

UNIVERSIDAD CENTROCCIDENTAL LISANDRO
ALVARADO

Decanato de Ciencias y Tecnología

Maestría en Ciencias Mención Optimización



“DISTRIBUCIÓN DE CATALIZADORES EN EL REACTOR
DE HIDROTRATAMIENTO DE DESTILADOS MEDIOS,
VÍA OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO”

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO PRESENTADO POR

LCDA. MARLYN CUADRADO

COMO REQUISITO

PARA OBTENER EL TÍTULO DE MAGISTER

SCIENTIARUM, MENCIÓN OPTIMIZACIÓN

13 de Junio de 2011

UNIVERSIDAD CENTROCCIDENTAL LISANDRO
ALVARADO

Decanato de Ciencias y Tecnología

Maestría en Ciencias Mención Optimización



“DISTRIBUCIÓN DE CATALIZADORES EN EL REACTOR
DE HIDROTRATAMIENTO DE DESTILADOS MEDIOS,
VÍA OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO”

TRABAJO ESPECIAL DE GRADO PRESENTADO POR

LCDA. MARLYN CUADRADO

COMO REQUISITO

PARA OBTENER EL TÍTULO DE MAGISTER

SCIENTIARUM, MENCIÓN OPTIMIZACIÓN

JURADO CALIFICADOR

PROF. HUGO LARA

TUTOR

PROF. CLAVEL QUINTANA

JURADO

PROF. ELISA VERRUSCHI

JURADO

13 de Junio de 2011

RESUMEN

El proceso de hidrotratamiento de destilados medios se hace vía hidrodesulfuración (HDS). Este proceso utiliza catalizadores muy activos para la reducción del contenido de azufre y aromáticos en el gasoleo. En la actualidad se han establecido regulaciones sobre el contenido de azufre desde 500 ppmw a 15ppmw desde 2006 a 2010, lo que ha permitido el planteamiento de estudios a nivel del reactor, del catalizador y de proceso, para satisfacer dicha regulación [1]. Verruschi, E. (2008) [20] postuló un modelo determinístico de Programación no Lineal Entera Mixta (MINLP) que permite el diseño de un reactor y la distribución de lechos catalíticos en el mismo, donde se obtuvieron soluciones por cada objetivo a cumplir. La posibilidad de cumplir los objetivos de manera equilibrada impulsó a definir el modelo multiobjetivo donde se define una función objetivo vectorial la cual tiene como componentes: costo del diseño del reactor, la producción de naftenos, la cantidad de monoaromáticos y la cantidad de aromáticos azufrados. Se minimizaron las primeras tres componentes y se maximizó la cuarta componente. Al analizar algunos de los resultados obtenidos por Verruschi [20] se plantearon diversas preguntas que fueron fundamentadas y respondidas matemáticamente mediante la solución de problemas bi-tri objetivos. Al realizar un análisis gráfico de las soluciones (frente de pareto) de estos modelos, se verificó en algunos de los casos, la existencia de conflicto entre algunos objetivos y para otros no se pudo evidenciar de forma clara dicho conflicto. Para la obtención de soluciones eficientes para el problema general de cuatro objetivos, se utilizó el método de ϵ -restricciones aumentado (AUGMECON [18]). Se estableció el rango de variación de los parámetros ϵ de las restricciones objetivos mediante la tabla de pagos y se resolvieron los modelos generados, haciendo uso de herramientas de GAMS que resuelve MINLP, como lo es DICOPT. Con el algoritmo AUGMECON se obtuvo soluciones del frente de pareto que en el espacio solución muestran configuraciones para el lecho catalítico en el reactor de destilados medios, donde el tomador de decisiones puede escoger entre alguna de ellas tomando en cuenta sus necesidades inmediatas.

Palabras claves: Distribución de Catalizadores, Programación No Lineal Entera Mixta, Optimización multiobjetivo, AUGMECON.

En primer lugar a Jehová, por darme la vida y la oportunidad de seguir adelante cada día. A mis padres y hermanos, y en especial a mi primer sobrino Sebastián, que llegó este año a nuestras vidas.

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer en primer lugar a la Universidad Centroccidental Lisandro Alvarado (UCLA) y en representación de ella, a todos los profesores que aportaron sus conocimientos en el área en la cual me especialicé como es; Optimización. Gracias por responder a todos los porqués que tenía cuando comencé la maestría. Desde el primer momento sabía que estaba rumbo a adquirir nuevos conocimientos a nivel académico. Gracias a ustedes me voy motivada a seguir especializándome en esta área.

A el prof. Hugo Lara por apoyarme en todas las decisiones necesarias para la culminación de esta investigación. Gracias profesor por tener siempre un decisión contundente y clara con respecto a la realización y culminación exitosa de este trabajo de grado.

A el prof. Víctor Griffin, por estar presente, apoyándome desde el comienzo de mi vida profesional y ayudarme en este momento en el análisis de los resultados de este trabajo. A mis colegas y amigos; Msc. Juan Carlos Juárez por ayudarme en la transcripción de este trabajo y a Msc. Alexander Peraza por brindarme su ayuda en el análisis químico de esta investigación.

En especial, a Msc. Clavel Quintana porque a pesar de la distancia, siempre estuvo ahí. Ayudándome y dándome ideas para la culminación definitiva de este trabajo de grado.

A todos ustedes, Gracias...

ÍNDICE GENERAL

| | |
|--|----------|
| 1. INTRODUCCIÓN | 1 |
| 1.1. Planteamiento del problema | 2 |
| 1.2. Objetivos de estudio | 5 |
| 1.2.1. Objetivo General | 5 |
| 1.2.2. Objetivos Específicos | 5 |
| 1.3. Delimitación del Problema | 6 |
| 1.4. Organización de la Tesis | 6 |
| 2. DESARROLLO TEÓRICO | 7 |
| 2.1. Programación no lineal Entera Mixta (MINLP) | 8 |
| 2.1.1. Motivación | 8 |
| 2.1.2. Descripción Matemática | 9 |
| 2.1.3. Dificultades de los MINLP | 10 |
| 2.2. Algoritmos de MINLP | 11 |
| 2.2.1. Descomposición Generalizada de Benders, GBD | 12 |
| 2.2.2. Algoritmo de Aproximación Exterior, OA | 20 |
| 2.2.3. Algoritmo de Aproximación Exterior con Relaxaciones de Igualdad, OA/ER | 26 |
| 2.3. DICOPT: Paquete de Optimización Continuo Discreto | 31 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 2.3.1. | Algoritmo DICOPT | 31 |
| 2.4. | Optimización Multiobjetivo | 32 |
| 2.4.1. | Antecedentes Históricos | 32 |
| 2.4.2. | Definición de un Problema de Optimización Multiobjetivo (MOOP) | 34 |
| 2.4.3. | Dominancia | 35 |
| 2.4.4. | Optimalidad de Pareto | 37 |
| 2.5. | Métodos de solución para problemas MOOP | 41 |
| 2.5.1. | Clasificación de los Métodos MOOP | 41 |
| 2.5.2. | Métodos Escalares | 42 |
| 2.6. | Método de ϵ -Restricciones Aumentado (AUGMECON) | 45 |
| 3. | ANTECEDENTES | 47 |
| 3.1. | Modelo determinístico para la distribución de catalizadores en el reactor de hidrotreatmento de destilados medios | 48 |
| 3.1.1. | Introducción | 48 |
| 3.1.2. | Modelo matemático | 48 |
| 3.2. | Parámetros del modelo (C1M1) | 54 |
| 3.2.1. | Resultados obtenidos por Verruschi | 56 |
| 3.3. | Discusión de los Resultados | 62 |
| 4. | MODELO MULTI OBJETIVO Y RESULTADOS | 64 |
| 4.1. | Modelo Multiobjetivo para la distribución de catalizadores en el reactor de hidrotreatmento de destilados medios | 65 |
| 4.2. | Aplicación de AUGMECON para la obtención de soluciones del modelo multiobjetivo | 68 |
| 4.2.1. | Resultados y análisis obtenidos para los modelos Biobjetivos | 68 |
| 4.2.2. | Resultados y análisis obtenidos para los modelos Triobjetivos | 71 |
| 4.3. | Resultados y análisis obtenidos para el modelo de cuatro objetivos | 72 |
| 5. | CONCLUSIONES | 79 |
| 5.1. | Conclusiones | 80 |
| 5.2. | Recomendaciones | 82 |
| 5.3. | Aportes de la Investigación | 82 |

| | |
|---|-----------|
| A. IMPLEMENTACION DEL MODELO Y ALGORITMO DE SOLUCIÓN | 83 |
| A.1. Modelo determinístico para la distribución de catalizadores en el reactor de hidrotratamiento de destilados medios en GAMS | 83 |
| A.2. Algoritmo AUGMECON implementado en GAMS y adaptado al modelo multiobjetivo | 92 |
| Bibliografía | 96 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| 2.4.1.Soluciones del espacio objetivo del Ejemplo 1 | 36 |
| 2.4.2.Optimalidad local en el sentido pareto | 38 |
| 2.4.3.Teorema de Contacto | 39 |
| 2.4.4.Nivel de preferencia y relación de Dominancia | 39 |
| 2.4.5.Representación de una superficie “tradeoff” | 40 |
| 2.4.6.Representación del punto ideal y el punto “Nadir” | 41 |
| 3.2.1.Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho (MD-Crit1-C1-M1) | 57 |
| 3.2.2.Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho (MD-Crit2-C1-M1) | 58 |
| 3.2.3.Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho (MD-Crit3-C1-M1) | 60 |
| 3.2.4.Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho (MD-Crit4-C1-M1) | 61 |
| 4.2.1.Frente de pareto del modelo (4.1.2) | 69 |
| 4.2.2.Frente de Pareto del modelo 4.1.3 | 70 |
| 4.2.3.Frente de pareto del Modelo (4.1.4) | 70 |
| 4.2.4.Frente de pareto del Modelo (4.1.5) | 71 |
| 4.2.5.Frente de pareto del Modelo (4.1.6) | 72 |

| | |
|---|----|
| 4.3.1.Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho Sol. 1. | 75 |
| 4.3.2.Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho Sol. 2. | 76 |
| 4.3.3.Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho Sol. 3. | 77 |
| 4.3.4.Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho Sol. 4. | 78 |

ÍNDICE DE TABLAS

| | |
|--|----|
| 3.2.1. Flujo molar de alimentación | 54 |
| 3.2.2. Pesos molares | 54 |
| 3.2.3. Constantes de Absorción | 54 |
| 3.2.4. Parámetros adicionales del modelo | 55 |
| 3.2.5. Parámetro cinético 1 de la reacción por tipo de catalizador | 55 |
| 3.2.6. Parámetro cinético 2 de la reacción por tipo de catalizador | 55 |
| 3.2.7. Parámetro estequiométrico del compuesto de cada reacción química por tipo de catalizador | 56 |
| 3.2.8. Resultados respecto al lecho catalítico y dimensiones | 56 |
| 3.2.9. Principales resultados del modelo (MD-Crit1-C1-M1) | 57 |
| 3.2.10. Resultados respecto al lecho catalítico y dimensiones | 58 |
| 3.2.11. Principales resultados del modelo (MD-Crit2-C1-M1) | 59 |
| 3.2.12. Resultados respecto al lecho catalítico y dimensiones | 59 |
| 3.2.13. Principales resultados del modelo (MD-Crit3-C1-M1) | 59 |
| 3.2.14. Resultados respecto al lecho catalítico y dimensiones | 60 |
| 3.2.15. Principales resultados del modelo (MD-Crit4-C1-M1) | 61 |
| 3.2.16. Principales resultados del modelo para cada criterio analizado | 62 |
| 3.2.17. Principales resultados del modelo para cada criterio analizado | 62 |

| | |
|---|----|
| 4.3.1.Tabla de Pagos de Modelo 4 objetivos | 73 |
| 4.3.2.Soluciones no Dominadas | 74 |
| 4.3.3.Resultados respecto al lecho catalítico y dimensiones | 74 |

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

Este Capítulo presenta la parte introductoria de la investigación. Se muestra el planteamiento del problema (Sección 1.1), los objetivos de estudio (Sección 1.2) y la delimitación de la investigación (Sección 1.3).

*Un consejo: ¡Estudia!, ya que los mejores científicos y filósofos, para aprender, escucharon a su espíritu y sus pensamientos los pusieron en práctica, porque la clave del éxito es el pensamiento humano lleno de sabiduría y entendimiento.
Cuadrado Marlyn (1998)*

1.1. Planteamiento del problema

Un reactor químico es un objeto tecnológico en cuyo interior tiene lugar una reacción química. Las reacciones químicas están presente en todas partes y de ahí la relevancia del estudio de las mismas. En la industria química, se pueden decir que son las acciones más importantes y complejas, porque a través de ellas se obtiene la transformación de la materia prima, que para este caso viene siendo el petróleo. El petróleo es hoy día, la principal fuente de energía, ya que a partir de él se genera el combustible que actualmente representa el 40 % de la demanda energética mundial.

En las últimas décadas se han establecido regulaciones para la reducción del contenido de sulfurados y aromáticos en los combustibles, los cuales representan del 75 % al 80 % del total de productos en una refinería, esto con el fin de mantener una calidad del aire que respiramos. Dichas regulaciones fueron propuestas por la directiva del Parlamento Europeo y el acta de aire limpio de la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos.

Con el objetivo de minimizar el efecto negativo que tiene sobre la salud y el ambiente las emisiones de gases en los tubos de escape de los automóviles, se ha venido minimizando el contenido de nivel de azufre y aromáticos en la gasolina y en el gasóleo. Los nuevos límites que comenzaron a regir en la Comunidad Europea y en Estados Unidos a partir del primero de enero del 2005 se encuentra entre 30-50 ppmw (Parts Per Million by Weight, por sus siglas en Inglés). De hecho, cero emisiones de azufre y por lo tanto cero contenido de azufre será la tendencia para los próximos 10 años. Esto hace que se requiera producir en las refinerías combustibles de ultra bajo azufre, por lo que el punto clave es lograr tecnologías de desulfuración eficientes [1].

Existen diferentes tecnologías para la remoción de sulfurados y aromáticos, una de las más usadas es el proceso donde se le agrega hidrógeno al combustible para su remoción, el cual es conocido como *hidrotratamiento*. El hidrotratamiento para la reducción de sulfurados y aromáticos ha de conseguirse vía Hidrodesulfuración (HDS) con catalizadores muy activos, estos catalizadores deben tener un efecto de favorecer la consecución de las nuevas regulaciones a un costo mínimo posible.

El proceso de hidrodesulfuración del gasóleo, como un proceso de hidrotratamiento de destilados medios, ha entrado en una etapa de transición y desafío, porque se debe reducir el contenido de sulfurados del gasóleo de 500 ppmw a 15 ppmw desde el 2006 al 2010 (<http://www.epa.gov/otaq/regs/hd2007/frm/f00057.pdf>). Para lograr este objetivo, se han planteado diferentes vías como son, estudios a nivel del catalizador, estudios del nivel del reactor y estudios a nivel de proceso [1]. Por tal razón, se viene investigando sobre la manera de desarrollar métodos que permitan generar procedimientos sistemáticos para la obtención de síntesis de redes de reactores óptimas, siendo uno de los principales problemas, el planteamiento de las estrategias de optimización de redes de reactores.

La configuración óptima para un reactor industrial de hidrotratamiento de destilados medios, a través de la síntesis y optimización de redes de reactores,

consiste en encontrar una configuración factible que satisfaga un conjunto de metas y especificaciones. El problema de síntesis implica determinar el arreglo óptimo del reactor y de los equipos asociados, así como las interconexiones que transforman las entradas en productos finales.

Verruschi, E. (2008) [20], desarrolló una metodología que propone una configuración de lechos catalíticos para un reactor de hidrodesulfuración de gasóleo, a través de un modelo el cual permite obtener la mejor distribución de dos tipos de lechos catalíticos, tal que estudie la existencia o no de la unidad y la selección de un tipo de catalizador, y genere como resultado la mejor combinación en el reactor y en el tamaño del equipo, minimizando la cantidad de aromáticos azufrados (caso más favorable) y el coste total anual y maximizando la cantidad de monoaromáticos (caso más desfavorable) y la producción de naftenos.

La metodología consistió de tres pasos (Grossman, 1996) [9]:

1. Se postuló una superestructura que incluye todas las posibles alternativas de diseño, de las cuales se selecciona la solución óptima. La superestructura considerada se basó en el modelo propuesto por Kokossis y Floudas (1990) [14].
2. Transformación de la superestructura en términos de un modelo matemático bajo incertidumbre basado en la programación matemática estocástica no lineal entera mixta, con cuatro diferentes objetivos a cumplir; minimizar la cantidad de aromáticos azufrados y el costo total anual y maximizar la cantidad de monoaromáticos y la producción de naftenos.
3. Solución del modelo de optimización. Se utilizaron dos casos basados en cuatro diferentes criterios. Los casos fueron; Caso 1: proceso isotérmico (ocurre a temperatura constante) y Caso 2: proceso adiabático (donde no hay intercambio de calor). Los criterios fueron los siguientes:
 - a) Minimizar el coste total anual.
 - b) Minimizar los cantidad de aromáticos azufrados (caso más favorable).
 - c) Maximizar la producción de monoaromáticos (caso más desfavorable).
 - d) Maximizar la producción de naftenos.

Los criterios 1) y 2) responden a las regulaciones ambientales que debe cumplir el gasóleo y los criterios 3) y 4) toman en cuenta la calidad del gasóleo y el aspecto económico, respectivamente.

Verruschi, planteó para el segundo pasos dos estrategias de solución basadas en la clasificación de los métodos de solución según los datos de un problema de optimización, estas fueron; optimización *determinista y estocástica*. Para la optimización determinista resolvió el modelo matemático pero sin la consideración de las variables que presentan incertidumbre (*modelo determinístico*) y optimización

estocástica es el modelo deperminístico pero con la presencia de las dichas variables (*modelo estocástico*). Estos modelos permitieron la obtención de la mejor distribución de dos tipos de lechos catalíticos en un reactor de flujo pistón, donde el sistema reactivo contempla reacciones series-paralelas.

La optimización de dichos modelos, se hizo para cada objetivo, tomando en cuenta cada caso (isotérmico ó adiabático) y cada modo de operación (modo de operación 1 y modo de operación 2). En total se resolvieron 32 modelos matemáticos de MINLP, esto se resume a continuación:

(MD) Modelo determinístico.

(ME) Estocástico.

(Crit1) Minimizar el costo del diseño del reactor.

(Crit2) Minimizar la cantidad de aromáticos azufrados (más favorable).

(Crit3) Maximizar la cantidad de monoaromáticos (menos favorable).

(Crit4) Maximizar la catidad de naftenos.

(C1) Caso Isotérmico: temperatura es constante en todo el reactor.

(C2) Caso Adiabático: no hay intercambio de calor con el medio ambiente.

(M1) Modo de operación 1: El flujo de alimentación $(Fko_k)_1$.

(M2) Modo de operación 2 :El flujo de alimentación $(Fko_k)_2$.

Al resolver los modelos como casos mono-objetivos, no se puede asegurar que el beneficio de alguno de los criterios obtendrá un beneficio para los otros. Las siguientes palabras de Pareto, V. quizás ayudarán a clarificar lo antes expuesto:

El bienestar de algunos se puede mantener constante sin que nuestras conclusiones resulten afectadas. Pero si, por el contrario, el pequeño movimiento (de una forma de estado social a otro) aumenta el bienestar de algunos individuos y disminuye el de otros, no puede afirmarse que el cambio es ventajoso para la colectividad en su conjunto.

Por tal motivo, el problema que plantearemos sugiere la optimización simultánea de las funciones objetivos y así obtener soluciones tal que mejore en un objetivo sin empeorar al menos uno de los otros. Lo anteriormente expuesto se conoce como **Optimización Multiobjetivo**.

Un Problema de Optimización Multiobjetivo (MOOP, Multi-Objective Optimization Program, por sus siglas en Inglés), trata la optimización de más de un objetivo que usualmente están en conflictos entre sí, lo que hace que la mejora de un objetivo da lugar al empeoramiento de algún otro.

El problema de la *distribución de catalizadores en el reactor de hidrotratamiento de destilados medios* evidencia la característica de ser un problema con múltiples objetivos (por poseer cuatro objetivos a alcanzar), dicho problema fue tratado como un problema de optimización Mono-objetivo, obteniendo así, soluciones óptimas por cada función objetivo. Sin embargo, existen diferencias teóricas y algorítmicas fundamentales entre los problemas mono-objetivos y multiobjetivos, lo que hace conveniente plantear el problema de la distribución de catalizadores como un modelo de optimización multiobjetivo y resolverlo utilizando algoritmos para dichos problemas. Como resultado, el objetivo principal de esta investigación se define de la siguiente manera:

Optimizar la distribución de catalizadores en el reactor de hidrotratamiento de destilados medios, minimizando la cantidad de aromáticos azufrados, la producción de monoaromáticos y el coste total anual y maximizando la producción de naftenos.

Esta investigación propone obtener la solución del problema planteado mediante el algoritmo de las ϵ -restricciones (ϵ -Constraint Method). Este método reformula el MOOP, fijando una función objetivo y considerando las demás como restricciones limitadas por algún nivel ϵ_i . La dificultad radica en la determinación cuidadosa de los ϵ_i , ya que de ello depende el éxito de la técnica. Para considerar estas limitantes y obtener soluciones eficientes usaremos el método de ϵ -restricciones aumentado (AUGMECON) implementado en GAMS por Mavrotas, G. [18].

1.2. Objetivos de estudio

1.2.1. Objetivo General

Obtener la mejor distribución de catalizadores en el reactor de hidrotratamiento de destilados medios, vía optimización multiobjetivo.

1.2.2. Objetivos Específicos

1. Convertir el problema multiobjetivo en uno mono-objetivo haciendo uso del método de ϵ -restricciones (modelo reformulado).
2. Establecer el rango de variación de los parámetros ϵ para las funciones objetivos que representarán las restricciones limitadas del método de ϵ -restricciones, mediante el uso de una tabla de pagos (payoff table).
3. Usar herramientas computacionales robustas de programación no lineal entera mixta para resolver el conjunto de modelos reformulados.
4. Obtener el conjunto pareto y frente de pareto óptimo del problema multiobjetivo.

5. Hacer un análisis gráfico de las soluciones (frente de pareto) de los modelos multiobjetivos que se pueden plantear, con dos y tres objetivos.
6. Determinar la mejor configuración del rearrreglo de lecho catalítico para el reactor de hidrotratamiento de gasóleo mediante el conjunto de pareto óptimo.

1.3. Delimitación del Problema

El presente estudio se delimitará a estudiar el modelo de distribución de lechos catalíticos en el reactor de hidrotratamiento de destilados medios para el caso determinístico (MD) y analizaremos el caso isotérmico (C1) en el modo de operación 1 (M1), usando todos los criterios (Crit1-Crit4) para fijar el problema multicriterio y definir el modelo multiobjetivo.

Para este caso, no tomaremos el criterio producción de monoaromáticos (Crit2) como un caso menos favorable, sino que se minimizará dicho objetivo, ya que es un producto no deseado en el gasóleo. Así el modelo de optimización multiobjetivo que estudiaremos mediante esta investigación serán el *modelo Determinístico caso isotérmico, modo de operación 1 (MD-C1-M1)*.

1.4. Organización de la Tesis

El presente trabajo está organizado, manteniendo la estructura de una parte introductoria, donde se presenta el planteamiento del problema (Sección 1.1), los objetivos de estudio (Sección 1.2) y la delimitación de la investigación (Sección 1.3). Posteriormente se presenta el Capítulo 2 donde se muestran los conceptos y algoritmos de Programación No Lineal Entera-Mixta (Secciones 2.1 y 2.2) y la teoría y algoritmos de optimización multiobjetivo (Secciones 2.4 y 2.5). En la Sección 2.6 se presenta la fundamentación teórica del método AUGMECON, que será utilizado para la obtención de las soluciones para el problema planteado. El Capítulo 3 presenta el modelo de optimización determinístico y las soluciones obtenidas por Verruschi y el Capítulo 4 presenta el modelo multiobjetivo para la distribución de catalizadores en el reactor de hidrotratamiento de destilados medios. La Sección 4.1 muestra los modelos desarrollados y la Sección 4.2, la aplicación del algoritmo AUGMECON y los resultados numéricos. Finalmente, en el Capítulo 5 se exponen las conclusiones, recomendaciones y aportes de la investigación.

CAPÍTULO 2

DESARROLLO TEÓRICO

A continuación se presenta una descripción de la teoría de Programación No Lineal Entera Mixta (Sección 2.1) y la presentación de los algoritmos desarrollados para la solución de dichos problemas (Sección 2.2). En la sección 2.3 se presenta el algoritmo implementado en GAMS para la resolución de MINLP conocido como DICOPT. El fundamento teórico de los Problemas de Optimización Multiobjetivo, una clasificación de los algoritmos de Optimización Multiobjetivos y se exponen brevemente los métodos escalares de Optimización Multiobjetivo se muestran en la Sección 2.4. Por último, se presenta una descripción del método AUGMECON que se utilizará para la obtención de soluciones para el problema multiobjetivo planteado en esta investigación (Sección 2.6).

*Al momento es solamente una Noción,
pero con un poco de respaldo creo
que puedo convertirme en un
Concepto y entonces en una Idea.
(Woody Allen, Annie Hall)*

2.1. Programación no lineal Entera Mixta (MINLP)

2.1.1. Motivación

Una gran cantidad de problemas de optimización involucran variables enteras o discretas en adición a la presencia de variables continuas. Esta clase de problemas de optimización vienen de una variedad de aplicaciones y son denotados como problemas de programación no lineal entera mixta (Mixed-Integer Nonlinear Programming MINLP Problems).

La naturaleza no lineal de estos problemas de optimización enteros mixtos pueden surgir de:

- i Relaciones no lineales con dominio enteros (por ejemplo, productos de variables binarias en un modelo de asignación cuadrática).
- ii Relaciones no lineales con dominio continuo (por ejemplo, modelos no lineales con entradas-salidas complejas en un reactor unitario).
- iii Relaciones no lineales con dominio continuo-entero (por ejemplo, producto de variables continuas y binarias en la programación y planeación de proceso por lotes y mejora de sistemas de recuperación térmicos). Nos basaremos en los casos (ii) y (iii) en esta sección.

Existe un amplio espectro de aplicaciones que pueden ser modeladas como MINLP. Estas aplicaciones están presentes en el área de *Síntesis de Procesos* en ingeniería química e incluye:

- i Síntesis de redes de recuperadores de calor (Floudas y Ciric, 1989; Ciric y Floudas, 1990; Ciric y Floudas, 1989; Yee et al., 1990a; Yee y Grossman, 1990; Yee, et al., 1990b).
- ii El acondicionamiento (o adaptación) de sistemas intercambiadores de calor (Ciric y Floudas, 1990; Papalexandri y Pistikopoulos, 1993;).
- iii La síntesis de sistemas de separación basados en destilación (Paules y Floudas, 1988; Viswanathan y Grossmann, 1990; Aggarwal y Floudas, 1990; Aggarwal y Floudas, 1992; Paules y Floudas, 1992).
- iv Síntesis de redes de reactores complejos (Kokossis y Floudas, 1990; Kokossis y Floudas, 1994).
- v Síntesis de sistemas reactor-separador con reciclaje (Kokossis y Floudas, 1991).
- vi Síntesis de sistemas de utilidad (Kalitventzeff Marechal, 1988).

vii Síntesis de sistemas de procesos totales (Kocis y Grossmann, 1988; Kocis y Grossmann, 1989a; Kravanja y Grossmann, 1990).

Importantes aplicaciones de problemas MINLP han surgido en el área de Diseño, programación y planeación de procesos discontinuos en ingeniería química e incluyen:

- i Diseño de plantas multiproductoras (Grossmann y Sargent, 1979; Birewar y Grossmann, 1989, Birewar y Grossmann 1990).
- ii Diseño y operación de plantas multipropósito (Vaselenak et al., 1987; Vaselenak et al., 1987; Faqir and Karimi, 1990; Papageorgaki y Reklaitis, 1990; Papageorgaki y Reklaitis, 1990; Wellons y Reklaitis, 1991; Sahinidis y Grossmann, 1991; Fletcher et al., 1991).

2.1.2. Descripción Matemática

La formulación general para un problema MINLP puede ser enunciado como:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Minimizar} & f(x, y) \\
 x, y & \\
 \text{s.a} & h(x, y) = 0 \\
 & g(x, y) \leq 0 \\
 & x \in X \subseteq \mathbb{R}^n \\
 & y \in Y \text{ entero}
 \end{array} \tag{2.1.1}$$

donde x representa un vector de n variables continuas (por ejemplo, flujos, temperaturas, longitud de unidades, etc), y y es un vector de variables enteras (por ejemplo, materiales o solventes alternativos); $h(x, y) = 0$ denota las m restricciones de igualdad (por ejemplo, masa, balance de energía, relaciones de equilibrios); $g(x, y) \leq 0$ son las p restricciones de desigualdad (por ejemplo, especificaciones de pureza en productos destilados, regulaciones ambientales, restricciones de factibilidad en sistemas recuperadores de calor, restricciones lógicas) y $f(x, y)$ es la función objetivo (por ejemplo, costo total anual, criterios termodinámicos, beneficios).

