \text{ para } \mathbf{x} \in E^n$$

De la forma general en (1) se pueden hacer simplificaciones de modo que se tenga un conjunto específico de problemas lineales o no lineales. Por ejemplo, las funciones en $g(\mathbf{x})$, $h(\mathbf{x})$ y el objetivo pueden ser lineales, en este caso, (1) se resolverá mediante las técnicas de programación lineal. Si $g(\mathbf{x})$ y $h(\mathbf{x})$ no existen, el problema se considerará como no restringido en la región de búsqueda $[l, u]$, por lo que métodos numéricos o analíticos pueden ser empleados.

La mayoría de los conceptos desarrollados en programación no lineal tienen su fundamento en la optimización de la función objetivo para una sola variable. Hay dos grandes grupos de métodos

de solución, el primero de ellos es el analítico y el segundo el numérico. Si la dependencia de la función objetivo en la variable se puede expresar por una relación matemática, algunos problemas se pueden resolver mediante el uso de técnicas de optimización. Para desarrollar las ecuaciones que describen el problema bajo estudio, muchas veces se puede partir de una región infinitesimal, para la cual, la solución involucra el uso del cálculo diferencial. Por ende, se sabe que la solución, u óptimo a la ecuación, se encuentra en los puntos estacionarios ubicados en la región interior definida por la función. Estos puntos pueden ser localizados mediante el uso de métodos analíticos. Una vez que los valores estacionarios se han localizado, se deben comparar con aquéllos que se encuentran en los límites de la región del problema o, en los puntos donde se presentan discontinuidades. Por lo tanto, los métodos analíticos permiten la localización de los puntos interiores mediante el uso de ecuaciones auxiliares, en contraste con los métodos numéricos, los cuales se van a aproximando a las soluciones interiores mediante prueba y error.

Dado que un valor óptimo se puede localizar en el interior de la región, a través de un punto estacionario o, en los límites de la región o, en alguna discontinuidad, sólo ciertos casos pueden ser tratados mediante el cálculo diferencial. En otras palabras, este tipo de metodología sólo se puede aplicar para encontrar puntos estacionarios en una región interior donde la función y sus derivadas son continuas y diferenciables.

Si se tiene una función que depende de una sola variable¹, la cual es continua, así también como algunas de sus derivadas, se pueden desarrollar ciertas expresiones que pueden ser utilizadas para encontrar todos los puntos óptimos e imputarle un carácter a la función objetivo en cada una de estas posiciones. Estas condiciones serán las necesarias y suficientes para la existencia de un óptimo local bajo estas circunstancias.

Mediante el uso de la expansión de series de Taylor, la cual establece que si la función $f(x)$ y sus primeras i 's derivadas son continuas en el rango $l \leq x \leq u$ y, su i th derivada existe en el rango $l < x < u$, entonces se puede escribir para cualquier punto en este rango que:

$$f(x) = f(a) + (x-a)f'(a) + \dots + \frac{(x-a)^{i-1}}{(i-1)!} f^{(i-1)}(a) + \frac{(x-a)^i}{i!} f^i(\xi) \quad (2)$$

para ξ localizada entre x y a .

Si se hace $x = a + h$, entonces la ecuación (2) se puede expresar como:

$$f(a+h) - f(a) = hf'(a) + \frac{h^2}{2!} f''(a) + \dots + \frac{h^i}{i!} f^i(\xi) \quad (3)$$

Por lo tanto, si se supone que $f(x)$ tiene un óptimo local en el punto $x = a$, y que en el mismo punto $f'(a) \neq 0$, al mostrar que estas dos condiciones son contradictorias, se debe llegar a la conclusión que para este punto, f' debe de ser igual a cero cuando la función presenta un mínimo. Si se considera que existe un valor de h lo suficientemente pequeño, de modo que el término $hf'(a)$ domina el lado derecho de la ecuación (3), entonces el postulado inicial se encuentra en contradicción, pues si $f'(a) \neq 0$, entonces es posible seleccionar el signo de h de modo que $hf'(a) < 0$. Esta condición implica que $f(a) > f(a+h)$, por lo que $f(a)$ no puede ser el mínimo. Por lo tanto,

¹ PNG sin $h(x)$ y $g(x)$, además de que $x \in E^1$

si $f(a)$ ha de ser el mínimo, es necesario que $f'(a)$ sea igual a cero. El punto en el cual $f'(a) = 0$, es llamado punto estacionario.

El siguiente paso consiste en encontrar otro conjunto de condiciones con las cuales se pueda saber cual es la naturaleza del punto estacionario. Cuando la expansión en series de Taylor (3) se aplica al punto estacionario, se tiene que para $f'(a) \neq 0$

$$f(a+h) - f(a) = 1/2h^2 f''(a) + O(h^3) \quad (4)$$

Dado que el primer término del lado derecho será el dominante en la ecuación (4), para un valor lo suficientemente pequeño de h , los términos restantes de la aproximación se pueden agrupar en la expresión $O(h^3)$. Si $f''(a)$ es mayor a cero, se puede constatar que el lado derecho de la ecuación (4) es positivo para valores de h pequeños, por lo tanto $f(a+h) > f(a)$. Entonces, de aquí se obtiene la condición de suficiencia para que un mínimo exista.

Si $f''(a)$ es cero, entonces, a través de argumentos similares a los expuestos en la primer sección, se concluye que $f'''(a)$ debe de ser cero. Si esto no se cumpliera, el punto para el cual $x = a$ sería un punto de inflexión en la función bajo estudio.

Para un punto $x = a$ donde $f'(a) = f''(a) = f'''(a) = 0$, y $f^{(4)}(a) \neq 0$, se puede demostrar que para la primera derivada par diferente de cero, en este caso $f^{(4)}(a)$, ésta debe de ser mayor que cero en caso de que el punto estacionario sea un mínimo. Este tipo de análisis se puede extender a derivadas de orden superior, cuando estudios adicionales, dada la estructura del problema, son requeridos.

Con base en el desarrollo anterior, el primer paso en la búsqueda de un mínimo, consistirá en encontrar todos los puntos estacionarios para los cuales $f'(x)$ es igual a cero. Esto es útil cuando se tiene una función continua, sin restricciones y con un buen comportamiento en el espacio. Posteriormente, se tendrán que verificar las condiciones de suficiencia para cada uno de los puntos estacionarios con el fin de determinar si, en efecto, el punto de interés se trata de un mínimo.

Es claro que este tipo de análisis se puede extender al caso en el cual se tengan varias variables y se desee buscar el máximo de la función, con la condición que la función en el espacio Euclidiano n dimensional sea continua y diferenciable. En este caso, los mismo criterios de optimalidad aplicarán. Es decir, la condición necesaria es equivalente a encontrar los puntos estacionarios cuando el gradiente de la función es igual a cero y, el de suficiencia, equivalente a demostrar que la matriz Hessiana es positiva definida en el caso de que se quiera probar que un punto es un mínimo local del problema bajo estudio.

La aplicación de técnicas analíticas rara vez se utiliza en problemas reales. Esto se debe a que muchas veces, la función bajo estudio no es continua, así como tampoco es diferenciables sobre el rango de interés. En algunos casos, cuando se desea encontrar los puntos estacionarios, el sistema de ecuaciones por resolver es tan complejo que es imposible emplear un medio analítico para encontrar los puntos estacionarios. Es por ello que se han desarrollado técnicas agrupadas bajo el concepto de Búsqueda Numérica, las cuales tratan de eliminar algunos de los inconvenientes presentes en los métodos analíticos.

Hay un conjunto grande de técnicas numéricas, por lo cual, un estudio detallado de las mismas saldría de los objetivos de este trabajo; sin embargo se pueden consultar excelentes libros sobre el tema. Básicamente, todos estos métodos se fundamentan en la misma mecánica. Primero se

selecciona un punto inicial que represente una solución al problema, posteriormente, la técnica empleada, selecciona un nuevo conjunto de valores para las variables independientes. Este nuevo punto sirve para calcular la función objetivo, la cual se compara con el caso anterior. Con base en estas comparaciones, donde se trata de mejorar el valor de la función objetivo, un nuevo conjunto de valores para las variables es seleccionado. Los cálculos se racionalizan de modo que los valores que no contribuyen al mejoramiento de la función sean eliminados en la medida de lo posible, y la función objetivo se vuelve a calcular y comparar hasta que se obtiene una posible solución al problema. La mayoría de los métodos de búsqueda solamente difieren en la forma en la que se elige la nueva posición de las variables independientes.

Una diferencia fundamental con respecto a la búsqueda analítica es que los métodos numéricos sólo son buenos para encontrar el óptimo en una región predefinida. Es decir, como primer paso se debe establecer un rango de búsqueda donde la función sea unimodal, de modo que el valor de interés dentro de estos límites sea un óptimo local, el cual no necesariamente coincide con el global.

Otras consideraciones de importancia en este tipo de técnicas son la convergencia del método a la solución deseada y, los criterios usados para detener el proceso de búsqueda, los cuales, en la solución analítica carecen de sentido.

Las técnicas de búsqueda en una dimensión son de lo más importante en optimización, ya que la aplicación de ésta se puede extender fácilmente a varias dimensiones cuando una dirección de búsqueda se ha seleccionado.

Entre los métodos de búsqueda numérica se encuentran los que se catalogan como directos, pues la información empleada proviene de cálculos directos con la función objetivo, mientras que los indirectos usan información adicional cuando ésta está disponible, como es el caso del gradiente de la función y la matriz Hessiana, en los casos más sofisticados. Claro que tanto el gradiente como la Hessiana se pueden calcular en forma numérica o analítica, esto en función de la estructura del problema.

En la discusión precedente se hablará de aquellos métodos empleados en la optimización de la función objetivo sujeta a restricciones, pues estos problemas son los que tienen mayor sentido en aplicaciones reales. Dos categorías importantes de restricciones se pueden encontrar en un problema: 1) las de igualdad y, 2) las de desigualdad.

Si se quiere resolver el problema:

Minimizar $f(\mathbf{x})$ (5)

Sujeto a n restricciones en las variables $m: x_1, \dots, x_m$ para $m > n$, donde las restricciones son de la forma:

$$g_k(\mathbf{x}) = 0 \text{ para } k=1,2, \dots, n \quad (5.1)$$

por cada restricción impuesta, al menos un grado de libertad en el problema es eliminado y, si n es mayor a m , el problema se vuelve sobre definido, para el cual puede no haber solución. Por lo tanto, el número de variables independientes se reduce de m a $m - n$, dado que algunas de éstas se pueden determinar de las n restricciones en el problema, es decir, n variables se pueden eliminar de la función objetivo, con lo cual quedarán sólo $m - n$ variables independientes en la función objetivo, algunas de las cuales pueden tener un rango de valores restringido. El paso obvio para

resolver un problema con este tipo de restricciones sería aplicar el método de sustitución de modo que las técnicas para optimización sin restricciones o, aquellas para restricciones de desigualdad puedan ser aplicadas.

Entre los métodos de solución del problema (5) se tiene el de sustitución, donde la nueva función se define por:

$$F_m = F(x_1, x_2, \dots, x_{m-n})$$

es decir, en términos de un número reducido de variables las cuales no están sujetas a ninguna restricción². Este método muchas veces no es conveniente, debido a que puede ser imposible³ expresar n variables dependientes en función de las demás a través de las restricciones del problema o porque la solución del problema no se puede obtener.

Del método anterior se desprenden dos conclusiones importantes: primero hay que sustituir y después diferenciar para encontrar los puntos estacionarios. Otro enfoque al problema sería diferenciar para encontrar el cambio infinitesimal de las variables, los cuales son lineales, para posteriormente sustituir n variables en la función objetivo, mediante los cambios infinitesimales en las variables y las restricciones de igualdad, que harán que las variaciones en las variables estén restringidas de modo que las restricciones de igualdad sean estrictamente satisfechas. Con esto se tendrá un sistema de ecuaciones no lineales. Este método recibe el nombre de Variación Restringida⁴.

Para entender mejor el procedimiento, considere las ecuaciones (5) y (5.1). La primera, mediante el uso de la condición necesaria para encontrar un mínimo y, la segunda mediante la expansión en series de Taylor se pueden expresar como⁵

$$f'(x) = 0 = \frac{\partial f}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2} dx_2 \quad y, \quad (6)$$

$$dg = \frac{\partial g}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial g}{\partial x_2} dx_2 \quad (7)$$

Por lo tanto, se tienen dos ecuaciones con dos incógnitas, que se pueden resolver para encontrar los puntos estacionarios. Como se puede observar, la ecuación (6) representa la restricción impuesta en los desplazamientos infinitesimales dx_i .

Otro método analítico que normalmente se emplea en la solución de (5) es el de los multiplicadores de Lagrange. Este método, a pesar de que no tiene una gran aplicación a problemas reales es de importancia teórica, pues conduce al desarrollo de los criterios de optimalidad propuestos por Kuhn y Tucker.

Las condiciones necesarias para encontrar un óptimo se pueden expresar como:

$$df = \sum_{i=1}^m \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i = 0 \quad (8)$$

² Como ya se mencionó, éste no necesariamente es el caso.

³ Este caso se puede presentar cuando las restricciones son no lineales.

⁴ Del inglés *Constrained Variation*

⁵ Desarrollo para el caso en el que el problema consiste de dos variables.

y las variaciones admisibles para las x_i 's están dadas por:

$$dg_k = \sum_{i=1}^m \frac{\partial g_k}{\partial x_i} dx_i \text{ para } k = 1, 2, \dots, n \quad (9)$$

donde en el punto estacionario $g'_k = g'_k(\mathbf{x}^*) = 0$ para todo $k = 1, 2, \dots, n$

Por lo tanto, si se construye una nueva función objetivo donde se introducen nuevas constantes llamadas multiplicadores de Lagrange, se tiene:

$$F = f + \sum_{k=1}^n \lambda_k g_k \quad (10)$$

Entonces, mediante el uso de las condiciones necesarias se llega a que:

$$dF = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_i} \right) dx_i \quad (11)$$

para la cual dF debe ser igual a cero para todas las variaciones admisibles. Esto implica que se deben seleccionar ciertos valores de λ_k ($k = 1, 2, \dots, n$) para los cuales los primeros n desplazamientos se hagan cero, por lo tanto, sólo los desplazamientos independientes quedarán integrados en dF . Dado que dF debe de ser cero para todos los valores de los desplazamientos independientes, $m - n$, los coeficientes de éstos necesariamente deben de desaparecer, con lo cual:

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_i} = 0 \text{ para } i = n + 1, n + 2, \dots, m \quad (12)$$

Los multiplicadores proporcionan una forma de considerar todas las variables como independientes en el problema modificado (10), a diferencia de los dos métodos anteriores, donde en forma más o menos arbitraria, un conjunto de éstas es eliminado. Sin embargo, el problema se extiende a un mayor número de variables, $n + m$.

Las condiciones $\partial F / \partial x_i = 0$ ($i = 1, \dots, m$) y g_k ($k = 1, \dots, n$) proporcionan un sistema de $n + m$ ecuaciones con $n + m$ incógnitas.

Es importante destacar que las condiciones de suficiencia no se deben aplicar a la función objetivo modificada. Como ya se explicó, ésta sólo debe ser utilizada en la obtención de los puntos estacionarios.

Otro método interesante de solución es aquel que emplea una función penal, de modo que ésta fuerza la solución al límite de la restricción $g_k = 0$. Está técnica encuentra mayor aplicación en los métodos que utilizan búsquedas numéricas.

La idea básica tras la función penal es la construcción de una función objetivo modificada con la forma:

$$F = f + \sum_{k=1}^n P_k \phi(g_k) \quad (13)$$

donde $\Phi(g_k)$ puede adoptar cualquier forma funcional, por ejemplo $\Phi(g_k) = (g_k)^2$.

La función en (13) puede ser resuelta empleando cualquiera de los métodos disponibles para un problema de optimización sin restricciones con incrementos sucesivos en los valores de P. Para una sola restricción se ha probado que a medida que P tiende a infinito, la solución del problema modificado (13) se aproxima a la solución de la función objetivo original sujeta a su respectiva restricción.

Un problema de naturaleza general involucra aquél donde se encuentran presentes las restricciones de desigualdad, es decir, el problema en (5) se modifica en su restricción (5.1) para quedar como $g_k \leq 0$. En este caso, dos técnicas de solución se pueden aplicar. La primera consiste en resolver (5) como si se tratara de un problema sin restricciones, para después probar si los puntos estacionarios cumplen o no con las restricciones $g_k \leq 0$. Si este no es el caso, la solución al problema se encontrará en alguna(s) de la(s) restricción(es) limitantes. El segundo método emplea el concepto de variables de holgura con el fin de transformar una restricción de igualdad en desigualdad. Por ejemplo, si a $g_k \leq 0$ se le adiciona la variable x_{m+i} , se tendría una restricción de igualdad la cual puede ser tratada mediante los métodos antes discutidos, si en la solución la variable de holgura es cero, la restricción de igualdad se cumplirá exactamente. Otros dos métodos que se pueden aplicar a este tipo de problemas son los de variación restringida y multiplicadores de Lagrange.

El método de Multiplicadores de Lagrange es el más conveniente de todos lo anteriores, dado que el valor de los multiplicadores puede dar un indicativo importante del carácter de los puntos estacionarios. Es decir, si se introduce una variable de holgura por cada restricción de desigualdad, al aplicar las condiciones de primer orden al problema modificado, siempre se encontrará una ecuación de la forma:

$$x_{m+k} \lambda_k = 0 \quad (14)$$

obtenida como producto de la derivada de F con respecto a la variable de holgura. Dada esta estructura, es obvio que un multiplicador de Lagrange que no es cero, para alguna restricción k, implica que la solución necesariamente se encuentra en límite de la restricción. También es claro que la solución se puede encontrar en el límite cuando el multiplicador de Lagrange es igual a cero. Sin embargo, se puede afirmar que el punto estacionario se ubica en el interior de la región si el multiplicador es igual a cero y, por el contrario, cuando adquiere algún valor, la solución se debe encontrar en el límite de la restricción. Al considerar estas dos condiciones, las variables de holgura no necesitan ser introducidas en el problema. De hecho, de aquí surgirán los criterios de optimalidad propuestos por Kunh y Toker – vea sección 1.3 -.

Para concluir esta sección, sólo se mencionará que los métodos numéricos confieren su característica particular en la determinación de la dirección de búsqueda a partir del punto inicial, es decir, la dirección de movimiento dado por el vector d . La mayoría de los métodos tratan de mejorar la función objetivo a través de ciertos movimientos en las variables, r , a partir de un punto de inicio factible en una dirección particular d . Por lo tanto, las coordenadas del nuevo punto x_{j+1} serán:

$$x_{j+1} = x_j + rd. \quad (15)$$

La mecánica de solución consiste de los siguientes pasos:

- a) Seleccionar un valor factible para las variables independientes el cual satisfaga todas las restricciones del problema original. Este se considera como el punto inicial.
- b) Evaluar la función objetivo en este punto.
- c) Escoger, mediante cualquier método numérico, la dirección y magnitud del movimiento en las variables independientes (15), a modo de obtener otro punto factible.
- d) Evaluar la función objetivo en la segunda posición.
- e) Comparar la función objetivo de la segunda posición con aquélla del punto inicial.
- f) Si la segunda posición es mejor, este punto se convertirá en el punto inicial y la búsqueda se continúa. Si el punto inicial es mejor, se prosigue con la búsqueda en otra dirección, tal vez con un tamaño de movimiento r , menor.

1.2. Programación Lineal

El problema de optimización general en (1) puede dar origen a una forma especial cuando tanto la función objetivo, como las restricciones son lineales con respecto a las variables independientes. El problema, en este caso particular, se puede plantear como:

Minimizar:

$$F = \sum_{i=1}^m c_i x_i \quad (16)$$

Sujeto a:

$$\sum_{i=1}^m a_{j,i} x_i \leq b_j \quad \text{para } j = 1, 2, \dots, l$$

$$\sum_{i=1}^m a_{j,i} x_i = b_j \quad \text{para } j = l+1, l+2, \dots, n$$

$$x_i \geq 0 \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, m$$

Esta forma de representación se puede obtener cuando se usan modelos simplificados en donde en una pequeña región, el modelo se puede considerar como lineal, o en problemas complicados donde la función objetivo y restricciones son linealizadas, como en el caso de los métodos de aproximaciones sucesivas presentados en este trabajo.

Es importante destacar que las posibles soluciones a este tipo de problemas se encuentran en las intersecciones de las restricciones – puntos extremos -. Por lo tanto, si de antemano se sabe que la solución no se puede encontrar en el interior de la región bajo estudio, las técnicas de búsqueda sólo se centrarán en los límites de las restricciones. A continuación se da una explicación simplificada del método más usado y conocido para resolver este tipo de problemas: el método Simplex, propuesto por el matemático Dantzig.

El método Simplex consiste de un conjunto de iteraciones, donde los cálculos inician con un conjunto de valores para las variables independientes que satisfacen las restricciones del problema. Cada iteración trata de encontrar nuevos valores para los cuales la función objetivo mejorará hasta llegar al óptimo global. Los pasos seguidos en el método Simplex son:

Paso 1. Usar variables de holgura con el fin de que las l restricciones de desigualdad se conviertan en igualdad.

Paso 2. Escoger una solución inicial – básica en términos de programación lineal -, en donde n de las variables son no negativas – la base – y $N - n$ de las variables son cero. Aquí, N es la suma de las variables originales m más las de holgura n – una por cada restricción de desigualdad -. En este paso se determina el primer vértice del poliedro localizado en la región válida.

Paso 3. Escribir las variables en la base y la función objetivo en términos de $N - n$ variables remanentes⁶. Esta representación es más conveniente efectuarla en forma tabular que algebraica. A este formato se le conoce como Tableau. Por ejemplo, considere el sistema:

$$\begin{aligned}x_3 - 3x_1 + 2x_2 &= 2 \\x_4 + 2x_1 - 4x_2 &= 3 \\x_5 + x_1 + x_2 &= 6 \\F - 2x_1 + x_2 &= 0\end{aligned}$$

El cual tiene una representación en forma tabular dada por

		x_1	x_2
X_3	2	-3	2
X_4	3	2	-4
X_5	6	1	1
F	0	-2	1

La ubicación de las variables no básicas, en este caso x_1 y x_2 , deben ir en el primer renglón del Tableau. De mismo modo, las variables básicas y la función objetivo se les representa en la primera columna. La segunda columna incluye el valor de estas variables y la función objetivo – lado derecho de restricciones y función objetivo -.

Paso 4. Seleccionar una variable no básica con el fin de mejorar la función objetivo. En este punto se debe decidir en qué monto se puede modificar la variable no básica, de modo que ninguna de las restricciones se viole. Igualmente se debe calcular una nueva base, es decir, determinar la variable básica que saldrá de la base en sustitución de la nueva variable no básica. Este paso representa el movimiento de un vértice – intersección de restricciones – a otro.

Paso 4^a. Selección de la variable que se adicionará a la base. Para ello se debe escoger la variable no básica cuyo valor mejore la función objetivo. Esto se puede ver fácilmente de los coeficientes que multiplican a las variables en la función objetivo, que para el ejemplo son 2 y -1 – notar que en el formato de Tableau los signos se encuentran invertidos -. Por lo tanto, en el caso de minimización se elige el coeficiente más positivo, y en el caso de maximización el más negativo. Con base en lo anterior, la variable que entrará a la base se encuentra en la columna 2 (x_1).

Paso 4^b. Selección de la variable a remover de la base. La variable que se debe remover de la base es aquella que impone un límite en el movimiento de la variable no básica debido a la restricción impuesta sobre la básica. Es claro que la restricción limitrofe es aquella para la cual el radio entre los lados derechos de las restricciones – primera columna – a los coeficientes bajo la columna de

⁶ Estas variables reciben el nombre de no básicas.

la variable no básica seleccionada en el paso anterior, tome el valor positivo más pequeño⁷. En el ejemplo, los radios están dados por 2:-3, 3:2, 6:1, donde el radio positivo más pequeño corresponde a la restricción en el renglón 3 (variable x_4). Por tanto, la variable que se debe remover de la base es x_4 , ya que la restricción impuesta en ésta limita el movimiento de x_1 . Una vez seleccionadas estas dos variables, la base quedará integrada por x_1 , x_3 y x_5 y, las variables no básicas serán x_2 y x_4 .

Paso 4°. Modificar el Tableau para el nuevo conjunto de variables básicas y no básicas. Para explicar las reglas de transformación es necesario definir algunos términos. A la intersección entre la columna donde se encuentra la variable no básica y el renglón de la variable básica a remover se le llama pivote, la columna recibe el nombre de columna pivotal y, al renglón que contiene la variable básica renglón pivotal. Algunos coeficientes dentro de este renglón o columna se definirán como e_r y e_c respectivamente y, al pivote por e_p . Las reglas de transformación son:

1. Construir un nuevo Tableau, repetir el orden de las variables básicas y no básicas en la primera columna y primer renglón pero, intercambiando las posiciones de las variables básica y no básica seleccionadas en los pasos anteriores. Es decir, la variable x_1 , en el primer renglón, formará parte de la columna uno en donde se encuentra ubicada la variable x_4 y, viceversa, la variable x_4 ocupará el lugar de la x_1 .
2. Calcular el valor recíproco del pivote ($1/e_p$) y ponerlo en esa misma posición en el nuevo Tableau.
3. Para cada coeficiente en el renglón pivotal, excepto el pivote, calcular la relación e_r/e_p y ponerlo en cada una de las posiciones correspondientes en el nuevo Tableau.
4. Para cada coeficiente en la columna pivotal, excepto el pivote, calcular la relación $-e_c/e_p$ y ponerlo en cada una de las posiciones correspondientes en el nuevo Tableau.
5. Para cada una de las posiciones en blanco del nuevo Tableau, poner el valor:

$$e - \frac{e_r e_c}{e_p}$$

donde e_r es el valor en el renglón pivotal en la misma columna que el elemento e , y e_c es el valor de la columna pivotal en el mismo renglón que e .

Paso 5. Repetir el paso cuatro de modo que se obtenga un nuevo arreglo hasta el momento en que la función objetivo no se pueda mejorar. Esto sucede cuando no es posible introducir una variable en la base debido a que todos los coeficientes en el renglón de la función objetivo son positivos - caso de maximización - o, todos son negativos - caso de minimización -.

Al aplicar todas los pasos antes mencionados, se llega al siguiente Tableau:

	x_4	x_2
x_3	6.5	1.5
x_1	1.5	0.5
x_5	4.5	-0.5
F	3	1

⁷ Recuerde que esta condición surge debido a la restricción de no negatividad impuesta en las variables del problema lineal.

La explicación anterior trata de resumir los principios de los métodos usados para resolver problemas lineales. Sin embargo, es relevante indicar, que hay una multitud de problemas donde la metodología antes expuesta no se puede aplicar, por ejemplo, en el caso de iniciar con una base donde todas las variables son negativas. Por otro lado, hay problemas particulares que se resuelven con otro tipo de técnicas, como aquellos relacionados con flujos en redes. Puesto que hay un conjunto muy grande de literatura que aborda en detalle todo lo referente a programación lineal, no se ahondará más en este tema. Al lector interesado se le recomienda consultar la literatura especializada en el tópico.

1.3. Criterios de Optimalidad

Para desarrollar los criterios de optimalidad es necesario retomar el concepto de multiplicadores de Lagrange que, como se recordará, fueron usados para encontrar los puntos estacionarios cuando un problema está sujeto a restricciones, tanto de igualdad como de desigualdad. Es posible probar en un caso general, que si λ es mayor a cero, el punto estacionario no puede ser un máximo. Del mismo modo, si λ es menor a cero, el punto estacionario no puede ser un mínimo. La demostración se resume a continuación.

