

UNIDAD Nº4

Métodos matemáticos de optimización no restringida Búsqueda unidimensional

Muchos métodos de optimización de problemas con restricciones (univariables y multivariables) involucran la resolución de un problema de optimización en una dimensión.

Los métodos analíticos imponen demasiadas restricciones a las funciones objetivos. Además, no siempre es posible resolver el sistema de ecuaciones analíticamente. Por este motivo se desarrollaron los métodos numéricos.

Existen dos tipos de métodos numéricos, a saber:

- * Métodos directos: sólo utilizan los valores de las función objetivo.
- * Métodos indirectos: utilizan las condiciones necesarias, las derivadas (analíticas o numéricas) y la función objetivo.

Los métodos indirectos requieren el cálculo de las derivadas primeras y segundas. Sin embargo, muchas veces obtener las derivadas es una tarea difícil, y hasta es posible que ni siquiera se conozca la forma analítica de la función objetivo. Esto plantea la necesidad de contar con métodos capaces de trabajar únicamente con los valores (experimentos) de la función objetivo. Estos son los métodos de búsqueda directa.

La obtención de un valor de la función objetivo significará en algunos casos evaluar un modelo matemático, mientras que en otros significará realizar un experimento. Sea como sea, siempre será conveniente llegar al óptimo realizando la menor cantidad de evaluaciones. Esa es la misión de los métodos de búsqueda directa, a partir de los resultados de las evaluaciones realizadas, sugerirán el siguiente experimento de forma tal de aumentar la velocidad de convergencia. Es decir, que estos métodos diseñarán un adecuado plan de experiencias.

El plan de experiencias puede ser secuencial o simultáneo. Cuando disponemos de un equipo por un tiempo limitado, puede ser que nos veamos obligados a realizar una serie de experimentos simultáneos. Estos experimentos son independientes, los experimentos realizados no influyen sobre la forma de realizar el siguiente. Un mejor enfoque es el plan de experiencias secuencial. Este método analiza los resultados obtenidos en un experimento para sugerir la forma de realizar el próximo.

Los métodos indirectos tienen una ventaja inherente: la convergencia es normalmente rápida, pero no son buenos para funciones no lineales multivariables, estos métodos dan como resultado un punto que puede encontrarse muy cercano al valor óptimo buscado. Los métodos directos tienen la ventaja de que pueden más fácilmente tratar problemas que involucran funciones con discontinuidades, puntos de inflexión y puntos finales, pero necesitan la definición de un criterio de precisión, estos métodos dan como solución al problema de optimización un intervalo donde puede encontrarse el valor óptimo.

Métodos numéricos para optimización de funciones de una variable

Para la aplicación de estos métodos es necesario conocer el intervalo inicial Δ^0 donde esta contenido el óptimo de la función objetivo, y asegurar la unimodalidad de la función en el intervalo en estudio.

Un método de optimización para una función de una sola variable podría ser determinar una grilla (tan fina como se quiera) de valores de x y calcular los valores de f(x) en cada valor de la grilla, el óptimo sería el mejor valor de f(x). Si utilizamos este procedimiento para funciones multimodales, el tiempo de cálculo se vuelve prohibitivo. La selección del método de búsqueda



del óptimo es una solución de compromiso entre la complejidad del procedimiento y el número de evaluaciones necesarias.

1. Métodos indirectos: Newton, Quasi-Newton y Secante

Es de suponer que si además de unimodalidad y continuidad en las funciones que queremos optimizar, se requiere también la derivabilidad de las mismas, podremos incrementar la eficiencia de los algoritmos de búsqueda.

Nos referiremos en esta sección a métodos de búsqueda de óptimos en funciones derivables. Recordemos en primer lugar que la condición necesaria para que un punto x* sea óptimo local de una función derivable es que se anule su derivada en ese punto, $f'(x^*) = 0$. Cuando f(x) es una función de tercer grado o superior, la solución analítica de la ecuación f'(x) = 0 se complica. Por tanto, requerimos un método de búsqueda que se aproxime sucesivamente al punto estacionario de f(x).

La efectividad de estas técnicas se evalúa mediante la velocidad de convergencia que presentan.

Convergencia lineal

$$\frac{\left\|x^{k+1} - x^*\right\|}{\left\|x^k - x^*\right\|} \le c \qquad 0 \le c \le 1 \quad \text{convergencia lenta}$$

* Convergencia de orden p

Convergencia de orden p
$$\frac{\|x^{k+1} - x^*\|}{\|x^k - x^*\|^p} \le c \qquad c \ge 0, \quad p \ge 1 \quad \text{convergencia muy rápida}$$

Si p=2 la convergencia se dice que es cuadrática

Convergencia superlineal

$$\lim_{k \to \infty} \frac{\left\| x^{k+1} - x^* \right\|}{\left\| x^k - x^* \right\|} \to 0$$
 convergencia rápida

Método de Newton

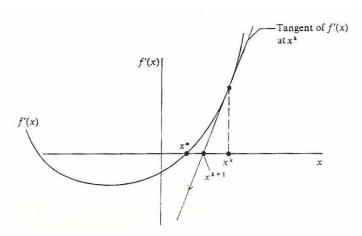
El método de Newton requiere que la función sea dos veces derivable. Se expresa como:

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

asegurando que para cada paso k, $f(x^{k+1}) < f(x^k)$, para la búsqueda de un mínimo. Este método utiliza la condición de que f'(x)=0.

