

UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA

Estudios con Reconocimiento de Validez Oficial por Decreto Presidencial
del 3 de abril de 1981



“CONTROL ÓPTIMO UTILIZANDO ALGORITMOS LIBRES DE
DERIVADAS”

TESIS

Que para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA

P r e s e n t a

ISRAEL NEGRELLOS ORTIZ

Director: Dr. Antonio Flores Tlacuahuac

Codirector: Dr. Guillermo Fernández Anaya

Lectores: Dr. Martín Rivera Toledo

Dr. Rubén Vásquez Medrano

Dr. Miguel Ángel Gutiérrez Limón

Control óptimo utilizando algoritmos libres de derivadas

Resumen

Tradicionalmente, la optimización de los sistemas de procesamiento se ha basado en la disponibilidad de un modelo explícito junto con la información de los gradientes correspondientes. Sin embargo, existen algunos escenarios prácticos como (a) sistemas no diferenciables, (b) sistemas experimentales físicos, (c) entornos de simulación y (d) sistemas de orden reducido en los que no se dispone de dicho modelo y sus gradientes. Bajo estos escenarios, el despliegue de estrategias de optimización libre de derivadas proporcionan una forma alternativa de hacer frente a la optimización de dichos sistemas. En particular, en este trabajo proponemos un enfoque de región de confianza de optimización libre de derivadas para hacer frente a la optimización dinámica del problema de transición de productos en los sistemas de procesamiento.

Con este objetivo, se utiliza una estrategia de control predictivo de modelos de ciclo cerrado donde el sistema a ser optimizado está incrustado en un entorno de simulación dinámica de tipo *black box*. Los resultados obtenidos demuestran que los modelos dinámicos de caja negra pueden ser optimizados dinámicamente asumiendo que el número de variables de decisión no es grande. El modelo dinámico de primeros principios de una columna de destilación binaria integrada en el entorno de simulación dinámica ASPEN se ocupó como nuestra caja negra para demostrar las ventajas de resolver problemas de transición dinámica de producto cuando un modelo explícito del modelo dinámico y / o su información de gradiente no están disponibles.

Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por su apoyo que permitió la realización de este trabajo y la obtención del grado de Doctor en Ciencias.

Al Dr. Antonio Flores Tlacuahuac, mi asesor, por el tiempo dedicado a este trabajo, por el conocimiento compartido, por sus consejos y amistad.

Al Dr. Guillermo Fernández Anaya por la revisión y observaciones que ayudaron a mejorar la tesis.

Al Dr. Martín Rivera Toledo por su apoyo, revisión y comentarios que ayudaron a mejorar la tesis.

Al Dr. Miguel Ángel Gutiérrez Limón y al Dr. Rubén Vásquez Medrano por su revisión y comentarios que ayudaron a mejorar el trabajo.

A mi familia y amigos...

Índice general

Introducción	5
Antecedentes. Transiciones entre productos	8
1. Aplicaciones de la Optimización Libre de Derivadas	11
2. Aproximaciones de OLD para transiciones entre producto	18
2.1. Problema de optimización sin restricciones con modelo dinámico penalizado	18
2.2. Control predictivo de modelos mediante modelado dinámico de caja negra .	19
2.3. Implementación del método de la región de confianza de OLD	22
2.4. Definición del Problema	23
3. Casos de estudio	24
3.1. Ecuación diferencial fundamental	24
3.2. Reactor de Hicks	27
3.3. Reactor Bioquímico Isotérmico	29
3.4. Transiciones dinámicas de producto utilizando un modelo de simulación de caja negra en ASPEN	31
3.4.1. Control de composición de un punto en la corriente de destilado . . .	36
3.4.2. Control de composición de un punto en la corriente de fondo	37
3.4.3. Control dual de composición de los flujos de destilado y de fondos . .	38
Conclusiones	41
Trabajo a futuro	42
Bibliografía	49

Índice de figuras

3.1. Comparación de los resultados óptimos de optimización dinámica para la ecuación diferencial ordinaria fundamental. El problema de optimización se resolvió mediante el enfoque de transcripción para la discretización del sistema y desplazando el sistema dinámico discretizado a la función objetivo utilizando los solucionadores CONOPT y BOBYQA. (a) y (b) para 10 elementos finitos y $\mu = 30$, (c) y (d) para 5 elementos finitos y $\mu = 100$	26
3.2. Mapa de multiplicidades en estado estacionario para el reactor de Hicks. La línea continua representa estados estacionarios estables, mientras que la línea discontinua representa estados estacionarios inestables.	28
3.3. Comparación de los resultados de transición dinámica óptima del producto para el reactor de Hicks usando un modelo dinámico explícito resuelto usando los optimizadores CONOPT y BOBYQA. 10 elementos finitos con tres puntos de colocación interna se utilizaron para la discretización del modelo dinámico.	29
3.4. Diagrama de estados estacionarios múltiples para el reactor bioquímico.	30
3.5. Comparación de los resultados de transición dinámica óptima del producto para el reactor bioquímico utilizando un modelo dinámico explícito resuelto utilizando los optimizadores CONOPT y BOBYQA. 20 elementos finitos con tres puntos de colocación interna se utilizaron para la discretización del modelo dinámico.	32
3.6. Diagrama de flujo de la columna de destilación benceno-tolueno. La presión de descarga en las bombas PUMP-D y PUMP-B es de 6 bares. La presión de salida en las válvulas de control CVD y CVB es de 3 bares. Además, se estableció un tiempo de residencia de 5 minutos, para dimensionar el acumulador y los tanques de sumidero.	34