Suponga que existe un punto estacionario en F (10) para el cual $\lambda > 0$ – para el caso de una sola restricción -. Este punto x_0 debe estar localizado en la frontera de la restricción (sección 1.1), pues el multiplicador de Lagrange no es cero, por lo tanto,

$$g(x_0) = 0 \quad (17)$$

y, sólo son válidos los desplazamientos para los cuales:

$$dg \leq 0 \quad (18)$$

Suponga que existe una serie de desplazamientos dx_i de modo que:

$$dg = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial g}{\partial x_i} \right)_0 dx_i < 0 \quad (19)$$

La ecuación (19) representa un conjunto de desplazamientos para los cuales es posible decrementar el valor de la restricción, es decir, se permiten movimientos⁸ hacia el interior de la región envuelta por la frontera de la misma. En el punto estacionario restringido se debe de cumplir que:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial x_i} \right) = 0 \text{ para } i = 1, 2, \dots, m \quad (20)$$

donde $F = f + \lambda g$, de la cual se obtiene la siguiente relación:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_0 = -\lambda \left(\frac{\partial g}{\partial x_i} \right)_0 \text{ para } i = 1, 2, \dots, m \quad (21)$$

⁸ No todo punto es accesible a estos movimientos.

o lo que es lo mismo:

$$\sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)_o dx_i = -\lambda \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial g}{\partial x_i} \right)_o dx_i \quad (22)$$

para finalmente obtener:

$$df = -\lambda dg \quad (23)$$

Entonces, si el punto estacionario restringido es, del mismo modo, accesible a un desplazamiento infinitesimal, existe un desplazamiento tal que:

$$df = -\lambda dg > 0 \text{ para } \lambda \text{ positivo} \quad (24)$$

En consecuencia, un movimiento permisible para dx_i hacia el interior de la región, resulta en un incremento de la función objetivo f . En conclusión, un punto estacionario en la frontera de la restricción no puede ser un máximo, pues hay puntos interiores que pueden incrementar el valor de la función objetivo. Por ello, para que un punto que es accesible y restringido sea un máximo, es necesario, pero no suficiente, que el multiplicador de Lagrange sea no positivo. De igual modo, una condición necesaria para que un punto accesible y restringido sea un mínimo, es que el multiplicador de Lagrange sea no negativo. En caso de que el multiplicador de Lagrange sea igual a cero, no se puede decir si el punto estacionario es un máximo o un mínimo. Sin embargo, si el multiplicador de Lagrange es negativo definido, el punto estacionario accesible es claramente un máximo, dado que f decrece o permanece constante para todo cambio admisible en los desplazamientos alrededor de la vecindad del punto estacionario⁹.

En la siguiente tabla se resumen las condiciones necesarias de optimalidad. Estos resultados se deben a los trabajos de Kunh y Tucker.

Signo del multiplicador de Lagrange λ	Punto Estacionario	
	Localización	Naturaleza
Negativo, diferente de cero	En la frontera	No es mínimo
Positivo, diferente de cero	En la frontera	No es máximo
Cero	En la frontera o en el interior de la región válida	Es un máximo, un mínimo, o ninguno de los dos

⁹ La discusión presedente se base en el hecho de que la desigualda es de la forma $g(x) \leq 0$. Si la restricción fuera de la forma $g(x) \geq 0$, entonces, el signo del multiplicador de Lagrange se tiene que invertir en la explicación anterior.

En años recientes ha habido un esfuerzo intenso de investigación enfocado a encontrar algoritmos eficientes capaces de resolver problemas no lineales con un número muy grande de ecuaciones y grados de libertad. El propósito principal de tales algoritmos es encontrar la mejor solución en un período de tiempo razonable; al mismo tiempo, se trata de usar los recursos computacionales de una manera eficiente. Entre los métodos propuestos se pueden distinguir aquellos que trabajan con aproximaciones sucesivas, sean estos de naturaleza lineal o cuadrática. La técnica de aproximación lineal se basa en el concepto de transformación de un problema no lineal¹ en lineal, mediante la expansión del primero alrededor de un punto base con la ayuda de la secuencia de Taylor – ver 1.1 –. Para pequeños valores en los deltas, los términos de orden superior pueden ser eliminados; así, mediante el empleo del gradiente, el problema no lineal se transforma en uno lineal, donde las incógnitas del seudoproblema lineal serán los deltas de incremento de las variables independientes, por tanto, la solución al problema lineal (LP), es equivalente a las secuencias proporcionadas por los algoritmos no lineales, es decir, los deltas equivalen al paso de avance $r \cdot d^2$.

Las aproximaciones lineales parecen razonables, pues las técnicas de programación lineal se han aplicado exitosamente a la resolución de problemas de grandes dimensiones, los cuales incluyen restricciones tanto de igualdad como de desigualdad. Además, el código para resolver problemas lineales, ha sido altamente optimizado, es decir, es confiable, rápido y eficiente. A pesar de que estas metodologías lucen prominentes, algunas dificultades y deficiencias han sido señaladas [7]:

1. El proceso de optimización es demasiado lento si el valor de los puntos precedentes es forzado a ser factible o, al menos extremadamente cerca de la factibilidad.
2. Es muy difícil comparar dos vectores sucesivos de solución, x , que dan diferentes valores de la función $f(x)$, cuando se da el caso en el cual una o más restricciones son violadas.
3. La solución del problema lineal puede dar origen a direcciones de búsqueda deficientes si la función objetivo, o la función objetivo restringida es altamente no lineal. Del mismo modo, las direcciones arrojadas por la solución del problema lineal, con cierto grado de certeza, pueden no conducir al óptimo del problema original cuando la superficie de respuesta es alongada.
4. En adición a lo anterior, el uso de algún procedimiento de aceleración para utilizar la información anterior, con el fin de que el progreso en la optimización sea más rápido, es muy difícil de diseñar para los métodos que usan aproximaciones lineales.

Los puntos uno y tres tienen que ver con la estructura del problema y la naturaleza propia de los algoritmos. Los puntos dos y cuatro se encuentran más relacionados con la implementación en computadora. Este trabajo tratará de probar que es posible la implementación de un algoritmo adecuado, lo suficientemente confiable como para ser aplicado a problemas de gran escala, como aquellos que se presentan en optimización en la industria del petróleo. Además de mostrar por qué su aplicación ha tenido tanto auge en este sector, se tratará de dar elementos de modo que su aplicación pueda extenderse a otro tipo de industrias.

¹ Notar que el problema puede ser no lineal tanto en la función objetivo como en las restricciones. De ahora en adelante, se sobre entiende que se está hablando de un problema restringido, pues de lo contrario hay técnicas muy eficientes para resolver problemas sin restricciones.

² Como se recordará, sec 1.1, r representa el paso de avance – obtenido mediante la búsqueda en una dimensión – y, d las direcciones de búsqueda.

Los puntos claves de los tres algoritmos que a continuación se discuten serán la forma en la que estos procedimientos cambian los límites impuestos en los deltas a través de cada iteración, el criterio de terminación del algoritmo y, la eficiencia en implementación. Ésta última, se relaciona más con el *software* usado y la habilidad para estructurar el código del algoritmo.

De las variantes de ALS probadas, se tratará de proporcionar una evaluación de estos métodos comparando su eficiencia global³ con la de aquel algoritmo para resolver problemas no lineales bien conocido, MINOS, desarrollado por Bruce Murtagh y Michael A. Saunders. Recomendaciones para mejorar los algoritmos, la sensibilidad a los cambios de los parámetros usados por éstos, y la utilidad de aplicar las metodologías seleccionadas a otros problemas deben de ser proporcionadas. Este análisis se concentrará, fundamentalmente, en la forma en que se seleccionan los límites en los deltas, dado que esto determina la eficiencia de los algoritmos.

2.1. Generalidades

Los algoritmos agrupados bajo Aproximación Lineal Sucesiva (ALS) resuelven los problemas de optimización no lineal a través de la resolución de una secuencia de pseudo programas lineales (LP). En muchos problemas, sólo algunas variables aparecen en forma no lineal, tanto en la función objetivo como en una o más restricciones. Adicionalmente, casi siempre hay un subconjunto de restricciones que son enteramente lineales. Por lo tanto, si se considera el problema no lineal (PNL) de la siguiente forma:

Problema PNL

$$\text{Minimizar } g_0(\mathbf{x}) + \mathbf{a}_0\mathbf{y} = h(\mathbf{x},\mathbf{y}) \quad (25)$$

Sujeto a

$$g(\mathbf{x}) + \mathbf{A}_1\mathbf{y} = \mathbf{b}_1 \quad (m_1 \text{ renglones}), \quad (25a)$$

$$\mathbf{A}_2\mathbf{x} + \mathbf{A}_3\mathbf{y} = \mathbf{b}_2 \quad (m_2 \text{ renglones}), \quad (25b)$$

$$l_1 \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{u}_1, \quad l_2 \leq \mathbf{y} \leq \mathbf{u}_2 \quad (25c)$$

donde,

$l_2, \mathbf{u}_2, \mathbf{y} \in E^{n_2}$, el espacio Euclidiano en n_2 ,

$l_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{x} \in E^{n_1}$, el espacio Euclidiano en n_1 y,

$g_0(\mathbf{x}), g(\mathbf{x})$ son continuas y diferenciables con valores reales sobre las restricciones definidas en PNL.

Las n_1 variables no lineales \mathbf{x} pueden o no, estar incluidas en la función objetivo a través de la función no lineal $g_0(\mathbf{x})$ o, en las primeras m_1 restricciones, representadas en la función vectorial $g(\mathbf{x})$. La dimensión del vector \mathbf{y} , n_2 , está conformada por variables lineales \mathbf{y} , el último conjunto de restricciones, m_2 , son lineales. Tanto las variables lineales como no lineales pueden estar sujetas a límites inferiores y superiores, donde éstos pueden tomar valores entre $+\infty$ o $-\infty$ respectivamente. Cualquier problema no lineal se puede expresar por (25) eligiendo las variables

³ Este término se define en función de los siguientes parámetros: 1) validez de las soluciones, 2) tiempo de solución, 3) tamaño del algoritmo, 4) número de evaluación de funciones, 5) número de evaluación de gradientes, y 6) número de iteraciones.

lineales y para que también incluyan las variables de holgura o lógicas. Es importante recalcar que en todo el desarrollo siguiente se supone que las funciones no lineales $g_0(x)$ y $g(x)$ son continuas y diferenciables en cualquier punto. Por otro lado, estas funciones no necesitan ser separables.

Si se empieza por un punto fijo, $(x_b, y_b) \in E^n$, cada función no lineal, g_i , se puede aproximar utilizando la expansión de la Serie de Taylor alrededor del punto x_b . Si se eliminan los términos de orden superior en la aproximación, sólo quedará el primer término que define la aproximación lineal. Definiendo el *Jacobiano* de la función $g(x)$ como:

$$J(x) = (\partial g_i / \partial x_i)^4 \tag{26}$$

entonces, la función $g(x)$ se puede remplazar por su aproximación lineal $g(x_b) + J(x)d$ alrededor de x_b , donde $d = x - x_b$ y, del mismo modo se puede aplicar este conjunto de relaciones a la función $g_0(x)$. Esta linearización sobre el punto x_b sólo será válida para valores pequeños de d , por lo tanto, límites inferiores y superiores se tienen que imponer como restricciones en los deltas⁵

$$-s \leq d \leq s^6 \tag{27}$$

donde s es un vector en el espacio Euclidiano de dimensión n_1 con todos sus componentes positivos. El valor de s representa los límites impuestos a los deltas⁷ de un subproblema LP. En la siguiente iteración, el valor de x estará dado por $x = x_b + d$. Dado que el nuevo valor de las variables no lineales debe de satisfacer los límites en las restricciones del problema no lineal original (25 a, c), entonces

$$l_1 \leq x_b + d \leq u_1 \tag{28}$$

Después de combinar las ecuaciones (27) y (28) con la expansión de la serie de Taylor y, eliminando x mediante el uso de la relación

$$x = x_b + d \tag{29}$$

el problema no lineal se convierte en uno lineal, donde las incógnitas serán los deltas de cambio, d , que definen un nuevo punto en las variables no lineales independientes x .

LP(x_b, s)

Minimizar $\Delta g_0(x_b)d + a_0 y$ (30)

Sujeto a

$$J(x_b)d + A_1 y = b_1 - g(x_b), \tag{30a}$$

$$A_2 d + A_3 y = b_2 - A_2 x_b \tag{30b}$$

$$\max(l_1 - x_b, -s) \leq d \leq \min(u_1 - x_b, s), \quad l_2 \leq y \leq u_2 \tag{30c}$$

⁴ También se usará la representación $J(x) = \Delta g$

⁵ Del mismo modo, estos límites tratan de controlar el error en la aproximación de primer orden.

⁶ Los límites en (27) se pueden generalizar a $k \leq d \leq s$, sin embargo, dados los propósitos de este trabajo, no se incluirá este tipo de generalización.

⁷ Step Bounds

Dado que $LP(x_b, s)$ es una aproximación lineal de primer orden a PNL, válida en el intervalo alrededor de x_b , será útil como guía para la solución de PNL. La magnitud de la norma del vector de los deltas d , es decir, el error en la aproximación es una función de $|d|^2$ y de las matrices Hessianas de g_0 y g_i , para todo $i \in n_1$. La naturaleza propia de las Hessianas indica el grado de curvatura de la región restringida.

En ALS, el problema $LP(x_b, s)$, al resolverse, brinda la solución (d_s, y_s) . Es importante resaltar que la solución, al menos temporalmente, se presupone como factible. Si el punto sucesor, $(x_b + d_s, y_s)$, cumple con ciertos criterios⁸, este es aceptado, y los límites en los deltas, s , probablemente puedan ser incrementados. De otro modo, s se reduce a s' y el problema $LP(x_b, s')$ se resuelve nuevamente. El algoritmo terminará cuando $|d|^2$, en determinada iteración, sea menor a cierta tolerancia. Dado que el problema en (30) es una aproximación sobre un punto factible de (25), al conjunto de problemas LP se le conoce como pseudo problemas o subproblemas lineales del sistema en (25).

Es evidente que uno de los puntos fuertes de resolver el PNL en (25) mediante el uso de ALS, es la habilidad de usar el código existente para los problemas LP, pues estos códigos brindan la facilidad para solucionar problemas con gran número de ecuaciones, donde éstas y sus variables pueden o no estar restringidas. Estos códigos se caracterizan por usar sistemas compactos de matrices, manejo simultáneo de múltiples pivotes, introducción simultánea de variables no básicas en la base y, varias reglas heurísticas que aplican cuando la solución al LP no es factible; además, el potencial para emplear software⁹ que integre diversas aplicaciones, por ejemplo, simuladores, obtención de gradientes y, constructor de reportes, pueden ser incorporados fácilmente en este tipo de metodologías.

Para probar convergencia a una solución única al aplicar técnicas de aproximaciones lineales, se deben cumplir ciertos requerimientos matemáticos, a saber, la región factible definida por el conjunto de restricciones debe de conformar un espacio convexo, la función objetivo debe ser cóncava y las derivadas parciales deben de existir sobre todo el conjunto de soluciones al problema. También se puede probar [5] que si la solución se encuentra en un vértice en el conjunto factible, ALS presenta una velocidad de convergencia cuadrática. De acuerdo con F. Palacios [5], la adición de reglas sofisticadas, para controlar el límite en los deltas, puede hacer que las propiedades arriba mencionadas sean válidas aún en ausencia de convexidad.¹⁰

De modo que las condiciones de Kuhn-Tucker se puedan probar para el problema no lineal general, PNL en (25), en la siguiente explicación se usará la definición dada en (1)¹¹.

La aproximación lineal alrededor de punto x^0 transforma el problema anterior general (1) en

⁸ Los criterios son función directa del algoritmo empleado. Detalle de los mismos se puede encontrar en las secciones correspondientes a las técnicas lineales.

⁹ Agrupado bajo lo que se conoce como *Model Management Systems*.

¹⁰ Mayores detalles sobre las propiedades matemáticas de las técnicas ALS y otros algoritmos relacionados con la linearización de los problemas no lineales continuos, se pueden consultar en la tesis doctoral de F. Palacios en el capítulo dos. Dado que este trabajo no se enfoca en resultados matemáticos, la mayoría de éstos son omitidos, a excepción de que la demostración matemática contenga elementos de apoyo al presente estudio.

¹¹ La representación corresponde al problema no lineal general. Por ser más sencilla y de forma ampliamente difundida en libros de texto, se escoge este tipo de presentación para las demostraciones que siguen, no siendo el caso para la representación de los algoritmos ALS discutidos posteriormente.

LP (x^0, s)

$$\text{Minimizar} \quad \Delta f(x_b)d \quad (31)$$

Sujeto a

$$\Delta g(x_b)d + g(x_b) \leq 0,$$

$$\Delta h(x_b)d + h(x_b) = 0$$

$$\max(l - x_b, -s) \leq d \leq \min(u - x_b, s)$$

Si x^* es un punto cualquiera del conjunto de restricciones, con la característica de pertenecer a la región factible de (1), entonces x^* resuelve el problema lineal en (31), si y sólo si satisface las condiciones de primer orden de optimalidad de Kuhn-Tucker (sección 1.3). La demostración de la afirmación anterior implica que, de la teoría de programación lineal, $g(x^*) \leq 0$, $h(x^*) \leq 0$, $w^* g(x^*) = 0$, $v^* h(x^*) = 0$, donde $w^* \geq 0$ dado que $\Delta g(x^*)d = 0$ y $\Delta h(x^*)d = 0$; donde w^* y v^* son los multiplicadores de Lagrange correspondientes a las restricciones de igualdad y desigualdad respectivamente. Por otro lado, si se toma en cuenta la dualidad, $-w^* \Delta g(x^*) - v^* \Delta h(x^*) = \Delta f(x^*)$, entonces, el primal implica que x^* es factible en el problema (1) y que la holgura complementaria se cumple, mientras que el dual implica que el Lagrangeano es estacionario en x^* . Estas dos condiciones, por lo tanto, implican que x^* es un punto que cumple las condiciones de primer orden de Kuhn y Tucker.

De la demostración anterior, se pueden dar diversos significados a las direcciones generadas por los algoritmos ALS, con dependencia en los valores que puedan adoptar los d :

a) Si se asume que x^k es factible en el problema original (1), es decir $g(x) \leq 0$ y $h(x) = 0$, y, además, si se supone que d^* es la solución óptima de (31), si d^* es cero, de acuerdo a la demostración anteriormente entonces, d^* satisface las condiciones de primer orden de Kuhn-Tucker para el óptimo local del problema PNG, de otro modo, si alguna de las d^* es diferente de cero, entonces se sigue que la dirección d^* , es una dirección descendente de $f(x)$, dado que $\Delta f(x^k)d^*$ debe de ser estrictamente negativo.

Para establecer un veredicto sobre la factibilidad o no factibilidad de una nueva iteración x^{k+1} definida por la ecuación

$$x^{k+1} = x^k + r d^k \quad (32)$$

para valores de r entre 0 y 1, esto dependerá de la curvatura de aquellas restricciones que sean limitantes, es decir, en ausencia de restricciones de igualdad, se sigue que si todas las de desigualdad se satisfacen estrictamente, o en otras palabras $g(x) < 0$, entonces existe un valor r , o conjunto de los mismos, los cuales mantendrán al problema factible y, simultáneamente, decrementen el valor de la función objetivo. Si no se tomará en cuenta esta afirmación, el supuesto en (a) sería falso, dado que es posible que $\Delta g_i d = 0$ para alguna i . Si todas las restricciones fueran lineales, entonces, cuando el ALS cumpla con el conjunto de restricciones, ésta permanecerá factible a través de todo el proceso.

b) Si ahora se asume que en la iteración x^k , el PNG no es factible, esto es que x^k no pertenece al espacio factible de soluciones, entonces, es imposible para este caso tener d^* igual a cero, dado que d^* no pertenece al espacio de soluciones factibles de PNG – el cual se define como F_G – y al

espacio de LP – nombrado por F_L -. A pesar de lo anterior, se debe de notar que las restricciones linealizadas se definen de tal modo que los algoritmos ALS siempre tratarán de reducir las no factibilidades de aquellas restricciones que son violadas.

En conclusión, la presencia de restricciones no lineales hace imposible establecer si d^* es una dirección de descenso mínimo de la función de la suma de infactibilidades [5] denotada por

$$S \inf gh(x^k) = \sum_{g_i > 0} g_i(x^k) + \sum |h_i(x^k)| \quad (33)$$

ya que, cuando $x^k \notin F_G$ es posible que el problema lineal restringido (31) sea inconsistente. Es decir, el PNG puede ser consistente debido a que muchas veces, los límites en los deltas se pueden escoger arbitrariamente pequeños, pero por otro lado, sólo la selección de límites relajados permite, eventualmente, que los algoritmos ALS cumplan con el conjunto de restricciones, lo cual imposibilita concluir sobre la dirección de búsqueda.

c) Como ya se señaló, en la iteración actual x^k , el PNG puede ser no factible, y el LP restringido puede ser inconsistente. Estas inconsistencias pueden tener lugar debido a las siguientes situaciones:

- 1.- Los límites en los deltas son altamente restrictivos.
- 2.- LP(x^k , s) es inconsistente, mientras que el PNG es consistente. Este tipo de situaciones se conocen como localmente inconsistentes.
- 3.- El problema PNG es globalmente inconsistente. No hay forma de determinar, en la práctica, si se da la inconsistencia local o global, por lo tanto, no se puede diferenciar entre 2 y 3. Detalles adicionales sobre este tipo de situaciones se pueden encontrar en [5].

2.2. Método de Aproximaciones Sucesivas (MAP)

El planteamiento del problema es igual al descrito en (30). La variable d se particiona de la siguiente manera:

$$d_i^+ = d_i \text{ cuando } d_i \geq 0,$$

$$d_i^- = -d_i \text{ cuando } d_i \leq 0$$

entonces, el problema (30) se transforma en

$$\begin{aligned} &LP(x_b, s) \\ &\text{Minimizar} \quad \Delta g_0(x_b)d^+ - \Delta g_0(x_b)d^- + a_0 y \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} &\text{Sujeto a} \\ &J(x_b)d^+ - J(x_b)d^- + A_1 y = b_1 - g(x_b), \end{aligned} \quad (34a)$$

$$A_2 d^+ - A_2 d^- + A_3 y = b_1 - A_2 x_b \quad (34b)$$

$$\max(l_1 - x_b, -s) \leq d^+ - d^- \leq \min(u_1 - x_b, s), \quad l_2 \leq y \leq u_2,$$

$$d^+, d \geq 0. \tag{34c}$$

Un algoritmo de programación lineal puede resolver el problema (34). Si después de que (34) es resuelto, $|d_i^+ - d_i^-| \approx 0$ para cada $i = 1, 2, \dots, n_2$ en el espacio no lineal y, la localización en el cual las derivadas parciales se basaron se mantiene sin cambio, la solución del problema LP(x_b, s) es la solución del problema no lineal original. Si $|d_i^+ - d_i^-| > 0$ para alguna i , o si las posiciones dadas por los límites en los deltas cambian, el valor de x se modifica a $x_b + (d^+ - d^-)$ y el proceso se repite nuevamente.

El criterio para finalizar el proceso iterativo toma en cuenta el valor dado por el cambio en $|d_i^+ - d_i^-|$ para cada i . Para este método, no hay ningún indicativo de cómo los límites en los deltas, s , a través de cada iteración deben de ser modificados. La técnica sólo hace referencia [13] a las medidas precautorias que se deben de tomar en cuenta cuando se observa un ciclo en el valor de la función objetivo¹². Si este es el caso, entonces, se sugiere modificar la magnitud de s – en general, disminuir los límites en los deltas -. Nada se dice con respecto al caso en el cual las restricciones de PNL, se vuelven no factibles en cada iteración por los nuevos valores asignados a las variables independientes en la aproximación lineal.

Los autores de este algoritmo [13] no proporcionan ninguna prueba de convergencia, sólo se menciona que MAP convergerá con el grado de precisión deseado si la solución se encuentra en un punto extremo y, el sistema cuenta con una función objetivo cóncava con restricciones convexas. También se menciona que el método mueve las variables de un punto en el espacio a punto mejor dentro del grado de precisión establecido por las aproximaciones¹³. En esta forma, de acuerdo con los autores, un óptimo se localiza exactamente, o una oscilación alrededor del óptimo resulta. Cuando el algoritmo empieza a oscilar entre dos soluciones, se sugiere ajustar los límites en los deltas en una forma inteligente, con esto, de acuerdo con los autores, el proceso de oscilación se puede reducir al grado que se desee.

2.3. Método de Aproximación Sucesiva Restringida¹⁴ (ASR)

Este método se basa en limitar la violación de las restricciones no lineales mediante la reducción en los límites impuestos en los deltas, s , es decir, se forza al algoritmo ALS a tomar pequeños avances en las variables independientes. La restricción en los deltas podría parecer como una limitación debido a que la velocidad de convergencia, en algunos casos, sería lenta, y en otros, ni siquiera alcanzada, debido una potencial inestabilidad en el algoritmo lineal¹⁵. Por lo tanto, es recomendable conciliar entre la mejora en el valor de la función objetivo y, la proporción en la que se permite violar las restricciones del problema no lineal. A modo de alcanzar esta conciliación, la siguiente función que cuantifica la suma de infactibilidades se propone:

$$\text{sinf}(x, y) = \frac{|b_1 - g(x) - A_1 y|}{\max(0, y - u_2)} + \max(0, l_1 - x) + \max(0, l_2 - y) + \max(0, x - u_1) + \tag{35}$$

¹² El fenómeno se presenta cuando la iteración actual toma valores en sus variables independientes que ya se habían asumido previamente, por lo tanto, las soluciones subsecuentes pueden encontrarse oscilando entre dos valores de función objetivo sin la posibilidad de convergencia.

¹³ Determinado por la magnitud de los límites impuestos en los deltas, o variables obtenidas de la solución de los subproblemas lineales.

¹⁴ Del término en inglés *Successive Linear Programming Reject (SLPR)*.

¹⁵ Posteriormente se mostrará que éste puede ser el caso cuando no se seleccionan en forma adecuada los parámetros de los que hace uso este algoritmo, ya que los límites en los deltas, bajo ciertas condiciones pueden, reducirse a cero.

donde cada $\mathbf{0}$ es un vector de la dimensión apropiada y, para cada vector \mathbf{v} ,

$$|\mathbf{v}| = \sum |v_i| \quad (35a)$$

$$\max(\mathbf{0}, \mathbf{v}) = \sum \max(0, v_i) \quad (35b)$$

Ningún término de las restricciones lineales en el problema (34) necesita incluirse en (35), dado que estas restricciones también aparecen en el problema $LP(\mathbf{x}_b, s)$. Si la solución de $LP(\mathbf{x}_b, s)$ es factible, entonces, por (34c), todo límite inferior y superior para \mathbf{x} y \mathbf{y} son satisfechos, por lo tanto, todos los términos de la función $\text{sinf}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, exceptuando el primero, son cero. Si la solución al problema $LP(\mathbf{x}_b, s)$ no es factible, entonces el método simplex aplicado al problema termina en la fase I con las restricciones linealizadas en (34a) y (34b) satisfechas, pero con algunas violaciones en los límites de (34c) para algunas variables que son básicas. En este caso, los cuatro términos de la función $\text{sinf}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ corresponden a la fase I de la función objetivo de $LP(\mathbf{x}_b, s)$.