Observación 1. Las variables enteras y , con cotas superior e inferior dada,

$$y^L \leq y \leq y^U$$

pueden ser expresadas como variables binarias denotadas por z , mediante la siguiente fórmula:

$$y = y^L + z_1 + 2z_2 + 4z_3 + \dots + 2^{N-1}z_N,$$

donde N es el número mínimo de variables binarias necesarias. Este número está dado por

$$N = 1 + INT \left\{ \frac{\log(y^U - y^L)}{\log 2} \right\}$$

donde INT es la función que trunca este argumento real en un valor entero.

La Formulación mostrada en (2.1.1) puede ser escrita en términos de variables binarias:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x, y) \\ x, y & \\ \text{s.a} & h(x, y) = 0 \\ & g(x, y) \leq 0 \\ & x \in X \subseteq \mathbb{R}^n \\ & y \in Y \subseteq \{0, 1\}^q \end{array} \quad (2.1.2)$$

donde y ahora es un vector de q variables binarias (por ejemplo, si existe una unidad de proceso ($y_1 = 1$) o si no existe ($y_1 = 0$)).

2.1.3. Dificultades de los MINLP

Tratar con modelos de optimización no lineal entero mixto de la forma (2.1.1) y (2.1.2) presenta dos grandes dificultades. Estas dificultades están asociadas con la naturaleza del problema, el dominio combinatorio (dominio de y) y el dominio continuo (dominio de x). Como el número de variables binarias y en el problema mostrado en (2.1.2) incrementa, nos enfrentamos con un problema combinatorio grande, y los resultados de análisis complejo caracterizan al problema MINLP como NP-completo (Nemhauser y Wolsey, 1998). Al mismo tiempo, las no linealidades del problema MINLP son en general no convexas lo cual implica una existencia potencial de soluciones locales múltiples. La determinación de una solución global para los problemas MINLP no convexas es además un problema NP-difícil (Murty y Kadadi, 1987), incluso, la optimización global de problemas de programación con restricciones no lineales es NP-difícil (Parpalos y Schnitger, 1988), y cada problema cuadrático con un autovector negativo es NP-difícil (Parpalos y Vavasis, 1991).

2.2. Algoritmos de MINLP

Una colección representativa de algoritmos desarrollados para resolver modelos MINLP de la forma (2.1.2) en orden cronológico de desarrollo, es la siguiente [falta referencia]:

1. **Descomposición Generalizada de Benders** (Generalized Benders Decomposition, GBD) (Geoffrion, 1972; Paules y Floudas, 1989; Floudas et al., 1989)

En el trabajo pionero de Geoffrion (1972) sobre Descomposición Generalizada de Benders, se crean dos secuencias de cotas superiores e inferiores que se van actualizando y convergen a ϵ en un número finito de iteraciones. La cota superior corresponde a resolver subproblemas en la variable x , fijando las variables y , mientras que la cota inferior se basa en la teoría de dualidad.

2. **Aproximación de Ramificación y Acotamiento** (Branch and Bound, BB) (Beale, 1977; Gupta, 1980; Ostrovsky et al., 1990; Borchers y Michael, 1991);

La aproximación de Ramificación y Acotamiento comienza resolviendo la relajación continua de un MINLP y subsecuentemente ejecuta una enumeración implícita donde un subconjunto de variables binarias son fijadas en un nodo. La cota inferior corresponde a la solución del problema de programación no lineal (Linear Programming Program, NLP) en cada nodo, esto es usado para expandir el nodo con la cota inferior mas pequeña o usado para eliminar nodos que exceden la cota superior actual. Si la relajación continua NLP de el MINLP tiene soluciones binarias para la variable y , entonces el algoritmo BB terminará en un nodo. Con un argumento similar, si resulta un resultado estrecho para el NLP relajado en el primer nodo del árbol, entonces el número de nodos que podría necesitarse puede ser bajo. En otro caso, las relajaciones NLP relajadas pueden resultar en un número muy grande de subproblemas a resolver.

3. **Aproximación Exterior** (Outer Aproximation, OA) (Duran y Grossmann, 1986a);

El algoritmo de Aproximación exterior aborda problemas con restricciones de desigualdad, y crea secuencias de cotas superiores e inferiores como el GBD, pero la diferencia es que tiene características distintas, este trabaja usando información primal, mediante la solución de los problemas para las cotas superiores, de manera que se linealiza el objetivo y las restricciones, alrededor de un punto. Las cotas inferiores para OA son basadas sobre la acumulación de las funciones objetivos y restricciones linealizadas, alrededor de los puntos soluciones primales generados.

4. **Aproximación Exterior con Relajaciones de Igualdad** (Outer Aproximation with Equality Relaxation, OA/ER) (Kocis y Grossmann, 1987);

El OA/ER es una extensión del OA para restricciones no lineales de igualdad, relajando estas a desigualdades de acuerdo con el signo de los multiplicadores asociados.

5. **Aproximación Exterior con Relajaciones de Igualdad y Penalidad Aumentada** (Outer Aproximation whit Equality Relaxation and Augmented Penalty, OA/ER/AP) (Viswanathan y Grossmann, 1990);

El OA/ER/AP introduce una función de penalidad aumentada en los subproblemas de cota inferior de la aproximación OA/ER.

6. **Aproximación Exterior Generalizada** (Generalized Outer Aproximation, GOA) (Fletcher y Leyffer, 1994);

El algoritmo de aproximación exterior generalizado extiende el OA para los problemas de tipo (2.1.1), (2.1.2) e introduce funciones de penalidad exacta.

2.2.1. Descomposición Generalizada de Benders, GBD

Formulación

Geoffrion (1972) Generalizó la propuesta de Benders (1962), explotando la estructura del problema de programación matemática definido en (2.1.2), sujeto a las siguiente condiciones:

- (C1) X es un conjunto no vacío, compacto y convexo y las funciones

$$f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^q \rightarrow \mathbb{R}$$

$$g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^q \rightarrow \mathbb{R}^p$$

son convexas para cada $y \in Y = \{0, 1\}^q$ fijo; mientras que las funciones $h : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^l : \mathbb{R}^m$ son lineales para cada $y \in Y = \{0, 1\}^q$ fijo.

- (C2) El conjunto,

$$Z_y = \{z \in \mathbb{R}^p : h(x, y) = 0, g(x, y) \leq z \text{ para algún } x \in X\}$$

es cerrado para cada $y \in Y$.

- (C3) Para cada $y \in Y \cap V$ fijo, donde

$$V = \{y : h(x, y) = 0, g(x, y) \leq z \text{ para algún } x \in X\}$$

una de las siguientes condiciones se satisface:

- (i) El problema resultante (2.1.2) tiene una solución finita y tiene una solución óptima para las restricciones de igualdad y desigualdad.
- (ii) El problema resultante (2.1.2) es no acotado, esto es, los valores de la función objetivo tienden a $-\infty$.

Observación 2. La formulación mostrada en (2.1.2) es, de hecho, una subclase de problemas para el cual la GBD de Geoffrion (1972) puede ser aplicada. Esto es debido a la especificación de $y = \{0, 1\}$. Geoffrion investigó el caso más general donde $Y \in \mathbb{R}^q$, y definió el vector de variables y como variables “complicadas.”^{em} el sentido de que si fijamos y , entonces

- (a) El problema (2.1.2) puede ser descompuesto en un número de problemas independientes, cada uno implica un subvector de x distinto; ó
- (b) El problema (2.1.2) toma una estructura especial conocida para la cual existen algoritmos eficientes; o
- (c) El problema (2.1.2) se convierte en uno convexo en la variable x . Sin embargo es no convexo en la unión de $x - y$.

En el caso (a) se puede aplicar computación paralela para los problemas independientes. En el caso (b) se puede usar algoritmos especiales (por ejemplo, el algoritmo de redes generalizado). Mientras que en el caso (c) se usa la estructura especial de punto convexo pudiendo observar que se puede emplear la descomposición no convexa de un problema de optimización, Floudas et al., (1989).

Ahora, es justo concentrarse en $Y = \{0, 1\}$ que es de interés en modelos MINLP. Nótese que el análisis incluye las restricciones de igualdad $h(x, y) = 0$ el cual no es tratado explícitamente por Geoffrion (1972).

Observación 3. La condición C2 no es rigurosa y esta se satisface si una de las siguientes se cumple (en adición a C1, C3):

- (i) X es acotado y cerrado y $h(x, y), g(x, y)$ son continuas en x para cada $y \in Y$.
- (ii) Existe un punto Z_y tal que el conjunto

$$\{x \in X : h(x, y) = 0, g(x, y) \leq z_y\}$$

es acotado y no vacío.

Observación 4. El conjunto V representa los valores de y para el cual el problema resultante (2.1.2) es factible con respecto a x para $h(x, y) = 0, g(x, y) \leq 0$. Entonces, la intersección de y y V ($Y \cap V$), representa la proyección de la región factible de (2.1.2) en el espacio y .

Observación 5. La condición C3 se satisface si una restricción de primer orden sujeta para el resultado (2.1.2) después de fijar $y \in Y \cap V$ es válida.

Idea Básica

La idea básica del algoritmo de GBD es la generación, en cada iteración, de una cota inferior y superior en la búsqueda de la solución para el modelo MINLP. La cota superior resulta del *problema primal*, mientras que la cota inferior resulta del *problema máster*. El problema primal correspondiente al problema dado en (2.1.2) resulta de fijar las variables y (es decir, solo en el espacio de x), y su solución provee información acerca de la cota superior y los multiplicadores de Lagrange asociados con las restricciones de igualdad y desigualdad. El problema máster es originado vía teoría de dualidad no lineal, haciendo uso de los multiplicadores de Lagrange obtenidos en el problema primal. Esta solución provee información de la cota inferior, así como también el conjunto de variables fijas y y variables que será usado subsecuentemente en el problema primal. Como las iteraciones proceden, esto da evidencia del no decrecimiento, y que las secuencias convergen en un número finito de iteraciones.

Desarrollo Teórico

■ Problema Primal

En esta sección presentamos el desarrollo teórico del algoritmo Generalizado de Descomposición de Benders GBD. Primeramente se analiza el problema primal para los casos factible e infactible. Seguidamente, se presenta el análisis teórico de la derivación del problema máster.

El problema primal resulta de fijar las variables y en una combinación particular $\{0, 1\}$, la cual denotamos como y^k , donde k representa el contador para la iteración. La formulación de problema primal $P(y^k)$, en la iteración k es:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x, y^k) \\ x & \\ \text{s.a} & h(x, y^k) = 0 \\ & g(x, y^k) \leq 0 \\ & x \in X \subseteq \mathbb{R}^n \end{array} \quad (2.2.1)$$

Observación 6. Para las condiciones C1 y C3(i), la solución del problema primal $P(y^k)$ es una solución global.

Distinguiremos los dos casos de (i) factibilidad primal y (ii) infactibilidad primal y describiremos el análisis para cada uno de ellos por separado.

Caso (i) Factible primal

Si el problema primal en la iteración k es factible, entonces esta provee información sobre x^k , $f(x^k, y^k)$, la cual es la cota superior, y los vectores multiplicadores óptimos λ^k, μ^k para las restricciones de igualdad y desigualdad. Seguidamente, usando esta información, podemos formular la función de Lagrange como:

$$L(x, y, \lambda^k, \mu^k) = f(x, y) + \lambda^k h(x, y) + \mu^k g(x, y)$$

Caso (ii) Infactible primal Si el primal es detectado por el solver NLP como infactible, entonces consideramos las siguientes restricciones

$$h(x, y^k) = 0$$

$$g(x, y^k) \leq 0$$

$$x \in X \subseteq \mathbb{R}^n$$

donde el conjunto X , por ejemplo, consiste en cotas superiores e inferiores en las variables x . Para identificar un punto factible podemos minimizar suma de violaciones de restricción en norma l_1 o norma l_∞ . Un problema de minimización l_1 puede ser formulado como:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & \sum_{i=1}^p \alpha_i \\ x \in X & \\ \text{s.a} & h(x, y^k) = 0 \\ & g_i(x, y^k) = \alpha_i \quad \forall i = 1, 2, \dots, p \\ & \alpha_i \geq 0 \quad \forall i = 1, 2, \dots, p \end{array} \quad (2.2.2)$$

Si $\sum_{i=1}^p \alpha_i = 0$, entonces se ha determinado un punto factible. Adicionalmente nótese que definiendo como:

$$\alpha^+ = \max(0, \alpha)$$

$$g_i^+(x, y^k) = \max[0, g_i(x, y^k)]$$

El problema de minimización l_1 puede ser indicado como

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & \sum_{i=1}^p g_i^+ \\ x \in X & \\ \text{s.a} & h(x, y^k) = 0 \end{array} \quad (2.2.3)$$

Un problema de minimización l_∞ puede ser declarado similarmente como

$$\begin{array}{ll} \text{Min} & \text{Max} \\ x \in X & i = 1, 2, \dots, p \\ \text{s.a} & g_i^+(x, y^k) \\ & h(x, y^k) = 0 \end{array} \quad (2.2.4)$$

Fletcher y Leyffer (1994) formuló un problema de factibilidad general (FP) definido como:

$$\begin{aligned} \text{Min} \\ x \in X \quad & \sum_{i \in I'} w_i g_i^+(x, y^k) \\ \text{s.a} \quad & h(x, y^k) = 0 \\ & g(x, y^k) \leq 0 \quad i \in I \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

Los pesos w_i son no negativos y no todos son ceros. Si $w_i = 1 \quad i \in I'$ obtenemos la minimización l_1 . Para el caso minimización l_∞ existen pesos no negativos en la solución tal que

$$\sum_{i \in I'} w_i = 1$$

y $w_i = 0$ si $g_i(x, y^k)$ no obtiene el máximo valor. La infactibilidad en el problema primal es detectada cuando una solución de (FP) es obtenida y los valores objetivos son mayores que cero.

La solución del problema de factibilidad (FP) provee información de los multiplicadores de Lagrange para las restricciones de igualdad y desigualdad los cuales son denotados como $\bar{\lambda}^k, \bar{\mu}^k$ respectivamente. Entonces, la función de Lagrange resultante para un problema de optimización primal infactible en la iteración k esta definida como

$$\bar{L}(x, y, \bar{\lambda}^k, \bar{\mu}^k) = \bar{\lambda}^k h(x, y) + \bar{\mu}^k g(x, y)$$

Observación 7. Los dos tipos de funciones de Lagrange son definidas dependiendo de si el problema es factible o infactible. Así, la cota superior es obtenida solo del problema factible primal.

■ **Problema Máster**

La derivación del problema máster en el GBD hace uso de la teoría dual no lineal y está caracterizada por las siguientes tres ideas:

- (i) Proyección del problema mostrado en (2.1.2) en el espacio y .

Este puede ser escrito como

$$\begin{aligned} \text{Min} \quad & \inf_x f(x, y) \\ \text{s.a} \quad & h(x, y) = 0 \\ & g(x, y) \leq 0 \\ & x \in X \\ & y \in Y = \{0, 1\}^p \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

Nótese que el ínfimo es con respecto a x y determinado para y , entonces el problema interno puede ser no acotado. Sea esto definido por v_y , entonces

$$\begin{aligned}
v(y) = & \inf_x f(x, y) \\
\text{s.a.} & \quad h(x, y) = 0 \\
& \quad g(x, y) \leq 0 \\
& \quad x \in X
\end{aligned} \tag{2.2.7}$$

Observación 8. $v(y)$ es paramétrica en la variable y y por lo tanto la definición corresponde al valor óptimo del problema dado en (2.1.2) fijando las variables y (es decir, el problema primal $P(y^k)$ para $y = y^k$).

Ahora, definimos también el conjunto V como

$$V = \{y : h(x, y) = 0, g(x, y) \leq 0 \quad \text{para algunos } x \in X\} \tag{2.2.8}$$

Entonces, el problema (2.2.6) puede ser escrito como

$$\begin{aligned}
\min_y & \quad v(y) \\
\text{s.a.} & \quad y \in Y \cap V
\end{aligned} \tag{2.2.9}$$

donde $v(y)$ y V es definido por (2.2.7) y (2.2.8), respectivamente.

Observación 9. El problema (2.2.9) es la proyección del problema (2.1.2) en el espacio y .

Teniendo definida la proyección del problema (2.1.1) en el espacio y , ahora podemos declarar el siguiente resultado de Geoffrion (1972).

Teorema 1. (Proyección)

- (i) Si (x^k, y^k) es óptimo en el problema mostrado en (2.1.2) entonces y^* es óptimo en el problema (2.2.9)
- (ii) Si el problema (2.1.1) es infactible o tiene solución no acotada, entonces lo mismo es cierto para el problema (2.2.9) y viceversa.

(ii) Representación dual de V .

La representación dual de V será definida en términos de la intersección de una colección de regiones que están contenidos en V y es descrita en el siguiente teorema de Geoffrion (1972).

Teorema 2. Asumiendo las condiciones C1 y C2, un punto $y \in Y$ pertenece solo al conjunto V si y solo si este satisface el sistema

$$\begin{aligned}
0 \geq & \inf_x \bar{L}(x, y, \bar{\lambda}, \bar{\mu}), \forall \bar{\lambda}, \bar{\mu} \in \Lambda \\
\text{Donde } \Lambda = & \left\{ \bar{\lambda} \in \mathbb{R}^m, \bar{\mu} \in \mathbb{R}^p : \bar{\mu} \geq 0, \sum_{i=1}^p \bar{\mu}_i = 1 \right\}
\end{aligned} \tag{2.2.10}$$

- (iii) Representación dual la de proyección del Problema (2.1.1) en el espacio y . La representación dual de $v(y)$ la haremos en términos del punto ínfimo de una colección de funciones que lo soportan. La representación se describe en el siguiente teorema gracias a Geoffrion (1972)

Teorema 3. (Dual de $V(y)$)

$$v(y) = \left[\begin{array}{l} \inf_x f(x, y) \\ \text{s.a. } h(x, y) = 0 \\ g(x, y) \leq 0 \\ x \in X \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \sup_{\lambda, \mu \geq 0} \inf_{x \in X} L(x, y, \lambda, \mu) \end{array} \right] \forall y \in Y \cap V \quad (2.2.11)$$

donde $L(x, y, \lambda, \mu) = f(x, y) + \lambda^t h(x, y) + \mu^k g(x, y)$

Observación 10. La igualdad de $v(y)$ y su dual se debe a que el teorema de dualidad fuerte es satisfecho debido a las condiciones C1, C2 y C3.

Sustituyendo (2.2.11) para $v(y)$ y (2.2.10) por $y \in Y \cap V$ en el problema (2.2.9), el cual es equivalente a (2.2.6) obtenemos

$$\begin{array}{l} \min_{y \in Y} \sup_{\lambda, \mu \geq 0} \inf_{x \in X} L(x, y, \lambda, \mu) \\ \text{s.a. } 0 \geq \inf_{x \in X} \bar{L}(x, y, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) \end{array} \quad (2.2.12)$$

Usando la definición de supremo como la menor cota superior e introduciendo el escalar μ_B obtenemos:

$$(M) \left[\begin{array}{l} \min_{y \in Y, \mu_B} \mu_B \\ \text{s.a. } \mu_B \geq \inf_{x \in X} L(x, y, \lambda, \mu), \quad \forall \lambda, \mu \geq 0 \\ 0 \geq \inf_{x \in X} \bar{L}(x, y, \bar{\lambda}, \bar{\mu}), \quad \forall (\bar{\lambda}, \bar{\mu}) \in \Lambda \end{array} \right] \quad (2.2.13)$$

El cual es llamado problema máster y denotado por (M).

Observación 11. En término de funciones de soportes tenemos que se cumple lo siguiente:

$$\begin{array}{l} \xi(y; \lambda, \mu) = \min_{x \in X} L(x, y, \lambda, \mu), \quad \forall \lambda, \mu \geq 0 \\ \bar{\xi}(y; \lambda, \mu) = \min_{x \in X} \bar{L}(x, y, \bar{\lambda}, \bar{\mu}), \quad \forall (\bar{\lambda}, \bar{\mu}) \in \Lambda \end{array} \quad (2.2.14)$$

Algoritmo GBD

En la sección previa discutimos sobre el problema primal y el problema máster del GBD. Comenzamos con un problema primal de programación lineal o no lineal para resolver mediante un algoritmo respectivo para estos problemas. El problema máster, sin embargo, consiste en problemas de optimización externos o internos, y los enfoques para resolver este problema se describen a continuación:

- **Solución del problema máster**

El problema máster tiene como restricción dos problemas de optimización en su interior (si el problema primal es factible o infactible) en los cuales es necesario considerar para todo λ y $\mu \geq 0$ (factible primal) y todo $(\bar{\lambda}, \bar{\mu}) \in \Lambda$ (infactible primal) esto implica que el problema máster tiene un número muy grande de restricciones.

El enfoque más natural para resolver el problema máster es la relajación (Geoffrion,1972). La idea básica del enfoque de relajación consiste en lo siguiente:

- (i) Ignorar algunas de las restricciones que corresponden a los problemas de optimización interiores (por ejemplo, considerar los problemas de optimización interiores que resultan de fijar los multiplicadores (λ^1, μ^1) o $(\bar{\lambda}^1, \bar{\mu}^1)$).
- (ii) Resolver el problema máster relajado y chequear si la solución resultante satisface todas las restricciones ignoradas. Sino, entonces generar y adjuntar para el problema máster relajado una o mas de las restricciones violadas y resolver el nuevo problema máster relajado.
- (iii) Continuar hasta que un problema máster satisfaga todas las restricciones ignoradas, lo que implica que la solución del problema máster ha sido obtenida o solo si se indica otro criterio de terminación adicional, donde la solución hallada sea aceptable.

- **Algoritmo General de GBD**

Asumiendo que el problema dado en (2.1.2) tiene una solución óptima de valor finito, Geoffrion (1972) presentamos el siguiente algoritmo de GBD:

Paso 1 Sea un punto inicial $y^1 \in Y \cap V$. Resolvemos el problema primal resultante $P(y^1)$ y obtenemos una solución primal óptima x^1 y vectores multiplicadores óptimos λ^1, μ^1 . Asumimos que se puede hallar, la función soporte $\xi(y; \lambda^1, \mu^1)$ para los multiplicados obtenidos. Inicializar el contador $k = 1$ para factible y $l = 1$ para infactible y la cota superior actual $UBD = v(y^1)$. Seleccionar una tolerancia $\epsilon \geq 0$.

Paso 2 Resolvemos problema máster relajado (RM). Sea $(\hat{y}, \hat{\mu}_B)$ una solución óptima del RM. $\hat{\mu}_B$ es una cota inferior para el problema mostrado en (2.1.2), que es, la cota inferior actual $LBD = \hat{\mu}_B$. Si $UBD - LBD \leq \epsilon$, terminar.

Paso 3 Resolver el problema primal para $y = \hat{y}$, que es el problema $P(\hat{y})$, distinguiendo dos casos; factible e infactible primal:

Paso 3a Factible Primal $P(\hat{y})$

El primal tiene $v(\hat{y})$ finito con una solución óptima \hat{x} y vectores multiplicadores óptimos $\hat{\lambda}, \hat{\mu}$. Actualizar la cota superior $UBD = \min\{UBD, v(\hat{y})\}$. Si $UBD - LBD \leq \epsilon$, terminar. Sino, hacer $k = k + 1, \lambda^k = \hat{\lambda}$, y $\mu^k = \hat{\mu}$ e ir al paso 2, asumiendo que podemos determinar la función soporte $\xi(y; \lambda^{k+1}, \mu^{k+1})$.

Paso 3b Infactible Primal $P(\hat{y})$ El primal no tiene solución factible de $y = \hat{y}$. Resolver un problema de factibilidad. Hacer $l = l + 1, \bar{y}^l = \hat{y}$ y $\bar{\mu}^l = \hat{\mu}$ e ir al paso 2, asumiendo que podemos determinar la función soporte $\xi(y; \lambda^{k+1}, \mu^{k+1})$.

▪ **Convergencia Finita de GBD**

Teorema 4. Si C1, C2 y C3 se cumplen, y Y es un conjunto discreto, entonces el algoritmo GBD termina en un número finito de iteraciones para cualquier $\epsilon > 0$ dado y para cada $\epsilon = 0$.

En este caso, la convergencia exacta puede ser obtenida en un número finito de iteraciones.

2.2.2. Algoritmo de Aproximación Exterior, OA

Formulación

Duran y Grossmann (1986a; 1986b) propusieron un algoritmo de Aproximación Exterior para la siguiente clase de problemas MINLP:

$$\begin{aligned}
 & \underset{x, y}{\text{Min}} && c^t y + f(x) \\
 & \text{s.a} && g(x) + B y \leq 0 \\
 & && x \in X = \{x : x \in \mathbb{R}^n, A_1 x \leq a_1\} \subseteq \mathbb{R}^n \\
 & && y \in Y = \{y : y \in \{0, 1\}^q, A_2 y \leq a_2\}
 \end{aligned} \tag{2.2.15}$$

sobre las siguientes condiciones:

(C1) X es un conjunto no vacío, compacto y convexo y las funciones

$$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$$

$$g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$$

son convexas en x .

(C2) f y g son continuamente diferenciables.

(C3) Una restricción calificada (Slater's) es tomada de la solución de cada problema de programación no lineal resultante del problema (2.2.15) fijando las variables y .

Desarrollo Teórico

■ Problema Primal

El problema primal correspondiente a fijar las variables y en el problema dado en (2.2.15) para una combinación binaria, la cual es denotada como y^k , es:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & c^t y^k + f(x) \\ x, y & \\ \text{s.a} & g(x) + B y^k \leq 0 \\ & x \in X = \{x : x \in \mathbb{R}^n, A_1 x \leq a_1\} \end{array} \quad (2.2.16)$$

dependiendo del punto y^k fijado, el problema primal puede ser factible o infactible y estos dos casos son analizados a continuación:

Caso(i) Factible Primal

Si el primal es factible en la iteración k , entonces esta solución provee información del óptimo x^k , $f(x^k)$, y por consiguiente la cota superior actual se define como; $UBD = c^t y^k + f(x^k)$. Usando la información de x^k , podemos subsecuentemente linealizar alrededor de x_k , las funciones convexas $f(x)$ y $g(x)$ satisfaciendo las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} f(x) &\geq f(x^k) + \nabla f(x^k)(x - x^k), & \forall x^k \in X \\ g(x) &\geq g(x^k) + \nabla g(x^k)(x - x^k), & \forall x^k \in X \end{aligned}$$

debido a la convexidad de $f(x)$ y $g(x)$.

Caso(ii) Infactible Primal

Si el primal es infactible en la iteración k , entonces necesitamos considerar la identificación de un punto factible por observación del conjunto de restricciones:

$$g(x) + B y^k \leq 0$$

y formulando un problema factible, similar al realizado en el GBD (Ver Sección 2.2.1).

Por ejemplo, si queremos usar la minimización l_1 , tenemos:

$$\begin{array}{ll}
\text{Minimizar} & \\
x \in X & \\
\text{s.a} & \sum_{j=1}^p a_j \\
& g_j(x) + By^k \leq a_j \quad \forall j = 1, 2, \dots, p \\
& a_j \geq 0
\end{array} \quad (2.2.17)$$

Estas soluciones será provista sobre el punto base x^l correspondiente, podremos linealizar las restricciones:

$$g(x) \geq g(x^l) + \nabla g(x^l)(x - x^l), \quad \forall x^l$$

donde el lado lateral derecho es un soporte lineal válido.

■ Problema Máster

La derivación del problema máster en la aproximación OA involucra las siguientes ideas claves:

• Proyección del problema (2.2.15) en el espacio y :

El problema dado en (2.2.15) puede ser escrito como:

$$\begin{array}{ll}
\text{Min} & \inf_x c^t y + f(x) \\
\text{s.a} & g(x) + By \leq 0 \\
& x \in X \\
& y \in Y
\end{array} \quad (2.2.18)$$

El problema interior es escrito como ínfimo con respecto a x para cubrir el caso de soluciones no acotadas para un y fijo. Además, $C^t y$ puede ser tomada fuera de el ínfimo puesto que este es independiente de x .