3.7.	Control en un punto de la fracción molar de benceno en la corriente de destilado usando el enfoque MPC-OLD. El tiempo de muestreo se fijó en 30 min.	37
3.8.	Control en un punto de la fracción molar de tolueno en la corriente de fondos usando el enfoque CPM-OLD. El tiempo de muestreo se fijó en 30 min. . . .	38
3.9.	Control en dos puntos de la fracción molar de benceno en la corriente de destilado y de la fracción molar de tolueno en la corriente de fondo usando el enfoque CPM-OLD. El tiempo de muestreo se fijó en 30 min.	39
3.10.	Comparación del control en un punto de la fracción molar de benceno en la corriente de destilado frente a un controlador PI de Ziegler-Nichols. El tiempo de muestreo se fijó en 30 min.	40

Índice de tablas

3.1. Parámetros utilizados para el reactor de Hicks de estados estacionarios múltiples.	27
3.2. Estados estacionarios nominales para el reactor bioquímico	30
3.3. Valores de los parámetros del controlador PI de Ziegler-Nichols para los lazos primarios (tres primeros lazos de control) y de control de la composición secundaria del sistema de la columna de destilación benceno-tolueno.	34

Introducción

Durante el arranque, el paro o el funcionamiento nominal, normalmente se requieren transiciones dinámicas óptimas entre los productos para lograr un objetivo de operación de la mejor manera posible. En este tipo de casos, el objetivo puede estar relacionado con los valores deseados de las variables de procesamiento tales como temperatura, composición, flujos, etc. Por lo tanto, en este tipo de problemas el objetivo consiste en el cálculo de los valores de dominio de tiempo de las variables de control $\mathbf{u}(t)$ tal que la respuesta del sistema $\mathbf{y}(t)$ logre un valor deseado incorporado en una función objetivo $\Omega(\mathbf{y}, \mathbf{u})$ que puede maximizarse o minimizarse.

Las transiciones óptimas de producto pueden ser sistemáticamente calculadas estableciendo el problema de transición del producto como una optimización dinámica^{5,22,23}. Varias técnicas de optimización para manejar la solución de problemas de optimización dinámica se puede encontrar en la bibliografía⁴. Todos estos algoritmos de optimización suponen que el gradiente de la función objetivo y de sus restricciones relacionadas están de alguna manera disponibles. Cuando este es el caso, el usuario tiene acceso a una amplia variedad de potentes algoritmos que calculan las soluciones óptimas locales o globales. Hoy en día, cuando la forma explícita de la formulación de la optimización está disponible, las derivadas exactas se calculan normalmente mediante técnicas de diferenciación automática²⁶, aunque las derivadas también pueden ser aproximadas por enfoques de diferencias finitas. Sin embargo, este enfoque de la evaluación de los gradientes se está volviendo obsoleto en el software de optimización comercial y académica debido a sus desventajas, especialmente cuando se trata de ruido y la dificultad para evaluar las funciones.

Por otro lado, existen algunos problemas prácticos de optimización donde las derivadas no están disponibles o no son confiables, haciendo imposible o indeseable utilizar técnicas de optimización basadas en gradientes. Dichas situaciones tienen que ver con procesos a

escala industrial o de laboratorio, o con enormes modelos matemáticos incorporados en plataformas de simulación. En cuanto al equipo de procesamiento se refiere, la información de los gradientes no estará disponible y por razones de seguridad, costo u operación, tal equipo normalmente no se utiliza para este fin. La situación es similar cuando se trata de códigos de simulación. Dependiendo del software, el usuario solo tiene acceso al código binario o a porciones limitadas del código. Por lo tanto, la mayoría del tiempo las diferencias finitas son la única manera de obtener la aproximación de los gradientes. Sin embargo, las costosas simulaciones por computadora y funciones de ruido parecen ser las dos razones principales para evitar la aproximación de los gradientes de esta manera. Por otra parte, la aproximación de los gradiente por técnicas de diferencias finitas no es una tarea directa ya que se requiere hacer complicadas elecciones, tales como el tamaño apropiado de las perturbaciones para que las aproximaciones a las derivadas sean confiables.

Cuando se concede acceso al código de simulación, existe la posibilidad de obtener una aproximación de gradientes mediante técnicas adjuntas^{8,48}.