El algoritmo ASR usa la función objetivo compuesta

$$\text{comp}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = g_0(\mathbf{x}) + a_0\mathbf{y} + \beta \text{sinf}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (36)$$

donde β es un escalar positivo y $\text{sinf}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ se define en (35). La función compuesta en (36) se emplea para decidir si un nuevo punto debe de ser o no aceptado. La técnica incorpora durante el proceso la separación del algoritmo en dos fases, I – II; $\text{comp}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ es usada en la aceptación de la fase II, mientras que $\text{sinf}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ es usada en la fase I. Durante cualquiera de las fases, si la solución de cualquier problema $LP(\mathbf{x}_b, s)$ no es factible, se define su solución como cualquier punto (\mathbf{d}, \mathbf{y}) , el cual minimiza la función objetivo del problema LP usual en la fase I – suma de violaciones en las restricciones -.

Los pasos seguidos en el algoritmo ASR son:

0. Datos:

ϵ_f	=	tolerancia permitida en la violación de las restricciones,
ϵ_1, ϵ_2	=	tolerancias que determinan la terminación del algoritmo,
n_s	=	número consecutivo de iteraciones en el cambio de la función objetivo que determinan la terminación del algoritmo,
lim	=	valor que dictamina cuándo se debe iniciar un incremento en los límites impuestos en los deltas,
a	=	factor de incremento en los límites impuestos en los deltas,
r	=	factor de reducción en los límites impuestos en los deltas,
\mathbf{x}_0	=	valor inicial para las variables no lineales,
\mathbf{y}_0	=	l_2 o otro valor razonable inicial,
s_0	=	valores iniciales para los límites impuestos en los deltas,
inicializar k	=	0,
fase	=	I.

1. Resolver $LP(\mathbf{x}_k, s_k)$ para obtener la solución $(\mathbf{d}_k, \mathbf{y}_{sk})$.

2. Si $\|\mathbf{d}_k\|_\infty < \epsilon_2$, terminar.

3. Si $(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_{sk})$ es ϵ_f factible, fase =II.

4. Si $LP(\mathbf{x}_k, \mathbf{s}_k)$ no es factible, ir al paso 6.
5. Si fase = II, ir al paso 8.
6. Si $\text{sinf}(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_{sk}) < \text{sinf}(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{sk})$.
 - 6.1. Hacer $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_{sk+1} = \mathbf{y}_{sk}$,
 - 6.2. (Posiblemente) incrementar algunos límites en los deltas, \mathbf{d}_k , para obtener \mathbf{s}_{k+1} ,
 - 6.3. $k = k + 1$ e ir al paso 1
7. Si $\|\mathbf{s}_k\|_\infty < \varepsilon_2$, parar. Si no, hacer $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_{sk}, \mathbf{s}_{k+1} = r\mathbf{s}_k, k=k + 1$ e ir al paso 1.
8. Si $\text{comp}(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_{sk}) \geq \text{comp}(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{sk})$, ir al paso 7, si no
 - 8.1. Hacer $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_{sk+1} = \mathbf{y}_{sk}$,
 - 8.2. (Posiblemente) incrementar algunos límites impuestos en los deltas, \mathbf{s}_{k+1}
9. Si el cambio en el valor de la función objetivo es lo suficientemente pequeño, parar, si no, hacer $k = k + 1$ e ir al paso 1.

El algoritmo permanece en fase II una vez que se entra en esta etapa, aun cuando puntos subsecuentes sean ε - no factibles. Para determinar ε - factibilidad, se emplea la siguiente medida relativa determinada por

$$\text{sinf}(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_{sk}) < \varepsilon_f \sum_{i \in V} (1 + |\text{rhs}_i|) \quad (37)$$

donde V es el índice que establece las restricciones violadas en el punto $(\mathbf{x}_k + \mathbf{d}_k, \mathbf{y}_{sk})$ y, rhs_i es el coeficiente del lado derecho de la restricción i th violada. En el paso 9 la siguiente condición es verificada

$$|\Delta f| = |f(\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{y}_{sk+1}) - f(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{sk})| < \varepsilon_1 (1 + |f(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_{sk})|) \quad (38)$$

para n_s iteraciones consecutivas, donde f es la función objetivo del problema no lineal, PNL. En los pasos 6 y 8, sólo los límites en los deltas en las variables no lineales que no son básicas en la solución del problema lineal $LP(\mathbf{x}_k, \mathbf{s}_k)$ son candidatos para un incremento – si la solución de $LP(\mathbf{x}_k, \mathbf{s}_k)$ no es degenerada, todos los otros límites de los deltas no se encuentran activos -. Sea z_i una variable no básica y no lineal, con un límite s_i . Entonces, se asocia con z_i un contador, c_i , que inicialmente vale cero. Este contador va cambiando de acuerdo a las siguientes reglas:

$$\begin{aligned} z_i = s_i &\Rightarrow c_i = c_i + 1, \\ z_i = -s_i &\Rightarrow c_i = c_i - 1, \\ z_i \text{ se vuelve básica} &\Rightarrow c_i = 0. \end{aligned}$$

Si en cualquier iteración, $|c_i| = \text{lim}$, se reemplaza s_i por as_i y c_i se inicializa a cero. Una posible extensión de esta estrategia es aplicar los pasos lógicos, arriba descritos, a los límites en los deltas de las variables no lineales degeneradas que se encuentran en la base.

La función comp en (36) es una función de penalización exacta. Esto es, si β es lo suficientemente grande, comp tiene un mínimo irrestricto en la solución del problema PNL. El escalar β necesita ser solamente más grande que el mayor de los multiplicadores de Lagrange óptimos PNL¹⁶.

¹⁶ Se omite su demostración por encontrarse fuera de los alcances de este trabajo. Mayores detalles se pueden consultar en la tesis doctoral de Fernando Eugenio Palacios-Gómez [5]

2.4. Método de Aproximación Sucesiva con Penalización (ASP)¹⁷

Exxon implementó una variante interesante al algoritmo SLP. En esta técnica, el problema (34) se resuelve con la incorporación de variables llamadas de desviación con la característica de ser no negativas, Sn_i^+ y Sn_i^- , de modo que se tiene el siguiente problema lineal:

LP(x, y, P)

$$\text{Minimizar } \Delta g_0(x_b) d^+ - \Delta g_0(x_b) d^- + a_0 y + P \sum_i (Sn_i^+ + Sn_i^-) \quad (39)$$

Sujeto a

$$J(x_b)d^+ - J(x_b)d^- + A_1 y + Sn^+ - Sn^- = b_1, \quad (39a)$$

$$A_2 d^+ - A_2 d^- + A_3 y = b_2 - A_2 x_b \quad (39b)$$

$$l_1 \leq x \leq u_1, \quad l_2 \leq y \leq u_2, \quad -D \leq d^+ - d^- \leq D,$$

$$d^+, d^-, \geq 0, \quad Sn_i^-, Sn_i^+ \geq 0 \quad (39c)$$

donde P es un escalar positivo y D representa un vector de límites impuestos en los deltas para el subproblema lineal.

Al término multiplicado por P en (39) se le puede dar el siguiente significado. La función

$$F(x, y, P) = g_0(x, y) + P \sum_{i \in NC} |g_i(x, y) - b_i|, \quad (40)$$

(donde NC son las variables no lineales)

es, bajo ciertas consideraciones, una función penal exacta para el problema no lineal en (25). Sobre el supuesto de que P es mayor que el valor absoluto máximo de los multiplicadores de Lagrange óptimos para las restricciones no lineales (25a), entonces cualquiera de los puntos Kuhn-Tucker del problema PNL es un punto estacionario de la función F (40) sujeto a las restricciones lineales y a los límites en los deltas.

Una aproximación para minimizar F , es minimizar la secuencia de aproximaciones a F dentro de alguna zona de confianza restringida, sobre la cual la aproximación es considerada como adecuada. La aproximación de F usada en (40) reemplaza g_0 y g_i por la aproximación de primer orden obtenida mediante la aplicación de la serie de Taylor, Lg_0 y Lg_i . Con esta sustitución, la siguiente función modificada se obtiene:

$$\xi(x, y, P) = \Delta g_0 + P \sum_{i \in NC} |\Delta g_i - b_i|, \quad (41)$$

Ahora bien, el problema de minimización ξ es equivalente a un problema lineal. Si además, se efectúa la siguiente transformación

$$\Delta g_i - b_i = Sn_i^- - Sn_i^+ \quad y \quad Sn_i^-, Sn_i^+ \geq 0 \quad (42)$$

¹⁷ Del término en inglés *Penalty Successive Linear Programming* (PSLP)

entonces,

$$|\Delta g_i - b_i| = Sn_i^- + Sn_i^+ \quad (43)$$

con la consideración de que $Sn_i^- Sn_i^+ = 0$. Entonces, reemplazando cada término del valor absoluto en (41) por (43) y adicionando una restricción de la forma de (42), se llega al subproblema lineal LP (39). La región de confianza sobre la cual ξ es minimizada es definida por los límites en los deltas (39c). La condición $Sn_i^- Sn_i^+ = 0$ para toda $i \in NC$ se debe satisfacer para cualquier solución óptima del problema lineal LP, de otra forma la función objetivo puede ser reducida o incrementada por ambos Sn_i^- y Sn_i^+ .

Claramente, este algoritmo presenta muchas ventajas sobre los dos primeros antes descritos. Por ejemplo, si las restricciones lineales (25b) y (25c) son factibles, el LP(x, y, P) es factible en cualquier punto (x,y). Si las variables de desviación Sn_i^- y Sn_i^+ no son incluidas entonces, la solución del problema lineal LP puede ser no factible, con el requerimiento del uso de varias estrategias *ad hoc* que manejan las no factibilidades en los subproblemas lineales LP.

La forma básica del algoritmo ALS usado por Exxon es:

- Paso 0.** Iniciación. Escoger un valor positivo para P y las tolerancias. Escoger un valor inicial para las variables x, y, y todos los D_n .
- Paso 1.** Calcular todos los gradientes y los términos no lineales.
- Paso 2.** Resolver el subproblema lineal LP a modo de obtener las deltas óptimas $d^+ - d^-$ y un nuevo valor para y, Hacer $x = x_b + d^+ - d^-$.
- Paso 3.** Si $|d^+ - d^-| \leq$ tolerancia para todas las n, terminar.
- Paso 4.** Para todas las n
 Si $d^+ - d^-$ ha cambiado de signo desde la última iteración, hacer $D_n = D_n / 2$.
 Si $d^+ - d^- = D_n$ para tres consecutivas iteraciones, hacer $D_n = 2D_n$.
 Si $d^+ - d^- = -D_n$ para tres consecutivas iteraciones, hacer $D_n = 2D_n$.
- Paso 5.** Regresar al paso 1.

El valor de la constante P debe ser suficientemente grande de modo que Sn_i^- y Sn_i^+ sean cero en la solución final del problema. Si, sin embargo, el valor de P es demasiado grande, las soluciones proporcionadas por el algoritmo ASP, se encontrarán muy cerca de la región factible, con la consecuente disminución en la velocidad de convergencia, provocando poco progreso en algunos problemas.

Los límites, D_n , impuestos en los vectores de incremento, deltas, $d^+ - d^-$, son ajustados independientemente, de modo que el tamaño de la región factible que controla el movimiento en cada iteración del ASP adapta su forma con la correspondencia a la dimensión del último movimiento exitoso.

Para poder comparar la eficacia de los algoritmos ALS, se necesita plantear un problema con las siguientes características: 1) restricciones no lineales, 2) diferentes casos correspondientes a situaciones reales con soluciones conocidas¹ y, 3) parámetros que correspondan más o menos con la realidad del proceso.

Un sistema con estos atributos es aquel propuesto por Crowe, Hrymak y Marlin, el cual consiste en un proceso de mezclado para la producción de gasolina. Además del módulo de mezclado, el sistema incluye una planta de alquiler, con sus unidades periféricas, usada en la producción de un componente idóneo en la formulación de gasolina. El modelo está compuesto por 39 ecuaciones, donde algunas de éstas presentan no linealidades. El número de variables es de 51, y los grados de libertad varían entre 9 y 15. Este problema, en términos generales, se puede catalogar como uno de pocos grados de libertad, dado que el conjunto de restricciones incluye balances de materia que lo hacen un poco más difícil de resolver que aquellos problemas relajados, donde el número de grados de libertad es mucho mayor para un menor conjunto de restricciones. Otra característica del problema es que su función objetivo es lineal.

El planteamiento y resolución de este problema se efectuará en el *software* de optimización conocido como GAMS [1]. Se decidió por esta herramienta debido a que su uso es compacto, brinda la posibilidad de empleo de varios optimizadores no lineales y lineales, y su ejecución no ofrece requerimientos importantes de memoria o velocidad de proceso.

Siete casos serán resueltos con las tres técnicas planteadas. Cada uno de estos casos pretende introducir diversas problemáticas a los algoritmos utilizados, es decir, someterlos a circunstancias complicadas, de modo que se pueda establecer si estos resuelven o no problemas de naturaleza variada. Cada uno de los casos trata de analizar cómo cambia la función objetivo dados cambios en los parámetros de proceso y el valor de algunas variables. También es introducida una pequeña variación al problema original en la estructura del modelo. En principio, la ecuación que predice el rendimiento de alquiler se cambiará a una forma altamente no lineal, de modo que se pueda comparar si las técnicas planteadas son o no buenas en dar una solución cuando una de las ecuaciones es altamente no lineal. Existe un modelo en GAMS que resuelve los casos del sistema de mezclado mediante el uso del optimizador MINOS, los resultados de este modelo serán tomados como base para compararlos con aquellos propuestos en este trabajo. El modelo no lineal de este proceso lo implantó el Dr. Thomas Marlin² [15] y es usado en su curso de optimización en tiempo real.

3.1. Planta de Alquiler

El alquiler es un producto que típicamente se ha usado como componente en la producción de gasolina. Sus propiedades son excelentes en la producción de este combustible debido a que no contiene azufre, su presión de vapor es muy baja - de 2.6 a 4.0 - y, su valor de antidetonación - RON/MON - puede considerarse idóneo para la producción de gasolina premio. Además de estas excelentes cualidades, el alquiler no contiene olefinas o aromáticos, donde las primeras fomenta las emisiones de hidrocarburos y contribuyen a la formación de ozono en la atmósfera. También pueden generar la formación de gomas en el motor del auto. Por otro lado, los compuestos aromáticos se les ha catalogado como cancerígenos. Dadas las continuas restricciones en la calidad de la gasolina, en lo que azufre, aromáticos, presión de vapor y olefinas se refiere, la

¹En este trabajo se supone que los resultados arrojados por MINOS en los diferentes casos planteados son la solución correcta al problema de mezclado.

² Dado que el programa se encuentra registrado, no puede ser reproducido en este trabajo.

alquilación será un proceso fundamental con el que todo refinador deberá contar si es que quiere permanecer activo en el mercado de las gasolinas.

Aunado a lo anterior, los problemas recientes encontrados por el uso del Metil Terbutil Eter³ - MTBE -, donde su inusual difusibilidad en agua ha provocado la contaminación de los mantos freáticos en Estados Unidos, han encausado a un gran sector de políticos a impulsar su eliminación en la producción de gasolina. De hecho, el gobierno de California, en fechas recientes, introdujo una acta prohibiendo su uso a partir del primero de enero del 2002. Las repercusiones de esta decisión en el ámbito mundial todavía no son conocidas, sin embargo, es un hecho que muchos países, incluido México, están en proceso de evaluación para determinar si es conveniente adoptar las mismas medidas que el gobierno de California. La eliminación del MTBE en la gasolina causará un déficit volumétrico y de octano importante que sólo puede ser remediado mediante el empleo de componentes como el alquilado⁴.

En la industria del petróleo a la alquilación se le caracteriza como la reacción entre olefinas⁵ de bajo peso molecular con isoparafinas, con el fin último de producir isoparafinas de alto peso molecular. A pesar de que este tipo de reacción es el proceso opuesto a la de ruptura de moléculas - o *cracking* -, dada la creencia de que las parafinas eran compuestos inertes, se retrasó el invento de la alquilación hasta 1935. La necesidad de contar con combustible de aviación con alto grado de octano, durante la Segunda Guerra Mundial, fomentó el desarrollo del proceso de alquilación para la producción de gasolinas isoparafínicas con altos valores de octano [8].

La reacción de alquilación se puede llevar acabo a alta temperatura y presión sin la necesidad de utilizar catalizador; sin embargo, todos los procesos conocidos en la industria del petróleo se llevan acabo a baja temperatura en presencia de ácido sulfúrico o hidrofúorídico. La selección de las condiciones de operación es vital, ya que en la mayoría de los casos el producto terminado puede regularse de modo que su temperatura de ebullición oscile en aquel que es propio de la gasolina; además, también se puede controlar el *Motor Octane Number (MON)*⁶, él cual oscila entre los 88 y 94, y el *Research Octane Number (RON)*⁷ entre los 94 y 99.

En la presencia de catalizador, sólo las isoparafinas con carbonos terciarios como el isobutano o isopentano son susceptibles de reaccionar con olefinas. Dado que el isopentano es un buen componente para la mezcla directa en gasolina, por lo general no se le emplea en la producción de alquilado. Hay diferencia en la operación cuando se usa un catalizador u otro, por ejemplo, cuando el ácido sulfúrico es empleado, se debe tener mucho cuidado en el control de la temperatura⁸, pues un aumento excesivo causa oxidación con la consecuente precipitación de lodos y la formación de dióxido de azufre. En este estudio se usará como catalizador al ácido sulfúrico.⁹ El volumen de ácido empleado es equivalente a la carga de hidrocarburos a proceso.

³ Este es otro componente estrella en la producción de gasolina. Se ha demostrado que su uso ha contribuido a la disminución de dióxidos de nitrógeno a la atmósfera, los cuales son precursores de ozono.

⁴ En fechas recientes se han suscitado grandes debates por el incremento en el uso de combustibles renovables, como el etanol. Sin embargo, se ha enfatizado, que este compuesto presenta problemas en las mezclas de gasolina por su gran volatilidad. Esto es aún más pronunciado en el verano, donde normalmente, la especificación de Presión de Vapor disminuye.

⁵ Estos compuestos no ocurren en forma natural, son el producto de los procesos dentro de la refinería. Las olefinas se caracterizan por presentar uniones de doble ligadura entre dos átomos de carbono, a diferencia de las parafinas, donde los carbonos contiguos se enlazan por uniones sencillas. La fórmula genérica de las olefinas es C_nH_{2n} .

⁶ El octano se define como la resistencia a la detonación ante la aplicación de cierta presión. El *Motor Octane Number* es la prueba que se efectúa bajo condiciones de manejo estables, es decir, en carreteras, donde la aceleración es constante.

⁷ Esta propiedad representa la eficiencia bajo condiciones variables de aceleración, como aquellas que se presentan cuando se maneja dentro de la ciudad. El promedio entre el MON y el RON, conocido como DON, es lo que se reporta al consumidor en las gasolineras donde adquiere el combustible. Por ejemplo, la gasolina Magna cuenta con un DON de 87, mientras que el de la Premio es de 92. A medida que este número sea mayor, se supone que la potencia conferida al vehículo que la usa, se incrementa.

⁸ Esta debe oscilar entre 10°C a 21°C, o menor.

⁹ Detalle adicional sobre el efecto de ambos catalizadores en el proceso se puede encontrar en [8].

La presión se debe mantener en un nivel adecuado con el fin de preservar la fase en estado líquido. Otra variable que se usa en el control de la calidad es el radio entre las isoparafinas a olefinas¹⁰, pues con ésta se puede regular el octano del producto y desfavorecer las reacciones de polimerización. Finalmente, la pureza del producto y su rendimiento serán función de las condiciones de mezclado y tiempo de contacto – el cual puede oscilar entre 10 a 40 minutos -. En resumen, los rendimientos, volatilidad del producto y octano se controlarán mediante la temperatura, el radio entre el ácido y los hidrocarburos y, el radio entre las isoparafinas y las olefinas. Las variables más importantes del proceso son: 1) Temperatura de reacción, que con su incremento, el octano del producto puede disminuir de 1 a 3 números, esto dependiente de la eficiencia de mezclado en el reactor. Por otro lado, a bajas temperaturas, la viscosidad del ácido puede aumentar considerablemente, con la consecuente dificultad en la separación de la emulsión. Si la temperatura es muy alta –por arriba de 21°C -, las olefinas empiezan a reaccionar entre sí, dando origen a reacciones de polimerización, con la consecuente reducción en el volumen de alquilado. 2) La concentración del ácido puede tener varios efectos en el producto terminado, todo ello en función de la eficiencia en el mezclado y en el contenido de agua presente en el ácido. La mejor calidad y el mayor rendimiento se obtienen con concentraciones de ácido sulfúrico entre el 93% al 95% en peso de ácido y, de 1% a 2% de agua más hidrocarburos de dilución restantes. El efecto del agua es disminuir la actividad del catalizador. Además, entre menor sea la eficiencia de mezclado en el reactor, el ácido necesitará estar más concentrado. 3) Concentración de isobutano. Ésta se expresa normalmente como el radio entre este compuesto y las olefinas. Cuando el radio se incrementa, el octano incrementa, así como el rendimiento del alquilado, por otro lado, el consumo de ácido y las reacciones colaterales son minimizadas. En la práctica, esta proporción puede variar de 5:1 a 15:1.

4) El tiempo de residencia de las olefinas se define como el volumen de carga por hora de estos productos, dividido por el volumen de ácido en el reactor. Entre menor sea el tiempo de residencia, la producción de componentes con alto punto de ebullición disminuirá, se incrementará el octano del alquilado y el consumo de ácido será menor. Otra forma de expresar el tiempo de residencia es en términos del tiempo de contacto, como el tiempo de residencia de la carga fresca y el isobutano externo recirculado en el reactor. El tiempo de contacto cuando se usa ácido sulfúrico varía entre los 5 a 40 minutos. Otro dato importante de la reacción de alquilación consiste en que es altamente exotérmica, por ejemplo, es común que se desprendan de 124,000 a 140,000 BTU por barril de isobutano reaccionado.

Las materias primas usadas en el proceso de alquilación son las olefinas y el isobutano. Las olefinas se obtienen dentro de los procesos de refinación conocidos como desintegración catalítica¹¹ y de la unidad de coquización. La mayoría de las reacciones de alquilación usan como fuente de olefinas al butileno y propileno, sin embargo, en algunos casos también se puede emplear el amileno, el cual tiene el propósito de reducir la presión de vapor. Del mismo modo, la alquilación del amileno tiende a reducir el contenido de olefinas, C5, en la gasolina terminada. Como ya se mencionó, las olefinas en este combustible tienden a incrementar el ozono y las partículas orgánica volátiles en la atmósfera. Por su parte, el isobutano se obtiene de las unidades de hidrodeseintegración catalítica, de las FCC's , de las unidades de reformación y de las torres de destilación atmosféricas.

A continuación se presenta una tabla resumen donde se muestran las características de operación de la planta cuando se usa ácido sulfúrico como catalizador.

¹⁰ Es común manejar radios de 4:1 a 15:1 [8]

¹¹ Su término en inglés es *Fluid Catalytic Cracking* - FCC-

Tabla 3.1¹²

Concentración de Isobutano	
% Volumen en la zona de Reacción	40-80
Radio externo a olefinas	3-12
Radio interno a olefinas	50-1,1000
Concentración de Olefinas	
Tiempo total de contacto de hidrocarburos (min.)	20-30
Velocidad espacial de las olefinas, v/hr/v	0.1-0.6
Temperatura del Reactor, ° C	2-16
Concentración del Ácido en el Reactor, % peso	88-95
Ácido en emulsión, % volumen	40-60

Los productos obtenidos de la reacción de alquilación incluyen propano y butano que entran como contaminantes en las corrientes de alimentación. También se obtiene algo de lodos como producto de las reacciones de polimerización. Este último subproducto se controla manipulando la concentración de ácido. Los demás subproductos tienen valor comercial, como el propano, que se puede comercializar como gas licuado y, el butano, el cual puede ser incorporado al mezclado de gasolina, o en su defecto, ser vendido.

El ácido sulfúrico que se remueve del proceso, por lo general es regenerado en una planta que no es parte del proceso. El consumo de ácido varía entre 13 y 30 libras por barril de alquilado producido. Por lo tanto es necesario alimentar el ácido perdido con concentraciones que oscilan entre 98.5% y 99.6% en peso.

La planta de alquilación considerada en este estudio es una simplificación de la real. En la práctica se tiene un reactor de múltiples etapas, cada una de ellas con cierto grado de conversión dependiente de la concentración de ácido, agitación, enfriamiento, proporción de reactivos y recirculaciones¹³. Muchas de las tecnologías hacen uso del sistema de enfriamiento para poder mejorar el rendimiento y la calidad del producto terminado. Este trabajo no tomará en cuenta estas variaciones, ya que el reactor trabaja como una caja negra donde el rendimiento de alquilado, la calidad y los balances de materiales son los más importantes. La planta de alquilación real tiene asociadas dos torres de destilación. En la primera de éstas se separan el butano e isobutano. Esta torre puede o no existir, pues es función directa de la economía de la planta, es decir, si todo el butano que acompaña al isobutano se alimenta al reactor, éste saldrá íntegro como un compuesto inerte de la torre isodebutanizadora. Dado que hay una concentración importante de pentano en el butano extraído de esta última torre, el butano, por lo general, no reúne la calidad de venta, por lo que puede terminar en la mezcla de gasolina. Sin embargo, el no separarlo puede ocupar espacio en el reactor y la torre posterior, con el consecuente incremento en los costos de operación. En el estudio aquí presentado, se toma en cuenta la torre debutanizadora, sin embargo, con simplificaciones importantes. Primero, la torre no se modela rigurosamente, plato por plato, si no que se emplean las ecuaciones del reflujo mínimo y las de Fleske-Edulhee para determinar el número de platos mínimo y, con ello, las concentraciones en las partes superiores e inferiores de la torre. La segunda torre atmosférica consiste en un proceso de separación entre el propano, isobutano, butanos y alquilado. La simplificación efectuada en esta torre es aún mayor, pues sólo un balance de materiales alrededor de la misma se efectúa con

¹² Tomado del *Petroleum Refining Technology and Economics* [8].

¹³ Si se deseara simular el proceso lo más cercano a la realidad, cada uno de estos compartimientos se tendrían que modelar como reactores continuos agitados, donde la concentración final de producto y reactivos de un reactor sería la alimentación al siguiente. También, dada la relevancia del proceso de enfriamiento, en función de la tecnología, se tendrían que plantear los balances de energía. Si se considera que el objetivo de este trabajo se centra en los métodos de solución, y no propiamente en el proceso de alquilación o producción de gasolina, estas simplificaciones son válidas siempre y cuando se llegue a las soluciones correctas. La extensión del problema a un modelo riguroso, una vez probado el simplificado, sería un paso más de implementación.

el supuesto de ciertos factores de separación. El propano irá a ventas, al igual que la mezcla de butanos. Por otro lado, el alquilado tendrá como destino final la mezcla de gasolinas y, el isobutano sin reaccionar se regresará al reactor. El ácido sulfúrico no es regenerado en este proceso, lo único en consideración es el catalizador de reposición. Este proceso proporciona dos características idóneas para su análisis, la primera es que considera recirculaciones, con lo cual el sistema es altamente interactivo y de difícil solución, la segunda considera elementos altamente no lineales, como son las ecuaciones que describen el proceso de separación en la debutanizadora, el rendimiento de alquilado y su calidad.