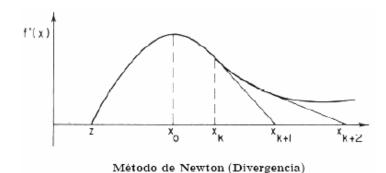
- * Ventajas: es un proceso que converge cuadráticamente en forma local. Para una función cuadrática converge con solo una iteración.
- Desventajas: se deben calcular las derivadas primeras y segundas, si las derivadas segundas son nulas el método converge lentamente, si existen más de un extremo el método puede no converger en el valor deseado.





Newton's method applied to the solution of f'(x) = 0.

Desafortunadamente el método depende de la elección del punto de partida y de la naturaleza de la función. Es bastante posible que este método no converja hacia el verdadero punto estacionario. La figura siguiente ilustra esta dificultad. Si comenzamos en un punto a la derecha de x_0 , las aproximaciones sucesivas se alejarán del punto estacionario x^* .



Método de Ouasi-Newton

Este método es una solución a las limitaciones del método de Newton. En el caso en que la función objetivo no sea conocida o no puedan evaluarse las derivadas, estas pueden reemplazarse por aproximaciones de diferencias finitas:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{[f(x+h) - f(x-h)]/2h}{[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)]/h^2}$$

La desventaja adicional de este método consiste en la necesidad de evaluar funciones adicionales en cada iteración, también es necesario conocer el valor de h (paso de la diferencia finita).

Método de la Secante

El método de la secante combina el método de Newton con un esquema de reducción de intervalo para encontrar, si existe, la raíz de la ecuación f'(x)=0, en el intervalo (a,b). En este método la condición necesaria se resuelve mediante la siguiente expresión:



$$f'(x^k) + m(x - x^k) = 0$$

donde m es la pendiente de la recta que une los puntos x^p y x^q , dada por: $m = \frac{f'(x^q) - f'(x^p)}{x^q - x^p}$

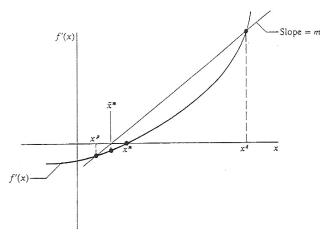
$$m = \frac{f'(x^q) - f'(x^p)}{x^q - x^p}$$

Este método aproxima la derivada de la función a una línea recta, m aproxima la segunda derivada de la función.

$$\overline{x}^* = x^q - \frac{f'(x^q)}{\left[f'(x^q) - f'(x^p)\right]} \left(x^q - x^p\right)$$

donde \bar{x}^* es la aproximación a x^* en la iteración nº k.

Este método comienza utilizando dos puntos x^p y x^q, la elección de estos puntos debe hacerse de tal manera que los valores de las derivadas sean de signos opuestos. Este método es de convergencia más lenta que el método de Newton.



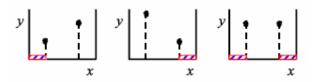
Secant method for solution of f'(x) = 0.

2. Métodos directos: eliminación de regiones

Este tipo de métodos se centra en la búsqueda de las soluciones óptimas mediante sucesivas reducciones del intervalo de estudio y en la eliminación de subintervalos.

Si la función es unimodal, se puede definir un criterio para eliminar regiones donde seguro el óptimo no se encuentra. Para ello necesitamos evaluar la función en dos puntos y aplicar algo de lógica. En la figura siguiente se indica cual sería la región eliminada para los tres casos posibles en la búsqueda de un máximo.





Región eliminada en la búsqueda de un máximo.

Criterio de eliminación de regiones.

Es fundamental el hecho de que la función estudiada sea unimodal, al menos dentro del dominio de interés. La utilidad de esta propiedad radica en el hecho de que si f(x) es unimodal, entonces solamente es necesario comparar f(x) en dos puntos diferentes para predecir en cuál de los subintervalos definidos por esos puntos no se va a encontrar el óptimo.

Cuando el subintervalo "sobreviviente" tenga una longitud suficientemente pequeña, la búsqueda termina. La gran ventaja de estos métodos de búsqueda es que solamente requieren evaluaciones de la función y no necesitamos ninguna hipótesis adicional acerca de la derivabilidad de la misma.

Búsqueda a intervalos iguales

Este método de búsqueda reduce en 1/3 la longitud del intervalo en cada iteración. Entonces si L^0 es la longitud original del intervalo (b-a) y L^k es la longitud luego de k iteraciones:

$$L^k = \left(\frac{2}{3}\right)^k L^0$$

Método de la bisección o dicotomía

Este método elimina exactamente la mitad del intervalo en cada paso. En este caso los puntos de búsqueda x_1 y x_2 se encuentran más próximos entre sí, manteniendo la equidistancia con los bordes.

$$L^k = \left(\frac{1}{2}\right)^k L^0$$

Método de Fibonacci

Con este método se conoce ya el rango inicial de búsqueda y en cada evaluación el método tiende a acorralar el punto óptimo.