Ahora, definamos $v(y)$ como:

$$\begin{array}{ll}
v(y) = & c^t y + \inf_x f(x) \\
\text{s.a} & g(x) + By \leq 0 \\
& bx \in X
\end{array} \quad (2.2.19)$$

Observación 12. $v(y)$ es paramétrica en el vector y y corresponden para el valor óptimo del problema mostrado en (2.2.15) que resulta de fijar las variables y (es decir, el problema primal $P(y^k)$). Ahora, definamos el conjunto V de y del cual existen soluciones factibles en las variables x como:

$$V = \{y : g(x) + By \leq 0, \text{ para algún } x \in X\}$$

Entonces, el problema (2.2.15) puede ser escrito como:

$$\begin{array}{ll}
\text{Minimizar} & \\
y & v(y) \\
\text{s.a} & y \in Y \cap V
\end{array} \quad (2.2.20)$$

Observación 13. El problema mostrado en (2.2.20) es la proyección del problema (2.2.15) en el espacio y . La proyección necesita satisfacer los requerimientos de factibilidad y esto es representado en el problema (2.2.20) por imposición de $y \in Y \cap V$.

Observación 14. Nótese que se puede reemplazar el ínfimo con respecto a $x \in X$ con el mínimo con respecto a $x \in X$, ya que de $y \in Y \cap V$, la existencia de soluciones en x se cumple debido a la característica compacta de X . Esto excluye la posibilidad de soluciones no acotadas para el problema interior que se obtiene de fijar las $y \in Y \cap V$.

Observación 15. La dificultad que se presenta al resolver el problema (2.2.20) se origina porque tanto V y $v(y)$ son dadas implícitamente. Para superar esta dificultad, Duran y Grossmann (1986a) consideran la linealización exterior para $v(y)$ y una representación particular de V .

- **Aproximación exterior de $v(y)$**

La aproximación exterior de $v(y)$ vendrá dada en términos de la intersección de un conjunto finito de funciones soportes. Estas funciones soportes corresponden para linealizaciones de $f(x)$ y $g(x)$ para todo $x^k \in X$. Entonces las siguientes condiciones se satisfacen:

$$f(x) \geq f(x^k) + \nabla f(x^k)(x - x^k), \quad \forall x^k \in X$$

$$g(x) \geq g(x^k) + \nabla g(x^k)(x - x^k), \quad \forall x^k \in X$$

Debido a que las afirmaciones de convexidad, continuidad y diferenciabilidad, $\nabla f(x^k)$ representa el vector n -gradiente de $f(x)$ y $\nabla g(x^k)$ es la matrix Jacobiano ($n \times p$) evaluada en $x^k \in X$.

Observación 16. Las funciones soportes son lineales en x y como resultado $v(y)$ será un problema de Programación Lineal Entero (MILP, por sus siglas en inglés).

Las restricción de calificación supuesta, cuyo apoyo está en la solución de cada problema primal con y fijas, acoplado con la convexidad de $f(x)$ y $g(x)$, implica el siguiente lema.

Lema 1.

$$v(y) = \left[\begin{array}{l} \text{Min} \\ x \quad c^t y + f(x) \\ \text{s.a} \quad g(x) + By \leq 0 \\ x \in X \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Min} \\ x \quad c^t y + f(x^k) + \nabla f(x^k)(x - x^k) \\ \text{s.a} \quad 0 \geq g(x^k) + \nabla g(x^k)(x - x^k) + By \\ x \in X \end{array} \right] \quad (2.2.21)$$

Observación 17. Esto es suficiente para incluir las linealizaciones de las restricciones que son activas en (x^k, y^k) , implicando que serán necesarias menos restricciones para el problema máster.

Entonces, por sustitución de $v(y)$ por lo afirmado en el Lema (2.2.21) para el problema de proyección (2.2.20) tenemos:

$$\begin{array}{l} \text{Min} \quad \text{Min} \\ x \quad y \quad c^t y + f(x^k) + \nabla f(x^k)(x - x^k) \\ \text{s.a} \quad 0 \geq g(x^k) + \nabla g(x^k)(x - x^k) + By \\ x \in X \\ y \in Y \cap V \end{array} \quad (2.2.22)$$

Combinando los operadores *Min* e introduciendo un escalar μ_{oa} , en el problema dado en (2.2.22), podemos escribirlo de la siguiente forma:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Minimizar} \\ x, y, \mu_{oa} \quad c^t y + \mu_{oa} \\ \text{s.a} \quad \mu_{oa} \geq f(x^k) + \nabla f(x^k)(x - x^k) + By, \quad \forall k \in F \\ \quad \quad \quad 0 \geq g(x^k) + \nabla g(x^k)(x - x^k) + By \end{array} \right\} \forall k \in F \quad (2.2.23)$$

$$x \in X$$

$$y \in Y \cap V$$

donde $F = \{k : x^k \text{ es una solución factible para el primal } P(y^k)\}$.

Duran y Grossmann (1986a) hicieron una supocisión adicional que permite reemplazar a $y \in Y \cap V$ con $y \in Y$ usando como argumento que las restricciones $y \in Y \cap V$ están incluidas en las linealizaciones del problema mostrado en (2.2.23), suministrando los cortes enteros apropiados, descartando la posibilidad de la generación de las mismas combinaciones enteras. Subsiguientemente, definieron el problema master del OA como:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Min} \\ x, y, \mu_{oa} \quad c^t y + \mu_{oa} \\ \text{s.a} \quad \mu_{oa} \geq f(x^k) + \nabla f(x^k)(x - x^k), \quad \forall k \in F \\ \quad \quad \quad 0 \geq g(x^k) + \nabla g(x^k)(x - x^k) + By \end{array} \right\} \forall k \in F \quad (2.2.24)$$

$$x \in X$$

$$y \in Y$$

$$\sum_{l \in B^k} y_l^k - \sum_{l \in NB^k} y_l^k \leq |B^k| - 1, \quad k \in K$$

Observación 18. El problema máster mostrado en (2.2.24) es un problema de programación lineal entero mixto ya que tiene función objetivo y restricciones lineales, variables continuas (x, μ_{oa}) y variables binarias (y) . Por consiguiente, se puede resolver con algoritmos estándar de ramificación y acotamiento.

Observación 19. El problema máster consiste en soportes lineales válidos y por lo tanto relajaciones de funciones no lineales, para todo punto x^k que resultan de fijar $y = y^k \in Y$ como el indicado por el problema (2.2.24). Como resultado, este representa una relajación del modelo MINLP original (2.2.15).

Observación 20. Lo mostrado en la Observación 19, no es eficiente para resolver el problema máster (2.2.24) directamente. Se necesita conocer todos los puntos factibles x^k lo que implica que debemos resolver todos los problemas primales $P(y^k)$, $y \in Y$. En lugar de eso, Duran y Grossmann (1986a) proponen una relajación del problema máster, el cual será discutido en la Sección 2.2.3.

Algoritmo OA

Paso 1 Si un punto inicial $y^1 \in Y \cap V$ está disponible. Resolvemos el problema primal resultante $P(y^1)$ y obtenemos una solución óptima x^1 . Definimos $k = 1$ y la cota superior actual $UBD = P(y^1) = v(y^1)$.

Paso 2 Resolvemos el modelo dado en (2.2.24). Sea (y^{k+1}, μ_{oa}^k) una solución óptima del problema máster, donde $\mu_{oa}^k + c^t g^{k+1}$ es la nueva cota superior actual del problema (2.2.15), $LBD = \mu_{oa}^k + c^t y^{k+1}$ y y^{k+1} es el próximo punto a ser considerado en el problema primal $P(y^{k+1})$. Si $UBD - LBD \leq \epsilon$, parar. Sino ir al Paso 1. Si el problema máster no tiene solución factible, entonces terminar. La solución óptima está dada por la cota superior y está asociada a los vectores (x, y) .

Observación 21. Para el paso 1 del algoritmo OA, en lugar de tener un $y^1 \in Y$ ó $Y \cap V$, podríamos resolver la relajación continua del problema (2.2.15) (esto es, tomar $0 \leq y \leq 1$) y el conjunto de variables y para valores enteros. Esta vía de solución podría dar que el resultado primal sea infactible, lo que implica que para el algoritmo OA, podríamos eliminar dicha combinación infactible en el problema

máster de la primera iteración y continuar sobre otro y hallado. Sin embargo, en este punto no hay información para el máster relajado que pueda ser utilizado como punto de linealización para este caso, aparte de corte entero. Fletcher y Leyffer (1994) probó que para el caso de problemas infactibles primales, las siguientes restricciones, son soportes lineales para este caso

$$0 \geq g(x^l) + \nabla g(x^l)(x - x^l) + By, \quad j \in \bar{F}$$

donde $\bar{F} = \{j : P(y^l) \text{ es infactible, y } x^l \text{ resuelve el problema de infactibilidad}\}$ incorporando lo anterior en el problema máster, entonces este toma la forma:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Minimizar} \\ x, y, \mu_{oa} \\ \text{s.a} \end{array} \right\} \left. \begin{array}{l} c^t y + \mu_{oa} \\ \mu_{oa} \geq f(x^k) + \nabla f(x^k)(x - x^k), \quad \forall k \in F \\ \mu_{oa} \geq g(x^k) + \nabla g(x^k)(x - x^k) + By \\ 0 \geq g(x^l) + \nabla g(x^l)(x - x^l) + By, \quad \forall l \in \bar{F} \end{array} \right\} \forall k \in F \quad (2.2.25)$$

$$\begin{array}{l} x \in X \\ y \in Y \end{array}$$

▪ **Convergencia Finita de OA**

Para el problema dado en (2.2.15), Duran y Grossmann (1986a) muestran la convergencia finita del algoritmo OA y se enuncia de la siguiente forma:

“Si las condiciones C1,C2,C3 se satisfacen y Y es un conjunto discreto, entonces el OA termina en un número finito de iteraciones.”

El punto central en la programación algorítmica OA es la solución del problema máster. La forma más natural para resolver el problema máster es usando relajación; esto es, considerar en cada iteración soportes lineales de la función objetivo y las restricciones alrededor de todos los puntos previamente linealizados. Este método, en cada iteración obtiene un nuevo conjunto de restricciones lineales de soporte las cuales mejoran las relajaciones y por consiguiente la cota inferior.

2.2.3. Algoritmo de Aproximación Exterior con Relajaciones de Igualdad, OA/ER

Formulación

Para manejar las restricciones de igualdad no lineales de la forma $h(x) = 0$, Kocis y Grossmann (1987) propusieron el algoritmo de aproximación exterior con relajaciones de igualdad para la siguiente clase de problemas MINLP:

$$\begin{aligned}
 & \text{Minimizar} && c^t y + f(x) \\
 & x, y && h(x) = 0 \\
 & \text{s.a} && g(x) \leq 0 \\
 & && Cx + By \leq 0
 \end{aligned} \tag{2.2.26}$$

$$\begin{aligned}
 x \in X &= \{x : x \in \mathbb{R}^n, A_1 x \leq a_1\} \subseteq \mathbb{R}^n \\
 y \in Y &= \{y : y \in \{0, 1\}^q, A_2 y \leq a_2\}
 \end{aligned}$$

sobre las siguientes condiciones:

(C1) X es un conjunto no vacío, compacto y convexo y las funciones satisfacen las siguientes condiciones:

$f(x)$ es convexa en x

$g_i(x)$ $i \in I_{IN} = \{i : g_i(x) < 0\}$, son convexas en x

$g_i(x)$ $i \in I_{EQ} = \{i : g_i(x) = 0\}$, son cuasiconvexas en x y $Th(x)$, son cuasiconvexas en x .

donde T es una matriz diagonal ($m \times m$) con elementos t_{ii}

$$t_{ii} = \begin{cases} -1 & \text{si } \lambda_i < 0 \\ 1 & \text{si } \lambda_i > 0 \\ 0 & \text{si } \lambda_i = 0 \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, m. \tag{2.2.27}$$

y λ_i son los multiplicadores de Lagrange asociados con la m -ésima restricción.

(C2) f, h y g son continuamente diferenciables.

(C3) Una restricción calificada es obtenida de la solución de cada problema de programación no lineal resultante del problema (2.2.25) al fijar las variables y .

Observación 22. Las ecuaciones no lineales $h(x) = 0$ y el conjunto de restricciones de igualdad las cuales son incluidas en $h(x) = 0$ corresponden a balance de energía y masa y ecuaciones de diseño para sistemas de procesos químicos y estas pueden ser de gran número. Ya que las restricciones de igualdad no pueden ser tratadas por el algoritmo OA, alguna de las siguientes alternativas puede ser ejecutadas:

- (i) Eliminación algebraica de igualdades no lineales:
- (ii) Eliminación numérica de las igualdades no lineales;
- (iii) Relajación de las igualdades no lineales a desigualdades.

La alternativa (iii) forma la base para el algoritmo OA/ER.

Desarrollo Teórico

En vista de que la diferencia entre el algoritmo OA y OA/ER se basa en la relajación de las restricciones no lineales de igualdad a desigualdad, presentaremos entonces resultados de la relajación y del problema máster del OA/ER.

Proposición 2.2.1. Si las condiciones C1, C3 son satisfechas, entonces al fijar $y = y^k$ en el problema dado en (2.2.26) es equivalente a el siguiente problema:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Min} & c^t y^k + f(x) \\
 x & \\
 \text{s.a} & T^k h(x) \leq 0 \\
 & g(x) \leq 0 \\
 & Cx + By^k \leq d \\
 & x \in X = \{x : x \in \mathbb{R}^n, A_1 x \leq a_1\} \subseteq \mathbb{R}^n
 \end{array} \tag{2.2.28}$$

donde T es una matriz diagonal ($m \times m$) con elementos t_{ii}^k definido como

$$t_{ii}^k = \begin{cases} -1 & \text{si } \lambda_i^k < 0 \\ 1 & \text{si } \lambda_i^k > 0 \\ 0 & \text{si } \lambda_i^k = 0 \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, m. \tag{2.2.29}$$

Observación 23. Sobre las condiciones antes mencionadas, los problemas primales mostrados en (2.2.26) y (2.2.28) tienen una única solución local la cual es de hecho la solución global respectiva a las condiciones KKT y ambas son necesarias y suficientes.

Observación 24. La relajación de las restricciones no lineales de igualdad pueden ser representadas por un conjunto aumentado de restricciones de desigualdad:

$$\begin{array}{l}
 T^k h(x) \leq 0 \\
 g(x) \leq 0
 \end{array}$$

en la cual, los principios de OA descritos en la Sección (2.2.2) pueden ser aplicados.

■ Problema Máster

El problema máster del algoritmo OA/ER es esencialmente el mismo que el problema (2.2.24) descrito en la Sección 2.2.3 con la diferencia que el vector de restricciones de desigualdad será aumentado por adición de las restricciones relajadas de igualdad:

$$T^k h(x) \leq 0$$

La forma general del problema máster relajado para el algoritmo OA/ER es:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Min} \\ x, y, \mu_{oa} \\ \text{s.a} \end{array} \right\} \begin{array}{l} c^t y + \mu_{oa} \\ \mu \geq f(x^k) + \nabla f(x^k)(x - x^k) \\ 0 \geq g(x^k) + \nabla g(x^k)(x - x^k) \\ 0 \geq T^k [h(x^k) + \nabla h(x^k)^t(x - x^k)] \end{array} \quad \forall k = 1, 2, \dots, K \quad (2.2.30)$$

$$Cx + By \leq d$$

$$x \in X = \{x : x \in \mathbb{R}^n, A_1 x \leq a_1\} \subseteq \mathbb{R}^n$$

$$y \in Y = \{y : y \in \{0, 1\}^p, A_2 y \leq a_2\}$$

$$\sum_{l \in B^k} y_l^k - \sum_{i \in NB^k} y_i^k \leq |B^k| - 1, \quad k \in K$$

$$Z_L^{k-1} \leq c^t y + \mu \leq Z_U$$

donde Z_L^{k-1} es la cota inferior en la iteración $k - 1$ y Z_U es la cota superior actual y la usada para acelerar la solución del problema dado en (2.2.30) y para tener infactibilidad como el criterio de terminación.

Observación 25. El lado derecho de el primer conjunto de restricciones del problema (2.2.30) puede ser escrito de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \nabla f(x^k)^t x - [\nabla f(x^k)^t x^k - f(x^k)] &= (w^k)^t x - w_o^k \\ \nabla g(x^k)^t x - [\nabla g(x^k)^t x^k - g(x^k)] &= (S^k)x - s^k \\ \nabla h(x^k)^t x - [\nabla h(x^k)^t x^k] &= (R^k)x - \tau^k \end{aligned} \quad (2.2.31)$$

$$\text{donde } w^k = \nabla f(x^k), \quad w_o^k = \nabla f(x^k)^t x^k - f(x^k)$$

$$S^k = \nabla g(x^k), \quad s^k = \nabla g(x^k)^t x^k - g(x^k)$$

$$R^k = \nabla h(x^k), \quad \tau^k = \nabla h(x^k)^t x^k$$

Nótese que $h(x^k) = 0$.

Observación 26. El problema máster relajado como un problema de programación lineal entero MILP puede ser resuelto con un código estándar de ramificación y acotamiento. Nótese que si $f(x), h(x), g(x)$ son lineales en x , entonces tenemos un problema MILP. Como resultado, ya que el máster relajado es también un problema MILP, el OA/ER podría terminar en dos iteraciones.

Algoritmo OA/ER

El algoritmo OA/ER puede ser indicado como sigue:

Paso 1 Dado un punto $y^1 \in Y$ o $y^1 \in Y \cap V$. Resolvemos el problema primal resultante $P(y^1)$ para obtener una solución óptima x^1 y un vector multiplicador λ^1 de las restricciones de igualdad $h(x) = 0$. La cota superior actual $UBD = P(y^1) = v(y^1)$.

Paso 2 Definimos la matriz T^k , $(m \times m)$. Calculamos $w^k, w_o^k, s^k, S^k, R^k, \tau^k$.

Paso 3 Resolver el problema máster relajado dado en (2.2.30) considerando los cambios propuestos en la Observación (25). Si el problema máster relajado es infactible entonces, (y^{k+1}, μ^k) será la solución óptima, donde $Z_L^k = c^t y^{k+1} + \mu^k$ es la nueva cota inferior actual del problema dado en (2.2.26) y y^{k+1} el próximo punto a considerar en el problema primal $P(y^{k+1})$. Si $UBD - Z_L^k \leq \epsilon$, terminar. Sino, ir al Paso 1. Si el problema máster es infactible, terminar.

Observación 27. En el caso de un problema primal infactible, necesitamos resolver un problema de factibilidad. Una formulación de este problema de factibilidad es el siguiente:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Min} & x \quad \alpha \\
 \text{s.a} & h(x) = 0 \\
 & g(x) \leq 0 \\
 & Cx + By^K - \mathbf{d} \leq \alpha \\
 & x \in X = \{x : x \in \mathbb{R}^n, A_1x \leq a_1\} \\
 & \alpha \geq 0
 \end{array} \tag{2.2.32}$$

En el problema mostrado en (2.2.32) mantenemos $h(x) = 0$ y $g(x) \leq 0$ mientras que alrededor de $Cx + By^K - \mathbf{d} \leq 0$ las restricciones serán relajadas por α , la cual es minimizada en la función objetivo.

Observación 28. Siguiendo argumentos similares del OA, el algoritmo OA/ER tiene convergencia global finita si C1,C2,C3 son satisfechas.

Observación 29. Kocis y Grossmann (1989a) sugirieron una formulación alternativa para el problema de factibilidad, en el cual una contribución tipo-penalidad es añadida para las funciones objetivos; esto es:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Min} & x \quad c^t y + f(x) + p\alpha \\
 \text{s.a} & h(x) = 0 \\
 & g(x) \leq \alpha \\
 & Cx + By^K \leq \alpha \\
 & x \in X = \{x : x \in \mathbb{R}^n, A_1x \leq a_1\} \subseteq \mathbb{R}^n
 \end{array} \tag{2.2.33}$$

Si existe una solución factible para el primal y entonces el término de penalidad tenderá a cero. Si el primal no tiene solución factible, entonces la solución del problema (2.2.33) corresponde minimizar la violación máxima de las restricciones de desigualdad (no lineal y lineal en x).

2.3. DICOPT: Paquete de Optimización Continuo Discreto

DICOPT [11], es un programa que resuelve problemas de Programación No Lineal Entero-Mixto (MINLP) que involucra variables binarias o enteras y variables continuas no lineales. DICOPT (DIcrete and COntinuous OPTimizer) fué desarrollado por Viswanathan, J. y Grossmann, I. en el centro de investigaciones en Ingeniería de Diseño de la Universidad de Carnegie Mellon. El programa está basado en una extensión del algoritmo de aproximación exterior con la estrategia relajaciones de igualdad. El algoritmo MINLP dentro de DICOPT resuelve una serie de subproblemas no lineales (NLP) y enteros (MIP) los cuales pueden ser resueltos usando cualquier resolvidor para estos casos disponibles en GAMS.

DICOPT resuelve modelos de la forma (2.1.2) y el mismo está basado en las siguientes ideas

- Aproximación Exterior.
- Relajaciones de Igualdad.
- Penalidad Aumentada.

2.3.1. Algoritmo DICOPT

El algoritmo puede ser indicado de brevemente como sigue:

Paso 1 Resolver el problema NLP relajado del problema MINLP. Si $y^{(0)} = y$ es entero, parar ("Solución óptima hallada"). Sino continuar al paso 2.

Paso 2 Hallar un punto entero $y^{(1)}$ con un problema master MIP que presenta una función de penalidad aumentada para hallar el mínimo sobre la cápsula convexa determinado por el semiespacio en la solución $(x^{(0)}, y^{(0)})$.

Paso 3 Fijar la variable binaria $y = y^{(1)}$ y resolver el NLP resultante. Sea $(x^{(1)}, y^{(1)})$ la solución correspondiente.

Paso 4 Hallar una solución entera $y^{(2)}$ con el problema máster MIP que corresponde a la minimización sobre la intersección de la cápsula convexa y el semiespacio de los puntos KKT en $y^{(0)}$ y $y^{(1)}$.

Paso 5 Repetir el Paso 3 y 4 hasta que haya un incremento en el valor de la función objetivo del NLP (repetiendo el paso 4 de manera que vaya aumentando sobre el conjunto para el cual la minimización es ejecutada con linealizaciones adicionales, es decir, semiespacio en el nuevo punto KKT).

Los problemas de cortes enteros son adjuntados al modelo para suprimir los vectores previamente determinados $y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(K)}$. El algoritmo ha sido extendido para la manipulación de variables enteras en general y variables enteras no lineales surgidas en el modelo.

2.4. Optimización Multiobjetivo

Como su nombre lo sugiere, un Problema de Optimización Multi Objetivo (MOOP) trata de más de un objetivo. Muchos de los problemas de toma de decisiones implican la optimización simultánea de varios objetivos que generalmente presentan conflictos entre sí, es decir, la mejora en uno conduce a un deterioro en el otro; Mientras que en los problemas de optimización de un único objetivo el resultado óptimo deseado está definido claramente (excepto en algunos problemas específicos de optimización multimodal donde se buscan múltiples soluciones), podríamos pensar en extender la idea de encontrar una solución óptima correspondiente por cada objetivo. Sin embargo, esta condición no es necesariamente cierta, ya que en vez de una única solución óptima, contaremos con todo un conjunto de soluciones comprometidas. Debido a la falta de metodologías de búsqueda de soluciones adecuadas para un MOOP, estos han sido tratados, en la mayoría de los casos como un problema de optimización mono-objetivo. Sin embargo, existe un número de diferencias considerables entre los algoritmos de optimización de un único objetivo y multiobjetivos.

2.4.1. Antecedentes Históricos

La optimización multiobjetivo es una parte inherente de la teoría de equilibrio económico y como tal, sus orígenes suelen atribuírsele al famoso tratado de **La Riqueza de las Naciones**, de Adam Smith, el cual data de 1776.

El concepto general de equilibrio económico suele atribuirse a Leon Walras (1834-1910). Dentro de la teoría de equilibrio económico, los trabajos mas relevantes (además del de Walras) son los de Jevons y Menger sobre teoría de la utilidad, así como el trabajo de Edgeworth y Pareto sobre teoría del bienestar. Dichos trabajos abarcan el período de 1874 a 1906.

Una segunda rama que se considera de vital importancia para los orígenes de la optimización multiobjetivo es la inepción de la teoría psicológica de los juegos y la noción de estrategia (para jugar). Los juegos de azar tienen una historia muy

antigua. Sin embargo, es Félix Édouard Justin Émile Borel (1871-1956) el iniciador de la teoría psicológica de juegos y el introductor de la definición formal de estrategias que se basan en analizar la psicología del contrincante. La denominada “teoría de juegos” se remonta a un trabajo de Borel de 1921. Sin embargo, muchos historiadores suelen atribuir los orígenes de la teoría de juegos a un artículo del matemático húngaro John von Neumann que fue presentado oralmente en 1926 y publicado en 1928.

En 1944, John von Neumann y Oskar Morgenstern mencionaron (en su ahora famoso libro sobre teoría de juegos) haberse topado con un problema de optimización en economía que era una “mezcla peculiar y desconcertante de varios problemas en conflicto entre sí” que no podían resolverse con los métodos matemáticos clásicos de optimización.

En 1951, Tjalling C. Koopmans editó un libro llamado *Activity Analysis of Production and Allocation*, donde se usó por primera vez el concepto de vector “eficiente” de una manera significativa.

Los orígenes de los fundamentos matemáticos de la optimización multiobjetivo se remontan al período de 1895 a 1906 en que George Cantor y Felix Hausdorff establecieron los fundamentos de los espacios ordenados de infinitas dimensiones. Cantor también introdujo las clases de equivalencia y estableció el primer conjunto de condiciones suficientes para la existencia de una función de utilidad. Hausdorff también proporcionó el primer ejemplo de un ordenamiento completo. Sin embargo, fue el concepto de *problema del vector máximo* introducido por Harold W. Kuhn y Albert W. Tucker (1951) el que permitió que la optimización multiobjetivo pudiese convertirse en una disciplina matemática propia.

Es bien conocido el hecho de que las famosas condiciones de optimalidad atribuidas a Kuhn y Tucker ya habían sido planteadas y demostradas por W. Karush en una tesis de maestría no publicada que data de 1939. De hecho, se sabe también que F. John publicó también un artículo en 1948 donde plantea y demuestra las mismas condiciones.

Kenneth J. Arrow realizó un trabajo pionero muy importante en los 1950s, usando el concepto de puntos admisibles y planteando su famoso teorema sobre la toma de decisiones multicriterio. Sin embargo, la teoría de optimización multiobjetivo permaneció prácticamente sin avances durante los años 1950. Fue hasta los años 1960 que se consolidaron los fundamentos de esta nueva disciplina y se le tomó en serio por los matemáticos puros cuando Leonid Hurwicz generalizó los resultados de Kuhn y Tucker a espacios vectoriales topológicos. Tal vez el resultado más importante de los años 1950 sea el desarrollo de la Programación por Metas (*Goal Programming*) introducida por Abraham Charnes y William Wager Cooper en 1957.

La aplicación de optimización multiobjetivo a dominios fuera de la economía comenzó con el trabajo de Koopmans (1951) en teoría de la producción y con el trabajo de Marglin (1967) en planeación de recursos hidráulicos. La primera aplicación reportada en la literatura de ingeniería es un artículo de Zadeh publicado

a principios de los años 1960. Sin embargo, el uso de la optimización multiobjetivo solo se generalizó hasta los años 1970.

2.4.2. Definición de un Problema de Optimización Multiobjetivo (MOOP)

Definición 1. Problema de Optimización Multiobjetivo: un MOOP se define como:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar-Maximizar} \quad \mathbf{f}(\mathbf{x}) \\ &\text{Sujeto a} \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \\ &\quad \quad \quad \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \end{aligned} \tag{2.4.1}$$

Donde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{f}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^k$, $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^m$ y $\mathbf{h}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^p$.

Como se puede notar, no tenemos un único objetivo sino un conjunto de k funciones objetivos. La meta es cumplir con todos los objetivos “de la mejor manera posible”. Para los problema de optimización multiobjetivo contamos usualmente con objetivos contradictorios. De manera informal, dos objetivos son contradictorios cuando el decremento en un objetivo (minimización) representa el incremento en el otro (minimización).

El **espacio de soluciones** estará definido por las restricciones mostradas en el problema (2.4.1), el cual denotaremos por D .

Definición 2. (Espacio solución factible y espacio objetivo): el espacio de soluciones factibles D_f se define como el conjunto de soluciones \mathbf{x} que satisface todos los requerimientos del problema:

$$D_f = \{\mathbf{x} \in D : \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0, \quad \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0\} \tag{2.4.2}$$

El **espacio objetivo** es la imagen de D_f , es decir, la región factible del espacio objetivo, y se denota por:

$$Z_f = \mathbf{f}(D_f) = \bigcup_{x \in D_f} \{\mathbf{z} = \mathbf{f}(\mathbf{x})\} \tag{2.4.3}$$

Definición 3. (Soluciones eficientes): Sea \mathbf{x} una solución del espacio de soluciones factibles D_f . \mathbf{x} es una solución eficiente (para un problema donde se asume que todas las funciones objetivos son de minimización) si no existe otra solución $\mathbf{x}' \in D_f$ tal que $\mathbf{f}(\mathbf{x}') \leq \mathbf{f}(\mathbf{x})$ con al menos una igualdad estricta para un elemento del vector $\mathbf{f}(\mathbf{x})$. Si $\mathbf{f}(\mathbf{x}') < \mathbf{f}(\mathbf{x})$ entonces obtenemos soluciones débilmente eficientes.