3.2. *Proceso de Mezclado*

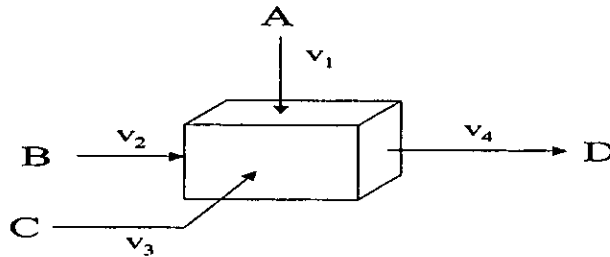
En todo proceso productivo o de acondicionamiento, por lo general, se tienen que combinar diversas sustancias con el propósito último de obtener un compuesto que debe cumplir con ciertas propiedades físicas. Una de las características esenciales de la combinación o mezclado de productos es que no hay transformación química, es decir, no se imputa reacción química entre los participantes, sin embargo, la interacción física entre los constituyentes es común. Cuando no existe interacción alguna entre las moléculas participantes, debido a su afinidad fisicoquímica, a la mezcla resultante se le conoce como ideal, es decir, las fuerzas entre las moléculas no son de la relevancia como para modificar alguna propiedad física de los constituyente en la mezcla como resultado de la combinación entre las mismas. Por ejemplo, cuando se mezcla un conjunto de hidrocarburos con pesos moleculares similares, la propiedad final de la mezcla se puede determinar como el promedio ponderado en volumen de las propiedades de los constituyentes individuales¹⁴. Es poco común encontrar en la práctica este tipo de mezclas, pues las fuerzas intermoleculares llegan a ser tan pronunciadas, que algunas de las propiedades del componente puro en la mezcla son alteradas, eliminado el supuesto de contribución lineal del mismo al producto de la combinación, por lo tanto, sería incorrecto tratar de obtener la(s) propiedad(es) final(es) mediante el empleo de un ponderamiento en volumen o peso. Por ejemplo, el producto de la combinación de agua y etanol trae como consecuencia una reducción en volumen y la liberación de energía, pues las fuerzas intermoleculares provocadas por los puentes de hidrógeno son tan altas, que ambas moléculas encuentran mucha afinidad. En este caso, la densidad final de la mezcla no podrá determinarse como la fracción volumen de cada compuesto multiplicadas por sus respectivas densidades – el cual sería el supuesto de contribución lineal -. Es por ello que en la industria química y, en particular aquella del petróleo, se han desarrollado metodologías para poder corregir las mezclas por efectos de no-linealidad. Entre tales soluciones se pueden mencionar aquellas de los coeficientes de interacción binarios; los índices de propiedades, los cuales son lineales en peso o volumen o; aquellos que involucran el incremento o decremento en la propiedad del componente puro en la mezcla cuando se combinan ciertos componentes¹⁵.

El modo más eficiente para cuantificar las no linealidades en una mezcla, involucra los factores de interacción binaria, donde se trata de corregir la propiedad total por la presencia de fuerza de atracción intermolecular, las cuales son de diversa índole: puentes de hidrógeno, Van der Waals, entre otras. Dado que éstas son funciones complejas de la temperatura, la presión y la composición, también lo serán los parámetros de interacción binarios, por lo que para su cálculo, se necesita una base teórica fundamentada en mecánica estadística o, en su defecto, la

¹⁴ La experiencia ha demostrado que ciertas propiedades se combinan mejor en volumen que en peso. Además, la dependencia de una propiedad física del volumen o el peso, también indicará como es que ésta se debe obtener. Por ejemplo, la densidad es una propiedad que depende directamente del volumen, por lo tanto, la obtención de ésta se debe efectuar ponderando volumetricamente la densidad de cada uno de los componentes. Por otro lado, el porcentaje de azufre es función directa del peso, consecuentemente su ponderación se debe efectuar en la misma base.

¹⁵ En inglés se les conoce como *bonus*.

experimentación. En el siguiente diagrama se esboza un proceso de mezclado y, la ecuación que regiría el cálculo de cualquier propiedad final. En el ejemplo se supone que se mezclan los componentes puros A, B y C para producir D.



Para calcular la propiedad x en D, se tiene la siguiente ecuación:

$$x_4 = \frac{\sum_{i=1}^3 v_i x_i + \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^3 a_{ij} x_i x_j}{\sum_{i=1}^3 v_i} \quad (44)$$

donde v_i representa el volumen del producto i en la mezcla, x_i corresponde a su propiedad y a_{ij} es el parámetro de interacción entre el componente i y j . En este caso a_{ij} se puede expresar como una función compleja de la temperatura (T), presión (P) y composición molar o volumétrica (y_i)

$$a_{ij} = f(T, P, y_i)$$

donde y_i se expresa como:

$$y_i = \frac{v_i}{\sum_{j=1}^3 v_j} \quad (45)$$

Hay algunos elementos que hacen impráctico el uso de las relaciones antes propuestas, a saber, es muy costoso establecer el valor de los parámetros de interacción binarias por medio de experimentación; las mezclas, por lo general, se restringen a un conjunto de participantes reducidos ya que, en caso de querer ampliarse, se tendría que incluir un nuevo conjunto de parámetros y la solución numérica se complica en extremo. En problemas de planeación, donde por lo general se necesita conocer una solución aproximada en el menor tiempo posible, el tercer punto es particularmente importante. Por lo tanto, para solventar estas dificultades se han planteado índices que son lineales con la fracción peso o volumen, es decir, se replantea la ecuación (44) con los parámetros de interacción binarios iguales a cero; además, en lugar de emplear la propiedad x , ésta se sustituye por un índice lineal en fracción volumen. Esta mecánica reducirá los cálculos debido al cambio en la estructura del problema, pues la ecuación final se expresará como:

$$I_4^x = \sum_{i=1}^3 y_i I_i^x \quad (46)$$

donde, I^x son los índices de propiedad de las diferentes corrientes. Se debe notar que en caso que la mezcla sea ideal, $x = I^x$, lo cual simplifica notablemente los cálculos.

Es de importancia contar con un estimado preciso de las propiedades de la mezcla, ya que de éstas dependerá su valor en el mercado o la habilidad con la que pueda ser consumida en determinado proceso químico. Lo anterior es vital para la industria del petróleo, pues la mayoría de los productos terminados son resultado de una mezcla. Múltiples ejemplos se pueden nombrar, tales como, la gasolina, el diesel, la turbosina y el combustóleo, sólo por indicar algunos. Dado que este trabajo se centra en la producción de gasolina, se hablará de este compuesto en particular.

La gasolina es un conjunto muy complicado de hidrocarburos, los cuales provienen de distintas fuentes dentro de la refinería. Entre sus constituyentes más importantes se pueden mencionar las naftas, que provienen de la torre de destilación atmosférica¹⁶, el reformado, la gasolina catalítica, el alquilado, el metanol, etanol, tolueno, el MTBE y n-butano. El rango de ebullición de la gasolina se encuentra entre los 160 y 400 °F. Las propiedades más importantes que se necesitan controlar en el producto terminado son: contenido de azufre, octano, contenido de aromáticos, olefinas, presión de vapor, temperatura a la cual evapora el 50% y el 90% del producto, entre otras. Cada una de estas propiedades tiene un propósito específico tanto en el rendimiento del vehículo, como en el impacto en la atmósfera. De las propiedades antes mencionadas, las fuertemente no lineales son la presión de vapor, el octano y las temperaturas a 50% y 90% de evaporación, por lo que para estas propiedades se han desarrollado índices especializados de cálculo, los cuales se mezclan en forma lineal con el volumen. Dados los propósitos de este trabajo, sólo se considerarán las propiedades de presión de vapor y octano, además, se supone que son lineales en el volumen, por lo que aplica la ecuación (46), cuando $x = I^x$.

3.3. Descripción del Proceso

Como ya se mencionó, la planta de alquilación, junto con sus operaciones unitarias, se simplificaron – sección 3.1 -. Al mismo tiempo, los procesos de mezclado de ninguna manera contienen todas las especificaciones que la gasolina terminada debe de reunir – sección 3.2 -, y al mismo tiempo, las dos propiedades en consideración se mezclan en proporción lineal, lo cual es una simplificación fuerte, cuando los componentes son de distinta naturaleza. Sin embargo, el propósito del estudio es evaluar el potencial de los algoritmos propuestos, por lo tanto, este problema será suficiente para detectar las consistencias o defectos que puedan presentar los mismos.

El esquema de la planta de alquilación junto con el proceso de mezclado se puede revisar en el Anexo [F].

La nomenclatura empleada en las ecuaciones es:

Flujo = F_i , donde i representa el número de corriente. El flujo se encuentra reportado en barriles por día (B/D).

Concentración = Y_{fijj} , donde j representa el componente en fracción volumen de la corriente F_i .

¹⁶ Este origen es uno de los importantes, sin embargo, las naftas se producen en varios procesos de la refinería.

A continuación se describe el conjunto de ecuaciones que conforman cada uno de los bloques considerados en el diagrama de flujo.

3.3.1. Torre Debutanizadora

- Modelo de Fenske-Edulhee que determina el proceso de separación butano – isobutano

$$R_m = \left[\frac{YF10iC4}{YF9iC4} - \alpha \frac{1 - YF10iC4}{1 - YF9iC4} \right] \frac{1}{\alpha - 1} \quad (47)$$

$$\frac{N - N_m}{N + 1} = 0.75 \left[1 - \frac{R - R_m^{0.5668}}{R + 1} \right] \quad (48)$$

$$N_m = \frac{\ln \left[\frac{YF10iC4}{1 - YF10iC4} * \frac{1 - YF11iC4}{YF11iC4} \right]}{\ln \alpha} \quad (49)$$

donde,

α es la volatilidad relativa dada por 1.4,
N es el número de platos teóricos fijados en 40,
R es el reflujo,
m representa el mínimo.

- Balance de materiales alrededor de la debutanizadora

$$F_9 = F_{10} + F_{11} \quad (50)$$

$$F_9 Y_{F9iC4} = F_{10} Y_{F10iC4} + F_{11} Y_{F11iC4} \quad (51)$$

$$F_{reflujo} = F_{vapor} - F_{10}$$

$$F_{vapor} = F_{vapor} / C4 \frac{\Delta H_{vapor}}{\Delta H_{nC4}} \quad (52)$$

$$R = \frac{F_{reflujo}}{F_{10}} \quad (53)$$

donde,

ΔH es el calor latente de vaporización.

3.3.2. Recirculación

$$F_2 = F_6 + F_{10} \quad (54)$$

$$F_2 Y_{F2iC4} = F_6 Y_{F6iC4} + F_{10} Y_{F10iC4} \quad (55)$$

$$Y_{F2nC4} = 1 - Y_{F2iC4} \quad (56)$$

3.3.3. Reactor

- Balance de componentes inertes

$$F_1 Y_{F1C3} = F_4 Y_{F4C3} \quad (57)$$

$$F_1 Y_{F1nC4} + F_2 Y_{F2nC4} = F_4 Y_{F4nC4} \quad (58)$$

- Ecuaciones de reacción

$$F_4 Y_{F4alqui} = F_1 Y_{F1olef} (A_0 + A_1 R_{i/o} + A_2 R_{i/o}^2) \quad (59)$$

$$R_{i/o} = \frac{F_2 Y_{F2iC4} + F_1 Y_{F1iC4}}{F_1 Y_{F1olef}} \quad (60)$$

$$R_{recir} = \frac{F_2}{F_1} \quad (61)$$

donde,

A_i son constantes de reacción dadas por 1.12, 0.132 y -0.0067

- Balance de materiales en el reactor

$$F_4 Y_{F4iC4} = F_1 Y_{F1iC4} + F_2 Y_{F2iC4} - F_4 Y_{F4alqui} \rho_{corrector} \quad (62)$$

$$F_4 = F_1 Y_{F1C3} + F_1 Y_{F1nC4} + F_2 Y_{F2nC4} + F_4 (Y_{F4iC4} + Y_{F4alqui}) \quad (63)$$

donde,

$\rho_{corrector}$ es el factor de corrección por cambio en densidad dado por 1.22/2.

- Calidad del alquilado

$$Y_{F8oct} = B_1 + B_2 (Y_{F4iC4} - 0.40) + B_3 (Y_{F3ConAc} - 89) \quad (64)$$

$$DilAc = 65.35 - 0.666 Y_{F8oct} \quad (65)$$

$$F_3 = \frac{F_4 Y_{F4alqui} Y_{F3ConAc} DilAc}{1000(99 - Y_{F3ConAc})} \quad (66)$$

donde,

oct, representa el octano del alquilado,

ConAc, indica la concentración del ácido,

DilAc, es la dilución del ácido por efecto de la reacción,

B1, B2 y B3 son las constantes que determinan el valor de octano del alquilado. Éstas están dadas por 90, 8.75 y 0.325.

3.3.4. Torre Isodebutanizadora

Esta torre se encuentra modelada como una columna de separación. Además contiene un estimado de la energía utilizada en el hervidor.

$$F_5 = F_4 Y_{F4C3} \quad (67)$$

$$F_8 Y_{F8alqui} = F_4 Y_{F4alqui} \quad (68)$$

$$Y_{F8alqui} = 1.0 - Y_{F8iC4} - Y_{F8nC4} \quad (69)$$

$$F_7 = F_4 Y_{F4nC4} - F_6 Y_{F6nC4} - F_8 Y_{F8nC4} \quad (70)$$

$$F_{vapor/DIB} = 5F_4(Y_{F4iC4} + Y_{F4nC4}) \quad (71)$$

$$Y_{F6iC4} = 1.0 - Y_{F6nC4} \quad (72)$$

$$F_6 Y_{F6iC4} = F_4 Y_{F4iC4} + F_8 Y_{F8iC4} \quad (73)$$

donde,

Y_{F5C3} y Y_{F7nC4} se presuponen componentes puros, en otras palabras, su fracción volumétrica es igual a 1.0.

3.3.5. Proceso de Mezclado

- Balance de materiales

$$F_{11} = F_{12} + F_{17} \quad (74)$$

$$F_8 = F_{13} \quad (75)$$

$$F_{16} = F_{12} + F_{13} + F_{14} + F_{15} \quad (76)$$

- Balance de calidades (se suponen mezclas ideales)

$$F_{16} Y_{F16rvp} = \sum_{F_{12}}^{F_{15}} F_i Y_{Firvp} \quad (77)$$

$$F_{16} Y_{F16oct} = \sum_{F_{12}}^{F_{15}} F_i Y_{Fioct} \quad (78)$$

- Especificaciones de gasolina terminada

$$RVP_{\min} \leq Y_{F16rvp} + OLG_1 - OLG_2 \leq RVP_{\max} \quad (79)$$

$$OCT_{\min} \leq Y_{F16oct} + OLG_3 - OLG_4 \leq OCT_{\max} \quad (80)$$

donde,

RVP_{min}, RVP_{max} son las especificaciones de presión de vapor mínimas y máximas dadas respectivamente por 5.0 y 10.0.

OCT_{min}, OCT_{max} son los valores de octano mínimos y máximos dados por 91.5 y 100.

OLG_i, representan variables de holgura con el fin de evitar infactibilidades en la solución del problema.

3.3.6. Función Objetivo

$$\text{Ingresos} = F_5 P_{F5} + F_7 P_{F7} + F_{16} P_{F16} + F_{17} P_{F17} - F_1 P_{F1} - F_3 P_{F3} - F_9 P_{F9} - F_{14} P_{F14} - F_{15} P_{F15} - F_{\text{vapor}} P_{\text{vapor}} - \rho_{\text{penalización}} \sum_i \text{OLG}_i \quad (81)$$

Donde,

P_i representa el precio de los insumos y productos en dólares por barril (DLS/B) y, ρ_{penalización} el costo asociado a las variables de holgura, que en esta caso se estableció como 1000.

3.3. Casos de Estudio

La descripción de los casos a resolver se proporciona a continuación:

Caso Base:

El caso base consiste en un conjunto de condiciones predefinidas al problema. A continuación, en la tabla 3.3.1 se indican los precios usados para los insumos y productos. En la tabla 3.3.2 se listan las propiedades de los componentes que conforman la gasolina: Presión de Vapor (RVP) y octano. En la tabla 3.3.3 se representan los flujos y las composiciones de las corrientes con valores fijos en el problema. Finalmente, la tabla 3.3.4 contiene los límites en los que pueden oscilar los grados de libertad.

Precios de insumos y productos. Estos se reportan en términos de las corrientes que conforman el diagrama de flujo de proceso. – Anexo [F] –. El valor monetario de los precios se encuentra en dólares por unidad de flujo.

Tabla 3.3.1

Corriente	Valor
1	25
3	60
5	10
7	10
9	12
14	34
15	24
16	37
17	10

Las especificaciones de los componentes que pueden formar parte de la mezcla de gasolina son:

Tabla 3.3.2

Componente	RVP	Octano
i-Butano	210	92.7
n-Butano	138	92.5
Alquilado	3	Por modelo
Reformado	4	91.8
Nafta	7.5	64.5
Gasolina Max Espec	10	100
Gasoline Min Espec	Ninguna	91.5

Algunas de las variables que forman parte del modelo son especificadas. Sus valores se pueden consultar en la siguiente tabla.

Tabla 3.3.3

Corriente	Unidades	Flujo	Propano	Butano	iButano	Buteno	Alquilado
1	B/D	3668	0.005	0.045	0.25	0.70	0
2	B/D	18441	0	0.012	0.988	0	0
3	MLB/D	165					
4	B/D	21289	Nada	0.018	0.771	0	0.21
5	B/D	18.4	1.0				
6	B/D	16582	0	0.01	0.990	0	0
7	B/D	217	0	1.0	0	0	0
8	B/D	4471	0	0.001	0	0	0.999
9	B/D	2280	0	0.20	0.80	0	0
10	B/D	1859	0	0.03	0.97	0	0
11	B/D	421	0	0.95	0.05	0	0
12	B/D	201.5	0	0.95	0.05	0	0
13	B/D	4471	0	0.001	0	0	0.999
14	B/D	0					
15	B/D	327					
16	B/D	5000					
17	B/D	220	0	0.95	0.05	0	0

En la mayoría de los problemas reales se pueden encontrar limitaciones en el valor que pueden tomar algunas variables, ya sea por la oferta restringida de algunos de los insumos requeridos para poder operar la planta o proceso o debido a condiciones específicas de operación, es decir, resistencia mecánica, consumos de energía, capacidad, entre otros. Como se mencionó con anterioridad, el modelo aquí analizado puede constar de 9 a 15 grados de libertad. Estos pueden oscilar entre ciertos rangos que se determinan por los elementos arriba estipulados.

Tabla 3.3.4

Variable	Descripción	Límite Inferior	Límite Superior
F_9	Mezcla de butanos	0	10000
Y_{F10iC4}	i-Butano de Deisobutanizadora	0.85	0.99
Y_{F11iC4}	i-Butano en fondos de torre	.003	0.10
F_1	Flujo de Olefinas	2000	4500

R_{recir}	Radio de recirculación (F_2/F_1)	1	13
Radio	i-Butano de reactor a Olefinas	4	12
F_6	Flujo de recirculación	500	Infinito
$Y_{F3\text{ConAc}}$	Concentración de ácido	85	93
$Y_{F8\text{nC4}}$	n-Butano en Alquilado	.001	.02
F_{12}	Butano a mezcla de gasolina	0.0	Infinito
F_{13}	Alquilado a mezcla de gasolina	Igual a F_8	
F_{14}	Reformado a mezcla de gasolina	0	3000
F_{15}	Nafta a mezcla de gasolina	0	2000
F_{16}	Gasolina producida	0	Infinito
F_{17}	n-Butano a ventas	0	Infinito

Caso C1:

Dada la importancia que tiene la concentración de olefinas en el proceso, así como el isobutano en la alimentación al reactor. Este caso propone cambiar la concentración de isobutano en la corriente de alimentación de olefinas, de su valor base 0.25% a 0.20% - Y_{F11C4} -. Con esto se pretende analizar el efecto en el radio de recirculación externo - F_2/F_1 - y el cambio en la función objetivo.

Caso C2:

El objetivo es el mismo que en el caso anterior, con la variante de que en lugar de disminuir la concentración de isobutano, se propone un incremento a 0.30%.

Caso D:

Como ya se mencionó, uno de los puntos claves, desde la perspectiva económica, radica en la primera torre atmosférica, cuya función primordial es evitar el paso de un inerte, en este caso, butano, al reactor. Por ende, en este ejercicio se pretende cuantificar el impacto en la función objetivo cuando se le permite a la torre trabajar libremente. En el caso base, la concentración de isobutano se encuentra fija, tanto en la parte superior como inferior de la unidad. En parte superior es de 0.97 - Y_{F10IC4} -, y en la inferior de 0.05 - Y_{F11IC4} -. El cambio propuesto es abrir los límites de estas variables, de modo que $0.85 \leq Y_{F10IC4} \leq 0.99$ y $0.003 \leq Y_{F11IC4} \leq 0.100$.

Caso E:

La recirculación de isobutano fomenta la obtención de una mejor calidad para el producto terminado. Al mismo tiempo, reduce las reacciones colaterales de las olefinas las cuales se pueden polimerizar - sección 3.1 -. Dicho lo anterior, en este ejercicio se pretenden revisar los cambios sufridos en todo el proceso de mezclado cuando cambia la recirculación de isobutano. Como se recordará, en el caso base, la recirculación de isobutano se encuentra libre, con un mínimo de 500 B/D. En este caso se pretende limitar el máximo a 20,000 B/D.

Caso F:

En este caso se plantea hacer un cambio en la función objetivo. En lugar de maximizar la ganancia, se busca incrementar la producción de gasolina a toda costa. Por ende, el problema se formulará con la función objetivo igual a la maximización gasolina – F16 -.

Caso G:

En este caso se pretende estudiar el efecto en el cambio estructural de la ecuación que predice el rendimiento de alquilado. Es decir, en lugar de tener una función cuadrática, la ecuación se simplificará de modo que solamente contenga el término lineal. En este caso se esperan modificaciones importantes en el valor de la función objetivo, dado que el rendimiento crecerá en forma lineal a medida que el radio de isobutano a olefinas se incrementa - $R_{i/o}$ -.

Caso H:

Al igual que en el caso anterior, la estructura del rendimiento de alquilado se modificará. Sin embargo, en este ejercicio se pretende cuantificar el efecto causado por la introducción de funciones no lineales adicionales. Es decir, se parte del supuesto que la relación para predecir el rendimiento seguirá siendo adecuada en los límites de $R_{i/o}$ pero, su estructura será totalmente diferente. La ecuación original para predecir el rendimiento de alquilado está dada por la ecuación (59). Ésta será modificada a ¹⁷:

$$F4Y_{F4alkyl} = F1Y_{F1olef}(A_0 + A_1R_{i/o} + A_2R_{i/o}^{1/2} + A_3e^{-A_4R_{i/o}}) \quad (82)$$

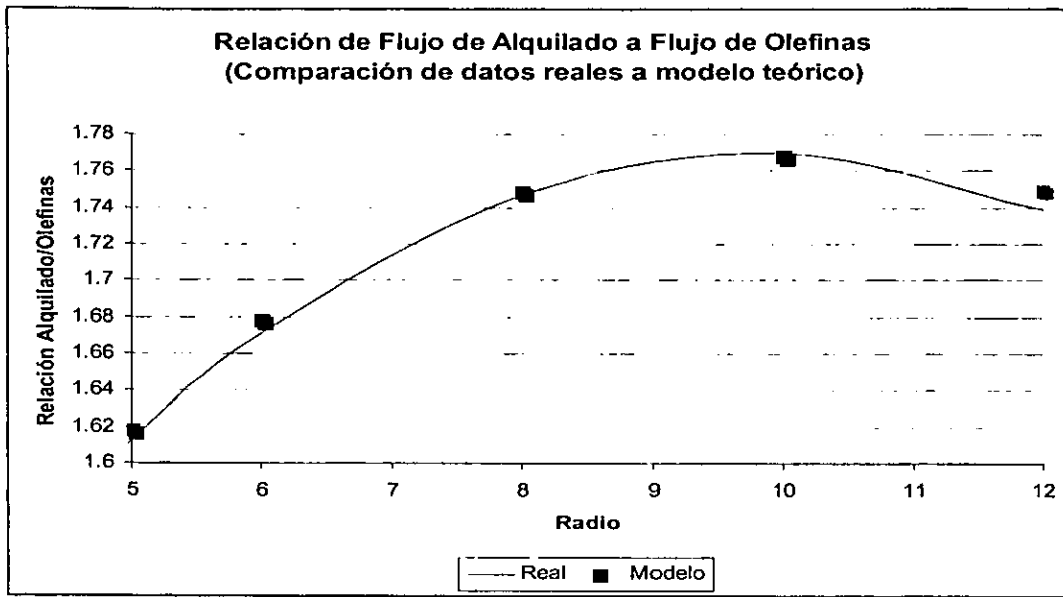
donde¹⁸

$A_0 = 1.6388$, $A_1 = -0.1394$, $A_2 = 0.6052$, $A_3 = -1.1736$ y $A_4 = 0.1100$

Como se puede observar en siguiente gráfica, el modelo propuesto predice muy bien la relación de flujo de alquilado a flujo de olefinas.

¹⁷ Es importante indicar que la modificación planteada es totalmente arbitraria, no hay ninguna lógica o relación con el proceso real. La modificación en la predicción del rendimiento de alquilado se hizo con el objeto de incrementar el grado de no linealidad en el proceso. Con este cambio, se persigue probar el comportamiento de los algoritmos bajo un cambio estructural en el problema.

¹⁸ Los parámetros de esta función fueron obtenidos de la siguiente manera: 1) La ecuación (59) se usó para generar rendimientos de alquilado para diferentes radios. 2) Con los rendimientos de alquilado a diferentes radios, se construyó una función objetivo de la siguiente forma (fracción; eq59 – fracción; eq82)². 3) Esta función objetivo se minimizó mediante el uso del método de Powell's - programado por Raúl Manzo Chardome en MATLAB -, el problema consiste en encontrar los mejores parámetros de ajuste en la ecuación (82). El pronóstico de los rendimientos de la ecuación (82) son cercanos a los de la ecuación (59) en el rango de $4 \leq \text{Radio} \leq 12$.



Los algoritmos previamente descritos fueron implementados en GAMS ver. 2.25. La comparación en el grado de eficiencia entre éstos sólo es posible cuando los criterios de terminación son los mismos para todos ellos. A continuación se presenta, en forma resumida, los pasos que se siguieron en la implementación:

4.1. *Implantación de Algoritmos*

1. Todas las variables de proceso se redefinieron, es decir, a pesar de que GAMS permite definir las variables con un número variables de caracteres y en el mismo formato que el descrito en las ecuaciones (47) a (82), esto fue necesario de modo que se pudiera tener una presentación compacta de los gradientes, restricciones y función objetivo, aún con la pérdida de claridad que el modelo hubiera podido haber tenido con el uso de las definiciones originales – ver diagrama de flujo en el anexo F -. Una descripción completa de las variables, ecuaciones y gradientes se puede encontrar en el anexo D y E.