Algunos de los primeros algoritmos de optimización no requieren información de los gradientes para determinar una solución óptima^{29,37}. Sin embargo, estos algoritmos carecían de una base teórica y estaban destinados a sistemas de pequeña escala. La mayoría de estos algoritmos fueron abandonados en favor de algoritmos basados en gradientes, ya que el uso de información de las derivadas sobre la función objetivo y las restricciones con respecto a las variables de decisión pueden mejorar drásticamente la eficiencia de los algoritmos de optimización. Sin embargo, en la práctica de la ingeniería es común encontrar problemas de optimización donde las derivadas no están disponibles o no son confiables. Incluso bajo estas circunstancias, la optimización de tales sistemas puede ser deseable. Se han propuesto algoritmos de optimización libre de derivadas (OLD) para tratar problemas de optimización sin información de los gradientes^{13,14}. Los métodos de OLD pueden clasificarse ampliamente en algoritmos determinísticos y estocásticos. Algunos de los métodos determinísticos del OLD se basan en técnicas de optimización sin restricciones bien conocidas, como la búsqueda de líneas y los métodos de la región de confianza^{17,38}. Sin embargo, también se han propuesto otras variaciones de los métodos determinísticos de OSD, como la búsqueda espacial, los algoritmos genéticos y los métodos *hit-and-run*⁴⁴. Por otro lado, los métodos estocásticos de OLD carecen de base teórica, pero tienden a ser más fáciles de usar. Tales métodos incluyen

algoritmos genéticos y de enjambres de partículas^{11,25}. Cabe señalar que existen algunas pruebas de convergencia teóricas para los métodos determinísticos de OLD¹⁴.

En este trabajo utilizamos una variante del algoritmo OLD de la región de confianza, implementado en el código BOBYQA⁴², para manejar la optimización dinámica de procesos químicos durante las transiciones entre productos. Las transiciones óptimas entre productos implican el cálculo de acciones de control que conducen a transiciones eficientes y óptimas entre los productos de los procesos²². Normalmente, durante las transiciones entre productos, un tiempo mínimo de transición y/o especificación del producto debe ser logrado. Sin embargo, también pueden considerarse otras funciones objetivo o funciones objetivo conflictivas.³⁶

En la actualidad, un inconveniente importante de las técnicas libres de derivadas es la limitación en el número de variables de optimización que se pueden manejar.

Antecedentes. Transiciones entre productos

En este trabajo, las *transiciones entre productos* se refieren a un tipo de problema de optimización, donde el objetivo es calcular el valor de tiempo que le toma a la o las variables manipuladas llevar a un sistema dinámico de un punto inicial a un punto objetivo de una manera óptima²⁸. Tales problemas son comunes en la industria de transformación. En particular, en la industria de la polimerización se les denomina problemas de transición de grado²². Tales problemas de transición entre productos pueden calcularse fuera de línea requiriendo entonces un sistema de control para realizar el seguimiento en lazo cerrado del valor óptimo de las variables manipuladas²¹. Por otro lado, la transición entre productos también se puede calcular en línea mediante el Control Predictivo de Modelos³⁴ para cuidar el impacto de las perturbaciones y, hasta cierto punto, el efecto de la incertidumbre del modelo en el problema de transición. En esta sección se ofrece una breve revisión de algunos de los trabajos más relevantes de transición entre productos. McAuley y McGregor³⁵ propusieron un enfoque de control óptimo en lazo abierto para abordar el problema de transiciones de grado en sistemas de reacciones de polimerización. Los autores utilizaron medidas de densidad e índice de fusión para cuantificar la calidad del producto. El impacto de los errores de modelado en las trayectorias de transición también se abordó. Usando trayectorias heurísticas de transición como políticas operativas Debling et al.¹⁶ analizaron la respuesta dinámica en lazo abierto de un sistema de producción de poliolefinas. Además, el trabajo solo se refería al cálculo de las políticas a lazo abierto, su implementación a lazo cerrado sigue siendo un problema.

Cervantes et al.⁹ estuvieron entre los primeros autores que consideraron el problema de transiciones de grado de un complejo sistema de polimerización a gran escala. Los autores abordaron un problema de transiciones de grado óptimo de un reactor tubular de polietileno.

El modelo dinámico resulta ser altamente no lineal. Además, el modelo comprende un sistema distribuido. Para abordar la solución eficiente del problema de optimización se utilizaron diferencias finitas para manejar la discretización del comportamiento espacial, mientras que la colocación ortogonal en elementos finitos se encargó de la discretización del comportamiento en el dominio del tiempo. Además, para mejorar la solución numérica del problema de optimización subyacente, los autores también explotaron la estructura matemática del problema.