El intervalo inicial de es L_0 y se define Δ_1 como el siguiente incremento:

$$\Delta_1 = L_0 \frac{F_{n-2}}{F_n}$$

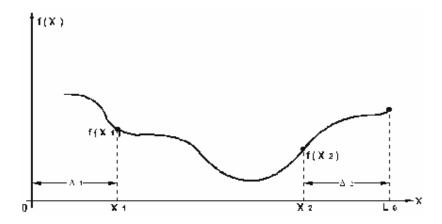
donde n, es el número de iteraciones que se desea realizar (en función a la tolerancia de error que se desea) y F_n es el número de Fibonacci para n evaluaciones, y se define así: $F_0 = F_1 = 1$, $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$, $n = 2,3,\ldots$, la secuencia de Fibonacci es entonces $1,1,2,3,5,8,13,21,34,55\ldots$

Se tiene entonces $x_1 = \Delta_1$ y $x_2 = L_0$ - Δ_1

Se supone que se quiere minimizar a la función unimodal f(x). Entonces si $f(x_1) \ge f(x_2)$, rechazamos el intervalo $0 \le x \le x_1$ y si $f(x_1) \le f(x_2)$, rechazamos el intervalo $x_2 \le x_1 \le L_0$.



Gráficamente se tiene que, si originalmente la función es como la que se ilustra en la figura, en la segunda iteración se rechaza el intervalo $0 \le x \le x_1$. En forma gráfica tenemos:



A continuación se calcula el siguiente incremento Δ_2 y se define x_3 como L_0 - Δ_2

$$\Delta_2 = L_1 \frac{F_{n-3}}{F_{n-1}} \qquad L_1 = L_0 - x_1$$

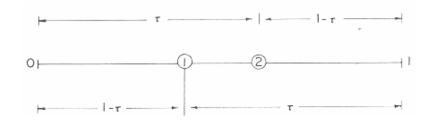
En caso de que se hubiera rechazado el intervalo $x_2 \le x_1 \le L_0$, entonces $L_1 = x_2$ y $x_3 = \Delta_2$. Se tiene en la segunda evaluación lo siguiente: si $f(x_2) \le f(x_3)$, rechazamos el intervalo $x_1 \le x \le x_3$ o si $f(x_2) \ge f(x_3)$, rechazamos el intervalo $x_2 \le x \le L_0$.

El proceso se repite hasta llegar al número n de iteraciones prefijadas. La efectividad en este caso, 1/Fn, mide la tolerancia del error en el entorno del punto óptimo. Así, por ejemplo, si se desea un error menor al 1%, se necesitan 11 evaluaciones de este método, puesto que $F_{11}=144$ y $1/F_{11}=1/144<0.01=1\%$.

Método de la Sección Aurea

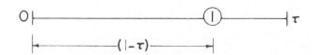
En la sección Aurea se ubican dos puntos interiores de manera tal que el intervalo eliminado en cada iteración sea de la misma proporción que el intervalo total. Solo un nuevo punto debe ser calculado en cada iteración.

Consideremos la localización simétrica de dos puntos como en la figura:



Partimos de un intervalo [0, 1] de longitud unidad (simplemente por conveniencia) y localizamos dos puntos, cada uno a una fracción τ de cada extremo. Con esta simetría, independientemente de qué valor de la función sea el más pequeño, la longitud del intervalo que permanece es siempre τ . Supongamos que eliminamos el subintervalo de la derecha.



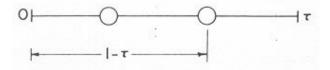


Se puede observar a partir de la figura que el punto que queda, de los dos anteriores, está situado a una distancia 1–τ de uno de los extremos.

En la estrategia que se plantea el método del número de oro el punto que permanece en el interior del nuevo intervalo está ubicado en la posición relativa en la que se encontraba el otro punto, que ahora limita la zona, la distancia $1-\tau$ debe corresponder a una fracción τ del intervalo (que es de longitud τ). Con esta elección de τ, el siguiente punto debe localizarse a una fracción τ de la longitud del intervalo desde el extremo de la parte derecha.

$$\frac{1-\tau}{\tau} = \frac{\tau}{1}$$

 $\frac{1-\tau}{\tau} = \frac{\tau}{1}$ Por tanto, con la elección de τ que satisfaga $1-\tau = \tau^2$, el patrón de búsqueda permanece en el intervalo reducido de la siguiente figura.



La solución de esta ecuación cuadrática es $\tau = \frac{-1 \pm \sqrt{5}}{2}$, siendo la solución positiva de la misma $\tau = 0.61803...$

El subintervalo final luego de cada iteración es:

$$L^k = (0.618)^{k-1} L^0$$

Método de Fibonacci y aproximación al método de la Sección Aurea

Para determinar la ubicación de los puntos según el método de Fibonacci se utiliza, como vimos, la expresión $\Delta_1 = L_0 \frac{F_{n-2}}{F_n}$. La relación de números de Fibonacci para grandes valores de n se acerca a 0.3820, como se observa en la siguiente tabla:

| n | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 |
|-----------------------|---|--------------|--------------|---------------|---------------|----------------|----------------|
| $\frac{F_{n-2}}{F_n}$ | | 2/5 = 0.4000 | 3/8 = 0.3750 | 5/13 = 0.3846 | 8/21 = 0.3810 | 13/34 = 0.3823 | 21/55 = 0.3818 |

Entonces para valores de n grandes, el enésimo número de la seria de Fibonacci puede calcularse con la siguiente relación:

$$F_n \frac{1}{\sqrt{5}} (1.6180)^{n+1}$$



Esto indica que en el método de Fibonacci para n grandes, la búsqueda debe comenzarse utilizando la relación $\Delta_1 = 0.3820 L_0$.