2. Los gradientes se calcularon en forma analítica para todas las ecuaciones. Es importante mencionar que todas las variables se consideraron como no lineales. Esta suposición es razonable cuando se pretende manipular a placer los grados de libertad, es decir, la mayoría de los balances de materia incluyen un factor multiplicativo – fracción peso/volumen – cuando éste se realiza alrededor de los componentes, por lo tanto, si se desea convertir en variable el peso/volumen y al mismo tiempo la propiedad, la ecuación será no lineal, en caso contrario, cuando alguna de éstas es conocida, la ecuación será lineal para ese componente. A pesar de que este planteamiento incrementa el número de gradiente a evaluar y la extensión de las ecuaciones, se compensa con la flexibilidad para modificar los grados de libertad sin la necesidad de cambiar la estructura del modelo en GAMS¹. Debido a que GAMS usa una representación compacta de las ecuaciones, con el fin de evitar un exceso de definiciones, los coeficientes constantes de las variables que aparecen en el problema lineal LP, son incluidas en el mismo arreglo que define los gradientes. Cuando una variable en particular no aparece en cierta ecuación del problema lineal, simplemente, el gradiente para la misma en esa ecuación se hace cero. En otras palabras, la variable DER(I,J), donde I es la ecuación y J la variable, tiene tres propósitos fundamentales en su definición: guardar la definición de los gradientes para cada variable en cada ecuación, almacenar los términos constantes cuando la variable aparece en forma lineal en la ecuación J, y contener los términos que son cero cuando las variables no pertenecen a una ecuación en particular.

3. Todas las ecuaciones se expresaron con el término del lado derecho igual a cero,²:

$$\text{FUNK}(I) = F(x) - G(x) = 0 \quad (83)$$

Esta forma de presentación es muy conveniente debido a que, cuando los términos de las ecuaciones en (83) son linealizadas, al usar la expansión en series de Taylor, las ecuaciones originales son regeneradas en algún punto x_b , escogido para la expansión. Por ejemplo, si se tiene la siguiente relación:

$$x_1^3 + x_4 = x_2 x_3 \quad (\text{ecuación 1})$$

después de usar la aproximación de Taylor alrededor del punto $[x_{1b}, x_{2b}, x_{3b}, x_{4b}]$, se llega a la siguiente expresión:

¹ En los casos planteados se busca esta flexibilidad, pues no sería práctico tener un código para cada problema que se pretende resolver.

² Del término en Inglés *Open Form Equation*

$$x_{1b}^3 + 3x_{1b}\Delta x_1 + x_{4b} + \Delta x_4 = x_{2b}x_{3b} + x_{2b}\Delta x_3 + x_{3b}\Delta x_2 \quad (\text{ecuación 2}),$$

entonces, con un reacomodo de términos se llega a:

$$x_{1b}^3 - x_{2b}x_{3b} + x_{4b} = x_{2b}\Delta x_3 + x_{3b}\Delta x_2 - 3x_{1b}\Delta x_1 - \Delta x_4 \quad (\text{ecuación 3})$$

Por lo tanto, de la ecuación 1, y de acuerdo con la definición en (83),

$$\text{FUNK}(1) = x_{1b}^3 - x_{2b}x_{3b} + x_{4b} = \sum \text{DER}(1,j) * \Delta x_j \quad \text{para } j = 1, 2, 3 \text{ y } 4$$

Y las variables en el problema LP se convierten en $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta x_3, \Delta x_4$ y, los gradientes se encuentran representados por:

$$\begin{aligned} \text{DER}(1,1) &= -3x_{1b} \\ \text{DER}(1,2) &= x_{3b} \\ \text{DER}(1,3) &= x_{2b} \\ \text{DER}(1,4) &= -1 \end{aligned}$$

Si suponemos que el problema tiene 5 variables, $\text{DER}(1,5)$ será igual a cero. Esto es posible sólo si la ecuación 1 se rescribe como

$$x_1^3 + x_4 - x_2x_3 = 0$$

4. El problema consta de 52 variables y 39 ecuaciones. Se debe notar que hay una variable artificial (x_{11}). Originalmente se planeó dar una mayor flexibilidad a la definición del problema, pero en realidad, esta variable nunca fue empleada. De las 52 variables, más o menos 15 pueden ser seleccionadas como grados de libertad para este problema en particular.

5. Se encontró que la mejor forma de presentar los deltas, al menos para este pequeño problema, es mediante el uso de la partición propuesta por Griffith and Steward [13] donde

$$\Delta x_i = x_{pi} - x_{ni}, \quad \text{para } x_{pi}, x_{ni} \geq 0$$

combinando los punto del 1 al 5, la representación del problema general LP en GAMS es como sigue:

$$\begin{aligned} \text{LOBJ} \dots & \text{SUM}(J, C(J) * (XP(J) - XN(J))) =E= \text{OBJF}; \\ \text{LINEQ}(I) \dots & \text{SUM}(J, \text{DER}(I, J) * (XP(J) - XN(J))) =E= \text{FUNK}(I); \\ \text{UPBOUND}(J) \dots & XP(J) - XN(J) =L= \text{UPB}(J); \\ \text{LOBOUND}(J) \dots & XP(J) - XN(J) =G= \text{LOB}(J); \end{aligned} \quad (84)$$

(84) es modificado de acuerdo a los algoritmos descritos en el capítulo 2. El vector $C(J)$ representa el gradiente de la función objetivo y, en caso de que la función sea lineal, entonces todos los $C(j)$ son constantes.

6. Los límites en los deltas después de cada iteración se calculan usando las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \text{UPB}(J) &= \text{MIN}(X.\text{UP}(J) - X.L(J), \text{BBB}(j)); \\ \text{LOB}(J) &= \text{MAX}(X.LO(J) - X.L(J), -\text{BBB}(j)); \end{aligned} \quad (85)$$

y $BBB(j)$ cambia en correspondencia con las reglas de los diferentes algoritmos. Las ecuaciones en (85) permiten tomar los movimientos correctos sin que se sobrepasen los límites de las variables dados por (25c), en el caso de que los límites en los deltas se incrementen.

7. Para todos los algoritmos, el problema LP es minimizado.

8. Todos los valores iniciales de las variables fueron proporcionados. Estos son determinados como sigue: 1) En orden que se pueda comparar la eficiencia de los algoritmos con MINOS, casi todas las condiciones iniciales se tomaron del modelo que se resolvió en forma no lineal. 2) Las relaciones proporcionadas por los balances de materia dan la posibilidad de emplearlos en forma directa para calcular los valores iniciales de algunas variables; esto, mediante el uso de los valores de algunas variables previamente especificadas en el apartado 1).

9. Tres criterios de terminación fueron empleados. En el primero, la norma Euclidiana se adoptó para el tamaño de los deltas y sus límites. El algoritmo ALS especifica el criterio de terminación cuando las deltas se van aproximando a cero. Esto puede tomar un número indefinido de iteraciones. Los métodos de ASR y el modificado por Exxon usan la métrica infinita. Sin embargo, en algunas corridas se observó que este tipo de métrica puede conducir a una falsa terminación, en particular cuando las composiciones de ciertos componentes en los cálculos presentan valores muy pequeños. Por los problemas antes mencionados, se proponen las sumas de los cuadrados de los deltas y de sus límites como criterios de terminación:

$$ERRORB = \text{SQRT}(\text{SUM}(j, BBB(j)*BBB(j))) \quad (86)$$

$$ERRORC = \text{SQRT}(\text{SUM}(j, DELTA(j)*DELTA(j))) \quad (87)$$

Segundo, el cambio relativo en la función objetivo no lineal fue implementado. ASR es el único algoritmo que explícitamente toma en cuenta esta consideración, es decir, el cambio relativo en el valor de la función objetivo en iteraciones sucesivas. El valor absoluto de la diferencia entre el valor de la función objetivo no lineal actual (NLFL1) y aquel de la iteración previa (NLFN) se uso para calcular el error

$$ERRORF = \text{ABS}(NLFN1 - NLFN) \quad (88)$$

Dicho lo anterior, los criterios de terminación son como sigue

$$ERRORF \leq \text{RELTOL1} * (1 + \text{ABS}(NLFN)) \quad (89)$$

$$ERRORB \leq \text{RETOL2} \quad (90)$$

$$ERRORC \leq \text{RETOL1} \quad (91)$$

donde

$$\text{RELTOL1} = 1e-4$$

$$\text{RETOL2} = 1e-6$$

La ecuación (89) es también aplicada a ASR con la adición de las reglas explicadas en (2.2).

10. Los valores iniciales de los límites en los deltas se hacen iguales a uno para todas las variables. Cuando los límites en los deltas se tienen que reducir, se aplica el factor de 0.5 (RECI).

Por otro lado, cuando se permite a los límites incrementar, el factor 2 fue usado (RECD). Es importante notar que el algoritmo original de MAP no define ningún procedimiento para incrementar o reducir los límites, sin embargo, en la implementación de MAP modificada se introdujo una función que computa una tolerancia en las infactibilidades como sigue:

$$\text{SINFD} \geq \text{RESTOL} * (1 + \text{SUM}(I, \text{ABS}(\text{FUNKL}(I)))) \quad (92)$$

donde SINFD es la suma de infactibilidades, FUNKL(I) son los valores de las relaciones definidas por (83) en la iteración actual y RESTOL es la tolerancia para las infactibilidades - i.e. para las simulaciones se fijaron igual a 0.5 -. la función de infactibilidad (92) se aplica en MAP como criterio para reducir los límites impuestos en los deltas.

Un criterio similar se empleó para ASR, pero con sus propias reglas. Por otro lado, el algoritmo de Exxon siempre es factible.

11. Parámetros adicionales empleados por ASR son:

Valor de penalización, Beta —en la mayoría de los casos se adoptó como uno—. Número consecutivo de iteraciones para el cambio en la función objetivo como criterio de finalización (NS = 3). Valor que activa el incremento en los límites impuestos en los deltas (LIM = 3).

Para el método de Exxon, el valor de Beta siempre se fijó como 1000.

El código relevante de los algoritmos se puede consultar en el anexo (A, B, C).

12. El código en GAMS incorpora cierta lógica de modo que se trata de evitar, en la medida de lo posible, la repetición de los cálculos cuando el valor de las x en la iteración actual no es aceptado. Esto es particularmente importante en el cálculo del gradiente, pues si las x son rechazadas, éstos no necesitan ser evaluados otra vez.

4.2. Análisis de Resultados

Múltiples casos fueron ejecutados con el objeto de encontrar los parámetros óptimos usados por los algoritmos propuestos. En algunos casos, se planteó el problema con el máximo número de grados de libertad; en otras corridas, las variables no se escalaron; y en otros, algunos de los factores constantes al problema, por ejemplo, los precios, se cambiaron radicalmente. Cuando los parámetros para el problema de mezclado fueron encontrados (ver sección 4), las soluciones obtenidas para los diferentes casos, cuando se usan las técnicas lineales aquí propuestas, se compararon con los resultados obtenidos cuando el problema se resuelve en forma no lineal [15] mediante el uso de MINOS.

En las siguientes tablas se muestran los resultados de las corridas y los índices de desempeño para los diversos métodos:

- 1) Suma del cuadrado del error para las 51 variables y la función objetivo; todas ellas comparadas con los resultados obtenidos por MINOS, suponiendo que ésta es la respuesta correcta al problema.
- 2) El tiempo que cada algoritmo tomó para resolver los diferentes casos - en segundos de CPU -,
- 3) El número total de iteraciones,
- 4) La suma total de infactibilidades y,
- 5) La desviación de la función objetivo con respecto a los valores obtenidos por MINOS.

**Resultados de la optimización para la planta de alquilación
Índices de desempeño entre MINOS y MAP, ASR y ASP**

	//SSR// (%)*		
	SLP	SLPR	SLPA
Base	8.02	8.52	10.81
C1	12.69	13.95	12.57
C2	70.95	8.89	9.97
D	72.36	88.25	23.17
E	27.81	103.57	36.62
F	16.64	9.89	9.87
G	34.10	17.44	14.33
H*	8.92	7.48	9.60

* Suma del cuadrado de los errores

* El caso H es igual al caso base, excepto por la ecuación que define el rendimiento en la planta de alquilación

	Tiempo de Proceso (Sec)		
	SLP	SLPR	SLPA
Base	2.14	2.07	1.23
C1	1.77	1.96	1.56
C2	0.83	1.45	2.5
D	8.03	2.37	2.87
E	1.49	1.45	2.42
F	10.96	2.09	1.37
G	1.12	1.34	1.93
H*	1.54	2.14	2.56

	Número de Iteraciones		
	SLP	SLPR	SLPA
Base	22	23	17
C1	17	21	17
C2	8	18	32
D	70	28	34
E	15	18	28
F	100	26	12
G	11	14	19
H*	17	24	34

	Función Objetivo		
	SLP	SLPR	SLPA
Base	56849.70	56848.40	56846.40
C1	59953.30	59954.60	59944.20
C2	53351.40	53269.30	53265.40
D	56940.00	56717.90	56925.90
E	56439.80	56320.40	56413.30
F	87032.50	86967.20	87003.80
G	84714.50	84715.20	84714.60
H	56762.50	56765.70	56752.20

	Error Obj Fun (%)*		
	SLP	SLPR	SLPA
Base	-5.10E-03	-2.81E-03	7.04E-04
C1	3.78E-02	3.57E-02	5.30E-02
C2	-1.51E-01	2.95E-03	1.03E-02
D	-1.14E-02	3.79E-01	1.34E-02
E	-3.19E-02	1.80E-01	1.50E-02
F	-7.58E-02	-7.32E-04	-4.28E-02
G	3.87E-04	-4.39E-04	2.69E-04
H	-1.14E-02	-1.44E-02	9.37E-03

* Error con respecto a MINOS

	Suma Infactibilidades		
	SLP	SLPR	SLPA
Base	3.819E-04	3.820E-04	0.000E+00
C1	1.587E-03	1.577E-03	0.000E+00
C2	3.035E-02	7.527E-04	0.000E+00
D	1.409E-02	8.643E-04	0.000E+00
E	4.368E-02	5.034E-05	0.000E+00
F	5.934E-03	1.152E-04	0.000E+00
G	3.895E-03	2.051E-03	0.000E+00
H	1.552E-03	1.535E-03	0.000E+00

Resultados de la optimización para el problema de mezclado
(Metodo: Aproximación Sucesiva Lineal)

(Sección dos)		E	SLP	Diff (%)
Func. Obj		56421.773	56439.8	-0.03
No. Iteración		37	15	
Tiempo (sec)		0.5	1.49	
X1	Y10iC4	0.9700	0.9741	-0.42
X2	Y19iC4	0.8000	0.8000	0.00
X3	SRM	2.512	2.58984	-3.10
X4	SMN	25.462	26.27908	-3.21
X5	Y11iC4	0.0060	0.0054	10.00
X6	F10	1927.226	1927	0.01
X7	F11	413.347	422.5	-2.21
X8	F9	2340.573	2349.5	-0.38
X9	SVapor	10000	10000	0.00
X10	SReflux	8072.774	8073	0.00
X11	SRFRatio	4.1899	4.18998	0.19
X12	F6	20000	20000	0.00
X13	F2	21927.226	21927	0.00
X14	Y16iC4	0.9990	0.9990	0.00
X15	Y16nC4	0.0010	0.0010	0.00
X16	Y12iC4	0.9960	0.9968	-0.08
X17	Y2iC4	0.0040	0.0032	20.50
X18	Y2nC4	24834.431	24846.5	-0.05
X19	F4	0.0007	0.0008	-0.07
X20	Y14C3	3722.391	3738.7	-0.44
X21	F1	0.0050	0.0050	0.00
X22	Y11C3	0.0100	0.0096	4.30
X23	Y14nC4	0.0450	0.0450	0.00
X24	Y1nC4	0.7000	0.7000	0.00
X25	Y10iCf	8.743	8.70771	0.40
X26	RATIO	0.1850	0.1855	-0.29
X27	Y14iCk	0.2500	0.2500	0.00
X28	Y11C4	0.8050	0.8041	0.11
X29	Y14iC4	5.891	5.86387	0.46
X30	RECRATIO	85.367	85	0.43
X31	ACIDSTR	92.359	92.362	0.13
X32	MOCTANE	3.839	3.92069	-2.13
X33	ADILUTE	110.363	109.6	0.69
X34	F3ACID	18.612	18.7	-0.47
X35	F5	4684.689	4704	-0.41
X36	F8	0.9800	0.9800	0.00
X37	Y18iCk	0.0000	0.0000	0.00
X38	Y18iC4	0.0200	0.0200	0.00
X39	Y18nC4	131.13	123.8	5.59
X40	F7	1.01E+05	1.01E+05	0.03
X41	STEAMDB	159.858	160.2	-0.21
X42	F12	253.49	262.3	-3.48
X43	F17	4684.689	4704	-0.41
X44	F13	0	0	0.00
X45	F14	155.453	135.8	12.64
X46	F15	5000	5000	0.00
X47	F16	10	10	0.00
X48	Y16iCp	91.5	91.5	0.00
X49	Y16iCt	0.9940	0.9946	-0.06
X50	Y11nC4	19980	19980	0.00
X51	F6iC4	20	20	0.00
X52	F6nC4			27.81
		//SSR// (%)		

F	SLP	Diff (%)
86966.56	87032.5	-0.08
0.9520	0.9508	0.13
0.8000	0.8000	0.00
2.139	2.10953	1.38
23.291	23.55133	-1.12
0.0080	0.0069	13.25
2386.761	2390.3	-0.15
458.533	454.4	0.90
2845.294	2844.7	0.02
10000	10000	0.00
7613.239	7609.7	0.05
3.19	3.18356	0.20
29346.94	29633.4	-0.98
31733.71	32023.6	-0.91
0.9990	0.9990	0.00
0.0010	0.0010	0.00
0.9950	0.9954	-0.04
0.0050	0.0046	8.20
35255.98	35545.8	-0.82
0.0006	0.0006	1.28
4500	4500	0.00
0.0050	0.0050	0.00
0.0100	0.0098	1.70
0.0450	0.0450	0.00
0.7000	0.7000	0.00
10.386	10.47661	-0.87
0.1580	0.1566	0.91
0.2500	0.2500	0.00
0.8320	0.8330	-0.12
7.052	7.11636	-0.91
93	93	0.00
95.076	95.08855	-0.01
2.029	2.02103	0.39
175.194	174.5	0.40
22.5	22.5	0.00
5683.6	5683.5	0.00
0.9800	0.9800	0.00
0.0000	0.0000	0.00
0.0200	0.0200	0.00
202.933	206.5	-1.76
1.48E+05	1.50E+05	-0.98
345.434	345.6	-0.05
113.099	108.8	3.80
5683.6	5683.5	0.00
3000	3000	0.00
788.101	790.7	-0.33
9817.136	9819.8	-0.03
10	10	0.00
91.5	91.5	0.00
0.9920	0.9931	-0.11
29317.6	29603.7	-0.98
29.347	29.6	-0.86
		//SSR// (%)
		15.64

G	SLP	Diff (%)
84714.83	84714.5	0.00
0.17	1.12	0.55
0.9510	0.9458	0.00
0.8000	0.8000	0.00
2.114	2.00682	5.07
23.521	24.34298	-3.49
0.0070	0.0048	31.29
2382.844	2395.8	-0.54
453.631	439.2	3.18
2836.476	2835	0.05
10000	10000	0.00
7617.156	7604.2	0.17
3.197	3.174	0.72
18167.43	18166.7	0.00
20550.28	20562.5	-0.06
0.9990	0.9990	0.00
0.0010	0.0010	0.00
0.9930	0.9928	0.02
0.0070	0.0072	-2.86
23150.88	23163	-0.05
0.0005	0.0005	0.18
2504.939	2504.8	0.01
0.0050	0.0050	0.00
0.0110	0.0113	-2.36
0.0450	0.0450	0.00
0.7000	0.7000	0.00
12	12	0.00
0.2050	0.2047	0.15
0.2500	0.2500	0.00
0.7840	0.7835	0.06
8.204	8.2091	-0.06
85	85	0.00
92.06	92.05575	0.00
4.038	4.04087	-0.07
116.25	116.3	-0.04
12.525	12.5	0.20
4838.111	4837.9	0.00
0.9800	0.9800	0.00
0.0000	0.0000	0.00
0.0200	0.0200	0.00
132.817	145.8	-9.78
9.20E+04	9.20E+04	-0.07
161.889	162.1	-0.13
291.742	277.1	5.02
4838.111	4837.9	0.00
0	0	0.00
0	0	0.00
5000	5000	0.00
10	10	0.00
92.08	92.07878	0.00
0.9930	0.9952	-0.22
18149.27	18148.5	0.00
18.167	18.2	-0.18
		//SSR// (%)
		34.10

H	SLP	Diff (%)
56757.52	56762.5	-0.01
76	17	
0.36	1.54	
0.9700	0.9700	0.00
0.8000	0.8000	0.00
2.506	2.50625	-0.01
19.082	19.08192	0.00
0.0500	0.0500	0.00
1926.841	1928.1	-0.07
436.751	437	-0.06
2363.592	2365.1	-0.06
7799.168	7804.2	-0.06
5872.327	5876.1	-0.06
3.048	3.04764	0.01
23329.14	23028	1.29
25255.98	24956.1	1.19
0.9990	0.9990	0.00
0.6010	0.6010	0.00
0.9970	0.9968	0.02
0.0030	0.0032	-8.00
28153.21	27854.8	1.06
0.0007	0.0007	-0.39
3701.921	3703.4	-0.04
0.0050	0.0050	0.00
0.0090	0.0089	1.33
0.0450	0.0450	0.00
0.7000	0.7000	0.00
10.072	9.95248	1.19
0.1630	0.1645	-0.93
0.2500	0.2500	0.00
0.8280	0.8260	0.25
6.822	6.73857	1.22
85	85	0.00
92.443	92.42703	0.02
3.783	3.7936	-0.28
105.212	105.6	-0.37
18.51	18.5	0.05
4674.667	4677.3	-0.06
0.9800	0.9800	0.00
0.0000	0.0000	0.00
0.0200	0.0200	0.00
130.898	130.9	0.00
1.18E+05	1.16E+05	1.28
155.961	156	-0.03
280.789	281	-0.08
4674.667	4677.3	-0.06
0	0	0.00
169.372	0.01667	0.00
5000	5000	0.00
10	10	0.00
91.5	91.5	0.00
0.9500	0.9500	0.00
23305.81	23005	1.29
23.329	23	1.41
		//SSR// (%)
		8.92

4.3. Aspectos Computacionales

1. Para todos los casos, los algoritmos ALS realizan menos iteraciones comparados con aquellos resueltos usando MINOS, sin embargo, el tiempo tomado en cada caso es mucho mayor que aquel empleado por MINOS. Esto se debe a que la solución de cada subproblema LP toma entre 0.05 y 0.15 segundos para encontrar la solución. Una de las ventajas que se menciona en la mayoría de los artículos que hablan de ALS, es que, a medida que se aproxima al óptimo del problema no lineal, las matrices de los subproblemas LP en cada iteración se van haciendo más parecidas en comparación con la de la anterior iteración; por lo tanto, cuando la base completa de la iteración anterior se toma como punto de partida para la solución del siguiente LP, el tiempo de solución en cada iteración posterior debe ir disminuyendo. Este fenómeno no fue observado en la mayoría de los casos, aun cuando GAMS usa la base previa como punto de partida para obtener la siguiente solución. Esto se explica como el resultado de las soluciones no factibles – presentadas con mayor frecuencia en MAP y ASR –, dado que la matriz se debe invertir nuevamente debido a que muchos de los coeficientes pudieron haber cambiado en varios órdenes de magnitud. Del mismo modo, cuando se está muy cerca de la solución final, la base previa puede ser singular, por lo tanto, el código de LP tiene que reemplazar suficientes columnas con variables de holgura de modo que ésta vuelva a ser no singular y pueda ser usada la base previa como inicio para resolver el nuevo subproblema LP. Esta situación implica, que si se cuenta con un código LP lo suficientemente versátil como para implementar cierto criterio sistemático para seleccionar la mejor base, esto puede dar mejores direcciones de búsqueda.

2. El algoritmo de MAP es demasiado lento, debido a que en determinado punto, con el fin de reducir las infactibilidades, el decremento en los límites impuestos a los deltas puede ser muy pronunciado, provocando con ello un movimiento lento en el valor de las variables y, por consiguiente, de la función objetivo. Inclusive se observó que el código LP puede ser inestable. Cuando los límites no son reducidos, simplemente el método converge a una false solución, la cual es altamente no factible en el problema no lineal original. La eficiencia de este método se relaciona directamente con las tolerancias que se imponen en las infactibilidades; si la tolerancia es muy pequeña, el problema nunca convergerá a una solución óptima - i.e. el valor de RESTOL = 0.5 se seleccionó con base en este método -. Algunos casos se corrieron con RESTOL = 0.3 y lo que pasó fue que todos los límites impuestos en los deltas se redujeron a cero. Cuando la tolerancia se encuentra demasiado relajada, por ejemplo, alrededor de 1.0, el algoritmo entra en ciclo. Este fenómeno es muy severo cuando hay algunas restricciones que no se encuentran activas. Es importante mencionar que en la forma en la que se programó este algoritmo, todos los límites en los deltas se modifican en la misma proporción. En conclusión, este método no funcionará si cierta lógica no es incorporada para modificar los cambios en los límites de los deltas.

3. El algoritmo ASR trabaja bien en la mayoría de los casos. El valor inicial de las variables es muy importante para este método – condiciones iniciales -. Cuando los grados de libertad cambian, o los límites superiores o inferiores de algunas variables son modificados y, las condiciones iniciales se mantienen constantes, la solución del problema LP puede ser no factible si el parámetro Beta no es ajustado. Si este parámetro, o las condiciones iniciales no se cambian, el algoritmo comenzará a reducir los límites en los deltas demasiado rápido, terminado la iteración en una falsa posición. Problemas de convergencia fueron detectados en los casos E y F, por tanto, para resolver esta contingencia, el valor de Beta se cambió. Sin embargo, aún con un valor de Beta de 10000 (caso E), el algoritmo presentó un gran error en el caso de la predicción de la corriente F15 (LSR- Nafta). Parece que en este algoritmo, el valor de Beta juega un papel muy importante al determinar los valores de los deltas tomados

en cada iteración. Por esta razón es recomendable para este algoritmo implementar una búsqueda inexacta en una dimensión en la función **comp** (36), de modo que se encontrará un valor aproximado de Beta en cada iteración, al menos esto sería conveniente en las primeras iteraciones del algoritmo. Esta estrategia no se consideró aquí debido a que el algoritmo se hubiera complicado extremadamente, perdiendo algunas de las bondades brindadas por las aproximaciones lineales usando LP. Es importante señalar que el valor de Beta también depende de los factores de escala usados, dado que la escala se puede modificar de modo que la forma en la que el algoritmo se mueve asemeje la ruta seguida por el método de la ruta del menor descenso.