Chatzidoukas et al.¹⁰ abordaron el problema de determinar las trayectorias óptimas de transición y la estructura del sistema de control utilizando tales trayectorias óptimas de control. Para resolver este problema los autores formularon y resolvieron un problema de optimización dinámica mixta entera para el cálculo de las variables de decisión continua y binaria en un marco de procesamiento dinámico. Nystrom et al.³⁹ estuvieron entre los primeros autores en considerar la interacción entre la programación y los problemas de optimización dinámica en sistemas de reacciones de polimerización. Para abordar este problema los autores propusieron un enfoque de descomposición basado en la construcción de un problema primordial y uno maestro. La solución iterativa de esos problemas proporcionó el programado óptimo de producción y las trayectorias óptimas de transición dinámica.

Asteasuain et al.³ abordaron el problema relacionado con el diseño óptimo del proceso de un sistema de polimerización de estireno junto con el diseño del sistema de control. El problema del diseño del reactor incluía el diseño del equipo, selección del iniciador, cálculo de las condiciones de estado estacionario y trayectorias de transición, mientras que el diseño del sistema de control incluía el emparejamiento de la estructura de control y la sintonización de los controladores PI. Dado que las políticas óptimas de transición se determinaron minimizando el tiempo de transición y el polímero fuera de especificación, y debido a que estos dos objetivos están en conflicto, se utilizó un marco de optimización multiobjetivo para abordar la solución óptima del problema de optimización dinámica mixto entero subyacente.

Prata et al.⁴³ también consideraron la programación de la producción y el problema de optimización dinámica. Propusieron un enfoque de optimización dinámica lógico-mixta entera para tratar este problema y aplicaron su enfoque a un sistema de polimerización industrial. Terrazas-Moreno et al.⁴⁹ abordaron el problema del diseño simultáneo, programación y control óptimo de un reactor continuo de polimerización de metacrilato de metilo.

El problema de optimización resultante se trató como un problema de optimización dinámica mixta-entera que fue discretizado y resuelto como un problema de optimización mixto-entero.

Recientemente, Weng et al.⁵⁵ consideraron la optimización dinámica de un proceso de polietileno de alta densidad utilizando la distribución del peso molecular como el índice de calidad para llevar a cabo cálculos de control óptimo. La optimización dinámica basada en la distribución completa del peso molecular resulta ser un problema computacionalmente tardado ya que requiere mucho tiempo para resolverlo debido a la complejidad del modelo. Para tratar con este problema los autores propusieron una combinación de un problema a pequeña escala basado en el método de momentos para representar la distribución del peso molecular y un método de distribución del peso molecular en estado estacionario. Sin embargo, sigue siendo un reto considerar la distribución completa del peso molecular dinámico como un índice de calidad en los problemas de transición de grado. Patil et al.⁴¹ propusieron una metodología novedosa para evaluar los problemas de diseño, programación y control bajo las perturbaciones del proceso y las condiciones de incertidumbre en sistemas de producción multiproducto. Las perturbaciones del proceso se caracterizaron como señales sinusoidales, mientras que la incertidumbre fue incorporada usando un enfoque de múltiples escenarios y asignando una probabilidad a cada escenario. La estrategia propuesta se aplicó a dos sistemas de reacción.

Capítulo 1

Aplicaciones de la Optimización Libre de Derivadas

Van der Lee et al.⁵² llevaron a cabo la optimización de la producción de energía en ciclos de potencia tipo Rankine. Consideraron como función objetivo la eficiencia termodinámica del ciclo y desplegaron varios casos de estudios de eficiencia energética que resultaron en diferentes números y tipos de variables de decisión. Se consideraron restricciones sencillas para los límites de las variables de decisión. Para realizar la optimización del sistema energético compararon el rendimiento de un enfoque Quasi-Newton basado en gradientes y un método de OLD propuesto por Conn et al.¹³. Debido a que el enfoque Quasi-Newton se basa en la aproximación numérica del gradiente por diferencias finitas, los autores concluyeron que este enfoque de optimización es altamente sensible al ruido numérico, lo que puede conducir a una convergencia lenta. Por supuesto, la selección del tamaño de paso para el cálculo adecuado del gradiente resulta ser un problema adicional. Los pasos muy pequeños pueden dar lugar a problemas de rendimiento o de convergencia ya que algunos elementos del gradiente pueden ser nulos. Por otra parte, el número de simulaciones para calcular el gradiente puede ser grande. Para hacer frente a esta cuestión, los autores utilizaron un enfoque de OLD que resultó ser una manera simple y eficiente de abordar la optimización de sistemas energéticos. Aunque ambos enfoques de optimización alcanzaron la misma solución óptima, después de ajustar adecuadamente cada enfoque, llegaron a la conclusión de que el tiempo de CPU requerido por el enfoque de OLD era más pequeño que el tiempo de CPU requerido por el enfoque Quasi-Newton de optimización.