La aproximación al valor óptimo obtenida luego de n experimentos será entonces:

$$\alpha = \frac{L_N}{L_1} = \frac{L_N}{L_{N-1}} \frac{L_{N-4}}{L_{N-2}} \cdots \frac{L_2}{L_1} = (0.6180)^{n-1}$$

Como podemos observar esta relación es la utilizada en el método del número de oro, $L^k = (0.618)^{k-1} L^0$. Entonces el método de la serie de Fibonacci, para más de cuatro iteraciones se convierte en el método del número de la Sección Aurea.

Métodos de búsqueda preplaneada

Este método realiza todos los experimentos a la vez, determinando luego el intervalo que contiene el óptimo.

2.1. Comparación de los métodos de eliminación de regiones

Comparemos ahora las eficiencias relativas de los métodos de eliminación de regiones que hemos visto. Denotemos el intervalo de incertidumbre original como L_0 y al intervalo de incertidumbre final, después de N evaluaciones de la función objetivo le llamaremos L_N Supongamos ahora que consideramos a la reducción fraccional (RF) del intervalo original como una medida de mérito de los métodos de eliminación de regiones.

Tenemos entonces:

Búsqueda a intervalos iguales
$$L^k = \left(\frac{2}{3}\right)^k L^0$$
 Método de la bisección o dicotomía
$$L^k = \left(\frac{1}{2}\right)^k L^0$$
 Método de Fibonacci
$$L^k = \left(\frac{2}{F_{N+1}}\right) L^0$$
 Método de la Sección Áurea
$$L^k = \left(0.618\right)^{k-1} L^0$$

Las reducciones fraccionales pueden obtenerse fácilmente:

Búsqueda a intervalos iguales
$$\frac{L^k}{L^0} = \left(\frac{2}{3}\right)^k$$
 Método de la bisección o dicotomía
$$\frac{L^k}{L^0} = \left(\frac{1}{2}\right)^k$$
 Método de Fibonacci
$$\frac{L^k}{L^0} = \left(\frac{2}{F_{N+1}}\right)$$
 Método de la Sección Áurea
$$\frac{L^k}{L^0} = (0.618)^{k-1}$$



La siguiente tabla muestra los valores de RF(N) para distintos valores de N. Estos valores son indicativos de la eficiencia de cada método.

| | N=5 | N=10 | N=15 |
|------------------------------------|-------|-------|--------|
| Búsqueda a intervalos iguales | 0,132 | 0,017 | 0,002 |
| Método de la bisección o dicotomía | 0,913 | 0,988 | 0,998 |
| Método de Fibonacci | 0,154 | 0,014 | 0,0013 |
| Método de la Sección Áurea | 0,146 | 0,013 | 0,0012 |

De esta tabla se desprende que los métodos más eficientes son el de Fibonacci y la sección dorada. En la práctica, suele calcularse el número de iteraciones que se requieren para obtener una precisión dada. Esto se puede obtener usando L_N = ϵ , siendo ϵ la precisión requerida.

3. Métodos de aproximación polinomial

Otra clase de métodos de minimización unidimensional, localizan un punto x cercano al óptimo mediante interpolación y extrapolación utilizando polinomios como modelos de la función.

La idea básica de los métodos de aproximación polinomial es que si la función es suficientemente "suave", entonces puede ser aproximada mediante un polinomio, y dicho polinomio puede entonces usarse para predecir la ubicación del óptimo. Para que esta estrategia sea efectiva, es necesario que la función a optimizar sea tanto unimodal como continua.

Interpolación cuadrática

La interpolación cuadrática aprovecha la ventaja de que un polinomio de segundo grado con frecuencia proporciona una buena aproximación de la forma de la función en las cercanías de un valor óptimo.

Así como existe una única recta que pasa por dos puntos, hay únicamente una ecuación cuadrática que pasa por tres puntos. De esta forma, si se tienen tres puntos que contienen un punto óptimo, se ajusta una parábola a los puntos, después se puede derivar e igualar a cero, y así obtener una estimación del óptimo.

$$x^* = \frac{1}{2} \left[\frac{f(x_0)(x_1^2 - x_2^2) + f(x_1)(x_2^2 - x_0^2) + f(x_2)(x_0^2 - x_1^2)}{f(x_0)(x_1 - x_2) + f(x_1)(x_2 - x_0) + f(x_2)(x_0 - x_1)} \right]$$

Este método utiliza evaluaciones de la función, y sólo un nuevo valor de función debe ser calculado en cada iteración.

Interpolación cúbica

Este método está basado en la aproximación polinomial mediante un polinomio de tercer grado de la función que se quiere minimizar. El esquema es similar al método cuadrático. Se necesitan cuatro puntos iniciales, o cuatro valores de f(x), o valores de f(x) y sus derivadas cada dos puntos.



Este método es de convergencia rápida, pero puede presentar errores en funciones no unimodales.