4. El algoritmo ASP, propuesto por Exxon, siempre fue eficiente y en ningún caso presentó problemas de convergencia. Sin embargo, tomó más tiempo e iteraciones para encontrar la solución correcta. Los errores absolutos fueron los más pequeños en comparación con los otros dos métodos. La velocidad se pudo incrementar en algunos casos reduciendo el valor de Beta, pero dado que no siempre valores pequeños de Beta funcionaron para todos los casos, el valor de 1000 se adoptó. Este valor se puede calibrar para cada problema en específico, sin tener que efectuar la búsqueda en una dimensión. Con relación al código de implementación de este algoritmo, es mucho más simple que el del algoritmo ASR, y la implementación puede ser incorporada a cualquier código LP disponible en forma muy sencilla. Los valores de los límites en los deltas se incrementan o disminuyen en forma lógica dependiendo si hay un mejoramiento en el valor de la función objetivo. Se debe indicar que la solución final nunca fue no factible. Por todas las razones antes mencionadas, muestro una preferencia particular por este algoritmo.
5. Una revisión detallada de los resultados, muestra que los tres algoritmos encontraron la solución correcta para todos los casos. Las mayores diferencias ocurrieron en la predicción de la composición del n-Butano Y_{F2nC4} , y sólo para el caso E, el monto de LSR – Nafta. La falta de predicción en el primer caso está relacionada con la precisión requerida en la evaluación y, la segunda está relacionada con las condiciones iniciales.
6. Ninguno de los algoritmos antes propuestos encontrará la solución correcta si el problema no se encuentra escalado – esto también es verdad para el caso en el que el problema es resuelto con MINOS -. En la simulación, el factor de escala afecta todos los volúmenes de las corrientes compradas y vendidas por el modelo. El factor de escala que se usó fue de 10000. Se puede probar que un cambio arbitrario en las unidades de las variables independientes cambiará la dirección del mayor descenso e influenciará la efectividad de la minimización; esto significa que el programador necesita tener una buena noción de las unidades del problema de modo que pueda encontrar los factores de escala correctos. Una forma de evitar esta dificultad puede ser la sustitución de las variables en el problema, por variables adimensionales, lo cual se consigue con la división de cada variable entre el rango de la misma.
7. Todos los algoritmos se comportaron eficientemente, aun cuando las restricciones impuestas fueron altamente no lineales. Se puede decir que el rendimiento de alquilerado representa el corazón de todo el proceso; por lo tanto, cuando este rendimiento se predijo usando otra ecuación, todos los algoritmos encontraron la solución óptima sin dificultades. A pesar de que no se pueden obtener conclusiones generales de este resultado – cambio en la estructura del programa por una en la que las no linealidades se incrementan -, los resultados aquí encontrados parecen contradecir algunos autores que recomiendan este tipo de metodología para problemas muy cercanos a la linealidad.

8. El uso de GAMS no es apropiado para implementar el código necesario en este tipo de algoritmos. Una redefinición de las variables se tuvo que efectuar; también no hay forma de controlar la estructura de la matriz por la adición de más columnas cuando los gradientes de la función son calculados en forma externa y, no hay comandos suficientes para controlar las estructuras del ciclo necesarias en este tipo de algoritmos debido a lo repetitivo de las iteraciones. Sus estructuras condicionales son muy pobres. Una forma de programar un código eficiente y elegante es la de seccionar el total del algoritmo en partes, por ejemplo, un código de simulación que calcule los parámetros para ser usados posteriormente en el código de programación lineal. Después, el código de programación lineal genera una solución óptima en términos de las variables independientes, x , las cuales son las variables de proceso requeridas en el código del simulador, este proceso es continuado, hasta que algún criterio de terminación es alcanzado. Un programa separado puede ser usado para generar los conjuntos de información en el formato requerido por el código de LP y para editar la información requerida por el simulador. Del mismo modo, otro programa se puede utilizar para manipular la salida del programa lineal de modo que sea alimentado al simulador en el formato en que esta es requerida.
9. El tamaño del problema se incrementa notablemente cuando se usan los algoritmos propuestos, El código original de GAMS para la versión de la planta de alquiler puede ser ejecutada en la versión estudiantil de GAMS, sin embargo, no es el caso para ninguno de los algoritmos aquí propuestos.
10. Un método para calcular en forma numérica el gradiente necesita ser implementado. No es conveniente, y muchas veces no es posible, calcular los gradientes en forma analítica. Sin embargo, dadas las limitaciones de GAMS, no se trató de implementar el gradiente en forma numérica.

FALTA

PAGINA

54

1. Anthony Brooke, David Kendrick, Alexander Meeraus, GAMS' User Manual, Release 2.25, The Scientific Press Series.
2. Boddington, C.E. y Randall, W.C., "Nonlinear Programs for Product Blending," Joint National TIMS/ORSA Meeting, New Orleans, April/May, 1979.
3. Beale, E. M. L., "Nonlinear Programming Using a General Mathematical Programming Systems," in Design and Implementation of Optimization software, H.J. Greenberg (ed.), Sijthoff and Noordhoff, Amsterdam, 1978, pp. 259-279
4. Buzby, B.R., "Techniques and Experience Solving Really Big Nonlinear Programs in Optimization Methods for Resource Allocation, R. Cottle and J. Krarup (eds.), English University Press, 1974, pp.227-237.
5. F. Palacios-Gomez, "The Solution of Nonlinear Optimization Problems Using Successive Linear Programming: Theoretical and Computational Results", Doctoral Dissertation, The University of Texas.
6. F. Palacios-Gomez, L. Lasdon y M. Engquist., "Nonlinear Optimization by Successive Linear Programming," Management Science, Vol. 28 No. 10 (1982), pp. 1106-1120
7. Himmelblau, D.M, Applied Nonlinear Programming, McGraw-Hill, New York, 1972.
8. James H. Gary, Glenn H. Handwerk, "Petroleum Refining Technology and Economics", Third Edition. Marcel Dekker, Inc.
9. Jerome D. Simon, H.M. Azma, "Exxon Experience with large Scale Linear and Nonlinear Programming Applications," Computers and Chemical Eng., Vol. 7, No. 5 (1983), pp. 605 – 614.
10. Jianzhong Zhang, Nae-Heon y L. Lasdon, "An improved Successive Linear Programming Algorithm," Management Science, Vol 21, No. 10 (1985), pp. 1312-1331.
11. J.Z. Zhang, "Superlinear Convergence of a Trust Region-Type Successive Linear Programming Method," Journal of Optimization Theory and Applications, Vol. 61, No. 2 (1989), pp. 295-310.
12. Leon S. Lasdon, A.D. Waren, "Large Scale Nonlinear Programming," Computer and Chemical Eng. Vol. 7, No. 5 (1983), pp. 595-604.
13. R.E. Griffith y R.A. Stewart, "A Nonlinear Programming Technique for the Optimization of Continuous Processing Systems", Management Science, Vol 7 (1961), pp. 379-392
14. Thomas E. Baker y Leon S. Lasdon, "Successive Linear Programming at Exxon," Management Science, Vol. 31, No. 3 (1985), pp. 264-274.
15. Thomas E. Marlin, "Real Time Optimization Simulation Training"

ANEXO A

A. Código en GAMS de Aproximaciones Sucesivas (MAP) y resultados de corrida –Caso Base -

```

$TITLE Aproximacion Sucesiva Lineal (MAP)
$ONTEXT
Universidad Nacional Autonoma de Mexico
Division de Estudios de Posgrado de Ingenieria
Asesor: Dr. Sergio Fuentes Maya
Optimizacion del Proceso de Mezclado con Alquileracion
Programa de Raul Manzo Chardome (Matricula: 8553666-7)

$OFFTEXT
$OFFUPPER
$OFFSYMXREF OFFSYMLIST

*OPTION SOLPRINT = OFF;

SET
CONT  Loop control      / 1 /
CONT1 Loop control      / 1 /
ITER  Contador de Iteraciones / 1*100 /
I     Numero de restricciones / 1*35 /
J     Numero de variables   / 1*52 /
RJ    Lado derecho no cero / 1 /;

PARAMETER
C(J)  Gradiente de funcion objetivo
DER(I,J) Matriz Jacobiana de Restricciones
FUNK(I) Restricciones no lineales evaluadas en Xk
FUNKL(I) Valores previos de las restricciones
CONINF(I) Contador de no factibilidades
DELTA(J) Incrementos en las Xs
UPB(J) Limite superior para la variable j
LOB(J) Limite inferior para las variables j
SINFD  Suma de no factibilidades
INFVAL Tolerancia para la suma de no factibilidades
NLFN  Funcion objetivo no lineal en la iteracion actual antes de los calculos LP
NLFN1 Funcion objetivo no lineal en la iteracion actual despues de los calculos LP
NOITER Numero de Iteraciones
ERRORC Delta de la aproximacion actual
ERRORB Tamano en los limites de los deltas
ERRORF Error en la funcion objetivo no lineal
CHANG  Diferencia en las no factibilidades en iteraciones consecutivas
RHS(I) Lado derecho de las restricciones;

SCALAR

*****
* Cuando la reduccion automatica en el paso de los deltas
* no es deseable, entonces ACTIVE debe de ser cero. Estos
* parametros se pueden cambiar para mejorar el algoritmo
*****

ACTIVE Reduccion aplicada en los limites cuando / 1 /
* la restriccion es violada
RECD  Reduccion en los limites      / 0.5 /
SLW   Valor de los limites          / 1.0 /
RELTOL1 Tolerancia de terminacion 1 / 1E-4 /
RELTOL2 Tolerancia de terminacion 2 / 1E-6 /
RESTOL Tolerancia en las infactibilidades / 0.50 /

*****
* Otros escaletes usados en los calculos
* Estos no se pueden modificar
*****

RECAL  Recomputo del gradiente      / 1 /

```

PK1 Control en la reduccion en limites / 0 /;

VARIABLES

XP(J) Incremento positivo en las variables x
XN(J) Incremento negativo en las variables x
X(J) Variables x
OBJF Funcion objetivo lineal;

POSITIVE VARIABLES XP(J), XN(J), X(J);

EQUATIONS

LINEQ(I) Restricciones lineales
UPBOUND(J) Limite superior en los deltas
LOBOUND(J) Limite inferior en los deltas
FEAS1 Usado por el reflujo minimo
LOBJ Funcion objetivo lineal;

* Planta de alquilerion

SCALARS

* Debutanizadora

SALPHA Volatilidad relativa / 1.4/
SN Numero de platos teoricos / 40 /
SCALE Factor de escala /10000/

* Reactor

* Coeficientes en el modelo

* Eq1. rendimiento de alquilado

YINTER interseccion / 1.12 /
YLINEAR termino lineal / 0.132 /
YQUAD termino cuadratico / -0.0067/

*

* Eq2. rendimiento de alquilado

YYA Primer coeficiente / 1.6388/
YYB segundo coeficiente / -0.1394/
YYC tercer coeficiente / 0.6052 /
YYD cuarto coeficiente / -1.1736/
YYE quinto coeficiente / 0.1100/

* coeficiente en el modelo

OINTER alkyl interseccion de octano / 90. /
OYF4IC4 alkyl termino ic4 en octano / 8.75/
OACIDSTR alkyl termino acido en octano / .325/

* Mezcla de gasolina

RVPIC4 rvp de ic4 / 210 /
RVPNC4 nc4 / 138 /
RVPALKYL alquilado / 3 /
RVPREF reformado / 4 /
RVPLSR nafta / 7.5 /
RVPMAX max spec / 10 /
RVPMIN min spec / 5 /

OCTIC4 octane ic4 / 92.7 /
OCTNC4 nc4 / 92.5 /
OCTREF reformado / 91.8 /
OCTLSR nafta / 64.5 /

OCTMAX max spec / 100 /
 OCTMIN min spec / 91.5 /

 * Precios (\$/unidad de flujo)

* PRICEQ precio de energia en el rehervidor / .0100 /
 unidad en \$/bl C4 en vapor
 * PRICEF1 Carga de olefinas / 25 /
 PRICEF3 restitucion de acido / 60 /
 PRICEF9 carga mezcla butanos / 12 /
 PRICEF14 reformado / 34 /
 PRICEF15 nafta / 24 /

 PRICEF5 propano / 10 /
 PRICEF7 dib corriente lateral / 10 /
 PRICEF16 gasolina / 37 /
 PRICEF17 venta de n-butano / 10 /

VARIABLES

HOLD1 var intermedia en calculo de rvp
 HOLD2 var intermedia en calculo de rvp
 HOLD3 var intermedia en calculo de oct
 HOLD4 var intermedia en calculo de oct;

 * Limites en debutanizadora

X.LO("1") = 0.97 Variable YF10IC4;
 X.UP("1") = 0.97;

X.LO("2") = 0.80 Variable YF9IC4;
 X.UP("2") = 0.80;

X.UP("8") = 10000/SCALE Variable F9;

X.LO("5") = 0.05 Variable YF11IC4;
 X.UP("5") = 0.05;

* X.UP("9") = 10000/SCALE Variable SVAPOR;
 hydraulic limitation

* Variable superflua

X.LO("11") = 0.00;
 X.UP("11") = 0.00;

 * Limite en la carga de olefinas

X.LO("21") = 2000/SCALE Variable F1;
 X.UP("21") = 4500/SCALE;

X.LO("22") = .005 Variable YF1C3;
 X.UP("22") = .005;

X.LO("28") = .25 Variable YF11C4;
 X.UP("28") = .25;

X.LO("24") = .045 Variable YF1NC4;
 X.UP("24") = .045;

X.LO("25") = 1-X.LO("22") - X.LO("28") - X.LO("24") Variable YF1OLEF;
 X.UP("25") = 1-X.UP("22") - X.UP("28") - X.UP("24");

* *****

* Limites en el Reactor

* *****

X.LO("31") = 85.0 Variable ACIDSTR;
X.UP("31") = 93.0;

X.LO("30") = 1.0 Variable RECRATIO;
X.UP("30") = 13.;

X.LO("26") = 4.0 Variable RATIO;
X.UP("26") = 12.0;

* *****

* Limites en deisobutanizadora

* *****

X.LO("13") = 500.0/SCALE Variable F6;
X.UP("13") = 20000.0/SCALE;

X.LO("39") = .001 Variable YF8NC4;
X.UP("39") = .020;

X.UP("38") = 0.0 Variable YF8IC4;

X.LO("16") = .001 Variable YF6NC4;
X.UP("16") = .20;

* *****

* Limites en mezclado

* *****

X.UP("45") = 300.0/SCALE Variable F14;

X.UP("46") = 2000.0/SCALE Variable F15;

X.LO("47") = 5000.0/SCALE Variable F16;
X.UP("47") = 5000.0/SCALE;

X.UP("43") = 1000.0/SCALE Variable F17;

X.LO("48") = RVPMIN Variable Gasoline RVP;
X.UP("48") = RVPMAX;

X.LO("49") = OCTMIN Variable Gasoline Octane;
X.UP("49") = OCTMAX;

* *****

* Valor inicial de las variables

* *****

X.L("1") = .97 Variable YF10IC4;
X.L("2") = 0.80 Variable YF9IC4;
X.L("5") = .05 Variable YF11IC4;

* Valor minimo de reflujo

$X.L("3") = (X.L("1")/X.L("2")) - SALPHA * (1 - X.L("1")) / (1 - X.L("2")) / (SALPHA - 1);$

* Numero minimo de platos

$X.L("4") = LOG((X.L("1")) / (1 - X.L("1"))) * ((1 - X.L("5")) / X.L("5")) / LOG(SALPHA);$

X.L("12") = X.L("3") + 0.1 Variable SRFRATIO;
X.L("15") = .90 Variable YF6IC4;
X.L("17") = .9 Variable YF2IC4;
X.L("21") = 3300.0/SCALE Variable F1;
X.L("22") = .005 Variable YF1C3;
X.L("24") = .045 Variable YF1NC4;
X.L("28") = .25 Variable YF1IC4;

```

X.L("30") = 10.          Variable RECRATIO;
X.L("31") = 92.         Variable ACIDSTR;
X.L("32") = 95.         Variable MOC'TANE;
X.L("33") = 3.793      Variable ADILUTE;
X.L("34") = 105.57/SCALE Variable F3ACID;
X.L("37") = .98         Variable YF8ALKYL;
X.L("38") = .01         Variable YF8IC4;
X.L("39") = .02         Variable YF8NC4;
X.L("42") = 156.0/SCALE Variable F12;
X.L("43") = 100.0/SCALE Variable F17;
X.L("44") = 4677.29/SCALE Variable F13;
X.L("45") = 300.0/SCALE Variable F14;
X.L("46") = 320.0/SCALE Variable F15;
X.L("47") = 5000.0/SCALE Variable F16;
X.L("48") = 10.0        Variable RVP Gasolina;
X.L("49") = 92          Variable Octane Gasolina;
X.L("50") = 0.95        Variable YF11NC4;
X.L("8") = X.L("21") / 3 Variable F9;
X.L("6") = X.L("8")*X.L("2") Variable F10;
X.L("7") = X.L("8") - X.L("6") Variable F11;
X.L("10") = X.L("6")*X.L("12") Variable SREFLUX;
X.L("9") = X.L("6") + X.L("10") Variable SVAPOR;
X.L("25") = 1 - X.L("22") - X.L("28") - X.L("24") Variable YF10LIF;
X.L("13") = X.L("21")*X.L("25")*10. Variable F6;
X.L("14") = X.L("6") + X.L("13") Variable F2;
X.L("16") = 1 - X.L("15") Variable YF6NC4;
X.L("18") = 1. - X.L("17") Variable YF2NC4;
X.L("19") = X.L("21") + X.L("14") Variable F4;
X.L("26") = X.L("14") / X.L("21") Variable RADIO;
X.L("20") = X.L("22") Variable YF4C3;
X.L("23") = (X.L("21")*X.L("24") + X.L("14")*X.L("18"))/(X.L("21") + X.L("14")) Variable YF4NC4;
X.L("27") = X.L("25")/X.L("26") Variable YF4ALKYL;
X.L("29") = (X.L("21")*X.L("28") + X.L("14")*X.L("17"))/(X.L("21") + X.L("14")) Variable YF4IC4;
X.L("35") = X.L("19")*X.L("20") Variable F5;
X.L("36") = X.L("19")*X.L("27") Variable F8;
X.L("40") = X.L("19")*X.L("23") Variable F7;
X.L("41") = 5*X.L("19")*(X.L("23") + X.L("29")) Variable Vapor DIB;
X.L("51") = X.L("13")*X.L("15") Variable F6IC4;
X.L("52") = X.L("13")*X.L("16") Variable F6NC4;

```

```

*****
*   Algoritmo de optimizacion

```

```

*****
*   Condiciones iniciales para la optimzacion
*****

```

```

ERRORC = 1;
ERRORB = 1;
ERRORF = 1;
NOITER = 0;
NLFN = 0;

```

```

*****
*   Valores iniciales de las restricciones
*****

```

```

*****
*   Control de no factibilidades en el radio de reflujo minimo
*****

```

```

RHS("1") = X.L("12") - 0.1 - X.L("3");

```

```

*****
*   Coeficiente de la funcion objetivo
*****

```

```

C("8") = PRICEF9;
C("9") = PRICEQ;
C("21") = PRICEF1;

```

C("34") = PRICEF3;
 C("35") = -PRICEF5;
 C("40") = -PRICEF7;
 C("41") = PRICEQ;
 C("43") = -PRICEF17;
 C("45") = PRICEF14;
 C("46") = PRICFF15;
 C("47") = -PRICEF16;

 * EQUACIONES Y GRADIENTE DE MODELO EN ESTA SECCION

UPB(J) = MIN(X.UP(J) - X.L(J), SLW);
 LOB(J) = MAX(X.LO(J) - X.L(J), -SLW);

LOBJ.. SUM(J, C(J)*(XP(J) - XN(J)))=E= OBJF;
 LINEQ(I).. SUM(J, DER(I,J)*(XP(J) - XN(J))) =E= FUNK(I);
 FEAS1.. (XP("3") - XN("3")) - (XP("12") - XN("12"))=L= RHS("1");
 UPBOUND(J).. XP(J) - XN(J)=L= UPB(J);
 LOBOUND(J).. XP(J) - XN(J)=G= LOB(J);

MODEL LINEAL /LOBJ, LINEQ, FEAS1, UPBOUND, LOBOUND/;

FILE RES /MAPALK.DAT/;
 PUT RES;

PUT " Aproximacion Lineal Sucesiva (SLP)" /;
 PUT /;
 PUT " SUM INF OBJ STATUS TIEMPO" /;

OPTION DECIMALS = 8;
 LOOP(ITER \$ ((ERRORC GT RELTOL1) AND (ERRORB GT RELTOL2) AND (ERRORF GT RELTOL1*(1 + ABS(NLFN))));

 * Definicion de la funcion objetivo no lineal antes del los calculos LP

NLFN = SUM(J, C(J)*X.L(J));

SOLVE LINEAL USING LP MINIMIZING OBJF;

DELTA(J) = XP.L(J) - XN.L(J);
 ERRORC = SQRT(SUM(J, DELTA(J)*DELTA(J)));
 X.L(J) = X.L(J) + DELTA(J);

* Valor de las restricciones despues del calculo LP

FUNKL(I) = FUNK(I);
 RHS("1") = X.L("12") - 0.1 - X.L("3");

 EQUACIONES DEL MODELO EN ESTA SECCION

 * Definicion de la funcion objetivo no lineal despues de los calculos LP

NLFN1 = SUM(J, C(J)*X.L(J));

ERRORF = ABS(NLFN1 - NLFN);
 CONINF(I) = ABS(FUNK(I));

```

SINFD = SUM(I, CONINF(I)) + SUM(J, MAX(0,X.LO(J) - X.L(J))) + SUM(J, MAX(0,X.L(J) - X.UP(J))) + MAX(0.0, -
RHS("1"));
CHANG = ABS(SUM(I, CONINF(I)) - SUM(I, ABS(FUNKL(I))));
INFVAL = RESTOL*(1 + SUM(I, ABS(FUNKL(I))));
PK1 $ (((SINFD GT INFVAL) OR (CHANG LT RELTOL)) AND (ACTIVE EQ 1)) = 1;
LOOP(CONT $ (PK1 EQ 1),
  X.L(J) = X.L(J) - DELTA(J);
  SLW = RECD*SLW;
  ERRORB = SLW;
  RECAL = 0;
  FUNK(I) = FUNKL(I);
  PK1 = 0;
);

LOOP(CONTI $ (RECAL EQ 1),
* *****
*   Valores finales del gradiente de la funcion objetivo
* *****

*****
*   DERIVADAS DEL MODELO EN ESTA SECCION
* *****
);
*****

UPB(J) = MIN(X.UP(J) - X.L(J), SLW);
LOB(J) = MAX(X.LO(J) - X.L(J), -SLW);

NOITER = NOITER + 1;
RECAL = 1;

PUT SINFD:10:5, NLFN1:10:4;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 1) " Optimo " ;
  PUT$(LINEAL.MODEI STAT EQ 2) " Optimo Local " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 3) " No limitado " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 4) " No factible " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 5) " Localmente infactible " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 6) " Intermedio infactible " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 7) " Intermedio no Optimo " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 8) " Solucion Entera " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 9) " Intermedio no-entero " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 10) " Entero no factible " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 12) " Error desconocido " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 13) " Error sin solucion " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 13) " Optimo ";
PUT LINEAL.RESUSI:5 /;
);

PUT /;
PUT " Numero de iteraciones: ", NOITER:5:0 /;
PUT " Tamano del delta actual: ", ERRORC:10:10 /;
PUT " Tamano de los limites: ", ERRORB:10:10 /;
PUT " Error en la funcion objetivo no lineal: ", ERRORF:10:10 /;
PUT " Suma de no factibilidades: ", SINFD:10:10 /;
PUT " Valor final de la funcion objetivo: ", NLFN1:10:5 /;
PUT /;
PUT " Valor de las variables " /;
PUT " X(J) STEPB(J) LOB(J) UPB(J) " /;
LOOP(J,
  PUT X.L(J):10:5, SLW:10:5, LOB(J):10:5, UPB(J):10:5 /;
);

OPTIONS DECIMALS = 8;

DISPLAY "La solucion se encontro dentro de los limites ", X.L, NLFN1, NOITER;

```

A.I. Resultados de Corrida para el caso base cuando se usa el algoritmo MAP

Aproximacion Lineal Sucesiva (SLP)
Caso Base

SUM INF	OBJ	STATUS	TIEMPO
3.50692	-5.7709	No factible	0.05
0.57317	-4.9644	No factible	0.05
0.41210	-5.5624	Optimo	0.04
0.06299	-5.6571	Optimo	0.04
0.02867	-5.6432	Optimo	0.05
0.04488	-5.6635	Optimo	0.05
0.03057	-5.6774	Optimo	0.03
0.04836	-5.6820	Optimo	0.05
0.02963	-5.6964	Optimo	0.05
0.05177	-5.6898	Optimo	0.05
0.02899	-5.7064	Optimo	0.04
0.01910	-5.6848	Optimo	0.04
0.01983	-5.7037	Optimo	0.05
0.01985	-5.6848	Optimo	0.02
0.00492	-5.6847	Optimo	0.05
0.00555	-5.6896	Optimo	0.05
0.00562	-5.6852	Optimo	0.05
0.00125	-5.6849	Optimo	0.03
0.00148	-5.6859	Optimo	0.05
0.00149	-5.6850	Optimo	0.03
0.00035	-5.6848	Optimo	0.03
0.00038	-5.6850	Optimo	0.05

Numero de iteraciones: 22
 Tamano del delta actual: 0.18232594
 Tamano de los limites: 0.06250000
 Error en la funcion objetivo no lineal: 0.00014559
 Suma de no factibilidades: 0.00038192
 Valor final de la funcion objetivo: -5.68497

Valor de las variables

X(J)	STEPB(J)	LOB(J)	UPB(J)
0.97000	0.06250	0.00000	0.00000
0.80000	0.06250	0.00000	0.00000
2.50625	0.06250	-0.06250	0.06250
19.08192	0.06250	-0.06250	0.06250
0.05000	0.06250	0.00000	0.00000
0.19283	0.06250	-0.06250	0.06250
0.04371	0.06250	-0.04371	0.06250
0.23654	0.06250	-0.06250	0.06250
0.78051	0.06250	-0.06250	0.06250
0.58768	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00000	0.06250	0.00000	0.00000
3.04764	0.06250	-0.06250	0.06250
2.32317	0.06250	-0.06250	0.06250
2.51600	0.06250	-0.06250	0.06250
0.99900	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00100	0.06250	0.00000	0.06250
0.99678	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00322	0.06250	-0.00322	0.06250
2.80565	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00066	0.06250	-0.00066	0.06250
0.36982	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00500	0.06250	0.00000	0.00000
0.00882	0.06250	-0.00882	0.06250
0.04500	0.06250	0.00000	0.00000
0.70000	0.06250	0.00000	0.00000
10.04474	0.06250	-0.06250	0.06250
0.16330	0.06250	-0.06250	0.06250
0.25000	0.06250	0.00000	0.00000
0.82722	0.06250	-0.06250	0.06250
6.80324	0.06250	-0.06250	0.06250
85.00000	0.06250	0.00000	0.06250

92.43817	0.06250	-0.06250	0.06250
3.78618	0.06250	-0.06250	0.06250
0.01053	0.06250	-0.01053	0.06250
0.00185	0.06250	-0.00185	0.06250
0.46755	0.06250	-0.06250	0.06250
0.98000	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00000	0.06250	0.00000	0.00000
0.02000	0.06250	-0.01900	0.00000
0.01308	0.06250	-0.01308	0.06250
11.72798	0.06250	-0.06250	0.06250
0.01560	0.06250	-0.01560	0.06250
0.02811	0.06250	-0.02811	0.06250
0.46755	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00000	0.06250	0.00000	0.03000
0.01685	0.06250	-0.01685	0.06250
0.50000	0.06250	0.00000	0.00000
10.00000	0.06250	-0.06250	0.00000
91.50000	0.06250	0.00000	0.06250
0.95000	0.06250	-0.06250	0.06250
2.32085	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00232	0.06250	-0.00232	0.06250

ANEXO B

B. Código en GAMS de Aproximación Sucesiva Restringida (ASR) y resultados de corrida – Caso Base –

\$TITLE Aproximacion Sucesiva Restringida (ARS)
\$ONTEXT

Universidad Nacional Autonoma de Mexico
Division de Estudios de Progrado de Ingenieria
Asesor: Dr. Sergio Fuentes Maya
Optimizacion del Proceso de Mezclado con Alquilacion
Programa de Raul Manzo Chardome (Matricula: 8553666-7)

\$OFFTEXT
\$OFFUPPER
\$OFFSYM XREF OFFSYMLIST
*OPTION SOLPRINT = OFF;