Schafer et al.⁴⁶ y Ugur et al.⁵¹ consideraron la optimización de la configuración de un agitador para propósitos de mezclado. Usaron un enfoque riguroso de dinámica de fluidos computacional (CFD) para el modelado y simulación de un tanque donde las operaciones de mezclado tienen lugar. Utilizando los resultados de CFD como un sistema de caja negra, compararon el desempeño de dos métodos de optimización libre de derivadas (DFO y CONDOR). La función objetivo consistió en la minimización del número adimensional de Newton, mientras que las variables de decisión fueron el espesor del disco, la holgura inferior y la longitud del deflector. Los autores concluyeron que en uno de los ejemplos ambos optimizadores condujeron a soluciones locales óptimas. La razón de este comportamiento tiene que ver con la forma en que ambos optimizadores construyen el modelo cuadrático que representa la función objetivo: el DFO despliega polinomios de Newton mientras que CONDOR usa polinomios de Lagrange. Los autores también declararon que para un mayor número de variables de decisión (20 o más) la carga computacional requerida para ambos optimizadores tiende a ser excesiva.

Korkel et.al.³² compararon el desempeño de los métodos basados en derivadas contra OLD para el manejo de problemas de diseño óptimo de experimentos no lineales utilizando un experimento simulado para obtener información experimental. Estaban interesados en el diseño de experimentos para computar las acciones de control que condujeran a estimaciones de parámetros estadísticamente fiables con el objetivo de identificar modelos matemáticos dinámicos. Primero, resolvieron el problema suponiendo que las derivadas del modelo estaban disponibles usando como función objetivo la minimización de una función estrechamente relacionada con la mínima incertidumbre estadística (es decir, la función de la matriz varianza-covarianza). Luego, en un bucle de optimización interno, consideraron el problema de estimación de parámetros. El problema fue resuelto utilizando una aproximación estándar de programación cuadrática sucesiva (SQP). Por otra parte, se formuló y resolvió el mismo problema conceptual (es decir, una estimación fiable de los parámetros del modelo) utilizando una metodología de OLD. Para ello, los autores utilizaron un método de búsqueda multidireccional propuesto por Torczon⁵⁰. Este es un método de OLD que puede manejar sólo límites simples en las variables de decisión además de la función objetivo. Para comparar el desempeño de ambos enfoques la misma función objetivo (es decir, una función dada de la matriz de varianza-covarianza) fue utilizada. Aunque los autores reportaron resultados

similares usando las dos aproximaciones, la carga computacional para resolver el problema de OLD fue significativamente mayor, ya que en este caso el número de evaluaciones de la función fue grande. La ventaja percibida del enfoque de OLD fue la simplicidad de su uso. Sigue siendo un desafío aplicar el marco de OLD para el diseño óptimo de experimentos no lineales a un sistema de escala real o de laboratorio.

Kramer et al.³³ proporcionan una visión general rápida tanto de los algoritmos informáticos como de las aplicaciones prácticas de métodos de optimización sin derivadas. Clasifican los métodos de optimización sin derivadas como: basados en métodos de búsqueda de patrones (es decir, búsqueda generalizada de patrones o búsqueda directa), métodos que aproximan la función objetivo y luego usan métodos de la región de confianza para el manejo de la solución del problema de optimización, y métodos de optimización que se basan en heurística y componentes estocásticos tales como evolutivos, genéticos y de enjambre de partículas. Algunas recomendaciones prácticas sobre cómo manejar la presencia de restricciones en un enfoque de optimización sin derivadas también se proporcionan. Los autores también mencionan que el trabajo futuro sobre la teoría y las aplicaciones de OLD en optimización dinámica, programación no lineal mixta entera y optimización de sistemas inciertos es requerido.

Giuliani y Camponogara²⁷ utilizaron los métodos de OLD para abordar la optimización de los campos de petróleo levantados por gas. Los autores desplegaron un enfoque lagrangiano aumentado para tratar con las limitaciones que originalmente se declararon como límites en las variables de decisión. Sin embargo, para tratar las limitaciones tipo $Ax - b \leq 0$, indicaron que sólo se aceptarían soluciones que hicieran posible este conjunto de restricciones lineales. Después las restricciones de desigualdad se integraron en la función de Lagrange, el problema de optimización se resolvió utilizando un algoritmo de región de confianza propuesto por Conn et.al.¹². Los autores también compararon los resultados de sus métodos de región de confianza de OLD con una formulación de programación lineal mixta entera (MILP) que desplegó una aproximación lineal pieza por pieza del modelo de optimización. Concluyeron que el método de la región de confianza de OLD condujo a mejores soluciones óptimas y reportó una solución de MILP no factible para dos de los escenarios de producción dirigidos. Esto tiene que ver con el hecho de que en esos casos el modelo lineal pieza por pieza no fue capaz de representar el comportamiento del modelo. Este comportamiento se esperaba de alguna manera, ya que la región de confianza del método de OLD construye un modelo

aproximado local en cada iteración.

Botelho et.al.⁶ consideraron el problema de la estimación de parámetros de un reactor industrial de polimerización. Antes de resolver la estimación de parámetros los autores utilizaron un análisis de identificabilidad para decidir el conjunto de parámetros a ser identificados. Una vez que se tomó esa decisión, un problema de estimación de parámetros no lineales de OLD fue resuelto. Para manejar la solución numérica de OLD los autores utilizaron el software de optimización BOBYQA⁴².