Las soluciones débilmente eficientes no son tratadas usualmente porque ellas pueden ser dominadas por otras soluciones eficientes. La mejor decisión es buscar la solución más privilegiada entre las soluciones eficientes de un MOOP. En ausencia de cualquier otra información, ninguna de estas soluciones puede ser mejor que otra. Usualmente el tomador de decisiones necesita disponer de información adicional para así identificar la solución “preferida”.

El problema de optimización multiobjetivo consiste en hallar los vectores \mathbf{x} que tengan el “mejor valor” de $\mathbf{f}(\mathbf{x})$. En general, y según ya se ha introducido, no existe un único mejor valor, sino un conjunto de soluciones. Entre éstas, ninguna se puede considerar mejor a las demás si se tienen en cuenta todos los objetivos al mismo tiempo. Este hecho deriva de que puede existir (y generalmente existe) conflicto entre los diferentes objetivos que componen el problema. Por ende, al tratar con MOOP se precisa de un nuevo concepto de “óptimo”.

2.4.3. Dominancia

Cuando resolvemos problemas de optimización multiobjetivo, tenemos que hallar una multitud de soluciones. Solo un subconjunto pequeño de estas soluciones serán de interés. Para una solución de interés, existe una relación de dominancia entre la solución considerada y las demás soluciones. Esto se define como sigue:

Definición 4. (Concepto de Dominancia): Sea $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2$ soluciones del espacio objetivo, \mathbf{x}^1 domina a otra solución \mathbf{x}^2 si se cumplen las siguientes condiciones:

1. La solución \mathbf{x}^1 es al menos mejor que \mathbf{x}^2 para todos los objetivos, ó $\mathbf{f}(\mathbf{x}^1) \not\prec \mathbf{f}(\mathbf{x}^2)$.
2. La solución \mathbf{x}^1 es estrictamente mejor que \mathbf{x}^2 en al menos un objetivo, ó $f_{\bar{j}}(\mathbf{x}^1) < f_{\bar{j}}(\mathbf{x}^2)$ para un \bar{j} fijo, $\bar{j} \in 1, \dots, K$

Si cualquiera de las condiciones es violada, la solución \mathbf{x}^1 no domina a la solución \mathbf{x}^2 . Si \mathbf{x}^1 domina a \mathbf{x}^2 (matemáticamente $\mathbf{x}^1 \preceq \mathbf{x}^2$), se acostumbra todavía a escribir de la siguiente manera:

- \mathbf{x}^2 es dominada por \mathbf{x}^1 ;
- \mathbf{x}^1 no es dominada por \mathbf{x}^2 , ó
- \mathbf{x}^1 es no-inferior para \mathbf{x}^2 .

Ejemplo 1. Consideremos un problema de optimización con dos objetivos y cinco diferentes soluciones. La representación gráfica se en la Figura 2.4.1. Se quiere cumplir con ambas funciones, sin embargo es difícil encontrar una solución que sea mejor con respecto a ambos objetivos, usando la definición de dominancia, podemos decidir cual (es) son la mejor(es) solución(es). Por ejemplo, si comparamos las soluciones

1 y 2, observamos que la solución 1 es mejor que la solución 2 en el objetivo 1 y que también es mejor que la solución 2 en el objetivo 2. Ambas condiciones de la Definición 4, son satisfechas, entonces podemos decir que la solución 1 domina a la solución 2. Ahora comparamos la solución 1 con la solución 5. Aquí, la solución 5 es mejor que la solución 1 en el objetivo 1 y la solución 5 no es peor que la solución 1 en el segundo objetivo. Ambas condiciones de la Definición 4 se satisfacen, por lo que la solución 5 domina a la solución 1.

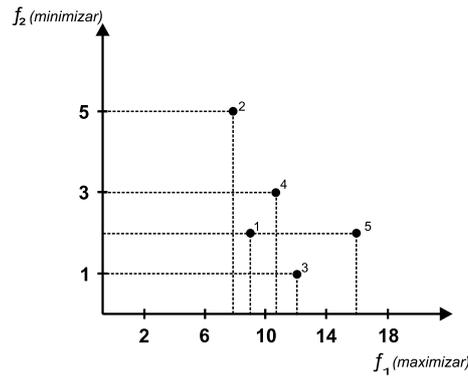


Figura 2.4.1: Soluciones del espacio objetivo del Ejemplo 1

Observación 30. (Propiedades de relación de dominancia)

La Definición 4, define la relación de dominancia entre un par de soluciones. Hay tres posibilidades que se pueden dar entre dos soluciones 1 y 2. (i) solución 1 domina a la solución 2, (ii) la solución 1 es dominada por la solución 2, o (iii) solución 1 y 2 no son dominadas por ninguna otra. Ahora discutimos las diferentes relaciones binarias del operador dominancia.

Reflexiva La relación de dominancia no es reflexiva, así, cualquier solución p no es dominada por sí misma. La segunda condición de la Definición 4 toma en consideración que no se cumpla esta propiedad.

Simétrica La relación de dominancia no es simétrica, porque $p \preceq q$ no implica $q \preceq p$. De hecho, el opuesto es cierto. Esto es, si q domina a p , entonces q no domina a p . La relación de dominancia es asimétrica.

Antisimétrica La relación de dominancia no es simétrica, es decir, es antisimétrica.

Transitiva La relación de Dominancia es transitiva. Esto es porque si $p \preceq q$ y $q \preceq r$ entonces $p \preceq r$.

Hay otras propiedades interesantes que la relación de dominancia posee. Si la solución p no domina a la solución q , esto no implica que q domina a p . Como hemos visto, la relación de dominancia cumple solo la relación de transitividad, por tanto

podemos decir que no es una relación de orden. Más aún la relación de dominancia no es una relación de orden parcial en el sentido general, por no ser reflexiva ni antisimétrica.

Definición 5. (Dominancia Fuerte): Una solución \mathbf{x}^1 domina fuertemente a una solución \mathbf{x}^2 si la solución \mathbf{x}^1 es estrictamente mejor que la solución \mathbf{x}^2 en todos los objetivos.

Definición 6. (Dominancia Débil): Entre un conjunto de soluciones del espacio objetivo Z_f , el conjunto de soluciones Z_f^1 de no dominancia débil es aquel que para cualquier otro miembro de Z_f no es fuertemente dominado.

2.4.4. Optimalidad de Pareto

Continuando con las comparaciones del Ejemplo 1, si comparamos 3 y 5 en la Figura 2.4.1, esta comparación revela un aspecto interesante. Se observa que la solución 5 es mejor que la solución 3 en el objetivo 1, mientras que la solución 1 es peor que la solución 3 en el objetivo 2. Así, la primera condición no se cumple para ninguna de estas dos condiciones. Sin embargo, no podemos concluir que la solución 5 domina a la solución 3 y tampoco podemos decir que la solución 3 domina a la solución 5. Cuando esto sucede, es usual decir que las soluciones 3 y 5 son no dominadas con respecto a cualquier otra. Cuando ambos objetivos se deben satisfacer, no podemos decir cual de las soluciones 3 y 5 es mejor.

Dado un conjunto finito de soluciones, podemos hacer todas las posibles comparaciones de manera par y hallar así las soluciones no dominadas y verificar cuales de las soluciones son no dominadas con respecto a las otras. Finalmente, tendremos un conjunto de soluciones tal que cualquiera dos soluciones no son dominadas por las demás. Este conjunto también tiene otra propiedad. Para cualquier otra solución que no está en dicho conjunto, podremos hallar una solución en el conjunto la cual domina a la que está fuera de dicho conjunto. Dicho conjunto tiene un nombre especial y es llamado el conjunto no dominado, el cual es subconjunto del conjunto de soluciones. En el problema del Ejemplo 1, las soluciones 3 y 5 constituyen el conjunto no dominado del conjunto dado por las 5 soluciones. Definimos el conjunto no dominada como sigue:

Definición 7. (Conjunto no Dominado y Conjunto óptimo de Pareto (Frente de Pareto)): Entre un conjunto de soluciones del espacio objetivo Z_f , el **conjunto no dominado** Z^* es aquel que no es dominado por cualquier otro miembro de Z_f . Si Z_f es el espacio \mathbb{R}^n , el conjunto no dominado Z^* es llamado **conjunto óptimo de Pareto**.

Definición 8. (Optimalidad Global en el sentido Pareto): Una solución \mathbf{x} es globalmente óptima en el sentido Pareto, si no existe cualquier otra solución \mathbf{x}' que sea dominada por la solución \mathbf{x} .

Definición 9. (Dominancia Global) El conjunto de no dominancia de todo el espacio objetivo Z_f es un conjunto de pareto óptimo global.

En muchas ocasiones, el conjunto óptimo de pareto global es llamado simplemente conjunto óptimo de pareto. Como las soluciones de este conjunto no son dominadas por cualquier solución factible del espacio solución, estas son soluciones óptimas del MOOP.

Definición 10. (Optimalidad local en el sentido Pareto): Una solución \mathbf{x} es localmente óptima en el sentido Pareto, si existe un $\delta > 0$ tal que no hay una solución \mathbf{x}' que domine a \mathbf{x} con $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^n \cap B(\mathbf{x}, \delta)$ donde $B(\mathbf{x}, \delta)$ representa una bola de centro \mathbf{x} y radio δ .

Una solución x es localmente óptima en el sentido Pareto y esta es óptima en el sentido Pareto con una restricción en el conjunto \mathbb{R}^n . Esta Definición, es ilustrada en la Figura 2.4.2.

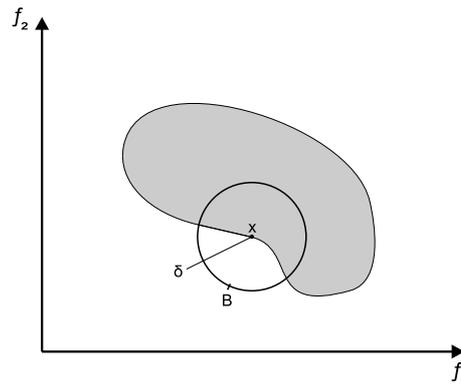


Figura 2.4.2: Optimalidad local en el sentido pareto

Definición 11. (Cono Negativo): Un cono negativo es definido en \mathbb{R}^k de la siguiente forma:

$$C^- = \{\mathbf{x} : \mathbf{f}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^k \text{ y } \mathbf{f}(\mathbf{x}) \leq 0\}$$

Definición 12. (Teorema de Contacto)

Una solución \mathbf{x} es óptima en el sentido Pareto para un problema de optimización multiobjetivo con funciones objetivos de minimización, si:

$$(C^- + \mathbf{x}) \cap Z_f = \{\mathbf{x}\}$$

El uso de este teorema es ilustrado en la Figura 2.4.3

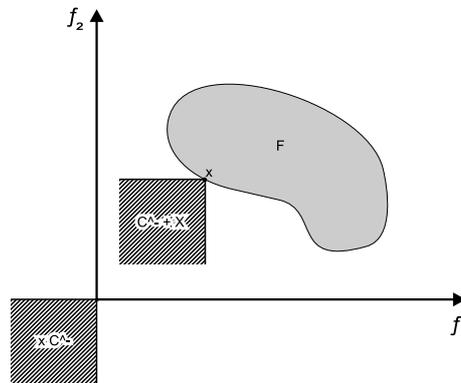


Figura 2.4.3: Teorema de Contacto

Cuando aplicamos la definición de dominancia para un problema donde todas las funciones objetivos se desean minimizar, podríamos definir cuatro áreas. Así podríamos asociar un nivel de preferencia para cada área. La Figura 2.4.4 usa una definición seccionada haciendo uso del cono negativo introducido en la Definición 11 y se extiende a lo largo de todo el espacio.

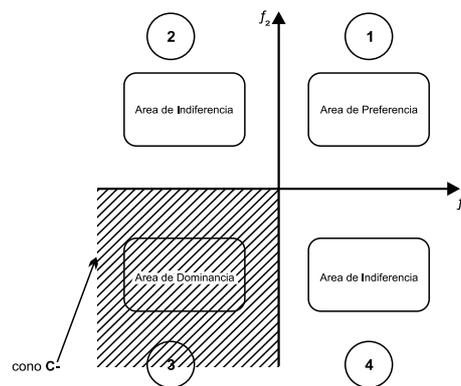


Figura 2.4.4: Nivel de preferencia y relación de Dominancia

Por ejemplo, si en esta figura es centrada una solución A y comparamos esta con una solución B, tendríamos las siguientes posibilidades:

- La solución B perteneciera al area 1, entonces la solución A es preferida a la solución B.
- La solución B perteneciera al area 3, entonces la solución A es dominada por la solución B.
- La solución B perteneciera al area 2 o 4, entonces no podríamos decir si preferiríamos la solución A en comparación a la solución B, o viceversa.

Superficie “Tradeoff” o Frente de Pareto

Imaginemos que tenemos un problema con dos funciones objetivos (minimizar f_1 y minimizar f_2 sobre las restricciones $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0$ y $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0$)

- Denotamos por S el conjunto de valores del par $(f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}))$ cuando \mathbf{x} respecto a las restricciones $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ y $\mathbf{h}(\mathbf{x})$.
- Denotamos por P la superficie tradeoff.

En la Figura 2.4.5 se representa S y P .

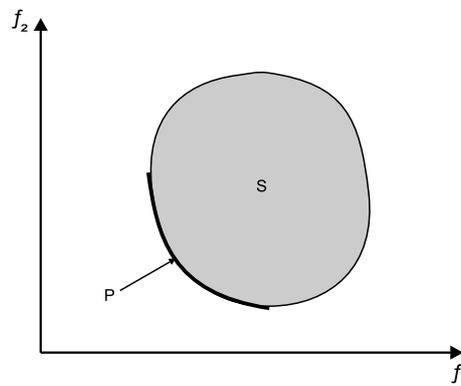


Figura 2.4.5: Representación de una superficie “tradeoff”

Una propiedad notable es que obtenemos ciertas formas dependiendo del tipo de problema que sea tratado aquí. La superficie tradeoff mostrada en la Figura 2.4.5 es para el caso de minimización de dos funciones objetivos, este tipo de superficie tradeoff es típica de un problema multiobjetivo min-min, con un espacio solución convexo. Dos puntos característicos asociados con una la superficie tradeoff son los siguientes:

Definición 13. (Punto Ideal): las coordenadas de este punto son obtenidas por minimización de cada función objetivo por separado.

Definición 14. (Punto “Nadir” o punto más bajo): las coordenadas de este punto corresponde a el peor valor obtenido por cada función objetivo cuando el conjunto solución es restringido a la superficie tradeoff.

El punto ideal es usado en gran parte de métodos de optimización como un punto referencia. El punto Nadir es usado para restringir el espacio de búsqueda en métodos de optimización interactivos. Estas dos definiciones son ilustradas en la Figura 2.4.6.

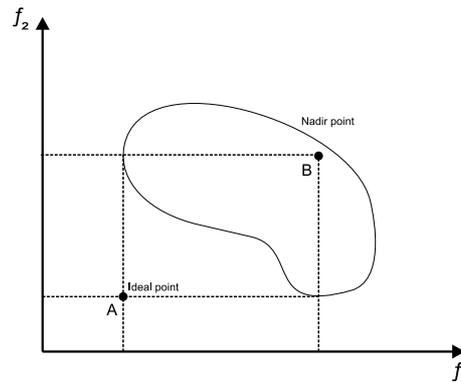


Figura 2.4.6: Representación del punto ideal y el punto “Nadir”

2.5. Métodos de solución para problemas MOOP

2.5.1. Clasificación de los Métodos MOOP

Los métodos para resolver MOOP pueden ser divididos en cinco conjuntos. Estos son:

1. Métodos Escalares
2. Métodos Interactivos
3. Métodos Difusos
4. Métodos que usan Metaheurística
5. Métodos de Decisiones.

Además, estos cinco conjuntos pueden ser clasificados en tres familias de métodos de MOOP (Veldhuizen, Van (1999))

1. **Métodos a priori:** con estos métodos, el tomador de decisiones define el espacio de solución a ser aplicado (el tomador de decisiones expone las preferencias a cumplir) antes de correr el método de optimización. En esta familia, están la mayoría de los metodos agregativos (donde las funciones objetivos son convertidas en una función objetivo).
2. **Métodos Progresivos:** para estos métodos, el tomador de decisiones mejora el espacio de solución, el cual es alcanzado durante la corrida del método de optimización. En esta familia se hayan los métodos interactivos.
3. **Métodos a posteriori:** con estos métodos, el tomador de decisiones deja que el espacio de solución sea alcanzado por el método de optimización. Los métodos de esta familia producen al final del método de optimización, una superficie tradeoff.

2.5.2. Métodos Escalares

Método de la suma ponderada de pesos (The weighting method)

En este método se combinan las diferentes funciones objetivos en una sola función $f_{eq}(\mathbf{x})$, de la siguiente manera:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f_{eq}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^k w_i f_i(\mathbf{x}) \\ \text{s.a} & \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\ & \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \end{array} \quad (2.5.1)$$

donde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ y w_i es el peso usado para ponderar la i -ésima función objetivo.

Usualmente y sin pérdida de generalidad, se escogen pesos fraccionales y diferentes de cero, de manera que se cumpla $\sum_{i=1}^k w_i = 1$ y $w_i > 0$.

El procedimiento es sencillo: se escoge una combinación de pesos (posiblemente aleatoria) y se optimiza la función $f_{eq}(\mathbf{x})$ para obtener una solución óptima. Otras soluciones surgen a partir de optimizaciones realizadas sobre una combinación diferente de pesos. Si se utiliza un algoritmo de optimización que obtiene resultados exactos y los pesos escogidos son siempre positivos, el método genera soluciones que pertenecen al conjunto Pareto óptimo.

La interpretación matemática de este método es la siguiente: alterar el vector de pesos y optimizar la ecuación implica encontrar un hiperplano (una línea para el caso en que se tengan dos objetivos) con una orientación fija en el espacio de la función. La solución óptima es el punto donde un hiperplano con esta orientación tiene una tangente común con el espacio de búsqueda factible. De aquí deducimos que este método no puede usarse para encontrar soluciones Pareto óptimas en problemas de optimización multicriterio que tienen un frente Pareto óptimo no convexos.

La principal ventaja de esta técnica es su simplicidad y eficiencia. Sus desventajas son la dificultad de definir un conjunto de pesos que permita generar una porción importante del frente de Pareto y el hecho de que esta técnica es incapaz de generar porciones no convexas del frente de Pareto sin importar la combinación de pesos utilizada.

Método de ϵ -restricciones (ϵ -Constraint Method)

Para intentar remediar la dificultad de problemas multiobjetivos que tienen un frente Pareto óptimo no convexos, se utiliza esta técnica. La misma consiste en construir un problema de optimización en el que todos los objetivos, excepto uno, se usan como restricciones ($k - 1$ restricciones), mientras el sobrante, que puede escogerse aleatoriamente, se usa como función objetivo del problema resultante. La forma general del problema es la siguiente:

$$\begin{aligned}
& \text{Max } f_k(\mathbf{x}) \\
& \text{s.a } f_j(\mathbf{x}) \geq \epsilon_j \quad 1 \leq j \leq k-1 \quad j \neq k \\
& \quad \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\
& \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0
\end{aligned} \tag{2.5.2}$$

Para encontrar una solución pareto óptima, se escoge un valor adecuado para ϵ_j de la j -ésima función objetivo ($j \neq k$). Luego se resuelve el problema de optimización con objetivo único. El procedimiento se repite, con diferentes valores de ϵ_j para hallar nuevas soluciones pertenecientes al frente Pareto óptimo. La dificultad principal que presenta este método reside en la necesidad de un conocimiento del rango apropiado de valores para asignar a ϵ_j para las $(k-1)$ funciones objetivos, lo que no resulta fácil en la práctica.

La principal ventaja del método es su relativa simplicidad, lo que lo ha hecho más o menos popular en ciertas disciplinas de ingeniería. Su principal desventaja es que puede resultar muy costoso (computacionalmente hablando), por el nivel de variabilidad que se requiere de los niveles ϵ_i .

Método de Programación por metas (Goal Programming method)

En algunas ocasiones, el conocimiento del problema permite tener una idea del valor que pueden tomar los distintos objetivos. En estos casos, esos valores se pueden tomar como niveles de aspiración. Establecerse como meta el llegar a esos niveles, introduciéndolos como restricciones “blandas” cuyas violaciones se intenta minimizar. Aunque estrictamente hablando esta técnica es también un método agregativo, los consideramos por separado debido a que (bajo ciertas condiciones) estas si pueden generar porciones no convexas del frente de Pareto.

Comenzando con un problema P . Elejimos un vector inicial de funciones objetivos $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^k$. Asociamos un conjunto de variables d_i^+ y d_i^- con cada función objetivo $f_i(\mathbf{x}), i \in \{1, \dots, k\}$

Ahora, tenemos el siguiente problema:

$$\begin{aligned}
& \text{Min } d_1^+ \text{ ó } d_1^-, \dots, d_k^+ \text{ ó } d_k^- \\
& \text{s.a } f_1(\mathbf{x}) = F_1 + d_1^+ - d_1^- \\
& \quad \vdots \\
& \quad f_k(\mathbf{x}) = F_k + d_k^+ - d_k^- \\
& \quad \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\
& \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0
\end{aligned} \tag{2.5.3}$$

donde las variables que tratamos de minimizar debe ser con respecto a algunas restricciones:

$$d_i^+ \text{ y } d_i^- \geq 0$$

$$d_i^+ \cdot d_i^- = 0, i = \{1, \dots, k\}$$

la idea es minimizar varias combinaciones de los coeficientes d_i^- y d_i^+ , dependiendo del camino por el cual alcanzamos la meta F .

La principal ventaja es su simplicidad y su eficiencia computacional, dado que no se requiere un proceso de jerarquización de pareto. Su principal desventaja es la dificultad que estriba la definición de metas deseables. También se ha detectado que algunas técnicas, bajo ciertas circunstancias, pueden comportarse de manera ambigua. Así mismo, estas técnicas pueden requerir que las metas se definan en la zona factible a fin de garantizar que las soluciones producidas sean óptimos de pareto.

Método Lexicográfico

Este método es muy intuitivo. Consiste en considerar las funciones objetivos una despues de otra y minimizar un problema de optimización mono-objetivo mientras el problema es completado gradualmente con restricciones objetivos (Coello, 1998).

Comenzamos con un problema P y procedemos en k pasos (tantos pasos como funciones objetivos tengamos). Comenzando con la primera función objetivo, resolvemos:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f_1(\mathbf{x}) \\ \text{s.a} & \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\ & \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \end{array} \quad (2.5.4)$$

denotamos por f_1^* la solución de este problema. Seguidamente, transformamos la primera función objetivo en una restricción de igualdad y tomamos la segunda función objetivo y resolvemos el siguiente problema:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f_2(\mathbf{x}) \\ \text{s.a} & f_1(\mathbf{x}) = f_1^* \\ & \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\ & \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \end{array} \quad (2.5.5)$$

Repetimos este paso hasta llegar a la función objetivo k . Entonces, en el paso k tendríamos:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f_k(\mathbf{x}) \\ \text{s.a} & f_1(\mathbf{x}) = f_1^*, \dots, f_{k-1}(\mathbf{x}) = f_{k-1}^* \\ & \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\ & \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \end{array} \quad (2.5.6)$$

El valor de \mathbf{x} es un único valor donde se minimizan todas las funciones objetivos.

Este método tiene una desventaja: el usuario necesita elegir la secuencia de funciones objetivos a minimizar. Esta escogencia es un poco arbitraria, así como la elección de los pesos del método de la suma ponderada de pesos. Dos optimizaciones lexicográficas con secuencia de funciones distintas no produce la misma solución.

2.6. Método de ϵ -Restricciones Aumentado (AUGMECON)

A pesar de las ventajas sobre el método de la suma ponderada de pesos, el método de ϵ -restricciones tiene dos puntos que son de especial atención: El rango de las funciones objetivos sobre el conjunto de soluciones eficientes (principalmente para el cálculo de valores “nadir” (punto más bajo)) y la garantía de eficiencia de la solución obtenida. Seguidamente, daremos un vistazo más de cerca a estos dos puntos.

Para aplicar apropiadamente el método de ϵ -restricciones debemos tener el rango de cada función objetivo, al menos para las $k - 1$ funciones objetivos que serán usadas como restricciones (Ver problema 2.5.2). El cálculo del rango de las funciones objetivos sobre el conjunto eficiente no es una tarea trivial. Mientras que el *punto ideal* es fácilmente definido como el óptimo de las optimizaciones individuales, el *punto Nadir* sobre el conjunto eficiente no. El enfoque más común para calcular estos rangos es mediante la *tabla de pagos* (Payoff Table), la tabla de pagos es un arreglo que contiene información de las optimizaciones individuales de las k funciones objetivos. El valor Nadir es aproximado usualmente como el mínimo de la columna correspondiente. Sin embargo, incluso en este caso, debemos estar seguros que las soluciones obtenidas de la optimización individual de las funciones objetivos son de hecho soluciones eficientes. En la presencia de óptimos alternativos la obtención de la solución óptima mediante software comerciales no garantizan una solución eficiente. Con el fin de superar esta ambigüedad el método AUGMECON, propone el uso de optimización lexicográfica para cada función objetivo con el fin de construir la tabla de pagos con solo soluciones eficientes. Una solución sencilla con el fin de eludir la dificultad de estimar el valor Nadir de las funciones objetivos se definen mediante los valores reserva de las funciones objetivos. El valor reserva actúa como una cota inferior (o superior para el caso de minimización). Los valores peores que el valor reserva, no son permitidos.

El segundo punto de atención es que la solución óptima del problema (2.5.2) sea garantizada a ser una solución eficiente solo si las $k - 1$ restricciones de funciones objetivos se cumplen. En otro caso, si hay soluciones óptimas alternativas, la solución obtenida del problema mostrado en (2.5.2) no es eficiente, pero si, una solución débilmente eficiente. Con el fin de superar esta ambigüedad AUGMECON transforma las restricciones de funciones objetivos a igualdad por incorporación explícita de variables de holgura y excedencia. Al mismo tiempo, la suma de estas variables son usadas como un segundo término (con prioridad inferior) en la función objetivo forzando el programa para producir solo soluciones eficientes. El segundo

término impulsa la búsqueda para encontrar la posible solución óptima alternativa de maximizar $f_1(x)$ para el que maximiza la búsqueda. El nuevo problema se convierte en:

$$\begin{aligned} \text{Maximizar} \quad & f_1(\mathbf{x}) + \delta \sum_{j=1}^{k-1} s_j \\ \text{s.a} \quad & f_j(\mathbf{x}) = \epsilon_j \quad 1 \leq j \leq k-1 \quad j \neq k \\ & \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\ & \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq 0 \end{aligned} \quad (2.6.1)$$

donde δ es un número muy pequeño (usualmente entre 10^{-3} y 10^{-6}).

Proposición 2.6.1. La formulación (2.6.1) del método de ϵ -restricciones produce solo soluciones eficientes (evita la generación de soluciones débilmente eficientes)

A fin de evitar cualquier problema de escalamiento, reemplazamos las s_j en el segundo término de la función objetivo es sustituida por s_j/r_j donde r_j es el rango de la j -ésima función objetivo (calculados mediante la tabla de pagos). Entonces, la función objetivo para el método ϵ -restricciones se convierte en:

$$f_1(\mathbf{x}) + \delta \sum_{j=1}^{k-1} s_j/r_j \quad (2.6.2)$$

El método AUGMECON (the augmented ϵ -constraint method) corresponde al problema (2.6.1) pero con la función objetivo (2.6.2).

Este método es implementado como sigue: de la tabla de pagos obtenemos en rango da cada una de las $k-1$ funciones objetivos que son usadas como restricciones. Dividimos el rango de la j -ésima función objetivo en q_j intervalos iguales usando q_j-1 puntos intermedios equidistantes de la grilla. Por lo tanto, tenemos en total q_j-1 puntos de la grilla que son todos usados para variar paramétricamente las RHS (ϵ_j) de la j -ésima función objetivo. El número total de corridas es $(q_2+1) \times (q_3+1) \times \dots \times (q_k+1)$. Una característica deseable del método ϵ -restricciones es que podemos controlar la densidad del conjunto eficiente asignando el valor de q_j . Si el número de puntos de la grilla es más denso, tendremos una buena representación del conjunto eficiente pero el costo en el tiempo computacional sería muy grande.

Una innovación adicional para el algoritmo es la salida anticipada del bucle anidado cuando el problema dado en (2.6.1) llega a ser infactible para una combinación de ϵ_j . La salida es como sigue: la estrategia de acotamiento para cada una de las funciones objetivos comienza desde formulaciones más relajadas (cota inferior para una función objetivo de maximización o cota superior para una de minimización) y moverse hasta el menos estricto (óptimo individual). En este camino, cuando llegamos a una solución infactible no es necesario seguir resolviendo los restantes problemas del bucle. (ya que el problema será más estricto y por lo tanto sigue siendo infactible) pudiendo forzar la salida del bucle. La implementación de este método está disponible en (<http://www.gams.com/modlib/libhtml/epscon.htm>).