Dados x_{k-1} y x_k junto a $f(x_{k-1})$, $f'(x_{k-1})$, $f(x_k)$, y $f'(x_k)$ es posible ajustar una ecuación cúbica en los puntos. El punto x_{k+1} (mínimo) puede ser determinado como el punto mínimo relativo de esta ecuación cúbica.

$$x_{k+1} = x_k - (x_k - x_{k-1}) \left[\frac{f'(x_k) + \mu_2 - \mu_1}{f'(x_k) - f'(x_{k-1}) + 2\mu_2} \right]$$

$$\mu_1 = f'(x_{k-1}) + f'(x_k) - 3 \frac{f(x_{k-1}) - f(x_k)}{x_{k-1} - x_k}$$

$$\mu_2 = \left[\mu_1^2 - f'(x_{k-1}) f'(x_k) \right]^{\frac{1}{2}}$$

La aplicación de éste método requiere que $x_{k-1} < x_k y$ $f'(x_k) > f'(x_{k-1})$.



Métodos indirectos

Ejemplo:

Minimizar la siguiente función utilizando los métodos indirectos vistos anteriormente:

$$f(x) = 2x^2 + \frac{16}{x}$$

1. Resolución utilizando el método de Newton

El punto de partida es $x_0=1$, el método converge en 3 iteraciones

| | Método de Newton | | | | | | | | | | |
|-----------|------------------|-----------|------------|--------------------|--|--|--|--|--|--|--|
| Iteración | x_k | $f'(x_k)$ | $f''(x_k)$ | f(x _k) | | | | | | | |
| 0 | 1 | -12 | 36 | 18 | | | | | | | |
| 1 | 1,333 | -3,667 | 17,500 | 15,556 | | | | | | | |
| 2 | 1,543 | -0,550 | 12,713 | 15,131 | | | | | | | |
| 3 | 1,586 | -0,015 | 12,019 | 15,119 | | | | | | | |
| 4 | 1,587 | 0,000 | 12,000 | 15,119 | | | | | | | |

2. Resolución utilizando el método de Quasi-Newton

El paso utilizado fue h=0.01, el método converge en 3 iteraciones.

| | Método de Quasi-Newton | | | | | | | | | | |
|-----------|---------------------------|---------|---------|--------------------|--|--|--|--|--|--|--|
| Iteración | $\mathbf{x}_{\mathbf{k}}$ | f(x+h) | f(x-h) | f(x _k) | | | | | | | |
| 0 | 1 | 17,8818 | 18,1218 | 18 | | | | | | | |
| 1 | 1,333 | 15,5197 | 15,593 | 15,5555 | | | | | | | |
| 2 | 1,543 | 15,1263 | 15,1373 | 15,1312 | | | | | | | |
| 3 | 1,586 | 15,1195 | 15,1198 | 15,1191 | | | | | | | |
| 4 | 1,587 | 15,1197 | 15,1197 | 15,1191 | | | | | | | |

3. Resolución utilizando el método de la Secante

| | Método de la Secante | | | | | | | | | | |
|-----------|----------------------|------------------|------------|-----------|-----------|--------|--|--|--|--|--|
| Iteración | X _p | \mathbf{x}_{q} | X * | $f'(x_q)$ | $f'(x_p)$ | f(x*) | | | | | |
| 0 | 1 | 5 | 2,531 | 19,36 | -12 | 19,131 | | | | | |
| 1 | 1 | 2,531 | 1,936 | 7,62401 | -12 | 15,761 | | | | | |
| 2 | 1 | 1,936 | 1,72579 | 3,47485 | -12 | 15,228 | | | | | |
| 3 | 1 | 1,726 | 1,64367 | 1,5311 | -12 | 15,138 | | | | | |
| 4 | 1 | 1,644 | 1,61048 | 0,65235 | -12 | 15,122 | | | | | |
| 5 | 1 | 1,610 | 1,5969 | 0,273 | -12 | 15,120 | | | | | |
| 6 | 1 | 1,597 | 1,59132 | 0,11332 | -12 | 15,119 | | | | | |
| 7 | 1 | 1,591 | 1,58902 | 0,04687 | -12 | 15,119 | | | | | |

El intervalo utilizado para optimizar la función fue (1,5), el valor óptimo se obtiene luego de 6 iteraciones.



Métodos directos, eliminación de regiones

Ejemplo:Diseño de un intercambiador de calor, minimizando los costos anuales ("Product and process design principles. Synthesis, analysis, and evaluation", Seider W., Seader J., Lewin D., 2004 2^a Edition, pp 628-629. Ed. John Wiley and Sons Inc.)

En una refinería de petróleo, 80000 lb/hr de un gas ligero que salen de una torre de destilación de crudo a 440°F, son actualmente enfriados utilizando agua, antes de ser almacenados. El calor perdido podría ser utilizado para precalentar 500000 lb/hr de petróleo crudo, el cual se dispone a 240°F y se calienta utilizando otros medios a un costo de \$3/million Btu, la planta opera 8200 hr/año. Basándose en los siguientes datos determine que debe hacerse.

- Cp del gas ligero: 0.5 Btu/lb °F
- * Cp del petroleo crudo: 0.45 Btu/lb °F
- Costo anual de operación: Cop + 0.8248 Cp{A}
- $Cp\{A\}$: $exp[11.667-0.8709 Ln(A) + 0.09005 [Ln(A)]^2]$, A: área del intercambiador, ft^2
- U: 24.5 Btu/hr °F ft²

Planteo de la función objetivo:

Los costos de operación están relacionados con el calor intercambiado, comenzamos por plantear los balances de energía:

$$Q = 80000(0.5)(440 - T_{LGO out})$$

$$Q = 500000(0.45)(T_{CO,out} - 240)$$

Balance de energía en el intercambiador:

$$Q = 24.5A \frac{\left(440 - T_{CO,out}\right) - \left(T_{LGO,out} - 240\right)}{Ln\left(\frac{440 - T_{CO,out}}{T_{LGO,out} - 240}\right)}$$

Nuestro objetivo es minimizar el costo anual de operación, la función objetivo será:

$$C_A = -0.0246 * Q + 0.8248 * C_p \{A\}$$

En los planteos realizados hay variables que no se conocen, una de ellas será nuestra variable de decisión. La mejor elección es la temperatura de salida del gas ligero, debido a que esta puede tomar valores limitados y permite calcular secuencialmente el resto de las variables. El valor superior de la temperatura de salida del gas es de 440°F, en este caso el costo sería nulo, el límite inferior es 240°F, temperatura de entrada del petróleo crudo, el costo sería infinito.