Rios y Sahinidis⁴⁴ publicaron una comparación completa y exhaustiva sobre el rendimiento de algoritmos de optimización libres de derivadas. Compararon 22 algoritmos de OLD usando 502 problemas. Este es prácticamente el primer trabajo sistemático con el objetivo de comparar el desempeño de los algoritmos de OLD para conocer mejor los méritos de los diferentes algoritmos. Llegaron a la conclusión de que, aunque importantes avances (especialmente en modelos basados en algoritmos de OLD y en las pruebas de convergencia global) tanto en los aspectos teóricos como numéricos, se necesita más trabajo en el OLD, especialmente en la extensión de los métodos de OLD para hacer frente a problemas generalmente con restricciones no lineales.

Schilling et.al.⁴⁷ proporcionan uno de los pocos resultados reportados de la aplicación de OLD a un sistema experimental dirigido a la síntesis de nuevos compuestos orgánicos-inorgánicos con propiedades objetivo. Los autores desplegaron un conjunto de funciones objetivo relacionadas con: incremento de la cristalinidad, inhibición de la cristalización, incremento del tamaño del cristal y ajuste del tamaño de partícula de diferentes compuestos inorgánicos-orgánicos. Dependiendo de la función objetivo desplegada, diferentes conjuntos de variables de decisión fueron utilizadas. También se incluyeron límites simples en las variables de decisión. Para solucionar el problema de OLD se implementó el algoritmo BOBYQA⁴². Los autores reportaron una rápida tasa de convergencia del algoritmo en este ambiente experimental y resultados mejorados de los compuestos dirigidos relacionados con las propiedades objetivo. Este trabajo demuestra claramente que la combinación de el conocimiento científico y la experiencia con algoritmos numéricos de OLD proporciona una manera eficiente, sistemática y confiable para mejorar la síntesis química de compuestos simplemente probando un pequeño conjunto de condiciones de síntesis.

Forouzanfar y Reynolds²⁴ abordaron el problema óptimo de colocación de pozos de pe-

tróleo utilizando los métodos de OLD. Modelar el comportamiento de los pozos de petróleo resulta ser un problema complejo, además, es computacionalmente muy demandante. Con este objetivo, los autores utilizaron un simulador comercial. En su enfoque, los autores utilizaron como función objetivo la maximización del valor actual neto (VAN) de la producción en un depósito. Las variables de decisión tenían que ver con los parámetros de colocación de pozos, tales como la ubicación, la longitud y la trayectoria de cada pozo. También se incluyeron límites simples en las variables de decisión. Para resolver el problema de optimización, los autores consideraron su propia implementación del algoritmo BOBYQA como el reportado por Powell⁴² y compararon tanto la calidad de la solución como el rendimiento de ese algoritmo frente a un algoritmo genético. Encontraron que, para los ejemplos tratados, los métodos del OLD requerían menos simulaciones por computadora para lograr la solución óptima. Sin embargo, las soluciones obtenidas utilizando ambos algoritmos de optimización tendieron a ser similares pero no iguales. Los autores también informaron que se obtuvieron diferentes soluciones óptimas iniciando el algoritmo de OLD desde diferentes puntos iniciales. Este comportamiento refleja el hecho de que el problema presenta varias soluciones óptimas locales y que cuando los métodos de OLD convergen sólo pueden lograr tales soluciones óptimas locales. Asadollahi et al.² compararon el desempeño y la confiabilidad de cuatro estrategias de OLD mientras se aproximaban a la optimización de la producción de pozos de petróleo. La función objetivo consistió en la maximización del VAN mientras que los cortes de agua para diferentes productores se tomaron como variables de decisión. Se utilizó un simulador comercial como caja negra para evaluar la producción de los pozos para proporcionar información de entrada para resolver los problemas de optimización. Los métodos de OLD fueron: búsqueda de patrones de Hooke-Jeeves, búsqueda generalizada de patrones, Nelder-Mead y un método de búsqueda de líneas. También compararon el desempeño de esos métodos de OLD contra un método de gradiente cuadrático secuencial (SQP), donde las derivadas numéricas fueron calculadas por diferencias finitas. La tasa de convergencia dependió fuertemente de las suposiciones iniciales de las variables de decisión. Además, en el caso del método SQP, los resultados también dependieron del tamaño de discretización para la evaluación numérica de las derivadas. Globalmente, el método de búsqueda de la líneas de OLD proporcionó los mejores resultados en términos del número de simulaciones utilizadas para converger los problemas de optimización. Aunque, en la mayoría de los casos, todos

los algoritmos dirigidos fueron finalmente capaces de lograr valores similares de la función objetivo, pero a un costo computacional más grande.