SET
CONT Loop control / 1 /
CONT1 Loop control / 1 /
CONT2 Loop control / 1 /
CONT3 Loop control / 1 /
ITER Manejo de Iteraciones / 1*100 /
I Numero de Restricciones / 1*35 /
J Numero de Variables / 1*52 /
RJ Lado derecho no cero / 1 /;

PARAMETER
C(J) Gradiente funcion objetivo
DER(I,J) Matriz Jacobiana de restricciones
FUNK(I) Restricciones no lineales evaluadas en Xk
FUNKL(I) Valores previos de las restricciones
CONINF(I) Contador de no factibilidades
DELTA(J) Deltas en las X's
SINFD Funcion de suma de no factibilidades antes del calculo de LP
NOITER Numero de iteraciones
ERRORC Tamanos de la aproximacion actual
ERRORB Tamano de los limites en los deltas
ERRORF Error en la funcion Objetivo no lineal
NLFN Funcion objetivo no lineal en la iteracion anterior al calculo LP
NLFNI Funcion objetivo no lineal en la iteracion posterior al calculo LP
CONTF Contador de las iteraciones consecutivas para el cambio en la funcion objetivo
OBJD Funcion objetivo compuesta antes del calculo LP
OBJDI Funcion objetivo compuesta despues del calculo LP
UPB(J) Limite superior de la variable j
LOB(J) Limite inferior de la variable j
BBB(J) Limites en los deltas de la variable j
CNB(J) Contador de la ocurrencia de variables no lineales no basicas
RHS(RJ) Lado derecho de las restricciones;

SCALAR

* Estos escalares se pueden modificar para mejorar los calculos

RECI Incremento en el limite de los deltas / 2.0 /
RECD Reduccion en el limite de los deltas / 0.5 /
SLW Valor inicial de los limites en deltas / 1.0 /
RELTOL1 Tolerancia de terminacion 1 / 1E-4 /
RELTOL2 Tolerancia de terminacion 2 / 1E-6 /
RELTOL Tolerancia de factibilidad / 0.5 /
BETA Valor penal / 1 /
NS Numero consecutivo de iteraciones / 3 /
* para el cambio en FO. Criterio de paro
LIM Valor que inicial el cambio en limites / 3 /

 * Otros escalares usados en los calculos
 * Estos no se deben de modificar

LP2 Fase dos de los calculos / 2 /
 PHASE Fase de calculo / 1 /
 RECAL Recalculo de los gradientes / 1 /
 PK1 Calculo en la fase I / 0 /
 PK2 Calculo en la fase II / 0 /;

VARIABLES

SINF Funcion de suma de no factibilidades despues del calculo LP
 XP(J) Incrementos positivos en las variables x's
 XN(J) Incrementos negativos en las variables x's
 X(J) Variables x's
 OBJF Funcion objetivo lineal;

POSITIVE VARIABLES XP(J), XN(J), X(J);

EQUATIONS

LINEQ(I) Restricciones lineales
 UPBOUND(J) Limite superior en los deltas
 LOBOUND(J) Limite inferior en los deltas
 INFES Suma de no factibilidades
 FEAS1 Usado en el reflujo minimo
 LOBJ Funcion objetivo lineal;

 * Planta de Alquilacion

SCALARS

 * Debutanizadora

SALPHA Volatilidad relativa / 1.4/
 SN Numero de platos teoricos / 40 /
 SCALE Factor de escala /10000/

 * Reactor

* Coeficientes en el modelo

* Eq1. rendimiento de alquilado

YINTER alkyl interseccion / 1.12 /
 YLINEAR alkyl termino lineal / 0.132 /
 YQUAD alkyl termino cuadratico /-0.0067/

* Eq2. rendimiento de alquilado

YYA primer coeficiente / 1.6388/
 YYB segundo coeficiente /-0.1394/
 YYC tercer coeficiente /0.6052 /
 YYD cuarto coeficiente /-1.1736/
 YYE quinto coeficiente /0.1100/

* coeficientes del modelo

OINTER alkyl interseccion octano / 90. /
 OYF4IC4 alkyl termino ic4 en octano / 8.75/
 OACIDSTR alkyl termino acido en octano / .325/

 * Mezcla de gasolina

RVPIC4	rvp de ic4	/ 210 /
RVPNC4	nc4	/ 138 /
RVPALKYL	alquilado	/ 3 /
RVPREF	reformado	/ 4 /
RVPLSR	nafta	/ 7.5 /
RVPMAX	max spec	/ 10 /
RVPMIN	min spec	/ 5 /
OCTIC4	octano de ic4	/ 92.7 /
OCTNC4	nc4	/ 92.5 /
OCTREF	reformado	/ 91.8 /
OCTLSR	nafta	/ 64.5 /
OCTMAX	max spec	/ 100 /
OCTMIN	min spec	/ 91.5 /

* Precios (\$/unidad de flujo)

* PRICEQ	precio de la energia en hervidor / .0100 / unidad en \$/bl c4 vapor	
PRICEF1	carga de olefinas	/ 25 /
PRICEF3	restitucion de acido	/ 60 /
PRICEF9	carga mezcla butanos	/ 12 /
PRICEF14	reformado	/ 34 /
PRICEF15	nafta	/ 24 /
PRICEF5	propano	/ 10 /
PRICEF7	dib corriente lateral	/ 10 /
PRICEF16	gasolina	/ 37 /
PRICEF17	venta de n-butano	/ 10 /

VARIABLES

HOLD1	var intermedia en calculo de rvp
HOLD2	var intermedia en calculo de rvp
HOLD3	var intermedia en calculo de oct
HOLD4	var intermedia en calculo de oct;

* Limites en debutanizadora

X.LO("1") = 0.97 Variable YF10IC4;
X.UP("1") = 0.97;

X.LO("2") = 0.80 Variable YF9IC4;
X.UP("2") = 0.80;

X.UP("8") = 10000.0/SCALE Variable F9;

X.LO("5") = 0.05 Variable YF11IC4;
X.UP("5") = 0.05;

X.UP("9") = 10000/SCALE Variable SVAPOR;
* Limite hidraulico

* Variable superflua

X.LO("11") = 0.00;
X.UP("11") = 0.00;

* Limites en carga de olefinas

X.LO("21") = 2000/SCALE Variable F1;
X.UP("21") = 4500/SCALE;

X.LO("22") = .005 Variable YF1C3;
X.UP("22") = .005;

X.LO("28") = .25 Variable YF1C4;
X.UP("28") = .25;

X.LO("24") = .045 Variable YF1NC4;
X.UP("24") = .045;

X.LO("25") = 1-X.LO("22") - X.LO("28") - X.LO("24") Variable YF1OLEF;
X.UP("25") = 1-X.UP("22") - X.UP("28") - X.UP("24");

* Limites en reactor

X.LO("31") = 85.0 Variable ACIDSTR;
X.UP("31") = 93.0;

X.LO("30") = 1.0 Variable RECRATIO;
X.UP("30") = 13.;

X.LO("26") = 4.0 Variable RATIO;
X.UP("26") = 12.0;

* Limites en Deisoburanizadora

* X.LO("13") = 500.0/SCALE Variable F6;
X.UP("13") = 20000.0/SCALE;

X.LO("39") = .001 Variable YF8NC4;
X.UP("39") = .020;

X.UP("38") = 0.0 Variable YF8IC4;

X.LO("16") = .001 Variable YF6NC4;
X.UP("16") = .20;

* Limites en mezclado

X.LO("45") = 0.0 Variable F14;
X.UP("45") = 3000.0/SCALE;

X.UP("46") = 2000.0/SCALE Variable F15;

X.LO("47") = 5000.0/SCALE Variable F16;
X.UP("47") = 5000.0/SCALE;

X.UP("43") = 1000.0/SCALE Variable F17;

X.LO("48") = RVPMIN Variable Gasolina RVP;
X.UP("48") = RVPMAX;

X.LO("49") = OCTMIN Variable Gasolina Octano;
X.UP("49") = OCTMAX;

* Valores iniciales de las variables

X.L("1") = .97 Variable YF10IC4;
X.L("2") = 0.80 Variable YF9IC4;
X.L("5") = .05 Variable YF11IC4;

* Valor minimo de reflujo

$$X.L("3") = (X.L("1")/X.L("2")) - SALPHA * (1 - X.L("1")) / (1 - X.L("2")) / (SALPHA - 1);$$

* Minimo numero de platos teoricos

$$X.L("4") = LOG((X.L("1") / (1 - X.L("1"))) * ((1 - X.L("5")) / X.L("5"))) / LOG(SALPHA);$$

```

X.L("12") = X.L("3") + 0.1      Variable SRFRATIO;
X.L("15") = .90                Variable YF6IC4;
X.L("17") = .9                 Variable YF2IC4;
X.L("21") = 3300.0/SCALE      Variable F1;
X.L("22") = .005              Variable YFIC3;
X.L("24") = .045              Variable YFINC4;
X.L("28") = .25               Variable YF1IC4;
X.L("30") = 10.               Variable RECRATIO;
X.L("31") = 92.               Variable ACIDSTR;
X.L("32") = 95.               Variable MOC'TANE;
X.L("33") = 3.793             Variable ADILUTE;
X.L("34") = 105.57/SCALE      Variable F3ACID;
X.L("37") = .98               Variable YF8ALKYL;
X.L("38") = .01               Variable YF8IC4;
X.L("39") = .02               Variable YF8NC4;
X.L("42") = 156.0/SCALE       Variable F12;
X.L("43") = 100.0/SCALE       Variable F17;
X.L("44") = 4677.29/SCALE     Variable F13;
X.L("45") = 300.0/SCALE       Variable F14;
X.L("46") = 320.0/SCALE       Variable F15;
X.L("47") = 5000.0/SCALE      Variable F16;
X.L("48") = 10.0              Variable RVP Gasolina;
X.L("49") = 92                Variable Octane Gasolina;
X.L("50") = 0.95              Variable YF11NC4;
X.L("8") = X.L("21") / 3      Variable F9;
X.L("6") = X.L("8") * X.L("2") Variable F10;
X.L("7") = X.L("8") - X.L("6") Variable F11;
X.L("10") = X.L("6") * X.L("12") Variable SREFI.UX;
X.L("9") = X.L("6") + X.L("10") Variable SVAPOR;
X.L("25") = 1 - X.L("22") - X.L("28") - X.L("24") Variable YF1OLEF;
X.L("13") = X.L("21") * X.L("25") * 10. Variable F6;
X.L("14") = X.L("6") + X.L("13") Variable F2;
X.L("16") = 1 - X.L("15")      Variable YF6NC4;
X.L("18") = 1 - X.L("17")      Variable YF2NC4;
X.L("19") = X.L("21") + X.L("14") Variable F4;
X.L("26") = X.L("14") / X.L("21") Variable RADIO;
X.L("20") = X.L("22")          Variable YF4C3;
X.L("23") = (X.L("21") * X.L("24") + X.L("14") * X.L("18")) / (X.L("21") + X.L("14")) Variable YF4NC4;
X.L("27") = X.L("25") / X.L("26") Variable YF4ALKYL;
X.L("29") = (X.L("21") * X.L("28") + X.L("14") * X.L("17")) / (X.L("21") + X.L("14")) Variable YF4IC4;
X.L("35") = X.L("19") * X.L("20") Variable F5;
X.L("36") = X.L("19") * X.L("27") Variable F8;
X.L("40") = X.L("19") * X.L("23") Variable F7;
X.L("41") = 5 * X.L("19") * (X.L("23") + X.L("29")) Variable vapor DIB;
X.L("51") = X.L("13") * X.L("15") Variable F6IC4;
X.L("52") = X.L("13") * X.L("16") Variable F6NC4;

```

* Algoritmo de optimizacion

* Condiciones iniciales para la optimizacion

```

BBB(J) = SLW;
CNB(J) = 0;
ERRORC = 1;
ERRORB = 1;
ERRORF = 1;
NOITER = 0;
PHASE = 1;
NLFN = 0;
CONTF = 0;

```

* Valor inicial de las restricciones

* Control de infactibilidades en el radio de reflujos mínimo

RHS("1") = X.L("12") - 0.1 - X.L("3");

* Coeficiente de la función objetivo

C("8") = PRICEF9;
C("9") = PRICEQ;
C("21") = PRICEF1;
C("34") = PRICEF3;
C("35") = -PRICEF5;
C("40") = -PRICEF7;
C("41") = PRICEQ;
C("43") = -PRICEF17;
C("45") = PRICEF14;
C("46") = PRICEF15;
C("47") = -PRICEF16;

ECUACIONES Y DERIVADAS DE MODELO EN ESTA SECCION

UPB(J) = MIN(X.UP(J) - X.L(J), BBB(J));
LOB(J) = MAX(X.LO(J) - X.L(J), -BBB(J));

CONINF(I) = ABS(FUNK(I));
INFES.. SINF =E= SUM(I, CONINF(I)) + SUM(J, MAX(0,X.LO(J) - X.L(J))) + SUM(J, MAX(0,X.L(J) - X.UP(J))) + MAX(0.0, -RHS("1"));
LOBJ.. SUM(J, C(J)*(XP(J) - XN(J))) + BETA*SINF =E= OBJF;
LINEQ(I).. SUM(J, DER(I,J)*(XP(J) - XN(J))) =I= FUNK(I);
FEAS1.. (XP("3") - XN("3")) - (XP("12") - XN("12")) =L= RHS("1");
UPBOUND(J).. XP(J) - XN(J) =L= UPB(J);
LOBOUND(J).. XP(J) - XN(J) =G= LOB(J);

MODEL LINEAL /INFES, LOBJ, LINEQ, FEAS1, UPBOUND, LOBOUND/;

FILE RES /RSLPRALK.RES/;
PUT RES;
PUT " Aproximacion Sucesiva Restringida (ASR)" /;
PUT /;
PUT " SUM INF OBJ STATUS TIME" /;

OPTION DECIMALS = 8;
LOOP(ITER \$ ((ERRORC GT RELTOL1) AND (ERRORB GT RELTOL2) AND (CONTF LT NS)),

* Definición de función objetivo no lineal y
* suma de infactibilidades antes del cálculo LP

NLFN = SUM(J, C(J)*X.L(J));
CONINF(I) = ABS(FUNK(I));
SINF = SUM(I, CONINF(I)) + SUM(J, MAX(0,X.LO(J) - X.L(J))) + SUM(J, MAX(0,X.L(J) - X.UP(J))) + MAX(0.0, -RHS("1"));

SOLVE LINEAL USING LP MINIMIZING OBJF;

DELTA(J) = XP.L(J) - XN.L(J);
ERRORC = SQRT(SUM(J, DELTA(J)*DELTA(J)));

X.L(J) = X.L(J) + DELTA(J);

* *****
 * Valor de las restricciones despues del calculo LP
 * *****

FUNKL(I) = FUNK(I);
 RHS("1") = X.L("12") - 0.1 - X.L("3");

* *****
 ECUACIONES DE MODELO EN ESTA SECCION
 * *****

* *****
 * Funcion objetivo no lineal despues de los calculos LP
 * *****

NLFN1 = SUM(J, C(J)*X.L(J));

* *****

CONINF(I) = ABS(FUNK(I));
 SINFL = SUM(I, CONINF(I)) + SUM(J, MAX(0, X.LO(J) - X.L(J))) + SUM(J, MAX(0, X.L(J) - X.UP(J))) +
 MAX(0.0, - RHS("1"));
 ERRORF = ABS(NLFN1 - NLFN);
 CONTF \$ (ERRORF LT RELTOL1*(1 + ABS(NLFN))) = CONTF + 1;

PK1 = 1\$(LINEAL.MODELSTAT EQ 4);
 LOOP(CONT \$ (PK1 EQ 1),

X.L(J) \$(SINF.L GT SINFD) = X.L(J) - DELTA(J);
 RECAL \$(SINF.L GT SINFD) = 0;
 BBB(J) \$ ((SINF.L LT SINFD) AND (ABS(DELTA(J)) LT EPS)) = RECI*BBB(J);
 FUNK(I) \$(SINF.L GT SINFD) = FUNKL(I);
 PK1 = 0;

);

PHASE\$(SINF.L LT RELTOL*(1 + SINFD)) = LP2;
 LOOP(CONT \$ (PHASE EQ 2),

OBJD = NLFN + BETA*SINFD;
 OBJD1 = NLFN1 + BETA*SINFL;

PK2 = 1 \$(OBJD1 GT OBJD)
 LOOP(CONT2 \$ (PK2 NE 1),

CNB(J) \$(ABS(X.L(J) - UPB(J)) LT EPS) = CNB(J) + 1;
 CNB(J) \$(ABS(LOB(J) - X.L(J)) LT EPS) = CNB(J) - 1;
 BBB(J) \$(CNB(J) EQ LIM) = RECI*BBB(J);
 CNB(J) \$(CNB(J) EQ LIM) = 0;

);

LOOP(CONT1 \$ (PK2 EQ 1),

ERRORB = SQRT(SUM(J, BBB(J)*BBB(J)));
 X.L(J) \$(ERRORB GT RELTOL2) = X.L(J) - DELTA(J);
 RECAL \$(ERRORB GT RELTOL2) = 0;
 BBB(J) \$(ERRORB GT RELTOL2) = RECD*BBB(J);
 FUNK(I) \$(ERRORB GT RELTOL2) = FUNKL(I);
 PK2 = 0;

);
);

* *****
 * Valor final de las restricciones no lineales
 * *****

RHS("1") = X.L("12") - 0.1 - X.L("3");

```

*****
*      Jacobiano de las restricciones no lineales
*****
  LOOP(CONT3 $ (RECAL EQ 1),

    DERIVADAS DEL MODELO EN ESTA SECCION
  );
*****

  UPB(J) = MIN(X.UP(J) - X.L(J), BBB(J));
  LOB(J) = MAX(X.LO(J) - X.L(J), -BBB(J));

  NOITER = NOITER + 1;
  RECAL = 1;

  PUT SINF.L:10:5, NLFN1:10:4;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 1) " Optimo " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 2) " Optimo Local " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 3) " No limitado " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 4) " No factible " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 5) " Localmente infactible " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 6) " Intermedio infactible " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 7) " Intermedio no Optimo " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 8) " Solucion Entera " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 9) " Intermedio no-entero " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 10) " Entero no factible " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 12) " Error desconocido " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 13) " Error sin solucion " ;
  PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 13) " Optimo ";
  PUT LINEAL.RESUSD:5 /;
);

PUT /;
PUT " Numero de Iteraciones: ", NOITER:5:0 /;
PUT " Tamano de la aproximacion actual: ", ERRORC:10:10 /;
PUT " Tamanos de los limites en los deltas: ", ERRORB:10:10 /;
PUT " Error en la funcion objetivo no lineal: ", ERRORF:10:10 /;
PUT " Suma de no factibilidades: ", SINF.L:10:10 /;
PUT " Valor final de la funcion objetivo: ", NLFN1:10:5 /;
PUT /;
PUT " Valor de las variables " /;
PUT " X(J) STEPB(J) LOB(J) UPB(J)" /;
LOOP(J,
  PUT X.L(J):10:5, BBB(J):10:5, LOB(J):10:5, UPB(J):10:5 /;
);

OPTIONS DECIMALS = 5;

DISPLAY "La solucion fue encontrada dentro de las tolerancias", X.L, NLFN1, NOITER, CONINF;

OPTION LIMROW = 0

OPTION LIMCOL = 0

```

B.I. Resultados de Corrida para el caso base cuando se usa el algoritmo ASR

Aproximación Sucesiva Restringida (ASR)

Caso Base (Beta = 1)

SUM INF	OBJ	STATUS	TIEMPO
4.82584	-4.3069	No factible	0.20
0.66038	-4.2868	No factible	0.15
0.67764	-5.4598	Optimo	0.19
0.04849	-5.6548	Optimo	0.19
0.03494	-5.6424	Optimo	0.21
0.04900	-5.6614	Optimo	0.17
0.03021	-5.6798	Optimo	0.18
0.05041	-5.6779	Optimo	0.20
0.01413	-5.6689	Optimo	0.13
0.00741	-5.6750	Optimo	0.19
0.01241	-5.6757	Optimo	0.17
0.00329	-5.6730	Optimo	0.14
0.00183	-5.6758	Optimo	0.18
0.00183	-5.6769	Optimo	0.13
0.00288	-5.6800	Optimo	0.20
0.00183	-5.6809	Optimo	0.23
0.00293	-5.6833	Optimo	0.18
0.00182	-5.6844	Optimo	0.18
0.00257	-5.6856	Optimo	0.18
0.00155	-5.6858	Optimo	0.21
0.00157	-5.6854	Optimo	0.19
0.00041	-5.6850	Optimo	0.13
0.00038	-5.6848	Optimo	0.20

Número de Iteraciones: 23

Tamaño de la aproximación actual: 0.18233283

Tamaños de los límites en los deltas: 0.90138782

Error en la función objetivo no lineal: 0.00012808

Suma de no factibilidades: 0.00038203

Valor final de la función objetivo: -5.68484

Valor de las variables

X(J)	STEPB(J)	LOB(J)	UPB(J)
0.97000	0.06250	0.00000	0.00000
0.80000	0.06250	0.00000	0.00000
2.50625	0.06250	-0.06250	0.06250
19.08192	0.06250	-0.06250	0.06250
0.05000	0.06250	0.00000	0.00000
0.19294	0.06250	-0.06250	0.06250
0.04373	0.06250	-0.04373	0.06250
0.23667	0.06250	-0.06250	0.06250
0.78094	0.06250	-0.06250	0.06250
0.58800	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00000	0.06250	0.00000	0.00000
3.04764	0.06250	-0.06250	0.06250
2.29791	0.06250	-0.06250	0.06250
2.49085	0.06250	-0.06250	0.06250
0.99900	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00100	0.06250	0.00000	0.06250
0.99675	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00325	0.06250	-0.00325	0.06250
2.78063	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00067	0.06250	-0.00067	0.06250
0.36996	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00500	0.06250	0.00000	0.00000
0.00889	0.06250	-0.00889	0.06250
0.04500	0.06250	0.00000	0.00000
0.70000	0.06250	0.00000	0.00000
9.94398	0.06250	-0.06250	0.06250
0.16485	0.06250	-0.06250	0.06250
0.25000	0.06250	0.00000	0.00000

0.82559	0.06250	-0.06250	0.06250
6.73264	0.06250	-0.06250	0.06250
85.00000	0.06250	0.00000	0.06250
92.42391	0.06250	-0.06250	0.06250
3.79568	0.06250	-0.06250	0.06250
0.01056	0.06250	-0.01056	0.06250
0.00185	0.06250	-0.00185	0.06250
0.46778	0.06250	-0.06250	0.06250
0.98000	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00000	0.06250	0.00000	0.00000
0.02000	0.06250	-0.01900	0.00000
0.01308	0.06250	-0.01308	0.06250
11.60175	0.06250	-0.06250	0.06250
0.01560	0.06250	-0.01560	0.06250
0.02813	0.06250	-0.02813	0.06250
0.46778	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00000	0.06250	0.00000	0.06250
0.01662	0.06250	-0.01662	0.06250
0.50000	0.06250	0.00000	0.00000
10.00000	0.06250	-0.06250	0.00000
91.50000	0.06250	0.00000	0.06250
0.95000	0.06250	-0.06250	0.06250
2.29562	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00230	0.06250	-0.00230	0.06250

ANEXO C

C. Código en GAMS de Aproximación Sucesiva Penal (ASP) y resultados de corrida – Caso Base –

```

$title Aproximacion Sucesiva con Penalizacion (ASP)
$ontext
Universidad Nacional Autonoma de Mexico
Division de Estudios de Posgrado de Ingenieria
Asesor: Dr. Sergio Fuentes Maya
Optimización del Proceso de Mezclado con Alquiler
Programa de Raul Manzo Chardome (Matricula: 8553666-7)

$offtext
$offupper
$offsymxref $offsymlist
*option solprint = off;

set
ITER  Manejo de iteraciones / 1*100 /
I     Numero de restricciones / 1*35 /
J     Numero de variables / 1*52 /
RJ    Lado derecho no cero / 1 /;

parameter
C(J)  Gradiente funcion objetivo
DER(I,J) Matriz Jacobiana de restricciones
FUNK(I) Restricciones no lineales evaluadas en Xk
DELTA(J) Deltas en las X's
SINF  Funcion de suma de no factibilidades antes de los calculos LP
NOITER Numero de iteraciones
ERRORC Tamano de la aproximacion actual
ERRORB Tamano de los limites en los deltas
ERRORF Error en la funcion objetivo no lineal
NLFN  Funcion objetivo no lineal antes de los calculos LP
NLFN1 Valor de la funcion objetivo en la iteracion despues del calculo LP
OBJD  Funcion objetivo compuesta antes de los calculos LP
OBJD1 Funcion objetivo compuesta despues de los calculos LP
UPB(J) Limite superior de la variable j
LOB(J) Limite inferior de la variable j
BBB(J) Limite en los deltas para la variable j
CNBP(J) Contador cuando la variable esta en su limite superior
CNBN(J) Contador cuando la variable esta en su limite inferior
SGN(J) Signo del delta para la variable j en la iteracion previa
SGA(J) Signo del delta para la variable j en la iteracion actual
RHS(RJ) Lado derecho de las restricciones;

scalar

*****
* Estos escalares se pueden modificar para mejorar los calculos
*****

RECI  Factor de incremento en los limites / 2.0 /
RECD  Factor de reduccion en los limites / 0.5 /
SLW   Valor inicial en los limites / 1.0 /
RELTOL1 Criterio de terminacion 1 / 1E-4 /
RELTOL2 Criterio de terminacion 2 / 1E-6 /
RELTOL Tolerancia en las no factibilidad / 0.5 /
BETA  Valor penal / 1000 /
LIM   Valor que inicial el cambio en los limites / 3 /

*****
* Otros escalares usados en los calculos
* Estos escalares no se deben modificar
*****

PK1  Iteracion inicial / 1 /;

variables
XP(J) Incrementos positivos en las variables x

```

XN(J) Incrementos negativos en las variables x
 X(J) Variables x
 Slp(I) Variables de holgura
 Sln(I) Variables de holgura
 OBJF Funcion objetivo lineal;

POSITIVE VARIABLES XP(J), XN(J), X(J), Slp(I), Sln(I);

EQUATIONS

LINEQ(I) Restricciones lineales
 UPBOUND(J) Limites superiores en los deltas
 LOBOUND(J) Limites inferiores en los deltas
 FEAS1 Usado en el reflujo minimo
 LOBJ Funcion objetivo lineal;

 * Planta de alquileracion

SCALARS

 * Debutanizadora

SALPHA Volatilidad relativa / 1.4/
 SN Numero de platos teoricos / 40 /
 SCALE Factor de escala /10000/

 * Reactor

* Coeficientes en el modelo
 * Eq1. rendimiento de alquilado
 YINTER alkyl interseccion / 1.12 /
 YLINEAR alkyl termino lineal / 0.132 /
 YQUAD alkyl termino cuadratico / -0.0067/

*
 * Eq2. rendimiento de alquilado
 YYA Primer coeficiente / 1.6388/
 YYB Segundo coeficiente / -0.1394/
 YYC Tercer coeficiente / 0.6052 /
 YYD Cuarto coeficiente / -1.1736/
 YYE Quinto coeficiente / 0.1100/

* Coeficientes en modelo
 OINTER Alkyl interseccion octano / 90. /
 OYF4IC4 Alkyl termino ic4 en octano / 8.75/
 OACIDSTR Alkyl termino acido en octano / .325/

 * Mezcla de gasolina

RVPIC4 rvp de ic4 / 210 /
 RVPNC4 nc4 / 138 /
 RVPALKYL alquilado / 3 /
 RVPREF reformado / 4 /
 RVPLSR nafta / 7.5/
 RVPMAX max spec / 10 /
 RVPMIN min spec / 5 /