CAPÍTULO 3

ANTECEDENTES

En este Capítulo expondremos los antecedentes de la investigación. Primeramente, en la Sección 3.1 se presenta el modelo determinístico para la Distribución de Catalizadores en el reactor de Hidrotatamiento de Destilados Medios. En la Sección 3.2 se muestran los parámetros de entrada del modelo y por último, en la Sección 3.2.1 se exponen los resultados obtenidos por Verruschi, E. en su tesis de Doctorado para el caso de estudio [20].

*La ciencia es el simple sentido común
llevado al máximo: observación cuidadosa
y rigor ante las falacias lógicas.
Thomas Henry Huxley (1825-1895)*

3.1. Modelo determinístico para la distribución de catalizadores en el reactor de hidrotratamiento de destilados medios

3.1.1. Introducción

En este Capítulo mostraremos el modelo matemático propuesto por Verruschi, E. (2008) [20], que permite obtener una configuración óptima de dos tipos de lechos catalíticos en un reactor de flujo pistón, modelado como N reactores mezcla completa en serie para un modo de operación. El sistema reactivo contempla reacciones series-paralelas. La superestructura consta de N unidades, representadas en el modelo por dos conjuntos de variables discretas, las cuales entran en la categoría de variables binarias. El primer grupo permite decidir la existencia de la unidad, y el segundo grupo, permite decidir la selección de un tipo de catalizador por unidad. Esto genera como resultado la mejor combinación de catalizadores y el tamaño del equipo. La variable de operación seleccionada para el estudio del modo de operación es el caudal de alimentación del destilado medio a tratar en el reactor. Este tipo de modelo cae en la categoría de MINLP.

La síntesis de proceso, en particular, la síntesis de reactores químicos, consiste en encontrar una configuración factible que cumpla con un conjunto de metas y limitaciones. Esto implica que dada las entradas del proceso, (por ejemplo, caudal volumétrico y composición de alimentación), seleccionado los tipos de reactores a emplear y especificado los productos deseados, el problema de síntesis determina el arreglo óptimo de equipos y sus interconexiones que transforman las entradas en productos finales.

3.1.2. Modelo matemático

El modelo matemático para la distribución de catalizadores en el reactor de hidrotratamiento de destilados medios para el caso isotérmico (C1) y modo de operación 1 (M1) propuesto por Verruschi se presenta a continuación:

- **Conjuntos:**

$C = \{F_0, F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6, F_7, F_8\}$. Tipos de Corrientes.

$Cs = \{F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6, F_7, F_8\}$. Tipos de Corrientes de salida del sistema.

$K = \{DBIBTHIO, H_2, CHXBNZ, BIPHENYL, H_2S, BICHXL, PARAF\}$. Compuestos.

$U = \{R_0, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7\}$. Unidades del sistema.

$Ue = \{R_0, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7\}$. Unidades de entrada del sistema.

$Us = \{R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7\}$. Unidades de salida del sistema.

$T = \{CoMo, NiMo\}$. Tipos de catalizadores

$R = \{1, 2, 3\}$. Reacciones químicas.

$CeU = \{(i, j) \in S : S \subseteq C \times Ue\}$. Corrientes que entran a los lechos catalíticos de las unidades y cambian por moles.

$CsU = \{(i, j) \in S : S \subseteq Cs \times U\}$. Corrientes que salen a los lechos catalíticos de las unidades y cambian por moles.

■ **Parámetros:**

Fko_k = Flujo molar inicial del compuesto k ($kmol/h$).

PMk_k = Pesos molares del compuesto k ($kg/kmol$).

KA_t = Constante de absorción de tipo de catalizador t .

$Temn$ = Temperatura mínima del sistema

$Temx$ = Temperatura máxima del sistema

vlo = Cota inferior para la velocidad (m/h).

vup = Cota superior para la velocidad (m/h).

$Taolo$ = Cota inferior del tiempo espacial (h).

$Taoup$ = Cota superior del tiempo espacial (h).

LD = Relación entre la longitud y el diámetro (L/D).

$Lmax$ = Longitud máxima del reactor (m).

$Lmin$ = Longitud mínima del reactor (m).

NR = Número máximo de reactores.

Ko_{rt} = Parámetro cinético de la reacción química r por tipo de catalizador t .

EaR_{rt} = Parámetro cinético de la reacción química r por tipo de catalizador t .

$Gamao_{krt}$ = Parámetro estequiométrico del compuesto k de cada reacción química r por tipo de catalizador t .

Ct = Costo del tanque que forma el reactor ($\$/m^3$).

C_t = Costo del catalizador t ($\$/m^3$).

AMR = Amortización del reactor.

AMC = Amortización del catalizador.

CH_2 = Costo del Hidrógeno ($\$/MSCF$).

■ **Variables de decisión:**

Rkc_{ukrt} = Cantidad de moles transformados en la unidad u por cada compuesto k en por la reacción química r por tipo de catalizador t ($kmol/h$).

Rk_{uk} = Cantidad de moles separados en unidad u por cada compuesto k ($kmol/h$).

Ql_c = Cantidad de caudal volumétrico en cada corriente c (m^3/h).

Tem = Temperatura de la unidad u por tipo de catalizador t .

Cck_{ck} = Concentración de cada compuesto k por cada corriente c ($kmol/m^3$).

Cu_{uk} = Concentración en la unidad de salida u por cada compuesto k , $\forall u \in Us$ ($kmol/m^3$).

Fk_{ck} = Cantidad de flujo molar del compuesto k por cada corriente c ($kmol/h$).

F_c = Cantidad de flujo molar total de la corriente c ($kmol/h$).

$Fmck_{ck}$ = Cantidad de flujo másico del compuesto k por cada corriente c (kg/h).

Fm_c = Cantidad de flujo másico por cada corriente c (kg/h).

rho_c = Densidad de corriente c (kg/m^3).

V_u = Volumen de la unidad u (m^3).

L_u = Longitud de la unidad u (m).

Tao_u = Tiempo de residencia de la unidad u (h).

S = Área transversal de la unidad (m^2).

D = Diámetro del reactor (m^2).

LU = Longitud del reactor (m).

N_k = Flujo no procesado de cada compuesto k ($kmol/h$).

$y_{cut} = \begin{cases} 1 & \text{si unidad } u \text{ utiliza tipo de catalizador } t \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$

$y_{e_u} = \begin{cases} 1 & \text{si existe la unidad } u \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$

$y_{cut} \in \{0, 1\}, y_{e_u} \in \{0, 1\}, Rkc_{ukrt} \in \mathbb{R}, Rk_{uk} \in \mathbb{R}, Ql_c \in \mathbb{R}^+, Tem_{ut} \in \mathbb{R}^+, Cck_{ck} \in \mathbb{R}^+, Cu_{uk} \in \mathbb{R}^+, Fk_{ck} \in \mathbb{R}^+, F_c \in \mathbb{R}^+, Fmck_{ck} \in \mathbb{R}^+, Fm_c \in \mathbb{R}^+, rho_c \in \mathbb{R}^+, V_u \in \mathbb{R}^+, L_u \in \mathbb{R}^+, Tao_u \in \mathbb{R}^+, S \in \mathbb{R}^+, L \in \mathbb{R}^+, LU \in \mathbb{R}^+$

▪ **Restricciones:**

- (Cálculo de moles transformados en la reacción de hidrodesulfuración).

$$\begin{aligned} Rkc_{uk'1't} + KA_t \cdot Rkc_{uk'1't} \cdot Cu_{u'H2S'} - Gamao_{k'1't} \cdot Ko_{1't} \cdot \\ Tao_u \cdot Cu_{u'DBZT'} \cdot Cu_{u'H2'} \cdot \exp\left(\frac{EaR_{1't}}{Tem}\right) = 0 \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

$\forall u \in Ue, \forall k \in K, \forall t \in T, \forall r \in R$

- (Cálculo de moles transformados en la reacción de hidrogenación del monoaromático).

$$\begin{aligned} Rkc_{uk'2't} - Gamao_{k'2't} \cdot Ko_{2't} \cdot Tao_u \cdot Cu_{u'CHXBZ'} \cdot \\ Cu_{u'H2'} \cdot \exp\left(\frac{EaR_{2't}}{Tem}\right) = 0 \end{aligned} \quad (3.1.2)$$

$\forall u \in Ue, \forall k \in K, \forall t \in T, \forall r \in R$

- (Cálculo de moles transformados en la reacción de hidrogenación de diaromático).

$$\begin{aligned} Rkc_{uk'3't} - Gamao_{k'3't} \cdot Ko_{3't} \cdot Tao_u \cdot Cu_{u'BIFHENYL'} \cdot \\ Cu_{u'H2'} \cdot \exp\left(\frac{EaR_{3't}}{Tem}\right) = 0 \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

$\forall u \in Ue, \forall k \in K, \forall t \in T, \forall r \in R$

- (Separación de los moles transformados de cada compuesto).

$$Rk_{uk} - \sum_{t \in T} \sum_{r \in R} Rk_{ukrt} y_{cut} = 0 \quad \forall u \in U, \forall k \in K \quad (3.1.4)$$

- (Cálculo de las concentraciones de cada compuesto)

$$\sum_{c \in CsU} Cck_{ck} - \sum_{c \in CeU} Cck_{ck} - \sum_{c \in CsU} Rk_{uk} = 0 \quad \forall k \in K \quad (3.1.5)$$

- (Cálculo del flujo molar total de cada corriente)

$$F_c - \sum_{k \in K} Fk_{ck} = 0 \quad \forall c \in C \quad (3.1.6)$$

- (Cálculo del caudal volumétrico de cada corriente)

$$rho_c \cdot Ql_c - \sum_{k \in K} PMk_k Fk_{ck} = 0 \quad \forall c \in C \quad (3.1.7)$$

- (Cálculo de los flujos molares de cada corriente)

$$Fk_{ck} - Ql_c \cdot Cck_{ck} = 0 \quad \forall c \in C, \forall k \in K \quad (3.1.8)$$

- (Existencia de la unidad y de los tipos de catalizadores empleados)

$$\sum_{t \in T} y_{cut} - y_{e_u} = 0 \quad \forall u \in U \quad (3.1.9)$$

- (Cálculo de las concentraciones de cada compuesto en la salida de cada unidad)

$$Cu_{uk} - \sum_{c \in CsU} Cck_{ck} = 0 \quad \forall k \in K \quad (3.1.10)$$

- (Cálculo de los flujos másicos de cada compuesto por cada corriente)

$$Fmck_{ck} - PMk_k Fk_{ck} = 0 \quad \forall c \in C, \forall k \in K \quad (3.1.11)$$

- (Cálculo del flujo másico total)

$$Fm_c - \sum_{k \in K} Fmck_{ck} = 0 \quad \forall c \in C \quad (3.1.12)$$

- (Balance de materia total)

$$\sum_{c \in CsU} Fm_c - \sum_{c \in CeU} Fm_c = 0 \quad (3.1.13)$$

- (Cálculo del tiempo espacial de cada unidad)

$$Tao_u \cdot \sum_{c \in CsU} Ql_c - V_u = 0 \quad \forall u \in U \quad (3.1.14)$$

- (Cotas del tiempo espacial total)

$$Taolo \leq \sum_{u \in U} Tao_u \leq Taoup \quad (3.1.15)$$

- (Cálculo del volumen de cada unidad existente)

$$V_u - L_u \cdot S \cdot ye_u = 0 \quad \forall u \in U \quad (3.1.16)$$

- (Cálculo del área transversal de la unidad en función del caudal de cada corriente y las cotas de las velocidades)

$$\frac{\sum_{c \in CsU} Ql_c}{vlo} \leq S \leq \frac{\sum_{c \in CsU} Ql_c}{vup} \quad (3.1.17)$$

- (Cálculo del flujo molar que es desviado de la alimentación de la primera unidad)

$$N_k + Fk'_{F'k} - Fk_{o_k} = 0 \quad (3.1.18)$$

- (Las unidades no existentes son colocadas al final del reactor)

$$ye_u - ye_{u-1} \leq 0 \quad (3.1.19)$$

- (Existencia de al menos una unidad)

$$\sum_{u \in U} ye_{u-1} \geq 0 \quad (3.1.20)$$

- (Diámetro del reactor en función del área transversal)

$$D - \sqrt{\frac{4S}{\pi}} = 0 \quad (3.1.21)$$

- (Longitud del reactor en función de la reacción L/D)

$$\sum_{u \in U} L_u \cdot ye_u - LD \cdot D = 0 \quad (3.1.22)$$

- (Cotas del tiempo espacial total)

$$Lmin \leq \sum_{u \in U} L_u \cdot ye_u \leq Lmax \quad (3.1.23)$$

- (Cota inferior para el diámetro del reactor)

$$D \geq 2,65 \quad (3.1.24)$$

- (La cantidad de monoaromáticos a la salida del reactor debe ser menor o igual al doble que alimenta al sistema)

$$Fk'_{F_8'CHXBNZ'} - 2 \cdot Fk'_{F_0''CHXBNZ'} \leq 0 \quad (3.1.25)$$

- (La cantidad de aromático azufrado a la salida del reactor debe ser menor o igual al 40 %)

$$Fk'_{F_8''DIBZT'} - 0,4 \cdot Fk'_{F_0''DIBZT'} \leq 0 \quad (3.1.26)$$

- **Funciones objetivos:**

1. (Minimizar la cantidad de aromático azufrado)

$$\min z = Fk_{F_8DIBZT} \quad (3.1.27)$$

2. (Maximizar la producción de monoaromático)

$$\max z = Fk_{F_8CHXBNZ} \quad (3.1.28)$$

3. (Maximizar la producción de naftenos)

$$\max z = Fk_{F_8BICHXL} \quad (3.1.29)$$

4. (Minimizar el coste total anual (CTA))

$$\min CTA = Cinv + Cop \quad (3.1.30)$$

Donde

$$\begin{aligned} Cinv &= AMR(Ct \cdot D^{1,05} \cdot L^{0,81} \cdot ye_u) \\ &+ AMC((C_{NiMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot y_{CuNiMo}) + (C_{CoMo} \\ &\sum_{u \in U} V_u \cdot y_{CuCoMo})) \\ Cop &= CH_2 \cdot Fmck_{F_8, H_2} \end{aligned} \quad (3.1.31)$$

- **Cotas sobre las variables:**

$$Fk_{F_0k} = Fko(k) \quad (3.1.32)$$

$$Temn \leq Tem_{ut} \leq Temx \quad (3.1.33)$$

$$596,642 \leq rho_{F_0} \leq 569,642 \quad (3.1.34)$$

$$L_u \geq Lmax/NR \quad (3.1.35)$$

$$10 \leq rho_c \leq 900 \quad (3.1.36)$$

$$D \leq 10^{-5} \quad (3.1.37)$$

3.2. Parámetros del modelo (C1M1)

Los parámetros de entrada para el modelo determinístico isotérmico, modo de operación 1, se muestran a continuación.

- Fk_{o_k} = Flujo molar inicial del compuesto k ($kmol/h$).

| Fk_{o_k} | |
|------------|-----------|
| DIBZTHIO | 10,06680 |
| H2 | 704,42500 |
| CHXBNZ | 31,99350 |
| BIPHENYL | 21,86900 |
| H2S | 0,0001 |
| BICHXL | 42,98500 |
| PARAF | 89,77570 |

Tabla 3.2.1: Flujo molar de alimentación

- PMk_k = Pesos molares del compuesto k ($kg/kmol$).

| PMk_k | |
|----------|----------|
| DIBZTHIO | 184,2620 |
| H2 | 2,0160 |
| CHXBNZ | 160,2560 |
| BIPHENYL | 154,2110 |
| H2S | 34,0790 |
| BICHXL | 166,3060 |
| PARAF | 220,9495 |

Tabla 3.2.2: Pesos molares

- KA_t = Constante de absorción y C_t = Costo del tipo de catalizador t ($\$/m^3$)

| | KA_t | C_t |
|------|------------|-----------|
| CoMo | 15399,8562 | 8126,5275 |
| NiMo | 11094,5931 | 7769,2176 |

Tabla 3.2.3: Constantes de Absorción

- Otros parámetros del modelo

| Parámetros del modelo | |
|---|-------------------|
| Temperatura máxima del sistema ($Temn$) | 613,15 |
| Temperatura mínima del sistema ($Temx$) | 633,15 |
| Cota inferior para la velocidad (vlo) | 0 m/hr |
| Cota superior para la velocidad (vlu) | 500 n/hr |
| Cota inferior del tiempo espacial ($Taolo$) | 0,3 |
| Cota superior del tiempo espacial ($Taoup$) | 1,2 |
| Relación entre la longitud y el diámetro (LD) | 3,0 |
| Longitud máxima del reactor ($Lmax$) | 10,0 m |
| Longitud mínima del reactor ($Lmin$) | 7,5 m |
| Número máximo de reactores (NR) | 8 |
| Amortización del reactor (AMR) | 1272,1218 |
| Costo del Hidrógeno (CH_2) | 767,983 (\$/MSCF) |

Tabla 3.2.4: Parámetros adicionales del modelo

| Ko_{rt} | | |
|-----------|-------------|-------------|
| | CoMo | NiMo |
| 1 | 2,48580E+15 | 3,37106E+15 |
| 2 | 1,24014E+06 | 1,02484E+06 |
| 3 | 3,11555E+06 | 4,78035E+06 |

Tabla 3.2.5: Parámetro cinético 1 de la reacción por tipo de catalizador

- Ko_{rt} = Parámetro cinético 1 de la reacción química r por tipo de catalizador t .
- EaR_{rt} = Parámetro cinético 2 de la reacción química r por tipo de catalizador t .

| EaR_{rt} | | |
|------------|-------|-------|
| | CoMo | NiMo |
| 1 | 19384 | 19384 |
| 2 | 12414 | 12414 |
| 3 | 12140 | 12140 |

Tabla 3.2.6: Parámetro cinético 2 de la reacción por tipo de catalizador

- $Gamao_{krt}$ = Parámetro estequiométrico del compuesto k de cada reacción química r por tipo de catalizador t .

El modelo mostrado en la Sección 3.1.2 se desarrolló en la herramienta de lenguaje de modelado algebraico general (GAMS) y fue resuelto usando el resolutor DICOPT

| $G_{mao_{krt}}$ | | | | | | |
|-----------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| | CoMo.1 | NiMo.1 | CoMo.2 | NiMo.2 | CoMo.3 | NiMo.3 |
| DIBZTHIO | -1.0000 | -1.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 |
| H2 | -2.0000 | -5.0000 | -3.0000 | -3.0000 | -3.0000 | -3.0000 |
| CHXBNZ | 0.0000 | 1.0000 | -1.0000 | -1.0000 | 1.0000 | 1.0000 |
| BIPHENYL | 1.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | -1.0000 | -1.0000 |
| H2S | 1.0000 | 1.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 | 0.0000 |
| BICHXL | 0.0000 | 0.0000 | 1.0000 | 1.0000 | 0.0000 | 0.0000 |

Tabla 3.2.7: Parámetro estequiométrico del compuesto de cada reacción química por tipo de catalizador

(Ver Sección 3.1.2). Recordando, DICOPT resuelve una serie de problemas de programación no lineal (NLP), el cual se resolvió haciendo uso del solver SNOPT (An SQP Algorithm for Large-Scale Constrained Optimization) y una serie de problemas de programación entera-mixta, resueltos usando el solver CPLEX. La herramienta SNOPT, usa el algoritmo de programación cuadrática secuencial para la optimización de problemas a gran escala y CPLEX usa el algoritmo de ramificación y acotamiento, el cual resuelve una serie de problemas lineales (PL).

3.2.1. Resultados obtenidos por Verruschi

Los resultados obtenidos por Verruschi, tomando cada criterio como función objetivo son los siguientes:

- **Modelo de minimización del costo del diseño del reactor (MD-Crit1-C1-M1)**

La función objetivo usada es la mostrada en la Ecuación 3.1.30. Los resultados obtenidos con respecto al lecho catalítico y sus dimensiones se muestran en la Tabla 3.2.8. Estos se representan gráficamente en la Figura 3.2.1.

| | |
|---|-------|
| Cantidad de unidades del reactor (Y_{e_u}) | 7 |
| Tipo de catalizador a utilizar ($Y_{c_{ut}}$) | NiMo |
| Longitud del Reactor | 7,94m |
| Diámetro del Reactor | 2,65m |

Tabla 3.2.8: Resultados respecto al lecho catalítico y dimensiones

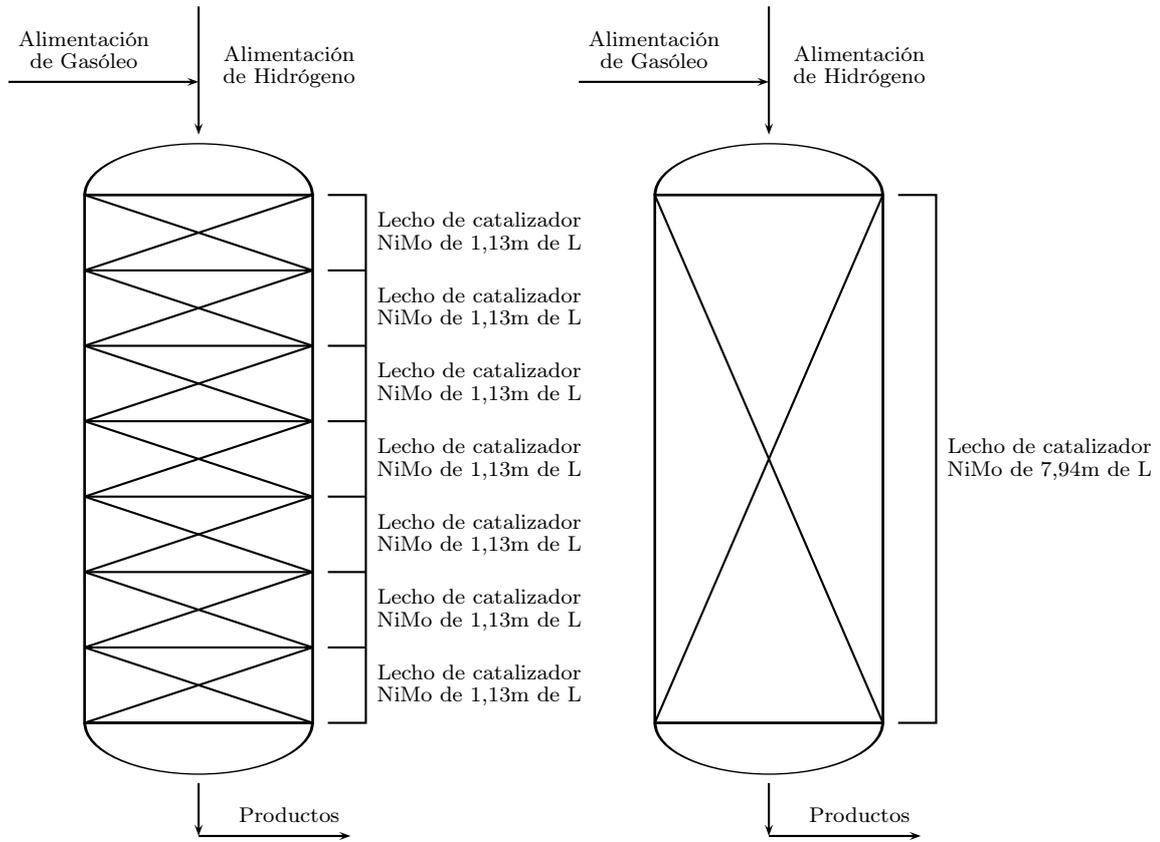


Figura 3.2.1: Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho (MD-Crit1-C1-M1)

Los resultados obtenidos con respecto al flujo de hidrógeno consumido, conversión de aromáticos azufrados y rendimientos de monoaromáticos y naftenos se muestran en la Tabla 3.2.9.

| | | |
|------------------------------------|--|-------------|
| Flujo H_2 consumido ($kmol/h$) | $\frac{Fk_{F_0,H_2} - Fk_{F_8,H_2}}{Fk_{F_0,DIBZTHIO} - Fk_{F_8,DIBZTHIO}}$ | 46,79 |
| Conversión de AR-S (%) | $100 \left(\frac{Fk_{F_0,DIBZTHIO} - Fk_{F_8,DIBZTHIO}}{Fk_{F_0,DIBZTHIO}} \right)$ | 70,98 |
| Rendimiento de Monoaromáticos (%) | $100 \left(\frac{Fk_{F_8,CHXBNZ} - Fk_{F_0,CHXBNZ}}{Fk_{F_0,CHXBNZ}} \right)$ | 28,96 |
| Rendimiento de Naftenos (%) | $100 \left(\frac{Fk_{F_8,BICHXL} - Fk_{F_0,BICHXL}}{Fk_{F_0,BICHXL}} \right)$ | 1,79 |
| Temperatura de Alimentación | Tem | 633,15 |
| Valor de la Función Objetivo | | 96506531,77 |

Tabla 3.2.9: Principales resultados del modelo (MD-Crit1-C1-M1)

▪ **Modelo de maximización de la cantidad de naftenos**

Para este caso se tomó como función objetivo la mostrada en la Ecuación (3.1.29). Los resultados obtenidos con respecto al lecho catalítico y sus dimensiones se muestran en la Tabla 3.2.10. Estos se representan gráficamente en la Figura 3.2.2.

| | |
|---|-----------------|
| Cantidad de unidades del reactor (Y_{e_u}) | 8 |
| Tipo de catalizador a utilizar ($Y_{c_{ut}}$) | 3 NiMo y 5 CoMo |
| Longitud del Reactor | 9,76m |
| Diámetro del Reactor | 3,26m |

Tabla 3.2.10: Resultados respecto al lecho catalítico y dimensiones

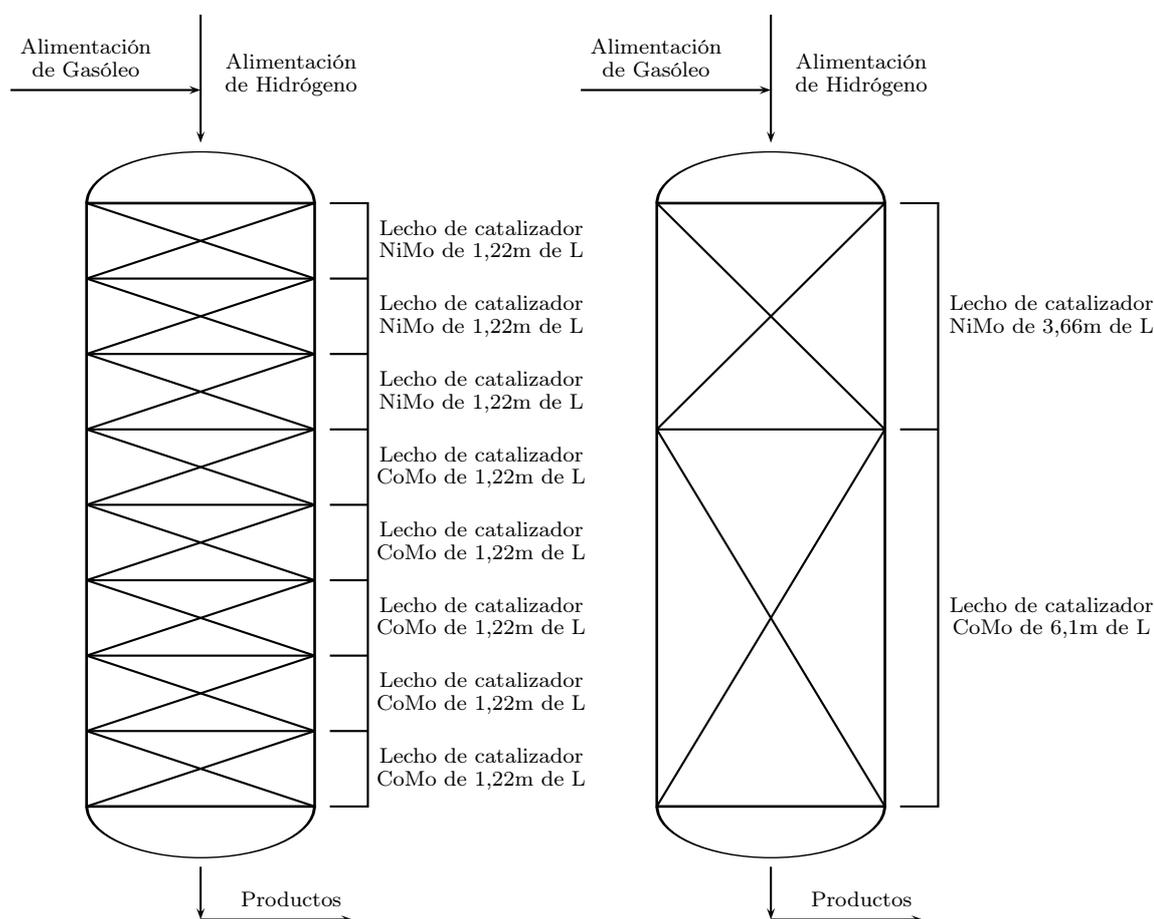


Figura 3.2.2: Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho (MD-Crit2-C1-M1)