1. Resolución por el método de Fibonacci, la tolerancia utilizada fue de 5%.



| | Fibonacci, tolerancia 5% | | | | | | | | | | |
|-------|--------------------------|---------------|---------|---|--------|--|--|--|--|--|--|
| Punto | $T_{LGO, out}$ | $T_{CO, out}$ | A [ft²] | C _A x 10 ³ [\$/año] | | | | | | | |
| 1 | 316,19 | 262,01 | 4,95 | 1684,8 | -100,4 | | | | | | |
| 2 | 363,81 | 253,54 | 3,05 | 813,0 | -58,9 | | | | | | |
| 3 | 287,62 | 267,09 | 6,10 | 2560,6 | -123,4 | | | | | | |
| 4 | 316,19 | 262,01 | 4,95 | 1684,8 | -100,4 | | | | | | |
| 5 | 268,57 | 270,48 | 6,86 | 3535,6 | -136,8 | | | | | | |
| 6 | 287,62 | 267,09 | 6,10 | 2560,6 | -123,4 | | | | | | |
| 7 | 259,05 | 272,17 | 7,24 | 4320,8 | -141,9 | | | | | | |
| 8 | 268,57 | 270,48 | 6,86 | 3535,6 | -136,8 | | | | | | |

La solución óptima del sistema se alcanza en la iteración número 7. La temperatura de salida del gas ligero óptima encontrada es de 259.05 °F, el valor del costo anual es de -141.9 10³ \$/año, es decir que la instalación de intercambio de calor provocaría un ahorro. Si se disminuye la tolerancia especificada puede lograrse un valor de temperatura más cercano al óptimo, pero en ese caso el número de iteraciones aumenta.

2. Resolución por el método de la Sección Aurea

| | Sección Aurea | | | | | | | | | | |
|-------|----------------|---------------|-----------------|----------------------|---|--|--|--|--|--|--|
| Punto | $T_{LGO, out}$ | $T_{CO, out}$ | Q x 10°[BTU/Hr] | A [ft ²] | C _A x 10 ³ [\$/año] | | | | | | |
| 1 | 363,60 | 253,58 | 3,06 | 816,0 | -59,1 | | | | | | |
| 2 | 316,40 | 261,97 | 4,94 | 1679,8 | -100,2 | | | | | | |
| 3 | 287,22 | 267,16 | 6,11 | 2576,7 | -123,7 | | | | | | |
| 4 | 269,18 | 270,37 | 6,83 | 3494,7 | -136,4 | | | | | | |
| 5 | 258,04 | 272,35 | 7,28 | 4427,0 | -142,4 | | | | | | |
| 6 | 251,15 | 273,57 | 7,55 | 5367,7 | -144,2 | | | | | | |
| 7 | 246,89 | 274,33 | 7,72 | 6314,3 | -143,4 | | | | | | |

La solución óptima del sistema se alcanza en la iteración número 6. La temperatura de salida del gas ligero óptima encontrada es de 251.1 °F, el valor del costo anual es de -144.2 10³ \$/año. La velocidad de convergencia de este método es superior al método de Fibonacci.

3. Resolución por el método de la Dicotomía, en este caso el valor de Δx utilizado fue de $10^{\circ} F$

| | Método de la dicotomía, ∆x=10 | | | | | | | | | | |
|-------|-------------------------------|---------------|-----------------|----------------------|---|--|--|--|--|--|--|
| Punto | $T_{LGO, out}$ | $T_{CO, out}$ | Q x 10°[BTU/Hr] | A [ft ²] | C _A x 10 ³ [\$/año] | | | | | | |
| 1 | 330,00 | 259,56 | 4,40 | 1381,3 | -88,6 | | | | | | |
| 2 | 350,00 | 256,00 | 3,60 | 1021,5 | -71,2 | | | | | | |
| 3 | 285,00 | 267,56 | 6,20 | 2667,6 | -125,4 | | | | | | |
| 4 | 305,00 | 264,00 | 5,40 | 1977,9 | -109,6 | | | | | | |
| 5 | 282,50 | 268,00 | 6,30 | 2775,9 | -127,3 | | | | | | |
| 6 | 262,50 | 271,56 | 7,10 | 3997,3 | -140,3 | | | | | | |
| 7 | 271,25 | 270,00 | 6,75 | 3363,3 | -135,1 | | | | | | |
| 8 | 251,25 | 273,56 | 7,55 | 5349,9 | -144,2 | | | | | | |
| 9 | 265,63 | 271,00 | 6,98 | 3745,6 | -138,6 | | | | | | |

En este caso el valor de temperatura de salida del gas ligero, que optimiza nuestra función objetivo, se obtiene luego de 8 iteraciones.