Echeverria et al.¹⁹ implementaron un enfoque de OLD para manejar la optimización de la producción de pozos para problemas de optimización generalmente con restricciones no lineales. Este es uno de los primeros intentos reportados por incluir restricciones no lineales más generales en un entorno de OLD donde normalmente se tratan los límites de caja simples. Informaron del uso de una función de penalización y de métodos de filtro³⁸ para el manejo eficiente de restricciones. Los autores compararon el rendimiento de dos métodos de OLD (búsqueda de patrones generalizada⁵⁰ y el método de búsqueda directa de Hooke-Jeeves²⁹) contra una optimización heurística genética y un método cuadrático secuencial basado en gradientes. Reportaron un buen desempeño de los métodos de OLD para tratar con el manejo de restricciones y llegaron a la conclusión de que el método generalizado de patrones aumentado con un filtro proporcionaba los mejores resultados cuando las derivadas no estaban disponibles. Sin embargo, hoy en día uno de los principales inconvenientes de los métodos de OLD radica en el hecho de que normalmente sólo se pueden tratar problemas de pequeña escala.

Koller y Ulbrich³¹ abordaron la producción de láminas de metal por el proceso de hidroformado como un problema de control óptimo. Utilizaron un simulador comercial para proporcionar un modelo dinámico para describir la variación espacial y temporal de la forma de las chapas metálicas cuando estaban sujetas a variación en la presión en el fluido que se consideraba la variable de control, mientras que la función objetivo se tomó como la diferencia en el volumen entre la chapa metálica y la matriz. Compararon el rendimiento del método de Nelder-Mead y el enfoque de BOBYQA⁴² para resolver el problema de control óptimo subyacente y llegaron a la conclusión de que el solucionador de BOBYQA superó a Nelder-Mead para resolver el problema de control óptimo abordado en términos de el valor de la función objetivo y el número de simulaciones necesarias para resolver el problema de optimización.

Dowling et al.¹⁸ aproximaron la optimización dinámica de un sistema complejo de absorción dirigido a la captura de CO₂. El modelo dinámico consistió en una serie de ecuaciones de conservación de masa y energía y algunas relaciones constitutivas que representan el tiempo y las coordenadas espaciales para el comportamiento del sistema. La captura de CO₂ alta

fue una de las funciones objetivo, también se seleccionaron varias variables de control. Debido a la complejidad del modelo matemático se utilizó un enfoque de OLD⁴² para abordar el problema de control óptimo subyacente. Los autores también utilizaron un algoritmo de optimización basado en gradientes, incorporado en el software IPOPT⁵⁴, para tratar con el problema de optimización. Debido a que utilizaron la solución del modelo matemático como una caja negra, la información adecuada de los gradientes se calculó mediante un enfoque adjunto. Aunque los autores concluyeron que el algoritmo de optimización basado en gradientes superó a la estrategia de OLD, de las Tablas 10,11 y 12 de¹⁸ está claro que esto se hizo a costa de mayores tiempos de CPU.

Fisher y Jiang²⁰ desplegaron cuatro métodos diferentes de OLD para la evaluación de parámetros cinéticos en un sistema de combustión. Los métodos considerados por los autores fueron: búsqueda aleatoria adaptativa, algoritmos genéticos y dos algoritmos determinísticos codificados en los programas CONDOR⁵³ Y BOBYQA⁴². Los autores concluyeron que BOBYQA fue el algoritmo de optimización que proporcionó los mejores parámetros de ajuste para reproducir la información pseudo-experimental proporcionada.

Capítulo 2

Aproximaciones de OLD para transiciones entre producto

En este capítulo se proveen los detalles sobre la forma de utilizar las técnicas de OLD para manejar problemas de Control Predictivo de Modelos (CPM) y una breve explicación sobre el algoritmo de OLD utilizado en este trabajo.

2.1. Problema de optimización sin restricciones con modelo dinámico penalizado

Incluso cuando las estrategias de OLD están dirigidas a sistemas en los que no se dispone de información de las derivadas, en un primer intento de tratar de optimizar tal tipo de sistemas y para darse cuenta de la calidad de las soluciones de OLD obtenidas de implementaciones típicas de software, hemos evaluado el problema de la transición del producto en sistemas donde está disponible un modelo dinámico. Entonces, el típico problema de optimización dinámica se transformó en un problema de optimización sin restricciones moviendo todo el conjunto de restricciones, que comprenden el modelo dinámico y las restricciones adicionales relacionadas, en la función objetivo. Para ello, el conjunto de restricciones relacionadas con el modelo dinámico, se aproximaron utilizando el enfoque de transcripción⁴. Los problemas de optimización penalizados sin restricciones resultantes se resolvieron entonces usando (a) solucionadores de optimización no lineales típicos, disponibles en el entorno de optimización GAMS⁷, y (b) BOBYQA que es la implementación de un solucionador de

OLD⁴². Como ya se ha dicho, reconocemos claramente que este no es el escenario real donde las estrategias de OLD deben ser utilizadas, ya que cuando el modelo matemático dinámico y las derivadas relacionados están disponibles se deben implementar técnicas eficientes de optimización basadas en gradientes³⁸. Nuestro objetivo era comparar el rendimiento de una implementación del algoritmo de OLD típico (es decir, BOBYQA) frente a una solución directa usando un método no lineal de programación. Por último, debe observarse que las transiciones de productos calculadas utilizando el procedimiento descrito anteriormente son políticas de control de lazo abierto o fuera de línea. Posteriormente, se necesitarían sistemas de control para implementar dichas políticas de control en un escenario de lazo cerrado²¹.