Los resultados obtenidos con respecto al flujo de hidrógeno consumido, conversión de aromáticos azufrados y rendimientos de monoaromáticos y naftenos se muestran en la Tabla 3.2.11.

| | | |
|------------------------------------|---|--------|
| Flujo H_2 consumido ($kmol/h$) | $Fk_{F_0,H_2} - Fk_{F_8,H_2}$ | 50,60 |
| Conversión de AR-S (%) | $100\left(\frac{Fk_{F_0,DIBZTHIO} - Fk_{F_8,DIBZTHIO}}{Fk_{F_0,DIBZTHIO}}\right)$ | 76,25 |
| Rendimiento de Monoaromáticos (%) | $100\left(\frac{Fk_{F_8,CHXBNZ} - Fk_{F_0,CHXBNZ}}{Fk_{F_0,CHXBNZ}}\right)$ | 26,53 |
| Rendimiento de Naftenos (%) | $100\left(\frac{Fk_{F_8,BICHXL} - Fk_{F_0,BICHXL}}{Fk_{F_0,BICHXL}}\right)$ | 3,79 |
| Temperatura de Alimentación | Tem | 633,15 |
| Valor de la Función Objetivo | | 44,615 |

Tabla 3.2.11: Principales resultados del modelo (MD-Crit2-C1-M1)

■ **Modelo de Maximización de la cantidad de monoaromáticos (menos favorable)**

Para este caso se tomó como función objetivo la mostrada en la Ecuación 3.1.28. Los resultados obtenidos con respecto al lecho catalítico y sus dimensiones se muestran en la Tabla 3.2.12. Estos se representan graficamente en la Figura 3.2.3.

| | |
|--|-------|
| Cantidad de unidades del reactor (Ye_u) | 8 |
| Tipo de catalizador a utilizar (Yc_{ut}) | NiMo |
| Longitud del Reactor | 9,76m |
| Diámetro del Reactor | 3,26m |

Tabla 3.2.12: Resultados respecto al lecho catalítico y dimensiones

Los resultados obtenidos con respecto al flujo de hidrógeno consumido, conversión de aromáticos azufrados y rendimientos de monoaromáticos y naftenos se muestran en la Tabla 3.2.13.

| | | |
|------------------------------------|---|--------|
| Flujo H_2 consumido ($kmol/h$) | $Fk_{F_0,H_2} - Fk_{F_8,H_2}$ | 61,35 |
| Conversión de AR-S (%) | $100\left(\frac{Fk_{F_0,DIBZTHIO} - Fk_{F_8,DIBZTHIO}}{Fk_{F_0,DIBZTHIO}}\right)$ | 83,43 |
| Rendimiento de Monoaromáticos (%) | $100\left(\frac{Fk_{F_8,CHXBNZ} - Fk_{F_0,CHXBNZ}}{Fk_{F_0,CHXBNZ}}\right)$ | 37,17 |
| Rendimiento de Naftenos (%) | $100\left(\frac{Fk_{F_8,BICHXL} - Fk_{F_0,BICHXL}}{Fk_{F_0,BICHXL}}\right)$ | 3,44 |
| Temperatura de Alimentación | Tem | 633,15 |
| Valor de la Función Objetivo | | 43,88 |

Tabla 3.2.13: Principales resultados del modelo (MD-Crit3-C1-M1)

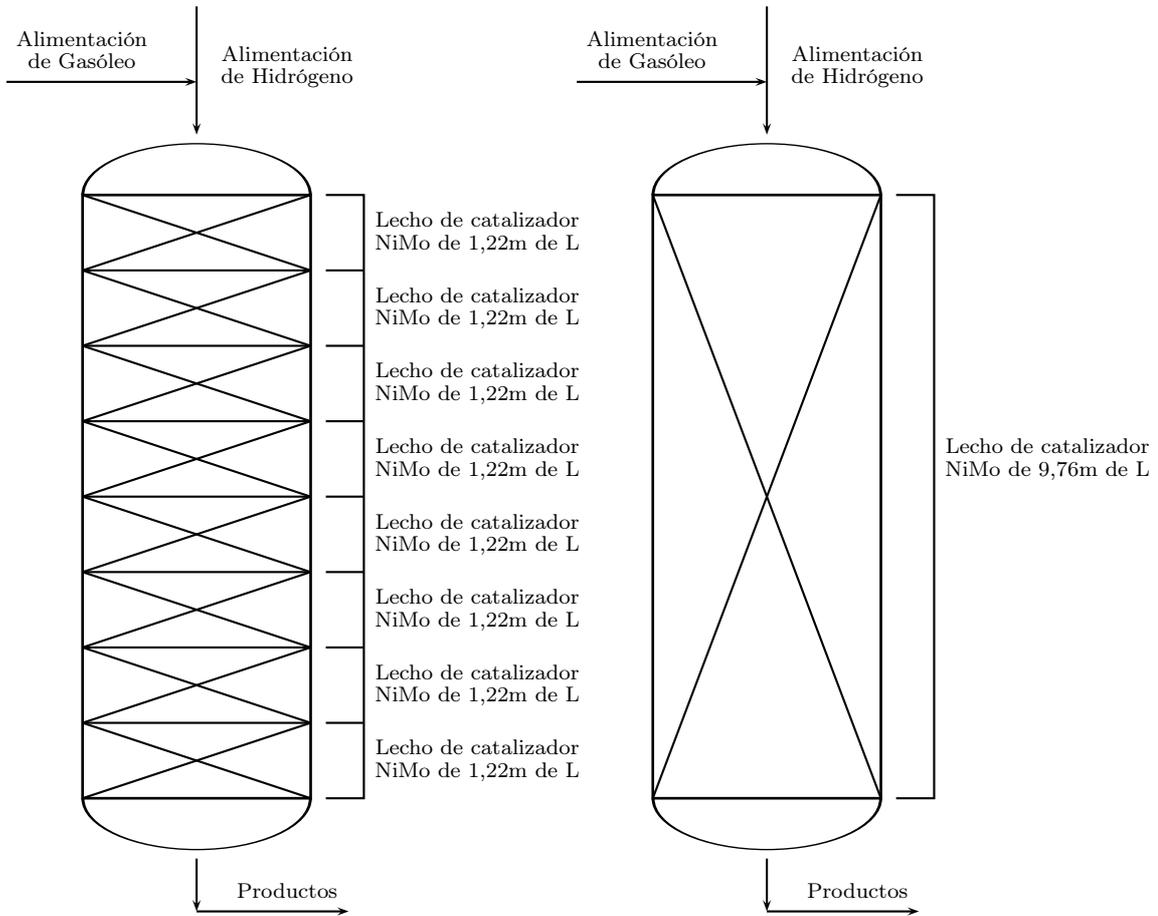


Figura 3.2.3: Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho (MD-Crit3-C1-M1)

■ **Modelo de minimización de la cantidad de aromáticos azufrados (más favorable)**

La función objetivo usada es la mostrada en la Ecuación 3.1.27. Los resultados obtenidos con respecto al lecho catalítico y sus dimensiones se muestran en la Tabla 3.2.14. Estos se representan graficamente en la Figura 3.2.4.

| | |
|---|-------|
| Cantidad de unidades del reactor (Y_{e_u}) | 8 |
| Tipo de catalizador a utilizar ($Y_{c_{ut}}$) | NiMo |
| Longitud del Reactor | 9,76m |
| Diámetro del Reactor | 3,26m |

Tabla 3.2.14: Resultados respecto al lecho catalítico y dimensiones

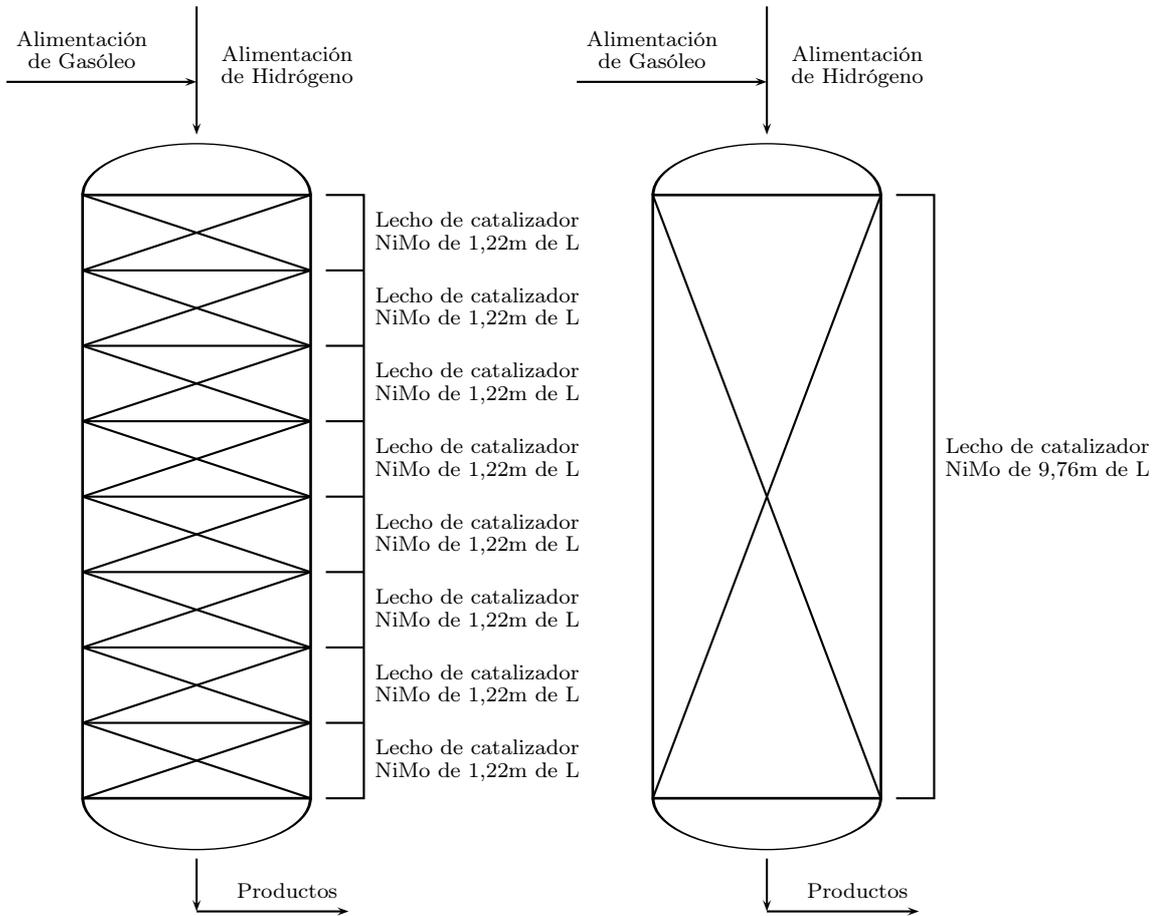


Figura 3.2.4: Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho (MD-Crit4-C1-M1)

Los resultados obtenidos con respecto al flujo de hidrógeno consumido, conversión de aromáticos azufrados y rendimientos de monoaromáticos y naftenos se muestran en la Tabla 3.2.15.

| | | |
|------------------------------------|--|--------|
| Flujo H_2 consumido ($kmol/h$) | $\frac{Fk_{F_0,H_2} - Fk_{F_8,H_2}}{Fk_{F_0,DIBZTHIO} - Fk_{F_8,DIBZTHIO}}$ | 61,35 |
| Conversión de AR-S (%) | $100 \left(\frac{Fk_{F_0,DIBZTHIO} - Fk_{F_8,DIBZTHIO}}{Fk_{F_0,DIBZTHIO}} \right)$ | 83,43 |
| Rendimiento de Monoaromáticos (%) | $100 \left(\frac{Fk_{F_8,CHXBNZ} - Fk_{F_0,CHXBNZ}}{Fk_{F_0,CHXBNZ}} \right)$ | 37,17 |
| Rendimiento de Naftenos (%) | $100 \left(\frac{Fk_{F_8,BICHXL} - Fk_{F_0,BICHXL}}{Fk_{F_0,BICHXL}} \right)$ | 3,44 |
| Temperatura de Alimentación | Tem | 633,15 |
| Valor de la Función Objetivo | | 1,6677 |

Tabla 3.2.15: Principales resultados del modelo (MD-Crit4-C1-M1)

A continuación presentamos un resumen de los resultados en donde se permiten comparar cada uno de ellos, para cada criterio optimizado.

| Criterio | Exist. Unidad | Tipo Catalizador | Long. Reactor | Diámetro Reactor |
|----------|---------------|------------------|---------------|------------------|
| Crit1 | 7 | NiMo | 7,94 | 2,65 |
| Crit2 | 8 | NiMo | 9,76 | 3,26 |
| Crit3 | 8 | 3 NiMo y 5 CoMo | 9,76 | 3,26 |
| Crit4 | 8 | NiMo | 9,76 | 3,26 |

Tabla 3.2.16: Principales resultados del modelo para cada criterio analizado

| Criterio | Flujo H_2 | AR-S (%) | Monoaromáticos (%) | Naftenos (%) | Temperatura | Función Objetivo |
|----------|-------------|----------|--------------------|--------------|-------------|------------------|
| Crit1 | 46,69 | 70,98 | 28,96 | 3,79 | 633,15 | 96506531,77 |
| Crit2 | 50,60 | 76,25 | 26,53 | 1,79 | 633,15 | 44,615 |
| Crit3 | 61,35 | 83,43 | 37,17 | 3,44 | 633,15 | 43,88 |
| Crit4 | 61,35 | 83,43 | 37,17 | 3,44 | 633,15 | 1,6677 |

Tabla 3.2.17: Principales resultados del modelo para cada criterio analizado

3.3. Discusión de los Resultados

Analizando parte de los resultados obtenidos por Verruschi (Tablas 3.2.16 y 3.2.17), concluyó que en la medida que la mejor opción es un solo tipo de catalizador, se observa que se logra a la salida del reactor gasóleos con bajo contenido de azufre, el contenido de monoaromático no se logra disminuir (Vease criterio 4), por lo que no es favorable para las regulaciones ambientales con respecto a la disminución de aromáticos. Además concluyó que el flujo de hidrógeno alimentado al reactor disminuye al considerar en la función objetivo los costos del mismo, obteniéndose que la mejor configuración es un único lecho de catalizador, un muy bajo consumo de hidrógeno, una mediana conversión de aromático azufrado y una disminución del rendimiento de monoaromático.

Discutiendo los resultados podemos aportar las siguientes conclusiones. Se observa que a mayor conversión de monoaromáticos, la longitud y diámetro del reactor es mayor (Vease Crit2, Crit3, Crit4 en las Tablas 3.2.16 y 3.2.17). En vista de que el costo del reactor está asociado al diseño, nos lleva a pensar que el costo del diseño del reactor aumenta, lo que no es ideal ya que se desea minimizar la cantidad de monoaromáticos pero minimizar el costo del diseño del reactor. También se puede observar que a medida que hay más rendimiento en la producción de naftenos, mayor es la longitud y diámetro del reactor, por lo tanto el costo de diseño tiende a aumentar. Esto no lleva a pensar que vistos como criterios o funciones objetivos, dichas funciones objetivos están en conflicto. Además, se puede observar que cuando se logra bajo contenido de azufre, la cantidad de monoaromáticos procesado es menor, por lo que esta configuración no es favorable para las regulaciones ambientales con respecto a la disminución de aromáticos.

De esta discusión, nos plantea las siguientes preguntas:

1. ¿Los criterios de minimizar el costo del reactor versus a minimizar la cantidad de aromáticos azufrados estarán en conflicto?
2. ¿Los criterios de minimizar el costo del reactor versus a maximizar la cantidad de naftenos estarán en conflicto?
3. ¿Si disminuyo la cantidad de monoaromáticos perjudicaré la disminución de aromáticos azufrados?
4. ¿Podría obtener resultados tal que la minimización de los costos del reactor no perjudique la minimización de los aromáticos azufrados y la maximización de la cantidad de naftenos producidos?
5. ¿Podría obtener una configuración óptima donde se satisfaga los la regulaciones ambientales sin que se perjudique la minimización del costo del reactor?
6. ¿Podría obtener una configuración óptima tal que la cantidad de naftenos aumente sin que se vea afectado la producción de aromáticos azufrados y monoaromáticos?
7. ¿Mas aún, podría obtener una configuración óptima donde todos los criterios de cumplan?

Todas estas preguntas, las contestaremos con el estudio multiobjetivo del problema. Cuando se requiere verificar si dos criterios cualesquiera estén en conflicto, haremos el estudio Bi-objetivo (Preguntas 1, 2 y 3). Para las preguntas 3 y 4 las responderemos haciendo el estudio multiobjetivo de los tres criterios por cada pregunta. Por último, haremos el estudio multiobjetivo general para hallar la configuración óptima tal que se satisfagan los cuatro criterios del problema.

CAPÍTULO 4

MODELO MULTIOBJETIVO Y RESULTADOS

En este capítulo se exponen los resultados obtenidos de esta investigación. En la Sección 4.1 se muestran todos los modelos multiobjetivos definidos en este trabajo, como fueron; los modelos de dos y tres objetivos. En general se expone el modelo de cuatro objetivos para la optimización de la distribución de catalizadores en el reactor de hidrotratamientos de destilados medios. La Sección 4.2 muestra la aplicación del algoritmo AUGMECON a los modelos multiobjetivos definidos conjuntamente con los resultados obtenidos para cada uno de ellos.

*La ciencia se construye
a partir de aproximaciones
que gradualmente se acercan
a la verdad. (Isaac Asimov)*

4.1. Modelo Multiobjetivo para la distribución de catalizadores en el reactor de hidrotreamiento de destilados medios

El modelo multiobjetivo que se planteará en esta investigación tiene las mismas características con respecto a los conjuntos definidos, los parámetros, las variables y restricciones del modelo de Distribución de catalizadores en el reactor de hidrotreamiento de destilados medios propuesto por Verruschi (Ver Capítulo 3, Sección 3.1.2). La diferencia radica en la definición de la función objetivo, la cual se presenta a continuación:

$$\text{Maximizar } \mathbf{Z} = \begin{cases} -z_1 = -CTA = -(Cinv + Cop) \\ z_2 = Fk_{F_8BICHXL} \\ -z_3 = -Fk_{F_8CHXBZ} \\ -z_4 = -Fk_{F_8DIBZT} \end{cases} \quad (4.1.1)$$

donde

$$\begin{aligned} Cinv &= AMR(Ct \cdot D^{1,05} \cdot L^{0,81} \cdot ye_u) + \\ AMC &((C_{NiMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot yc_{uNiMo}) + (C_{CoMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot yc_{uCoMo})) \\ Cop &= CH_2 \cdot Fmck_{F_8, H_2} \end{aligned}$$

Sujeto a las restricciones presentadas en las Ecuaciones (3.1.1-3.1.24) y las cotas para las variables presentes en las Ecuaciones (3.1.34-3.1.37).

Nótese que z_1 corresponde al costo total del reactor, z_2 la producción de naftenos, z_3 la cantidad de monoaromáticos y z_4 la cantidad de aromáticos azufrados.

En primer lugar definimos los siguientes modelos multiobjetivos con dos funciones objetivos (Bi-objetivo) para categorizar si las funciones están en conflicto o no. Esto nos permitirá responder las preguntas 1-3 planteadas en la Sección 3.3 del Capítulo 3.

- **Modelo Biobjetivo min-min (costos versus aromáticos azufrados)**

Para responder la primera pregunta definimos el siguiente modelo Biobjetivo:

$$\text{Minimizar } \mathbf{Z} = \begin{cases} z_1 = CTA = (Cinv + Cop) \\ z_4 = Fk_{F_8DIBZT} \end{cases} \quad (4.1.2)$$

donde

$$Cinv = AMR(Ct \cdot D^{1,05} \cdot L^{0,81} \cdot ye_u) +$$

$$\begin{aligned}
& AMC((C_{NiMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot y_{CuNiMo}) + (C_{CoMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot y_{CuCoMo})) \\
& Cop = CH_2 \cdot Fmck_{F_8, H_2}
\end{aligned}$$

Sujeto a las restricciones presentadas en las Ecuaciones (3.1.1-3.1.24) y las cotas para las variables presentes en las Ecuaciones (3.1.34-3.1.37).

Este modelo pretende minimizar el costo total del reactor y minimizar la cantidad de aromáticos azufrados y así verificar si existe conflicto entre estos dos objetivos.

■ **Modelo Biobjetivo min-max (costos versus naftenos)**

Para la pregunta planteada número 2, el modelo Biobjetivo que se define es el siguiente:

$$\text{Minimizar } \mathbf{Z} = \begin{cases} z_1 = CTA = (Cinv + Cop) \\ -z_2 = -Fk_{F_8 BICHXL} \end{cases} \quad (4.1.3)$$

donde

$$\begin{aligned}
& Cinv = AMR(Ct \cdot D^{1,05} \cdot L^{0,81} \cdot ye_u) + \\
& AMC((C_{NiMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot y_{CuNiMo}) + (C_{CoMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot y_{CuCoMo})) \\
& Cop = CH_2 \cdot Fmck_{F_8, H_2}
\end{aligned}$$

Sujeto a las restricciones presentadas en las Ecuaciones (3.1.1-3.1.24) y las cotas para las variables presentes en las Ecuaciones (3.1.34-3.1.37).

Con este modelo de optimización multiobjetivo, analizaremos si hay conflicto entre la minimización del costo total y maximización el producto deseado, el cual es la cantidad de naftenos producidos.

■ **Modelo Biobjetivo min-min (monoaromáticos versus aromáticos azufrados)**

Por último, definimos el modelo Biobjetivo que corresponde a la pregunta número 3 y que pretende comprobar si hay conflicto entre los objetivos, minimizar la cantidad de monoaromaticos y la cantidad de aromáticos azufrados.

$$\text{Minimizar } \mathbf{Z} = \begin{cases} z_3 = Fk_{F_8 CHXBNZ} \\ z_4 = Fk_{F_8 DIBZT} \end{cases} \quad (4.1.4)$$

donde

$$\begin{aligned}
& Cinv = AMR(Ct \cdot D^{1,05} \cdot L^{0,81} \cdot ye_u) + \\
& AMC((C_{NiMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot y_{CuNiMo}) + (C_{CoMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot y_{CuCoMo})) \\
& Cop = CH_2 \cdot Fmck_{F_8, H_2}
\end{aligned}$$

Sujeto a las restricciones presentadas en las Ecuaciones (3.1.1-3.1.24) y las cotas para las variables presentes en las Ecuaciones (3.1.34-3.1.37).

Seguidamente, definimos los modelos multiobjetivos con tres funciones objetivos (Tri-objetivo) que nos permitirá responder las preguntas 4-5 planteadas en la Sección 3.3 del Capítulo 3.

■ **Modelo Triobjetivo min-max-min (costos-naftenos-aromáticos azufrados)**

Para la pregunta número 4, el modelo Triobjetivo que se define es el siguiente:

$$\text{Minimizar } \mathbf{Z} = \begin{cases} z_1 = CTA = (Cinv + Cop) \\ -z_2 = -Fk_{F_8BICHXL} \\ z_4 = Fk_{F_8DIBZT} \end{cases} \quad (4.1.5)$$

donde

$$\begin{aligned} Cinv &= AMR(Ct \cdot D^{1,05} \cdot L^{0,81} \cdot ye_u) + \\ &AMC((C_{NiMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot yc_{uNiMo}) + (C_{CoMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot yc_{uCoMo})) \\ Cop &= CH_2 \cdot Fmck_{F_8, H_2} \end{aligned}$$

Sujeto a las restricciones presentadas en las Ecuaciones (3.1.1-3.1.24) y las cotas para las variables presentes en las Ecuaciones (3.1.34-3.1.37).

Para este caso analizaremos si se pueden obtener resultados tal que se satisfagan los objetivos de disminuir o minimizar el costo del diseño de reactor y la cantidad de aromáticos azufrados y maximizar el producto deseado, el cual es la cantidad de naftenos producidos.

■ **Modelo Triobjetivo max-min-min (naftenos-monoaromáticos-aromáticos azufrados)**

Para la pregunta número 5, el modelo Triobjetivo que se define es el siguiente:

$$\text{Minimizar } \mathbf{Z} = \begin{cases} -z_2 = -Fk_{F_8BICHXL} \\ z_3 = Fk_{F_8CHXBNZ} \\ z_4 = Fk_{F_8DIBZT} \end{cases} \quad (4.1.6)$$

donde

$$\begin{aligned} Cinv &= AMR(Ct \cdot D^{1,05} \cdot L^{0,81} \cdot ye_u) + \\ &AMC((C_{NiMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot yc_{uNiMo}) + (C_{CoMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot yc_{uCoMo})) \\ Cop &= CH_2 \cdot Fmck_{F_8, H_2} \end{aligned}$$

Sujeto a las restricciones presentadas en las Ecuaciones (3.1.1-3.1.24) y las cotas para las variables presentes en las Ecuaciones (3.1.34-3.1.37).

Mediante el modelo definido en (4.1.6), analizaremos si se pueden obtener resultados tal que se satisfagan los objetivos de minimizar la cantidad de aromáticos azufrados y monoaromáticos y maximizar la cantidad de naftenos producidos.

Como punto central de esta investigación, nos centraremos en el objetivo principal de la misma, el cual es hallar una distribución óptima de catalizadores en el reactor de hidrotreatmento de destilados medios tal que se cumplan todos los criterios. Para este caso resolveremos el modelo multiobjetivo dado en (4.1.1). Presentaremos las componentes de interés de las variables que representan el conjunto de soluciones eficientes y el conjunto de soluciones no dominadas o frente de Pareto.

4.2. Aplicación de AUGMECON para la obtención de soluciones del modelo multiobjetivo

Para la Solución de cada uno de los modelos planteados en la Sección 4.1 utilizamos el método escalar de optimización multiobjetivo conocido como Método de ϵ -Restricciones, con una serie de ventajas que hacen definir un método aumentado conocido como AUGMECON [18]. El algoritmo está implementado para tres funciones objetivos y para problemas de programación lineal. Se realizaron cambios en alguna de las líneas de código para adaptar el algoritmo a cuatro funciones objetivos y a la resolución de MINLP, este se muestra en el Apéndice A.

En primer lugar mostraremos los frentes de Pareto de los problemas Biobjetivos, luego presentaremos los resultados para los modelos Triobjetivos y por último los resultados para el modelo de cuatro objetivos (modelo principal). Para este último caso haremos un análisis detallado que permita mostrar la configuración óptima de catalizadores para el reactor de hidrotreatmento de destilados medios.

4.2.1. Resultados y análisis obtenidos para los modelos Biobjetivos

Se realizaron corridas para cada uno de los problemas Biobjetivos definidos en la Sección 4.2, usando el algoritmo AUGMECON con 50 puntos en la grilla. El tiempo de duración promedio para cada corrida fue de 103,311 segundos. Los resultados gráficos fueron obtenidos usando MATLAB.

- **Frente de Pareto del Modelo Biobjetivo min-min (costos versus aromáticos azufrados)**

El frente de pareto del modelo Biobjetivo mostrado en (4.1.2) se muestra en la Figura 4.2.1.

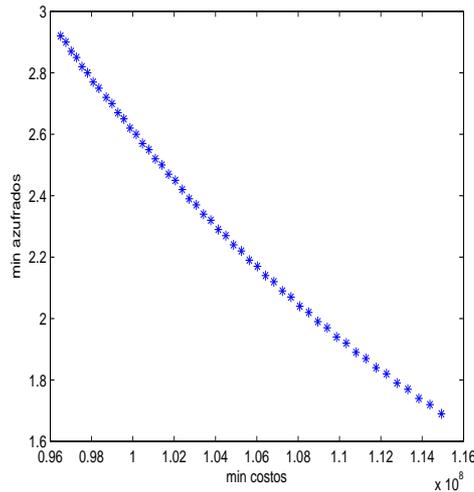


Figura 4.2.1: Frente de pareto del modelo (4.1.2)

Lo primero que podemos notar en esta figura es el hecho que las funciones objetivos son contradictorias ya que a medida que el costo del reactor disminuye, la cantidad de aromáticos azufrados aumenta y viceversa.

- **Frente de pareto del Modelo Biobjetivo min-max (costos versus naftenos)**

Para el modelo formulado en (4.1.3) se muestra el frente de pareto en la Figura 4.2.2.

Para este caso se cumple que a medida que el costo del diseño del reactor disminuye, la cantidad de naftenos producido tiende a disminuir cuando lo ideal es que aumente, por lo tanto podemos decir que estos criterios están en conflicto.