4. Resolución por el método de búsqueda secuencial con dos experimentos igualmente espaciados

El valor óptimo se obtiene con 15 iteraciones. Puede observarse que de los tres métodos utilizados para la resolución del problema planteado, el método de la sección Áurea posee una velocidad de convergencia superior.

| Е | Busqueda secuencial con dos exp. igualmente espaciados | | | | | | | | |
|-------|--|----------------------|-----------------|----------------------|---|--|--|--|--|
| Punto | $T_{LGO, out}$ | T _{CO, out} | Q x 10°[BTU/Hr] | A [ft ²] | C _A x 10 ³ [\$/año] | | | | |
| 1 | 306,67 | 263,70 | 5,33 | 1931,0 | -108,3 | | | | |
| 2 | 373,33 | 251,85 | 2,67 | 683,8 | -50,4 | | | | |
| 3 | 284,44 | 267,65 | 6,22 | 2691,1 | -125,8 | | | | |
| 4 | 328,89 | 259,75 | 4,44 | 1403,7 | -89,6 | | | | |
| 5 | 269,63 | 270,29 | 6,81 | 3465,6 | -136,1 | | | | |
| 6 | 299,26 | 265,02 | 5,63 | 2150,0 | -114,3 | | | | |
| 7 | 259,75 | 272,04 | 7,21 | 4250,1 | -141,6 | | | | |
| 8 | 279,51 | 268,53 | 6,42 | 2914,8 | -129,4 | | | | |
| 9 | 253,17 | 273,21 | 7,47 | 5041,3 | -143,9 | | | | |
| 10 | 266,34 | 270,87 | 6,95 | 3692,6 | -138,1 | | | | |
| 11 | 248,78 | 273,99 | 7,65 | 5837,1 | -144,1 | | | | |
| 12 | 257,56 | 272,43 | 7,30 | 4479,3 | -142,6 | | | | |
| 13 | 245,85 | 274,52 | 7,77 | 6636,0 | -142,8 | | | | |
| 14 | 251,71 | 273,47 | 7,53 | 5272,1 | -144,1 | | | | |
| 15 | 249,75 | 273,82 | 7,61 | 5630,0 | -144,2 | | | | |
| 16 | 253,66 | 273,13 | 7,45 | 4970,1 | -143,8 | | | | |

5. Resolución por el método de búsqueda preplaneada, localizando el valor optimo dentro del 5% del rango inicial.

En este caso los experimentos deben realizarse todos al mismo tiempo, el número de experimentos a realizar esta determinado por la tolerancia, que en este caso es del 5%.

$$N \ge \frac{2}{0.05} - 1 \qquad N \ge 39$$

 $T_i = 240^{\circ} F + \frac{i(440 - 240)^{\circ} F}{N+1}$, donde i indica el número de experimento, y N el número total de experimentos.

Una vez realizados todos los experimentos se determina el intervalo que contiene el valor óptimo. En este caso el óptimo de temperatura se encuentra entre (245°F,255°F).



| | | Búsqued | la Preplaneada, t | olerancia 5 | % |
|-------|----------------|----------------------|-------------------|----------------------|------------------------------|
| Punto | $T_{LGO, out}$ | T _{CO, out} | Q x 10°[BTU/Hr] | A [ft ²] | C _A x 10°[\$/año] |
| 1 | 245,00 | 274,67 | 7,80 | 6946,9 | -142,0 |
| 2 | 250,00 | 273,78 | 7,60 | 5581,2 | -144,2 |
| 3 | 255,00 | 272,89 | 7,40 | 4786,6 | -143,5 |
| 4 | 260,00 | 272,00 | 7,20 | 4225,9 | -141,5 |
| 5 | 265,00 | 271,11 | 7,00 | 3793,3 | -138,9 |
| 6 | 270,00 | 270,22 | 6,80 | 3441,7 | -135,9 |
| 7 | 275,00 | 269,33 | 6,60 | 3146,0 | -132,6 |
| 8 | 280,00 | 268,44 | 6,40 | 2891,2 | -129,1 |
| 9 | 285,00 | 267,56 | 6,20 | 2667,6 | -125,4 |
| 10 | 290,00 | 266,67 | 6,00 | 2468,6 | -121,6 |
| 11 | 295,00 | 265,78 | 5,80 | 2289,5 | -117,7 |
| 12 | 300,00 | 264,89 | 5,60 | 2126,8 | -113,7 |
| 13 | 305,00 | 264,00 | 5,40 | 1977,9 | -109,6 |
| 14 | 310,00 | 263,11 | 5,20 | 1840,8 | -105,5 |
| 15 | 315,00 | 262,22 | 5,00 | 1713,7 | -101,4 |
| 16 | 320,00 | 261,33 | 4,80 | 1595,5 | -97,1 |
| 17 | 325,00 | 260,44 | 4,60 | 1484,9 | -92,9 |
| 18 | 330,00 | 259,56 | 4,40 | 1381,3 | -88,6 |
| 19 | 335,00 | 258,67 | 4,20 | 1283,6 | -84,3 |
| 20 | 340,00 | 257,78 | 4,00 | 1191,5 | -79,9 |
| 21 | 345,00 | 256,89 | 3,80 | 1104,3 | -75,6 |
| 22 | 350,00 | 256,00 | 3,60 | 1021,5 | -71,2 |
| 23 | 355,00 | 255,11 | 3,40 | 942,8 | -66,8 |
| 24 | 360,00 | 254,22 | 3,20 | 867,9 | -62,3 |
| 25 | 365,00 | 253,33 | 3,00 | 796,3 | -57,9 |
| 26 | 370,00 | 252,44 | 2,80 | 727,8 | -53,4 |
| 27 | 375,00 | 251,56 | 2,60 | 662,3 | -48,9 |
| 28 | 380,00 | 250,67 | 2,40 | 599,4 | -44,5 |
| 29 | 385,00 | 249,78 | 2,20 | 539,0 | -39,9 |
| 30 | 390,00 | 248,89 | 2,00 | 481,0 | -35,4 |
| 31 | 395,00 | 248,00 | 1,80 | 425,1 | -30,9 |
| 32 | 400,00 | 247,11 | 1,60 | 371,2 | -26,3 |
| 33 | 405,00 | 246,22 | 1,40 | 319,2 | -21,8 |
| 34 | 410,00 | 245,33 | 1,20 | 269,0 | -17,2 |
| 35 | 415,00 | 244,44 | 1,00 | 220,5 | -12,5 |
| 36 | 420,00 | 243,56 | 0,80 | 173,6 | -7,9 |
| 37 | 425,00 | 242,67 | 0,60 | 128,2 | -3,0 |
| 38 | 430,00 | 241,78 | 0,40 | 84,1 | 2,0 |
| 39 | 435,00 | 240,89 | 0,20 | 41,4 | 8,2 |