OCTIC4 octane ic4 / 92.7 /
 OCTNC4 nc4 / 92.5 /
 OCTREF reformado / 91.8 /
 OCTLSR nafta / 64.5 /
 OCTMAX max spec / 100 /
 OCTMIN min spec / 91.5 /

**ESTA TESIS NO SALE
 DE LA BIBLIOTECA**

 * Precios (\$/unidad de flujo)

* PRICEQ precio de energia en rehervidor / .0100 /
 unidad en \$/bl C4 vapor
 PRICEF1 carga de olefinas / 25 /
 PRICEF3 restitution de acido / 60 /
 PRICEF9 carga mezcla butanos / 12 /
 PRICEF14 reformado / 34 /
 PRICEF15 nafta / 24 /
 PRICEF5 propano / 10 /
 PRICEF7 dib corriente lateral / 10 /
 PRICEF16 gasolina / 37 /
 PRICEF17 venta de n-butano / 10 /

VARIABLES

HOLD1 var intermedia en calculo de rvp
 HOLD2 var intermedia en calculo de rvp
 HOLD3 var intermedia en calculo de oct
 HOLD4 var intermedia en calculo de oct;

 * Limites en debutanizadora

X.LO("1") = 0.97 Variable YF10IC4;
 X.UP("1") = 0.97;

X.LO("2") = 0.80 Variable YF9IC4;
 X.UP("2") = 0.80;

X.UP("8") = 10000.0/SCALE Variable F9;

X.LO("5") = 0.05 Variable YF11IC4;
 X.UP("5") = 0.05;

* X.UP("9") = 10000/SCALE Variable SVAPOR;
 hydraulic limitation

* Variable superflua

X.LO("11") = 0.00;
 X.UP("11") = 0.00;

 * Limite en carga de olefinas

X.LO("21") = 2000/SCALE Variable F1;
 X.UP("21") = 4500/SCALE;

X.LO("22") = .005 Variable YF1C3;
 X.UP("22") = .005;

X.LO("28") = .25 Variable YF11C4;
 X.UP("28") = .25;

X.LO("24") = .045 Variable YF1NC4;
 X.UP("24") = .045;

X.LO("25") = 1-X.LO("22") - X.LO("28") - X.LO("24") Variable YF1OLEF;
 X.UP("25") = 1-X.UP("22") - X.UP("28") - X.UP("24");

 * Limites en reactor

X.LO("31") = 85.0 Variable ACIDSTR;
X.UP("31") = 93.0;

X.LO("30") = 1.0 Variable RECRATIO;
X.UP("30") = 13.;

X.LO("26") = 4.0 Variable RATIO;
X.UP("26") = 12.0;

* Limites en Deisobutanizadora

X.LO("13") = 500.0/SCALE Variable F6;
X.UP("13") = 20000.0/SCALE;

X.LO("39") = .001 Variable YF8NC4;
X.UP("39") = .020;

X.UP("38") = 0.0 Variable YF8IC4;

X.LO("16") = .001 Variable YF6NC4;
X.UP("16") = .20;

* Limites en mezclado

X.UP("45") = 3000.0/SCALE Variable F14;

X.UP("46") = 2000.0/SCALE Variable F15;

X.LO("47") = 5000.0/SCALE Variable F16;
X.UP("47") = 5000.0/SCALE;

X.UP("43") = 1000.0/SCALE Variable F17;

X.LO("48") = RVPMIN Variable Gasoline RVP;
X.UP("48") = RVPMAX;

X.LO("49") = OCTMIN Variable Gasoline Octane;
X.UP("49") = OCTMAX;

* Valores iniciales de las variables

X.L("1") = .97 Variable YF10IC4;
X.L("2") = 0.80 Variable YF9IC4;
X.L("5") = .05 Variable YF11IC4;

* Valor minimo de reflujo

$X.L("3") = (X.L("1")/X.L("2")) - SALPHA * (1 - X.L("1")) / (1 - X.L("2")) / (SALPHA - 1);$

* Numero minimo de platos teoricos

$X.L("4") = LOG((X.L("1")) / (1 - X.L("1"))) * ((1 - X.L("5")) / X.L("5")) / LOG(SALPHA);$

X.L("12") = X.L("3") + 0.1 Variable SRFRATIO;
X.L("15") = .90 Variable YF6IC4;
X.L("17") = .9 Variable YF2IC4;
X.L("21") = 3300.0/SCALE Variable F1;
X.L("22") = .005 Variable YF1C3;
X.L("24") = .045 Variable YF1NC4;
X.L("28") = .25 Variable YF1IC4;
X.L("30") = 10. Variable RECRATIO;
X.L("31") = 92. Variable ACIDSTR;
X.L("32") = 95. Variable MOCTANE;

```

X.L("33") = 3.793      Variable ADILUTE;
X.L("34") = 105.57/SCALE      Variable F3ACID;
X.L("37") = .98      Variable YF8ALKYL;
X.L("38") = .01      Variable YF8IC4;
X.L("39") = .02      Variable YF8NC4;
X.L("42") = 156.0/SCALE      Variable F12;
X.L("43") = 100.0/SCALE      Variable F17;
X.L("44") = 4677.29/SCALE      Variable F13;
X.L("45") = 300.0/SCALE      Variable F14;
X.L("46") = 320.0/SCALE      Variable F15;
X.L("47") = 5000.0/SCALE      Variable F16;
X.L("48") = 10.0      Variable RVP Gasolina;
X.L("49") = 92      Variable Octane Gasolina;
X.L("50") = 0.95      Variable YF11NC4;
X.L("8") = X.L("21") / 3      Variable F9;
X.L("6") = X.L("8")*X.L("2")      Variable F10;
X.L("7") = X.L("8") - X.L("6")      Variable F11;
X.L("10") = X.L("6")*X.L("12")      Variable SREFLUX;
X.L("9") = X.L("6") + X.L("10")      Variable SVAPOR;
X.L("25") = 1 - X.L("22") - X.L("28") - X.L("24")      Variable YF1OLEF;
X.L("13") = X.L("21")*X.L("25")*10.      Variable F6;
X.L("14") = X.L("6") + X.L("13")      Variable F2;
X.L("16") = 1 - X.L("15")      Variable YF6NC4;
X.L("18") = 1 - X.L("17")      Variable YF2NC4;
X.L("19") = X.L("21") + X.L("14")      Variable F4;
X.L("26") = X.L("14") / X.L("21")      Variable RADIO;
X.L("20") = X.L("22")      Variable YF4C3;
X.L("23") = (X.L("21")*X.L("24") + X.L("14")*X.L("18"))/(X.L("21") + X.L("14"))      Variable YF4NC4;
X.L("27") = X.L("25")/X.L("26")      Variable YF4ALKYL;
X.L("29") = (X.L("21")*X.L("28") + X.L("14")*X.L("17"))/(X.L("21") + X.L("14"))      Variable YF4IC4;
X.L("35") = X.L("19")*X.L("20")      Variable F5;
X.L("36") = X.L("19")*X.L("27")      Variable F8;
X.L("40") = X.L("19")*X.L("23")      Variable F7;
X.L("41") = 5*X.L("19")*(X.L("23") + X.L("29"))      Variable vapor DIB;
X.L("51") = X.L("13")*X.L("15")      Variable F6IC4;
X.L("52") = X.L("13")*X.L("16")      Variable F6NC4;

```

```

* *****
*      Algoritmo de optimizacion

```

```

* *****
*      Condiciones iniciales para la optimizacion
* *****

```

```

BBB(J) = SLW;
CNBP(J) = 0;
CNBN(J) = 0;
ERRORC = 1;
ERRORB = 1;
ERRORF = 1;
NOITER = 0;
NLFN = 0;

```

```

* *****
*      Valor inicial de las restricciones
* *****

```

```

* *****
*      Control de no factibilidades en el radio de reflujo minimo
* *****

```

```

RHS("1") = X.L("12") - 0.1 - X.L("3");

```

```

* *****
*      Coeficiente de la función objetivo
* *****

```

```

C("8") = PRICEF9;
C("9") = PRICEQ;

```

```

C("21") = PRICEF1;
C("34") = PRICEF3;
C("35") = -PRICEF5;
C("40") = -PRICEF7;
C("41") = PRICEQ;
C("43") = -PRICEF17;
C("45") = PRICEF14;
C("46") = PRICEF15;
C("47") = -PRICEF16;

```

```

*****
EQUACIONES Y DERIVADAS DE MODELO EN ESTA SECCION
*****

```

```

UPB(J) = MIN(X.UP(J) - X.L(J), BBB(J));
LOB(J) = MAX(X.LO(J) - X.L(J), -BBB(J));
SGA(J) = 0.0;

```

```

LOBJ.. SUM(J, C(J)*(XP(J) - XN(J))) + BETA*SUM(I, Slp(I) + Sln(I)) =E= OBJF;
LINEQ(I).. SUM(J, DER(I,J)*(XP(J) - XN(J))) + Slp(I) - Sln(I) =E= FUNK(I);
FEAS1.. (XP("3") - XN("3")) - (XP("12") - XN("12")) =L= RHS("1");
UPBOUND(J).. XP(J) - XN(J) =L= UPB(J);
LOBOUND(J).. XP(J) - XN(J) =G= LOB(J);

```

```

MODEL LINEAL /LOBJ, LINEQ, FEAS1, UPBOUND, LOBOUND/;

```

```

FILE RES /ASPALK.DAT/;
PUT RES;
PUT " Aproximacion Sucesiva Penal (ASP)" /;
PUT /;
PUT " SUM INF OBJ STATUS TIME" /;

```

```

OPTION DECIMALS = 8;
LOOP(ITER $ ((ERRORC GT RELTOL1) AND (ERRORB GT RELTOL2) AND (ERRORF GT RELTOL1*(1 + ABS(NLFN))));

```

```

    ERRORB = SQRT(SUM(J, BBB(J)*BBB(J)));
    SGN(J) = SGA(J);

```

```

*****
* Definicion de funcion objetivo no lineal y
* suma de infeasibilidades antes del calculo LP
*****

```

```

    NLFN = SUM(J, C(J)*X.L(J));

```

```

*****
SOLVE LINEAL USING LP MINIMIZING OBJF;

```

```

    SINF = SUM(I, (Slp.L(I) + Sln.L(I)));
    DELTA(J) = XP.L(J) - XN.L(J);
    ERRORC = SQRT(SUM(J, DELTA(J)*DELTA(J)));
    SGN(J) $ (PK1 EQ 1) = SIGN(DELTA(J));
    PK1 = 0;
    SGA(J) = SIGN(DELTA(J));
    X.L(J) = X.L(J) + DELTA(J);

```

```

*****
* Funcion objetivo no lineal despues del calculo LP
*****

```

```

    NLFN1 = SUM(J, C(J)*X.L(J));

```

```

*****
    ERRORF = ABS(NLFN1 - NLFN);

```

```

    BBB(J) $ (SGA(J) NE SGN(J)) = RECD*BBB(J);
    CNBP(J) $ (ABS(X.L(J) - UPB(J)) LT EPS) = CNBP(J) + 1;
    CNBN(J) $ (ABS(LOB(J) - X.L(J)) LT EPS) = CNBN(J) + 1;

```

```

    BBB(J) $ (CNBP(J) EQ LIM) = RECI*BBB(J);

```

```

CNBP(J) $ (CNBP(J) EQ LIM)= 0;

BBB(J) $ (CNBN(J) EQ LIM)= RECI*BBB(J);
CNBN(J) $ (CNBN(J) EQ LIM)= 0;

UPB(J) = MIN(X.UP(J) - X.L(J), BBB(J));
LOB(J) = MAX(X.LO(J) - X.L(J), -BBB(J));

```

```

*****
* Valor de las restricciones despues del calculo LP
*****

```

```

RHS("1") = X.L("12") - 0.1 - X.L("3");

```

EQUACIONES Y DERIVADAS DE MODELO EN ESTA SECCION

```

*****

```

```

NOITER = NOITER + 1;

PUT SINF:10:4, NLFN1:10:4;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 1) " Optimo " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 2) " Optimo Local " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 3) " No limitado " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 4) " No factible " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 5) " Localmente infactible " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 6) " Intermedio infactible " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 7) " Intermedio no Optimo " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 8) " Solucion Entera " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 9) " Intermedio no-entero " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 10) " Entero no factible " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 12) " Error desconocido " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 13) " Error sin solucion " ;
PUT$(LINEAL.MODELSTAT EQ 13) " Optimo ";
PUT LINEAL.RESUSD:5 /;

```

```

);

PUT /;
PUT " Numero de iteraciones: ", NOITER:5:0 /;
PUT " Tamano de la aproximacion actual: ", ERRORC:10:10 /;
PUT " Tamano de los limites en los deltas: ", ERRORB:10:10 /;
PUT " Error en la funcion objetivo no lineal: ", ERRORF:10:10 /;
PUT " Suma de no factibilidades: ", SINF:10:10 /;
PUT " Valor final de la funcion objetivo: ", NLFN1:10:5/;
PUT /;
PUT " Valor de las variables " /;
PUT " X(J) STEPB(J) LOB(J) UPB(J)" /;
LOOP(J,
  PUT X.L(J):10:5, BBB(J):10:5, LOB(J):10:5, UPB(J):10:5 /;
);

```

```

OPTIONS DECIMALS = 5;

```

```

DISPLAY "La solucion fue encontrada dentro de las tolerancias", X.L, NLFN1, NOITER;

```

```

OPTION LIMROW = 0

```

```

OPTION LIMCOL = 0

```

C.I. Resultados de Corrida para el caso base cuando se usa el algoritmo ASP

Aproximacion Sucesiva Penal (ASP)

Caso Base (Beta = 1000)

SUM INF	OBJ	STATUS	TIEMPO
0.9436	1.4485	Optimo	0.05
0.0616	-5.5849	Optimo	0.05
0.0000	-4.8210	Optimo	0.04
0.0000	-5.5613	Optimo	0.04
0.0000	-5.6165	Optimo	0.04
0.0000	-5.6184	Optimo	0.05
0.0000	-5.6329	Optimo	0.03
0.0000	-5.6427	Optimo	0.05
0.0000	-5.6512	Optimo	0.04
0.0000	-5.6586	Optimo	0.03
0.0000	-5.6649	Optimo	0.03
0.0000	-5.6702	Optimo	0.03
0.0000	-5.6745	Optimo	0.03
0.0000	-5.6782	Optimo	0.04
0.0000	-5.6817	Optimo	0.03
0.0000	-5.6847	Optimo	0.05
0.0000	-5.6846	Optimo	0.05

Numero de iteraciones: 17

Tamano de la aproximacion actual: 0.04558613

Tamano de los limites en los deltas: 3.88783158

Error en la funcion objetivo no lineal: 0.00007801

Suma de no factibilidades: 0.00000000

Valor final de la funcion objetivo: -5.68464

Valor de las variables

X(J)	STEPB(J)	LOB(J)	UPB(J)
0.97000	1.00000	0.00000	0.00000
0.80000	1.00000	0.00000	0.00000
2.50625	1.00000	-1.00000	1.00000
19.08192	1.00000	-1.00000	1.00000
0.05000	1.00000	0.00000	0.00000
0.19295	0.03125	-0.03125	0.03125
0.04374	0.03125	-0.03125	0.03125
0.23669	0.03125	-0.03125	0.03125
0.78100	0.03125	-0.03125	0.03125
0.58804	0.03125	-0.03125	0.03125
0.00000	1.00000	0.00000	0.00000
3.04764	0.50000	-0.50000	0.50000
2.29408	0.06250	-0.06250	0.06250
2.48703	0.06250	-0.06250	0.06250
0.99900	0.25000	-0.25000	0.25000
0.00100	0.12500	0.00000	0.12500
0.99675	0.03125	-0.03125	0.03125
0.00325	0.03125	-0.00325	0.03125
2.77683	0.12500	-0.12500	0.12500
0.00067	0.01563	-0.00067	0.01563
0.37000	0.03125	-0.03125	0.03125
0.00500	1.00000	0.00000	0.00000
0.00891	0.12500	-0.00891	0.12500
0.04500	1.00000	0.00000	0.00000
0.70000	1.00000	0.00000	0.00000
9.92826	0.25000	-0.25000	0.25000
0.16510	0.12500	-0.12500	0.12500
0.25000	1.00000	0.00000	0.00000
0.82532	0.12500	-0.12500	0.12500
6.72163	0.12500	-0.12500	0.12500
85.00000	0.25000	0.00000	0.25000
92.42159	0.12500	-0.12500	0.12500
3.79722	0.06250	-0.06250	0.06250
0.01057	0.50000	-0.01057	0.50000
0.00185	0.06250	-0.00185	0.06250
0.46782	0.06250	-0.06250	0.06250

0.98000	0.25000	-0.25000	0.25000
0.00000	0.50000	0.00000	0.00000
0.02000	0.25000	-0.01900	0.00000
0.01308	0.06250	-0.01308	0.06250
11.58258	0.03125	-0.03125	0.03125
0.01560	0.12500	-0.01560	0.12500
0.02813	0.03125	-0.02813	0.03125
0.46782	0.06250	-0.06250	0.06250
0.00000	0.25000	0.00000	0.25000
0.01658	0.12500	-0.01658	0.12500
0.50000	1.00000	0.00000	0.00000
10.00000	1.00000	-1.00000	0.00000
91.50000	0.06250	0.00000	0.06250
0.95000	1.00000	-0.95000	1.00000
2.29178	0.12500	-0.12500	0.12500
0.00229	0.06250	-0.00229	0.06250

ANEXO D

D. Descripción de las variables

Variable	Equivalente en modelo Mezclado
X1	Yf10iC4
X2	Yf9iC4
X3	SRM
X4	SMN
X5	Yf11iC4
X6	F10
X7	F11
X8	F9
X9	Svapor
X10	Sreflux
X11	Dummy variable
X12	SRFRatio
X13	F6
X14	F2
X15	Yf6iC4
X16	Yf6nC4
X17	Yf2iC4
X18	Yf2nC4
X19	F4
X20	Yf4C3
X21	F1
X22	Yf1C3
X23	Yf4nC4
X24	Yf1nC4
X25	Yf10lef
X26	RATIO
X27	Yf4Alky
X28	Yf1iC4
X29	Yf4iC4
X30	RECRATIO
X31	ACIDSTR
X32	MOCTANE
X33	ADILUTE
X34	F3ACID
X35	F5
X36	F8
X37	Yf8Alkyl
X38	Yf8iC4
X39	Yf8nC4
X40	F7
X41	STEAMDIB
X42	F12
X43	F17
X44	F13
X45	F14
X46	F15
X47	F16
X48	Yf16rvp
X49	Yf16oct
X50	Yf11nC4
X51	F6iC4
X52	F6nC4

ANEXO E

* Objective function coefficients

C("8") = PRICEF9;
C("9") = PRICEQ;
C("21") = PRICEF1;
C("34") = PRICEF3;
C("35") = -PRICEF5;
C("40") = -PRICEF7;
C("41") = PRICEQ;
C("43") = -PRICEF17;
C("45") = PRICEF14;
C("46") = PRICEF15;
C("47") = -PRICEF16;

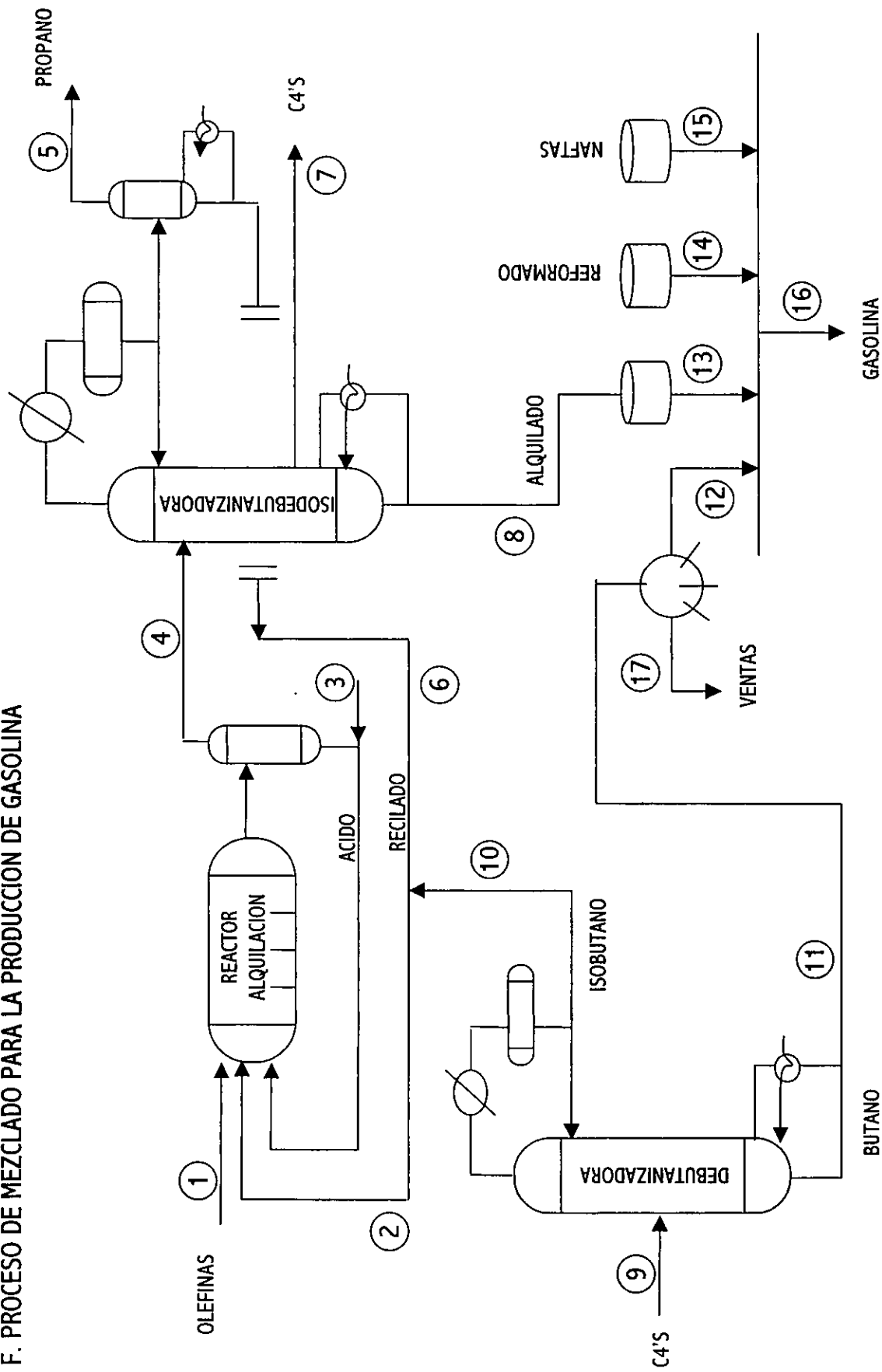
* Jacobian of the nonlinear constraints

DER("1","1") = (1/(SALPHA - 1))*(1/X.L("2") + SALPHA/(1 - X.L("2")));
DER("1","2") = (-1/(SALPHA - 1))*(X.L("1")/SQR(X.L("2")) + SALPHA*(1 - X.L("1"))/SQR((1 - X.L("2"))));
DER("1","3") = -1;
DER("2","3") = (0.75*0.5668)*((X.L("12")-X.L("3"))/(X.L("12") + 1))*(-0.4332)/(X.L("12") + 1);
DER("2","12") = -(0.75*0.5668)*((X.L("12")-X.L("3"))/(X.L("12") + 1))*(-0.4332)*(1 + X.L("3"))/SQR(X.L("12") + 1);
DER("2","4") = 1 / (SN + 1);
DER("3","1") = 1/(LOG(SALPHA)*X.L("1")*(1 - X.L("1")));
DER("3","4") = -1;
DER("3","5") = -1/(LOG(SALPHA)*X.L("5")*(1 - X.L("5")));
DER("4","6") = 1;
DER("4","7") = 1;
DER("4","8") = -1;
DER("5","1") = X.L("6");
DER("5","2") = -X.L("8");
DER("5","5") = X.L("7");
DER("5","6") = X.L("1");
DER("5","7") = X.L("5");
DER("5","8") = -X.L("2");
DER("6","6") = -1;
DER("6","9") = 1;
DER("6","10") = -1;
DER("7","5") = -1;
DER("7","50") = -1;
DER("8","6") = -X.L("10")/SQR(X.L("6"));
DER("8","10") = 1/X.L("6");
DER("8","12") = -1;
DER("9","6") = 1;
DER("9","13") = 1;
DER("9","14") = -1;
DER("10","1") = X.L("6");
DER("10","6") = X.L("1");
DER("10","13") = X.L("15");
DER("10","14") = -X.L("17");
DER("10","15") = X.L("13");
DER("10","17") = -X.L("14");
DER("11","17") = -1;
DER("11","18") = -1;
DER("12","19") = X.L("20");
DER("12","20") = X.L("19");
DER("12","21") = -X.L("22");
DER("12","22") = -X.L("21");
DER("13","19") = X.L("23");
DER("13","23") = X.L("19");
DER("13","21") = -X.L("24");
DER("13","24") = -X.L("21");
DER("13","14") = -X.L("18");
DER("13","18") = -X.L("14");

DER("28","51") = 1;
 DER("28","52") = 1;
 DER("29","42") = 1;
 DER("29","43") = 1;
 DER("29","7") = -1;
 DER("30","44") = 1;
 DER("30","36") = -1;
 DER("31","42") = 1;
 DER("31","44") = 1;
 DER("31","45") = 1;
 DER("31","46") = 1;
 DER("31","47") = -1;
 DER("32","42") = RVPIC4*X.L("5") + RVPNC4*X.L("50");
 DER("32","5") = RVPIC4*X.L("42");
 DER("32","50") = RVPNC4*X.L("42");
 DER("32","44") = RVPIC4*X.L("38") + RVPNC4*X.L("39") + RVPALKYL*X.L("37");
 DER("32","38") = RVPIC4*X.L("44");
 DER("32","39") = RVPNC4*X.L("44");
 DER("32","37") = RVPALKYL*X.L("44");
 DER("32","45") = RVPREF;
 DER("32","46") = RVPLSR;
 DER("32","47") = -X.L("48");
 DER("32","48") = -X.L("47");
 DER("33","42") = OCTIC4*X.L("5") + OCTNC4*X.L("50");
 DER("33","5") = OCTIC4*X.L("42");
 DER("33","50") = OCTNC4*X.L("42");
 DER("33","44") = OCTIC4*X.L("38") + OCTNC4*X.L("39") + X.L("32")*X.L("37");
 DER("33","38") = OCTIC4*X.L("44");
 DER("33","39") = OCTNC4*X.L("44");
 DER("33","37") = X.L("44")*X.L("32");
 DER("33","32") = X.L("44")*X.L("37");
 DER("33","45") = OCTREF;
 DER("33","46") = OCTLSR;
 DER("33","47") = -X.L("49");
 DER("33","49") = -X.L("47");
 DER("34","19") = X.L("29");
 DER("34","29") = X.L("19");
 DER("34","36") = -X.L("38");
 DER("34","38") = -X.L("36");
 DER("34","51") = -1;
 DER("35","52") = 1/X.L("13");
 DER("35","13") = -X.L("52")/SQRT(X.L("13"));
 DER("35","16") = -1;

ANEXO F

F. PROCESO DE MEZCLADO PARA LA PRODUCCION DE GASOLINA



F. PROCESO DE MEZCLADO PARA LA PRODUCCION DE GASOLINA