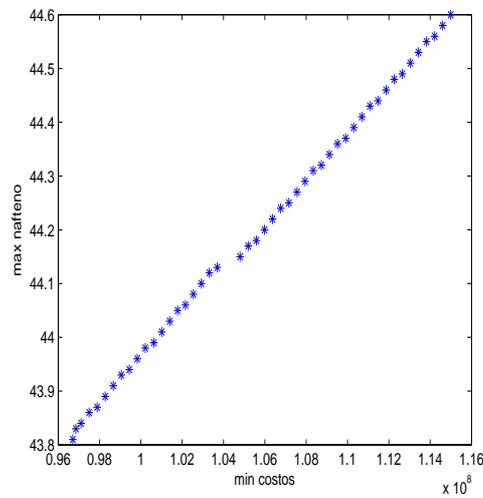


Figura 4.2.2: Frente de Pareto del modelo 4.1.3

- **Frente de Pareto del Modelo Biobjetivo min-min (monoaromáticos versus aromáticos azufrados)**

La Figura 4.2.3 muestra el frente de Pareto para el caso de minimización de monoaromáticos y aromáticos azufrados.

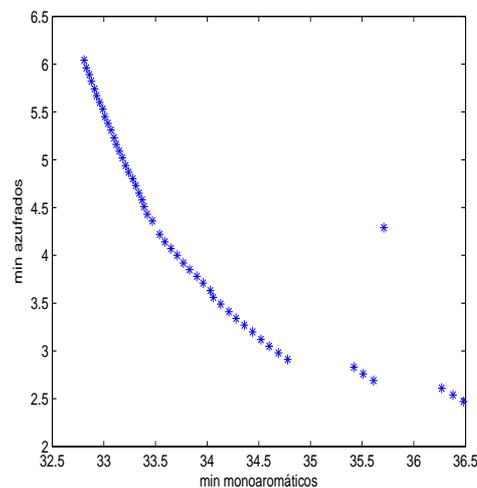


Figura 4.2.3: Frente de Pareto del Modelo (4.1.4)

Observando la gráfica no podemos afirmar a simple vista que los criterios son contradictorios. Analizando en detalle los resultados de las soluciones eficientes, en particular con las variables de existencia de unidades (Ye_u) y tipo de catalizador para cada unidad (Y_{cut}). Se presentan tres diseños de reactores para este caso: (i) El reactor tiene 7 unidades y se usa tipo de catalizador CoMo. (ii) El reactor posee 8 unidades y el tipo de catalizador por unidad es

CoMo. (iii) El reactor posee 8 unidades con una unidad de tipo de catalizador NiMo y las restantes CoMo.

Las diferencias entre el grupo (i) y (ii) es la longitud total que son 0,9937m y 1,1357m por unidad, respectivamente. El punto atípico mostrado en la Gráfica representa el caso donde el diseño del reactor es la mostrada en (iii). de este análisis podemos concluir que hay tres diseños del reactor. Para los diseños (i) y (ii) se cumple que a medida que la cantidad de monoaromáticos disminuye, la cantidad de aromáticos azufrados aumenta. En cierta forma decimos que los objetivos son contradictorios.

4.2.2. Resultados y análisis obtenidos para los modelos Triobjetivos

Los resultados que se exponen a continuación muestran los frentes de pareto para los modelos con tres funciones objetivos (4.1.5,4.1.6) definidos en la Sección 4.1. Los modelos pretenden dar respuesta a las preguntas 4 y 5 planteadas en el Capítulo anterior.

- **Frente de Pareto del Modelo Triobjetivo min-max-min (costos-naftenos-aromáticos azufrados)**

En primer lugar, mostramos el frente de pareto del modelo mostrado en (4.1.5). Este relaciona el costo del reactor, la producción de naftenos y la cantidad de monoaromáticos.

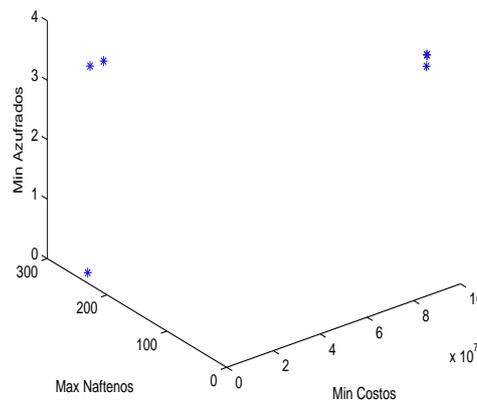


Figura 4.2.4: Frente de pareto del Modelo (4.1.5)

En este caso no podemos asegurar que la minimización de los costos no perjudicará los otros dos objetivos, ya que la información mostrada en el gráfico

es insuficiente para dar una conclusión acertada. Sin embargo podemos decir que estos tres objetivos necesariamente no están en conflicto, en caso contrario la gráfica mostraría un punto solución único.

- **Modelo Triobjetivo max-min-min (naftenos-monoaromáticos - aromáticos azufrados)**

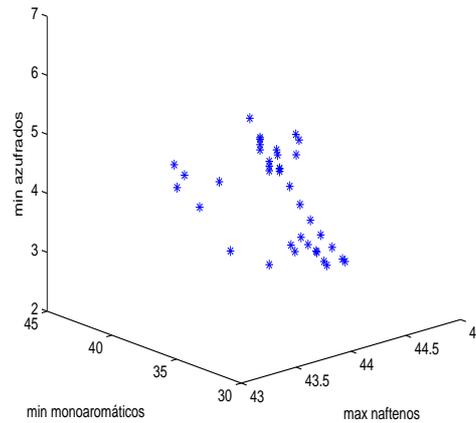


Figura 4.2.5: Frente de Pareto del Modelo (4.1.6)

En la Figura 4.2.5 se muestra el frente de Pareto de las funciones objetivos de costos, monoaromáticos y aromáticos azufrados. La respuesta a la pregunta por la cual se planteó este modelo se responde por el hecho de que el gráfico muestra un frente de Pareto el cual representa soluciones no dominadas, estas soluciones satisfacen cada uno de los objetivos planteados de forma equilibrada. La configuración del reactor, tal que no se perjudique la producción de naftenos y cumpliendo con los objetivos de minimización de monoaromáticos y aromáticos azufrados existe y no es única. Cada solución no dominada representa una configuración del reactor.

4.3. Resultados y análisis obtenidos para el modelo de cuatro objetivos

El modelo de cuatro objetivos representado en la Ecuación 4.1.1 se definió en términos del método de resolución de la siguiente forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Maximizar} \quad \mathbf{Z} = -z_1 + \epsilon \times (s_2/r_2 + s_3/r_3 + s_4/r_4) \\ \text{s.a.} \quad \quad \quad Fk_{F_8BICHXL} - s_2 = \epsilon_2 \\ \quad \quad \quad -Fk_{F_8CHXBNZ} - s_3 = \epsilon_3 \\ \quad \quad \quad -Fk_{F_8DIBZT} - s_4 = \epsilon_4 \end{array} \right. \quad (4.3.1)$$

donde

$$C_{inv} = AMR(Ct \cdot D^{1,05} \cdot L^{0,81} \cdot ye_u) +$$

$$AMC((C_{NiMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot y_{CuNiMo}) + (C_{CoMo} \sum_{u \in U} V_u \cdot y_{CuCoMo}))$$

$$C_{op} = CH_2 \cdot Fmck_{F_8, H_2}$$

Sujeto a las restricciones del modelo presentadas en las Ecuaciones (3.1.1-3.1.24) y las cotas para las variables presentes en las Ecuaciones (3.1.34-3.1.37).

La tabla de pagos obtenida para definir los rango de variación ϵ se muestra en la Tabla 4.3.1

| | z1 | z2 | z3 | z4 |
|----|-------------|-------------|-------------|------------|
| z1 | 9,650653E+7 | 43,75344387 | 39,49352206 | 3,56946875 |
| z2 | 1,082347E+8 | 44,62121650 | 39,32848028 | 2,56358259 |
| z3 | 9,928701E+7 | 43,41236289 | 32,80999655 | 6,03534422 |
| z4 | 1,154973E+8 | 44,46555374 | 43,88431342 | 1,66776603 |

Tabla 4.3.1: Tabla de Pagos de Modelo 4 objetivos

El rango de variación de los $\epsilon_i \quad i = 1, 2, 3$ para las restricciones de funciones objetivos es el siguiente:

$$\epsilon_2 \in [43, 41236289; 44, 62121650]$$

$$\epsilon_3 \in [43, 88431342; 32, 80999655]$$

$$\epsilon_4 \in [6, 03534422; 1, 66776603]$$

Nótese que los valores mínimos del rango de variación son obtenidos por los valores diagonales de la Tabla 4.3.1, estos son los valores mínimos de los objetivos individuales. Los valores máximos del rango de variación es el mayor valor entre las columnas respectivas al objetivo que define. La corrida para este caso se realizó para 40 puntos que dividen cada uno de los rangos de variación. El tiempo de ejecución fue de 2,55hr aproximadamente.

La Tabla 4.3.2 muestra las soluciones no dominadas del espacio objetivo. Estas representan los óptimos del modelo y el experto puede escoger la solución que más se ajuste a la realidad y a las condiciones que se quieren cumplir con respecto al diseño y distribución de catalizadores en el reactor.

Las soluciones no dominadas mostradas en la tabla representan una solución eficiente en el espacio objetivo. En la Tabla 4.3.3 se muestran las componentes de interés de cada solución eficiente correspondientes al diseño del reactor.

La representaciones gráficas con respecto al diseño del reactor para las soluciones mostradas de representan el las Figuras 4.3.2-4.3.2.

| Nro. Solucion | Crit1 | Crit2 | Crit3 | Crit4 |
|---------------|-------------|-------------|-------------|------------|
| 1 | 6,012061E+6 | 226,1800 | 0 | 6,04000000 |
| 2 | 9,650653E+7 | 43,75000000 | 41,26000000 | 2,92000000 |
| 3 | 9,670818E+7 | 43,81000000 | 39,43000000 | 3,44000000 |
| 4 | 9,685902E+7 | 43,83000000 | 38,60000000 | 3,63000000 |

Tabla 4.3.2: Soluciones no Dominadas

| Variables | Soluciones no Dominadas | | | |
|----------------------|-------------------------|-----------|-----------------|-----------------|
| | 1 | 2 | 3 | 4 |
| Y_{e_u} | 7 | 7 | 7 | 7 |
| Y_{cut} | 1 NiMo y 6CoMo | NiMo | 4 NiMo y 3 CoMo | 3 NiMo y 4 CoMo |
| Longitud del Reactor | 1,22m/u | 1,1357m/u | 1,1357m/u | 1,1357m/u |
| Diámetro del Reactor | 2,65m | 2,65 | 2,65 | 2,65 |

Tabla 4.3.3: Resultados respecto al lecho catalítico y dimensiones

Cualquiera que sea la solución escogida para el diseño del reactor y la distribución de catalizadores es una buena representación, ya que las soluciones no dominadas son los valores óptimos para el problema. Queda de manos del experto escoger la que mejor se adecue a la realidad y limitaciones existentes con respecto a materia prima y catalizadores disponibles para cumplir el objetivo real.

La primera configuración para la distribución de catalizadores se muestra en la Figura 4.3.1 donde se obtuvo un reactor de 7 unidades con una longitud de 8,54 y un diámetro de 2,65.

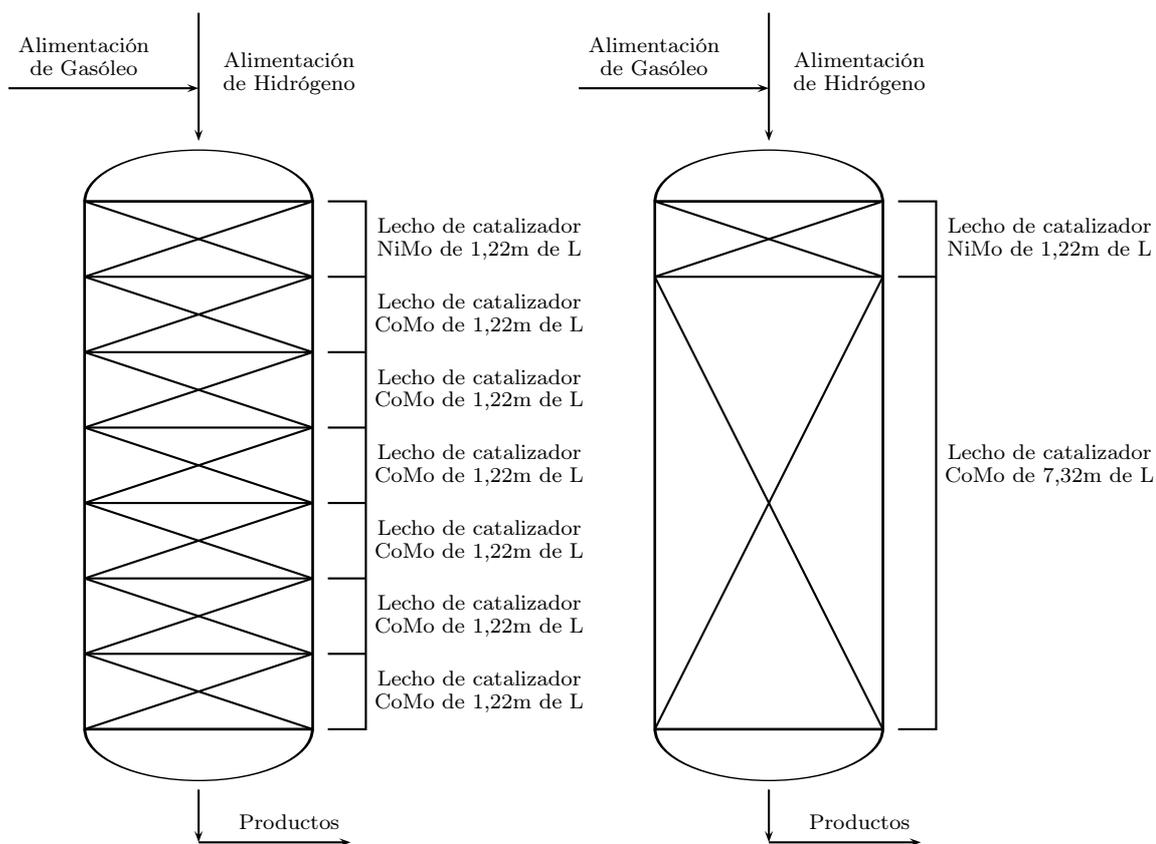


Figura 4.3.1: Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho Sol. 1.

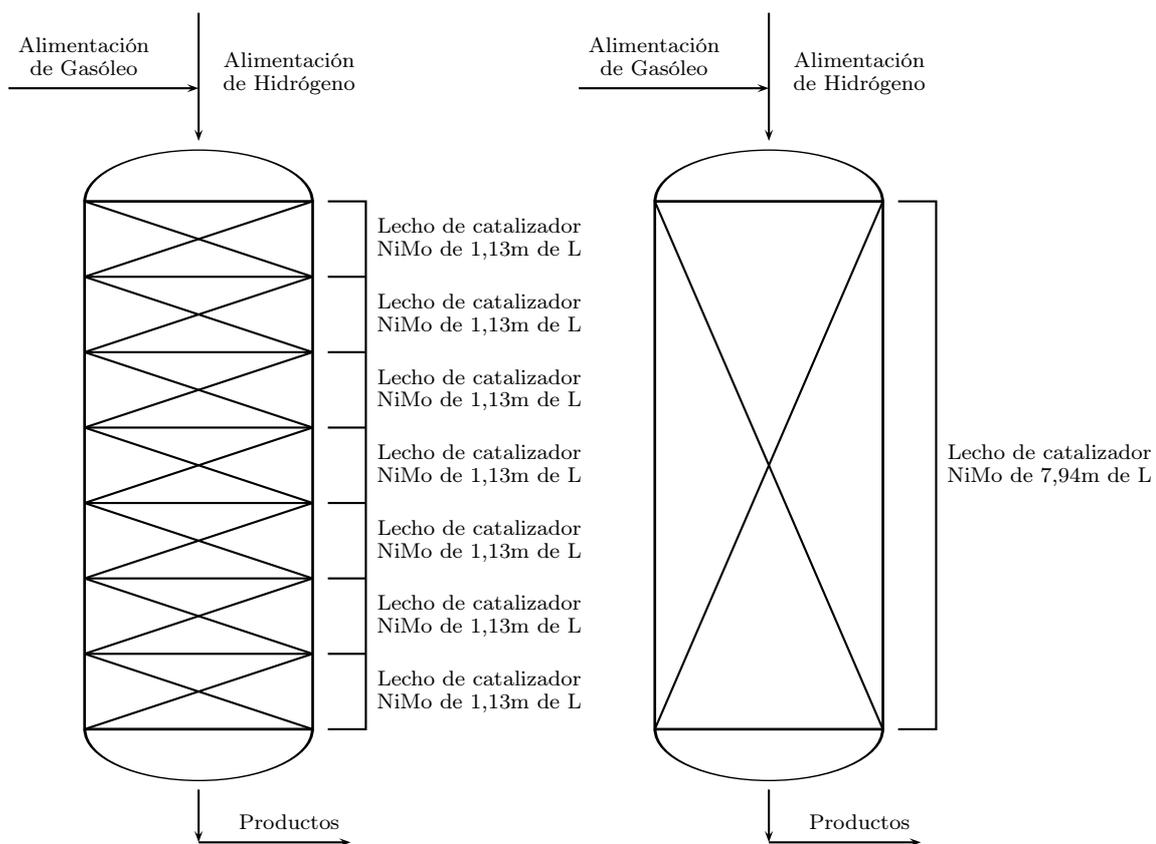


Figura 4.3.2: Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho Sol. 2.

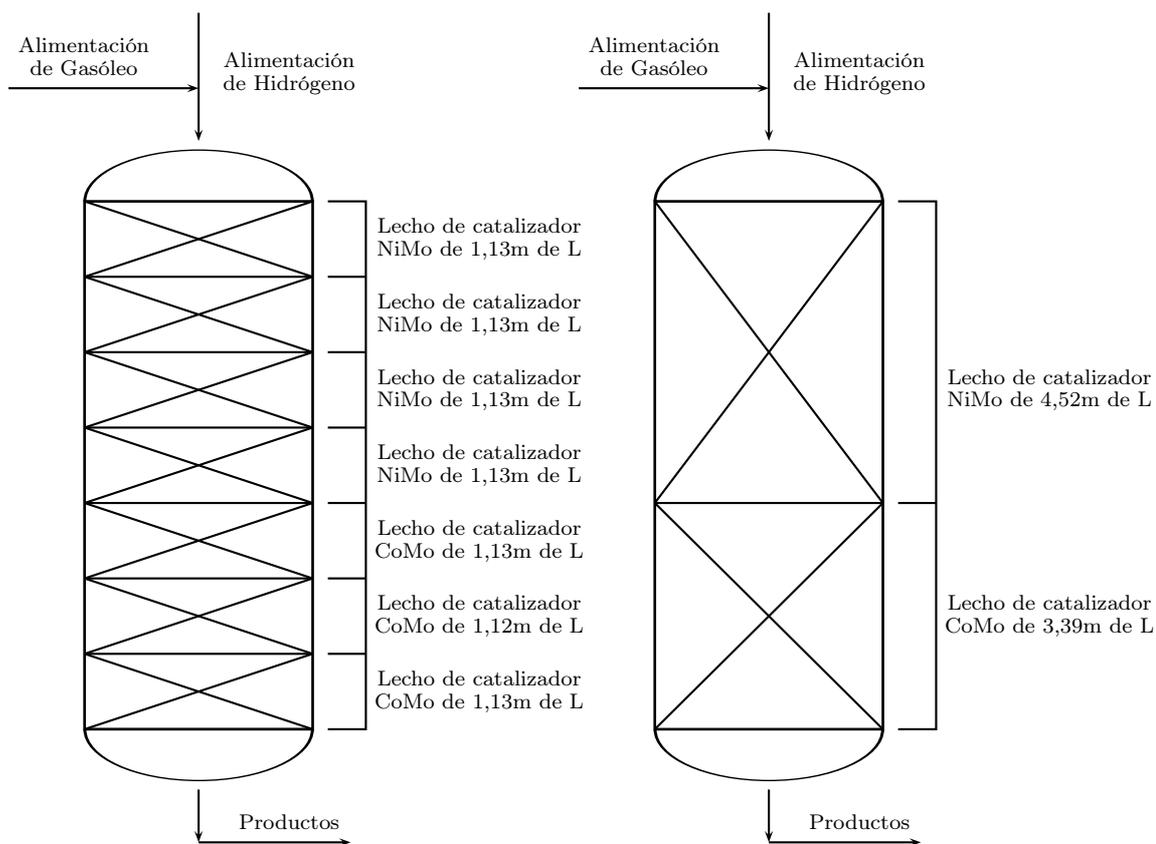


Figura 4.3.3: Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho Sol. 3.

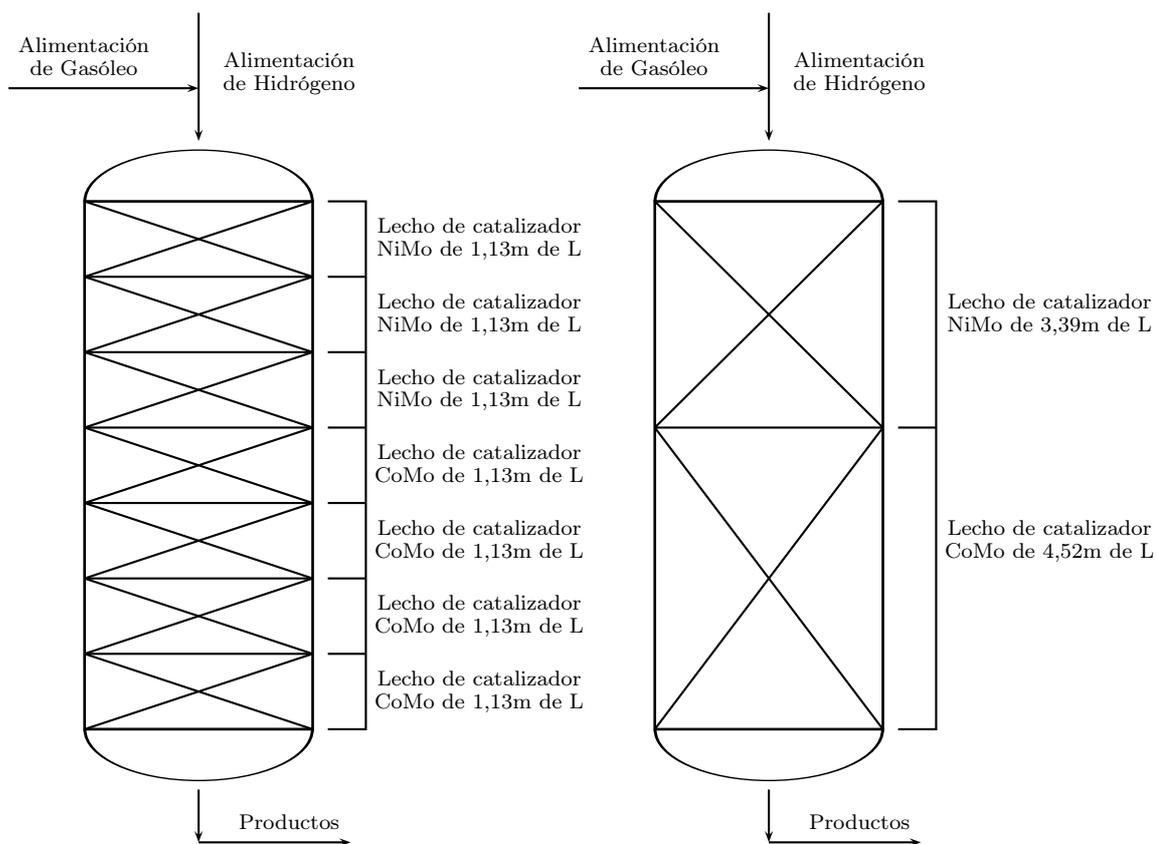


Figura 4.3.4: Resultados del modelo de la disposición del catalizador, tipo de catalizador y tamaño del lecho Sol. 4.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES

La principal contribución de este trabajo ha sido la de hallar la mejor distribución de catalizadores en el reactor de destilados medios, la cual plantea una discretización del reactor para el diseño del mismo y la colocación de distintos catalizadores. Se pudo obtener la mejor distribución de los tipos de lecho catalíticos NiMo y CoMo, los cuales son los más utilizados en el reactor de destilados medios. En este capítulo se presentan las conclusiones y recomendaciones de los resultados obtenidos (Secciones 5.1, 5.2) y en la Sección 5.3 se exponen los aportes principales de este trabajo de investigación.

*La ciencia no admite excepciones,
de lo contrario no habría
determinismo en la ciencia,
o más bien, no habría ciencia.
Claude Bernard*

5.1. Conclusiones

El desarrollo y aplicación de nuevas técnicas para la obtención de soluciones para el modelo de distribución de catalizadores en el reactor de destilados medios fue lo que impulsó a realizar esta investigación, esto fundamentado a la gran complejidad que tienen estos modelos como son la no linealidad de las limitaciones y enterabilidad de las soluciones, así como también la exigencia de cumplir varios objetivos a la vez.

En el presente trabajo se expuso el desarrollo multiobjetivo del problema de distribución de catalizadores para el caso determinístico y se resolvió mediante una técnica escalar de solución de problemas de este tipo, es decir el método de ϵ -restricciones aumentado (AUGMECON [18]). El modelo planteado por Verruschi representa el reactor de hidrotreatmento de destilados medios como una discretización del mismo, en el cual se quiere obtener una configuración óptima del lecho catalítico con dos tipos de catalizadores más usados. Esto debido a que se quiere cumplir con las exigencias de protección ambiental de manera que se reduzca el contenido de sulfurados y aromáticos en el gasóleo. Lo que trajo como consecuencia el planteamiento de nuevas configuraciones de reactores.

En el capítulo 2 se mostró la teoría necesaria para el desarrollo de la investigación, entre ellas se destaca la teoría de MINLP y optimización multiobjetivo. En el Capítulo 3 se muestran los antecedentes del problema a tratar, donde se define el modelo que representa la abstracción de la realidad del diseño y distribución de catalizadores en el reactor, y los resultados obtenidos por Verruschi [20]. En el Capítulo 4 se replantea el modelo de distribución de catalizadores en el reactor de hidrotreatmento como un modelo multiobjetivo y se presentan los resultados obtenidos por la aplicación del método AUGMECON a dicho modelo.

El modelo multiobjetivo define la función objetivo como un vector donde sus componentes son los objetivos individuales que se desean alcanzar, esto con el fin de determinar soluciones que satisfagan los objetivos de manera equilibrada. Para la investigación, se cuenta con un vector función objetivo formado por cuatro componentes: el costo del diseño del reactor, la producción de naftenos, la cantidad de monoaromáticos y la cantidad de aromáticos azufrados. Nos planteamos minimizar el primero, tercero y cuarto, y maximizar el segundo objetivo.

Al analizar algunos de los resultados obtenidos en la tesis doctoral de Verruschi [20] nos planteamos fundamentar mediante optimización multiobjetivo el comportamiento químico que ella logró obtener. Esto trajo como consecuencia una serie de inquietudes, entre las cuales se plantean estudiar la existencia de conflictos entre dos y tres funciones objetivos. Al realizar un análisis gráfico de las soluciones (frente de pareto) de los modelos multiobjetivos planteados se verificó: (a) existe conflicto entre la minimización del costo del diseño del reactor y los aromáticos azufrados; (b) existe conflicto entre la minimización de costos y la maximización de la producción de naftenos; (c) se evidencia conflictos dependiendo de la configuración de catalizadores en el reactor, entre la minimización de monoaromáticos y aromáticos

azufrados. Para verificar si las regulaciones ambientales se satisfacen sin perjudicar el costo del reactor se analizó el frente de pareto de estos objetivos y se evidenció que la información mostrada en el gráfico es insuficiente para dar una conclusión acertada. Para el frente de pareto obtenido por la maximización de naftenos y minimización de monoaromaticos y aromaticos azufrados se muestra un frente de pareto con múltiples soluciones no dominadas, estas soluciones satisfacen cada uno de los objetivos planteados de forma equilibrada.

El problema de distribución de catalizadores en el reactor de destilados medios se representó en esta investigación mediante un modelo de optimización multiobjetivo con cuatro funciones objetivos, conservando las limitaciones modeladas en [20] haciendo uso de la programación matemática. Este modelo se convirtió en uno de un solo objetivo usando la técnica escalar conocida como el método de ϵ -restricciones aumentado. Se estableció el rango de variación de los parámetros ϵ de las restricciones objetivos, lo cual se logró mediante la tabla de pagos. Al resolver los modelos generados, fue necesario el uso de herramientas de GAMS que resuelve MINLP, como lo es DICOPT. Con el algoritmo AUGMECON se obtuvo soluciones del frente de pareto que en el espacio solución muestran configuraciones para el lecho catalítico en el reactor de destilados medios, donde el tomador de decisiones puede escoger entre alguna de ellas tomando en cuenta sus necesidades inmediatas.