Métodos de aproximación polinomial

Ejemplo:

Minimizar la siguiente función utilizando los métodos de aproximación polinomial analizados:

$$f(x) = 2x^2 + \frac{16}{x}$$

1. Resolución utilizando el método interpolación cuadrática

Los puntos iniciales utilizados fueron $x_0=1$, $x_1=2.5$ y $x_2=5$, el método converge en cuatro iteraciones, el valor óptimo obtenido es $x^*=1.60$.

| | Interpolación cuadrática | | | | | | | | | | |
|-----------|--------------------------|-----------------------|-----------------------|------------|----------|----------|----------|--------|--|--|--|
| Iteración | X ₀ | X ₁ | X ₂ | X * | $f(x_0)$ | $f(x_1)$ | $f(x_2)$ | f(x*) | | | |
| 0 | 1 | 2,5 | 5 | 1,66 | 18 | 18,9 | 53,2 | 15,15 | | | |
| 1 | 1 | 1,66 | 2,5 | 1,70 | 18 | 15,149 | 18,9 | 15,190 | | | |
| 3 | 1 | 1,66 | 1,7 | 1,61 | 18 | 15,149 | 15,2 | 15,122 | | | |
| 4 | 1 | 1,61 | 1,7 | 1,60 | 18 | 15,122 | 15,1 | 15,120 | | | |

2. Resolución utilizando el método interpolación cúbica.

Para éste método se necesitan dos puntos iniciales, y los respectivos valores de la derivada de la función, dichos valores iniciales fueron $x_0=1$, $x_1=2$. El método converge en la tercera iteración, el valor óptimo es $x^*=1.59$.

| | Interpolación cúbica | | | | | | | | | | | |
|-----------|--------------------------------------|--------|------|--------|--------|--|--|--|--|--|--|--|
| Iteración | x_k u_1 u_2 $f'(x_k)$ $f(x_k)$ | | | | | | | | | | | |
| | 1 | | | -12 | 18 | | | | | | | |
| | 2 | -2.00 | 7.21 | 4.000 | 16 | | | | | | | |
| 1 | 1.57 | -2.33 | 2.55 | -0.264 | 15.122 | | | | | | | |
| 2 | 3.98 | -10.94 | 11.1 | 14.926 | 35.753 | | | | | | | |
| 3 | 1.59 | -10.90 | 10.8 | 0.082 | 15.119 | | | | | | | |
| 4 | 9.21 | -24.83 | 24.8 | 36.663 | 171.49 | | | | | | | |



Bibliografía

- * Beveridge G., Schechter (1970) "Optimization: Theory and Practice" Ed. McGraw-Hill.
- * Castillo E., Conejo A., Pedregal P., García R., Alguacil N. (2002), "Formulación y Resolución de Modelos de Programación Matemática en Ingeniería y Ciencia".
- Chapra Steven, Canale Raymond (2006). "Numerical methods for engineers", 5th edition. Ed. McGraw-Hill.
- Legar T., Himmelblau. (1988) "Optimization of chemical processes" Ed. McGraw-Hill.
- * Reklaitis G., Ravindran A., Ragsdell K. (1983), "Engineering Optimization. Methods and Applications", Ed. John Wiley and Sons Inc.
- * Tarifa E. (2006) "Optimización y Simulación de Procesos. Métodos numéricos" Facultad de Ingeniería Universidad Nacional de Jujuy
- Zerpa L., Colmenares J. (2004), "Optimización para ingenieros, optimización sin restricciones". Notas de clase, Universidad del Zulia, Facultad de Ingeniería, División de Estudios para Graduados, Instituto de Cálculo Aplicado. República Bolivariana de Venezuela.
- Seider W., Seader J., Lewin D., (2004), "Product and process design principles. Synthesis, analysis, and evaluation", 2^a Edition, Ed. John Wiley and Sons Inc.