5.2. Recomendaciones

Después de la realización de este trabajo se presentan las siguientes sugerencias y recomendaciones:

Presentar los resultados obtenidos al experto para discutir y analizar químicamente los resultados obtenidos e incentivar a la continuación de este estudio, para lograr a mediano o largo plazo la implementación.

Presentar las soluciones de los otros modelos propuestos por Verruschi, de manera que la configuración óptima se pueda realizar tomando en cuenta las variables que presentan incertidumbre en el problema.

Resolver el modelo multiobjetivo con una técnica de optimización multiobjetivo donde el costo computacional en términos del tiempo de ejecución se disminuya. Por ejemplo, usar técnicas heurísticas y/o de lógica difusa (fuzzy logic).

5.3. Aportes de la Investigación

Primeramente, se logró fundamentar en términos matemáticos algunos de los resultados obtenidos por verruschi en su tesis doctoral, mediante la representación de los frentes de pareto que son las soluciones no dominadas (valores óptimos) de los problemas (Bi-Tri)objetivos, los cuales responden algunas de las relaciones químicas presentes en la distribución del lecho catalítico y diseño del reactor de hidrotratamiento de destilados medios.

Se obtuvieron configuraciones del lecho catalítico y diseño del reactor donde se garantiza que los objetivos están equilibrados, es decir, que la mejora de uno de los objetivos no empeorará alguno de los otros. El experto podrá escoger entre alguna de las configuraciones que mejor se adapte a la situación real.

APÉNDICE A

IMPLEMENTACION DEL MODELO Y ALGORITMO DE SOLUCIÓN

A.1. Modelo determinístico para la distribución de catalizadores en el reactor de hidrotratamiento de destilados medios en GAMS

\$TITLE Modelo Multiobjetivo

\$offsymlist offsymxref

\$ontext

NOTA: Corrida con las siguientes características:

Funciones Objetivos: minimizar el costo total del reactor

maximizar la producción de naftenos

minimizar la cantidad de aromáticos azufrados

minimizar la cantidad de monoaromáticos

Numero maximo de division del reactor NR = 8

Relacion L/D = 3

Metodo MULTIOBJETIVO AUGMENCOM

Metodo MINLP DICOPT

Metodo NLP SNOP

Metodo MIP CPLEX

Modelo simple que busca la selección entre dos tipo de catalizador por unidad y la existencia de la unidad tal que maximizar la producción de monoaromatico

Fobj1 : Minimizar el costo del diseño del reactor

Fobj2 : Minimizar la cantidad de aroñático azufrado
 Fobj3 : Maximizar la cantidad de monoaromático
 Fobj4 : Maximizar la producción de naftenos
 Yeu : es la variable binaria de la existencia o no de la unida u
 Yeu = 0 La unidad u no existe
 Yeu = 1 La unidad u existe
 Ycu : es la variable binaria segun el tipo de catalizador de la unida u
 Ycu = 0 La unidad no utiliza el catalizador t en la unidad u
 Ycu = 1 La unidad utiliza el catalizador t en la unidad u

 Autores: Ing.(Msc) Elisa Marisol Verruschi Pigliacampo
 Lic. Marlyn Dayana Cuadrado Guevara
 Colaboradores:
 Ing. Alexander Peraza
 Ing. Juan Freitez
 Ing. Richard Vargas
 Titulo: Distribución de Catalizadores en el Reactor de Hidrotratamiento
 de Destilados Medios, vía Optimización Multiobjetivo
 Version no lineal entera multiobjetivo

 A : AROMATICOS AZUFRADOS = Dibenzotiofeno = DIBZTHIO
 B : HIDROGENO = Hidrogeno = H2
 C : MONOAROMATICOS = Ciclohexilbenceno = CHXBNZ
 D : DIAROMATICOS = Bifenil = BIPHENYL
 E : SULFURO DE HIDROGENO = Sulfuro de Hidrogeno = H2S
 F : NAFTENOS = Biciclohexil = BICHXL
 G : PARAFINA + TRI = Pentadecano + Nonadecano + Triatomicos = PARAF

 \$offtext

 * Opciones del programa GAMS

 OPTIONS DECIMALS = 8;

 * Conjunto simples

 SETS
 C "Corrientes" /F0*F8/
 K "Compuestos" /DIBZTHIO,H2,CHXBNZ,BIPHENYL,H2S,BICHXL,PARAF/
 U "Unidades del sistema " /R0*R7/
 Ur(U) "Unidades de salida del reactor" /R1*R7/
 Ue(U) "Unidades de entrada del reactor " /R0*R7/
 T "Tipo de catalizador" /CoMo,NiMo/
 R "Ecuaciones de reacion quimica" /1*3/
 P "parametros cineticos"/Ko,AH/

```

Prop "Propiedades fisico quimicas " /1*16/
; *****
* Conjuntos compuestos
*****
SETS
U1(u) "Subconjunto de unidades" /R2*R7/
CeU(C,U) "Corrientes que entran a los lechos y que cambian de moles" /F0.R0, F1.R1,
F2.R2, F3.R3, F4.R4,F5.R5, F6.R6, F7.R7/
Csu(C,U) "Corrientes que salen de los lechos y que cambian de moles" /F1.R0, F2.R1,
F3.R2, F4.R3, F5.R4,F6.R5, F7.R6, F8.R7/
;
*****
* Parámetros
*****
PARAMETERS
Fko(K) "Flujo molar inicial de k (Kmol/hr)" /DIBZTHIO 10.06680, H2 704.42500,
CHXBNZ 31.99350, BIPHENYL 21.86900, H2S 0.0001, BICHXL 42.98500, PARAF
89.77570/
Pmk(K) "Pesos moleculares del compuesto k " / DIBZTHIO 184.2620, H2 2.0160,
CHXBNZ 160.2560, BIPHENYL 154.2110, H2S 34.0790, BICHXL 166.3060, PARAF
220.9495/
KA(T) "Constante de adsorcion del catalizador t" / CoMo 15399.8562, NiMo
11094.5931 /
Temn "Temperatura mínima del sistema" / 613.15 /
Temx "Temperatura máxima del sistema" / 633.15 /
vlo "Velocidad inferior en m/hr" /0/
vup "Velocidad superior en m/hr" /500/
Taolo "Tao minimo" /0.3/
Taoup "Tao maximo" /1.2/
LD "Relacion L/D" /3.0/
Pi "Valor de Pi" /3.141592654/
Lmax "Longitud maxima del reactor en m" /10.0/
Lmin "Longitud minima del reactor en m" /7.5/
NR "Numero maximo de reactores" /8/
;
*****
* Tablas
*****
* Ko(R,T)*Dcat(T)*Fcat para pasar de unidades de masa de cat a volumen del
reactor
* Dcat(T) "Densidad del catalizador t" / CoMo 710, NiMo 750 /
* Fcat "Fraccion de catalizador (Volcat/(Volcat+Volvacio)))" / 0.5 /
* La concentración de H2 es e-02 y esta multiplicada en el ko
*****
Table Ko(R,T)"Parametros cineticos P de la ecuacion E para el catalizador"

```

```

CoMo NiMo
1 2.48580E+15 3.37106E+15
2 1.24014E+06 1.02484E+06
3 3.11555E+06 4.78035E+06
;
Table EaR(R,T)“Parametros cineticos P de la ecuacion E para el catalizador”
CoMo NiMo
1 19384 19384
2 12414 12414
3 12140 12140
;
Table Gamao(K,T,R)“Parametros Estequiometrico ecuacion E para el catalizador”
CoMo.1 NiMo.1 CoMo.2 NiMo.2 CoMo.3 NiMo.3
DIBZTHIO -1.0000 -1.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
H2 -2.0000 -5.0000 -3.0000 -3.0000 -3.0000 -3.0000
CHXBNZ 0.0000 1.0000 -1.0000 -1.0000 1.0000 1.0000
BIPHENYL 1.0000 0.0000 0.0000 0.0000 -1.0000 -1.0000
H2S 1.0000 1.0000 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
BICHXL 0.0000 0.0000 1.0000 1.0000 0.0000 0.0000
;
*****
* Reacciones para el catalizador CoMo
* DIBZTHIO + 2H2 —> BIPHENYL + H2S
* CHXBNZ + 3H2 —> BICHXL
* BIPHENYL + 3H2 —> CHXBNZ
*
* Reacciones para el catalizador NiMo
* DIBZTHIO + 5H2 —> CHXBNZ + H2S
* CHXBNZ + 3H2 —> BICHXL
* BIPHENYL + 3H2 —> CHXBNZ
*****
DISPLAY Fko, Pmk, ko, EaR, Gamao, Temx;
*****
* Las opciones
*****
* Numero máximo de iteraciones
OPTIONS ITERLIM = 600000;
* Lista fila las 40 primeras columna de cada tipo
OPTIONS LIMCOL = 40;
* Lista fila las 25 primeras filas de cada tipo
OPTIONS LIMROW = 25;
* Optimizadores a utilizar
OPTIONS MINLP = DICOPT;
OPTIONS NLP = SNOPT;
OPTIONS MIP = CPLEX;

```

```

* Criterio de terminacion relativo para el MIP
OPTIONS OPTCR = 0.000001;
* Tiempo limite para el optimizador. Generalmente en segundos de CPU
OPTIONS RESLIM = 36000;
* Opcion para imprimir informe solucion de resultados
OPTIONS SOLPRINT = ON;
OPTION SYSOUT = ON;
*****
* Variables
*****
VARIABLES
Yc(u,t),Ye(u),Rkc(U,K,T,R),Rk(U,K),Ql(c),SumaQl(u),Tem,Cck(c,k),Cu(u,k),
Fk(c,k),F(c),Fmck(c,k),Fm(c),rho(c),V(u),Lu,Tao(u),S,L(u),D,N(k),Z;
*****
* Variables positivas
*****
POSITIVE VARIABLES
Ql(c) Flujo vol de la corriente en m3-hr
SumaQl(u) Flujo vol de la unidad en m3-hr
Tem Temperatura en K
Cck(c,k) Concentraciones de los compuestos corriente en kmol-m3
Cu(u,k) Concentraciones de los compuestos por unidades en kmol-m3
Fk(c,k) Flujo molar de los compuestos por corriente en kmol-hr
F(c) Flujo molar total por corriente en kmol-hr
Fmck(c,k) Flujo masico de los compuestos por corriente en kg-hr
Fm(c) Flujo masico total por corriente en kg-kr
rho(c) Densidad en kg-m3
V(u) Volumen de la unidad u en m3 Volvacio+Volcat
Lu Longitud de las unidades
Tao(u) Tiempo de residencia de la unidad en hr
S Area transversal del volumen
L(u) Longitud
D Diametro del Reactor
N(k) Flujo no procesado
;
*****
* Variables Binaria
*****
BINARY VARIABLE
Yc(u,t) '(0=NO, 1=SI)Utiliza el tipo de catalizador t en la unidad u'
Ye(u) '(0=NO, 1=SI)Existe la unidad u'
;
*****
* Variables libre
*****

```

FREE VARIABLE

Rkc(U,K,T,R)

Rk(U,K)

Z Objetivo Maximizar produccion de aromaticos

;

* Ecuaciones

EQUATIONS

fobj Funcion objetivo

e01(u,k,t,r) Calculo del cambio de moles de la RQ1

e02(u,k,t,r) Calculo del cambio de moles de la RQ2

e04(u,k,t,r) Calculo del cambio de moles de la RQ3

e05(u,k) Selección del cambio de moles segun el tipo de cat

e06(u,k) Balance molar de concentraciones

e07(c) Calculo del flujo molar total

e08(c) Calculo del flujo volumetrico

e09(c,k) Calculo de las concentraciones de k en la corriente c

e10(u) Determinación de la existencia del cat

e11(u,k) Calculo de las concentraciones de k en la unidad u

e12(c,k) Calculo del Flujo masico de k en la corriente c

e13(c) Calculo del Flujo masico total en la corriente c

e14(u) Balance masico

e15(u) Calculo de los caudales volumétricos en función de la unidad

e16(u) Calculo del Tao por unidad

e16a Cota inferior del tiempo espacial

e16b Cota superior del tiempo espacial

e17(u) Calculo del volumen de la unidad

e18(u) Calculo de la sección entre Smin y Smax

e19(u) Calculo de la sección entre Smin y Smax

e20(k) Calculo del flujo que no entra a la unidad

e21(u) Todas las unidades igual a cero se colocan de ultimo

e22 Existencia de al menos una unidad

e23 Diámetro del reactor en función del área transversal

e25 Longitud del reactor en función de la relación L/D

e25a Cota inferior para el Diámetro del reactor

e26 Cota superior del tiempo espacial

e27 Cota inferior del tiempo espacial

e28 Cantidad de monoaromaticos a la salida del reactor, menor o igual al doble que alimenta al sistema

e29(u) Igualdad de Longitudes de las unidades

e30(u) La cantidad de aromático azufrado a la salida del reactor debe ser menor al 60%

;

* Debe seleccionar la ecuación fobj de acuerdo al criterio que quiera resolver. Un

objetivo por cada corrida.

$$\text{fobj.. } \text{SUM}((u,c),(((1272.1218*(D**1.05))*(LD*D)**0.81)*Ye(u) + 8126.5275*(\text{SUM}(uuUr(uu),V(uu) * Yc(uu,'NiMo')) + 7769,2176 * (\text{SUM}(uuUr(uu),V(uu)*Yc(uu,'CoMo')) + 767.983*Fmck('F8','H2')))=E=z('fo1');$$

$$\text{fobj.. } Fk('F8','BICHXL')=E=z('fo2');$$

$$\text{fobj.. } Fk('F8','CHXBNZ')=E=z('fo3');$$

$$\text{fobj ..} Fk('F8','DIBZTHIO')=E=z('fo4');$$

$$\text{e01}(u,k,t,'1') .. Rkc(u,k,t,'1')+KA(t)*Rkc(u,k,t,'1')*Cu(u,'H2S') =E= Tao(u)*Gamao(k,t,'1')*Cu(u,'DIBZTHIO')*Cu(u,'H2')*Ko('1',t)*exp(-EaR('1',t)/Tem);$$

$$\text{e02}(u,k,t,'2').. Rkc(u,k,t,'2') =E= Tao(u)*Gamao(k,t,'2')*Cu(u,'CHXBNZ') *Cu(u,'H2')*Ko('2',t)*exp(-EaR('2',t)/Tem);$$

$$\text{e04}(u,k,t,'3').. Rkc(u,k,t,'3') =E=Tao(u)*Gamao(k,t,'3')*Cu(u,'BIPHENYL') *Cu(u,'H2')*Ko('3',t)*exp(-EaR('3',t)/Tem);$$

$$\text{e05}(u,k).. \text{SUM}((t,r),Rkc(u,k,t,r)*Yc(u,t)) - Rk(u,k) =E= 0;$$

$$\text{e06}(u,k).. \text{SUM}(C\$Ceu(c,u),Cck(c,k)) + \text{SUM}(C\$Csu(c,u),Rk(u,k))-\text{SUM}(C\$Csu(c,u),Cck(c,k))=E=0;$$

$$\text{e07}(c).. \text{SUM}(k,Fk(c,k))-F(c) =E= 0;$$

$$\text{e08}(c).. Ql(c)*rho(c) - \text{SUM}(k,Pmk(k)*Fk(c,k)) =E= 0;$$

$$\text{e09}(c,k).. Fk(c,k)-Cck(c,k)*Ql(c) =E= 0;$$

$$\text{e10}(u) .. \text{SUM}(t,Yc(u,t)) - Ye(u) =E= 0;$$

$$\text{e11}(u,k) .. Cu(u,k) =E= \text{SUM}(c\$Csu(c,u),Cck(c,k));$$

$$\text{e12}(c,k) .. Fmck(c,k) =E= Fk(c,k)*Pmk(k);$$

$$e13(c) \dots Fm(c) = E = \text{SUM}(k, Fmck(c, k));$$

$$e14(u) \dots \text{SUM}(c\$Csu(c, u), Fm(c)) = E = \text{SUM}(c\$Ceu(c, u), Fm(c));$$

$$e15(u) \dots \text{SumaQl}(u) = E = \text{SUM}(c\$Ceu(c, u), Ql(c));$$

$$e16(u) \dots \text{SumaQl}(u) * \text{Tao}(u) = E = V(u);$$

$$e16a \dots \text{Taolo} - \text{SUM}(u, \text{Tao}(u)) = L = 0;$$

$$e16b \dots \text{SUM}(u, \text{Tao}(u)) - \text{Taoup} = L = 0;$$

$$e17(u) \dots V(u) - L(u) * S * Ye(u) = E = 0;$$

$$e18(u) \dots v1o * S - \text{SUM}(c\$Csu(c, u), Ql(c)) = L = 0;$$

$$e19(u) \dots \text{SUM}(c\$Csu(c, u), Ql(c)) - vup * S = L = 0;$$

$$e20(k) \dots Fk('F0', k) + N(k) = E = Fko(k);$$

$$e21(u) \dots Ye(u) - Ye(u-1) = L = 0;$$

$$e22 \dots \text{SUM}(u, Ye(u)) - 1 = G = 0;$$

$$e23 \dots 4 * S - Pi * D ** 2 = E = 0;$$

$$e25 \dots \text{SUM}(u, L(u) * Ye(u)) - LD * D = E = 0;$$

$$e25a \dots D = G = 2.65;$$

$$e26 \dots \text{SUM}(u, L(u) * Ye(u)) - Lmax = L = 0;$$

$$e27 \dots Lmin - \text{SUM}(u, L(u) * Ye(u)) = L = 0;$$

$$e28 \dots Fk('F8', 'CHXBNZ') = L = Fk('F0', 'CHXBNZ') * 2.00;$$

e29(u) .. L(u) - Lu =E= 0;

e30(u)..SUM(c\$Csu(c,u),Fk(c,'DIBZTHIO'))=G=
SUM(c\$Ceu(c,u),Fk(c,'DIBZTHIO')*0.60);

```

*****
* Límites:
*****
* 1.- Superiores:
Fk.up('F0',k) = Fko(k);
L.up(u) = Lmax/NR;
Tem.up = Temx;
rho.up(c) = 900;
rho.up('F0') = 569.642160241431;
* 2.- Inferiores:
Fk.lo('F0',k) = Fko(k);
Tem.lo = Temn;
rho.lo(c) = 10; D.lo =1e-5; rho.lo('F0') = 569.642160241431;
MODEL MINLP / all /;
*****
* Opciones especificas de la DICOPT (archivo dicopt.opt)
*****
MINLP.dictfile = 4;
MINLP.optfile = 1;
SOLVE MINLP using minlp maximizing Z;
*****
* Reporte Final
*****
DISPLAY rho.l,Ql.l,Fk.l,Rkc.l,Tao.l,Cu.l;
DISPLAY Z.l, Yc.l, Ye.l, Rkc.l, Rk.l, Cu.l, Cck.l, Fk.l, Fmck.l, Fm.l, Tem.l;
DISPLAY rho.l, Ql.l, V.l, S.l, D.l, L.l, SumaQl.l,Tao.l, N.l;
DISPLAY Costcap.l, CostH2.l;
*****
* Fin del programa
*****

```

A.2. Algoritmo AUGMECON implementado en GAMS y adaptado al modelo multiobjetivo

\$STitle eps-constraint method

Set k1(w) the first element of k, km1(w) all but the first elements of k;

k1(w)\$ (ord(w)=1) = yes; km1(w)=yes; km1(k1) = no;

Set kk(w) active objective function in constraint allobj

Parameter

rhs(w) right hand side of the constrained obj functions in eps-constraint

maxobj(w) maximum value from the payoff table

minobj(w) minimum value from the payoff table

free Variables

a_objval auxiliary variable for the objective function

*free Variables

obj auxiliary variable during the construction of the payoff table

Positive Variables

sl(w) slack or surplus variables for the eps-constraints

Equations

con_obj(w) constrained objective functions

augm_obj augmented objective function to avoid weakly efficient solutions

allobj all the objective functions in one expression;

con_obj(km1).. z(km1) - dir(km1)*sl(km1) =e= rhs(km1);

* We optimize the first objective function and put the others as constraints

* the second term is for avoiding weakly efficient points

augm_obj.. sum(k1,dir(k1)*z(k1))+1e-3*sum(km1,sl(km1)/(maxobj(km1)-minobj(km1))) =e= a_objval;

allobj.. sum(kk, dir(kk)*z(kk)) =e=obj;

Model mod_payoff

/

obj1,obj2,obj3,obj4,e01,e02,e04,e05,e06,e07,e08,e09,e10,e11,e12,e13,e14,e15,e16,e16a,e16b,e17,e18,e19,e20,e21,e22,e23,e25,e25a,e26,e27,e28,e29,e30,allobj/ ;

Model mod_epsmethod/

```
obj1,obj2,obj3,obj4,e01,e02,e04,e05,e06,e07,e08,e09,e10,e11,e12,e13,e14,e15,e16,e16a,
e16b,e17,e18,e19,e20,e21,e22,e23,e25,e25a,e26,e27,e28,e29,e30, con_obj, augm_obj
/ ;
```

```
mod_payoff.optfile = 1;
mod_epsmethod.optfile = 1;
option limrow=0, limcol=0;
option solprint=off, solvelink=2;
```

```
Parameter
payoff(w,w) payoff tables entries;
Alias(w,kp);
```

```
* Generate payoff table applying lexicographic optimization
loop(kp, kk(kp)=yes;
repeat
solve mod_payoff using minlp maximizing obj;
payoff(kp,kk) = z.l(kk);
z.fx(kk) = z.l(kk); // freeze the value of the last objective optimized
kk(w++1) = kk(w); // cycle through the objective functions
until kk(kp); kk(kp) = no;
* release the fixed values of the objective functions for the new iteration
z.up(w) = inf; z.lo(w) =-inf;
);
```

```
if (mod_payoff.modelstat > 2,5 and mod_payoff.modelstat <> 8, abort ño optimal
solution for mod_payoff');
```

```
display payoff;
minobj(w)=smin(kp,payoff(kp,w));
maxobj(w)=smax(kp,payoff(kp,w));
```

```
$set fname p.gams.scrext
File fx solution points from eps-method / “ %gams.scrdir % %fname %/;
$if not set gridpoints
$set gridpoints 40
```

```
Set g grid points /g0*g %gridpoints %/
grid(w,g) grid
```

Parameter

gridrhs(w,g) rhs of eps-constraint at grid point
 maxg(w) maximum point in grid for objective
 posg(w) grid position of objective
 firstOffMax, lastZero some counters
 numk(w) ordinal value of k starting with 1
 numg(g) ordinal value of g starting with 0;
 lastZero=1;

```
loop(km1, numk(km1)=lastZero; lastZero=lastZero+1); numg(g) = ord(g)-1;
grid(km1,g) = yes; // Here we could define different grid intervals for
different objectives
maxg(km1) = smax(grid(km1,g), numg(g)); gridrhs(grid(km1,g))
$( %min %=dir(km1)) = maxobj(km1)
- numg(g)/maxg(km1)*(maxobj(km1)- minobj(km1));
gridrhs(grid(km1,g))$( %max %=dir(km1)) = minobj(km1) +
numg(g)/maxg(km1)*(maxobj(km1)- minobj(km1)
);
```

display gridrhs;

```
* Walk the grid points and take shortcuts if the model becomes infeasible
posg(km1) = 0;
repeat
rhs(km1) = sum(grid(km1,g)$(numg(g)=posg(km1)), gridrhs(km1,g));
solve mod_epsmethod maximizing a_objval using minlp;
if (mod_epsmethod.modelstat<>8, // not optimal is in this case infeasible
lastZero = 0; loop(km1$(posg(km1)>0 and lastZero=0), lastZero=numk(km1));
posg(km1)$(numk(km1)<=lastZero) = maxg(km1);
// skip all solves for more demanding values of rhs(km1)
else
loop(w, put fx z.l(w):12:2); put /);
display z.l,Ye.l,Yc.l,L.l,D.l,Tem.l,Fk.l;
* Proceed forward in the grid
firstOffMax = 0;
loop(km1$(posg(km1)<maxg(km1) and firstOffMax=0), posg(km1)=posg(km1)+1;
firstOffMax=numk(km1));
posg(km1)$(numk(km1)<firstOffMax) = 0;
until sum(km1$(posg(km1)=maxg(km1)),1)=card(km1) and firstOffMax=0;
putclose fx; // close the point file
```

```
* Get unique solutions from the point file using some Posix Tools (awk, (g)sort, uniq)
that come with GAMS
```

```

$set awkscript awk.gams.scrext
file fa / “%gams.scrdir % %awkscript %/; put fa 'BEGIN { printf("Table
solutions(*,*)\n$ondelim\nsol';
loop(w,put',' w.tl : 0);putclose'\n");}'/{printNR,$0}'/'END{print";}';
$if %system.filesys %==UNIXexecute'cd' %gams.scrdir %"&&sort
%fname % |uniq| awk - f %awkscript % >
g.gams.scrext&&gams.g.gams.scrext=
gx.gams.scrextlo=0gdx=soleps';
$if NOT %system.filesys %==UNIXexecute'cd' %gams.scrdir %"&&gsort
%fname % |uniq| awk - f %awkscript
% > g.gams.scrext&&gams.g.gams.scrext=gx.gams.scrextlo=0gdx=soleps';
execute'mv - f %gams.scrdir %soleps.gdx.';

```

```

Set h Solutions /1*50/;
Parameter solutions(h,w) Unique solutions; execute_load 'soleps', solutions;
display solutions;

```

```

$exit

```

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Babich I. y Moulijn J., (2003) "Science y Technology of novel processes for deep desulfurization of oil refinery streams: a review "Fuel. 82, 607-631.
- [2] Achenie L., y Biegler L., (1986), "Algorithmic synthesis of chemical reactor networks using mathematical programming". Ind. Eng. Chem. Fund., 25, 621-627.
- [3] Achenie L., y Biegler L., (1988), "Developing targets for the performance index of a chemical reactor network". Ind. Eng. Chem. Res., 27, 1811 - 1821.
- [4] Chitra S., y Goving R., (1981). "Yield optimization for complex reactor systems". Chem.Eng. Sci., 36, 1219 - 1222.
- [5] Chitra S., y Goving R., (1985). "Synthesis of optimal reactor structures for homogeneous reactions". AIChE J., 31, 177 - 184.
- [6] Collette, Y. y Siarry, P. (2003). "Multiobjective Optimization: Principles and Case Studies", School of Industrial and Manufacturing Science, Cranfield University.
- [7] Floudas C., (1995), "Nonlinear and Mixed-Integer Optimization. Fundamentals and applications". Oxford University Press.
- [8] GAMS, (1998), Manual del Usuario.
- [9] Grossmann I.E., (1996). "Mixed-Integer Optimization Techniques for Algorithmic Process Synthesis", Advances in Chemical Engineering, 23, 171 - 246.
- [10] Grossmann I., Caballero J., Yeomans H. (2000), "Advances in mathematical programming for the synthesis of process systems". Latin American Applied Research. 30, 263 - 284.

-
- [11] Grossmann, E. et al., (2004) "A Discreto Continuous Optimization Package", Manual de Usuario. GAMS Development Corporation.
- [12] Himmelblau D., Edgar T., Lasdon L., (2001). "Optimization of chemical processes". McGraw-Hill International Edition.
- [13] Kalyanmoy, D. (2004). "Multi-objective Optimization using Evolutionary Algorithms", Departament of Mechanical Engenieering, Indian Institute Techology, Kanpur, India.
- [14] Kokossis A. y Floudas C., (1990), "Optimization of complex reactor networks I. Isothermal operation". Chem. Eng. Sci. Vol 45, 595 - 614.
- [15] Kokossis A. y Floudas C., (1991). "Optimal synthesis of isothermal reactor-separator-recycle systems". Chem. Eng. Sci. 46, 1361 - 1383.
- [16] Kokossis A. y Floudas C., (1994). "Optimization of complex reactor networks II. Nonisothermal operation". Chem. Eng. Sci. 49, 1037 - 1051.
- [17] Marcoulaki E., y Kokossis A., (1996). "Stochastic optimization of complex reaction systems". Computers Chem. Eng. 20, S231 - S236.
- [18] Mavrotas, G. (2006). "Generation of efficient solutions in Multiobjective Mathematical Programming problems using GAMS". Tech. rep., School of Chemical Engineering, National Technical University of Athens.
- [19] Nemhauser G., y Wolsey L., (1999). "Integer and combinatorial optimization". Wiley-Interscience.
- [20] Verruschi E. (2008). "Optimización de la Distribución de Catalizadores en Hidrotratamiento de Destilados Medios". Tesis de Doctorado Presentado ante la Universidad Politécnica de Madrid para optar el Título de Doctor.
- [21] Wolsey L., (1998). "Integer Programming". Wiley-Interscience.