2.2. Control predictivo de modelos mediante modelado dinámico de caja negra

Se han utilizado técnicas de OLD para aproximarse al control predictivo de sistemas lineales o no lineales¹⁵. El control predictivo de modelos (MPC) es una técnica de control en lazo cerrado bien adaptada para el control de sistemas no lineales usando un enfoque de horizonte de retroceso³⁴. En este entorno de control se calcula un conjunto de valores de las variables de entrada o manipuladas (es decir, $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N$) son computadas tal que la salida o variables controladas (es decir, $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M$) son forzadas hacia valores objetivo o deseados, donde N, M representan la longitud de los horizontes de control y predicción, respectivamente. Comúnmente, sólo la primera acción de control \mathbf{u}_1 se aplica al sistema controlado. Cuando se dispone de una nueva medición, el escenario de control se mueve hacia adelante por un tiempo equivalente al tiempo de muestreo y el procedimiento se repite hasta que se obtienen los valores objetivo.

Cuando un modelo matemático dinámico o las derivadas de los sistemas subyacentes no están disponibles, una especie de algoritmos de OLD, los llamados algoritmos genéticos, han sido aplicados para el tratamiento del problema de control predictivo de modelos de dichos sistemas^{40,45}. En este trabajo desplegamos un tipo de algoritmos de OLD basados en el uso de técnicas de optimización de la región de confianza, que son técnicas numéricas orientadas a la optimización eficiente de sistemas sin restricciones^{17,38} con sólo una función objetivo dada. En el caso de los métodos de la región de confianza de la OLD, la función objetivo se aproxima por

una función cuadrática¹⁴. Esta aproximación de la función objetivo se construye utilizando sólo información de entrada y salida. Por lo tanto, utilizando técnicas del OLD, no se requiere información, en forma de un modelo dinámico explícito o sus derivadas relacionadas, para la optimización dinámica de los sistemas de procesamiento. Sólo se requiere (a) información de entrada / salida del sistema controlado y (b) resolver el problema de optimización dinámica aproximando la función objetivo utilizando las técnicas de optimización de la región de confianza de la OLD. Asumiendo que la respuesta del sistema estaría disponible en forma de un modelo de caja negra, el problema restante consiste en formular una función objetivo que imite el modelo de control predictivo utilizado cuando se dispone de un modelo dinámico. Después de probar varias formas de función objetivo para las transiciones de producto, se llegó a la conclusión de que la siguiente forma de función objetivo es adecuada para realizar transiciones dinámicas de producto:

$$\Omega = \sum_{i=1}^N [\alpha_x (x_i - x^f)^2 + \alpha_u (u_i - u^f)^2] + \lambda_x \sum_{i=1}^N [\Delta x_i]^2 + \lambda_u \sum_{i=1}^N [\Delta u_i]^2 \quad (2.1)$$

donde el superíndice f representa valores finales, deseados u objetivos, α_x y α_u , son los pesos utilizados para penalizar por desviaciones de los valores objetivo, mientras λ_x, λ_u son penalizaciones impuestas sobre las variaciones de la magnitud de los estados y de las variables manipuladas, respectivamente. En realidad, la forma de la función objetivo definida en la ecuación 2.1 la propuso por primera vez Daehlen et al.¹⁵. Los primeros dos términos en la ecuación 2.1 se utilizan para conducir a los estados x y a las variables manipuladas u hacia sus valores objetivo. El objetivo de los últimos dos términos de la ecuación 2.1 es penalizar por grandes cambios tanto en los estados como en los valores de las variables manipuladas. Esto refleja nuestro deseo de obtener unas acciones de control suaves y, en consecuencia, una respuesta suave del sistema. Tenga en cuenta que estos cambios se definen de la siguiente manera:

$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1} \quad (2.2)$$

$$\Delta u_i = u_i - u_{i-1} \quad (2.3)$$

Por lo tanto, al inicio de la transición del producto (i.e. $i = 1$) x_0 y u_0 Representan los

valores iniciales de los estados y las variables manipuladas, respectivamente. Debe observarse que en la ecuación 2.1 hemos hecho equivalente el tamaño de los horizontes de control y predicción. Sin embargo, la función objetivo Ω puede expresarse claramente para diferentes valores de N y M .

En resumen, el cálculo del CPM de transiciones dinámicas óptimas de productos usando un enfoque de OLD puede ser planteado de la siguiente manera:

$$\min_{\mathbf{x}, \mathbf{u}} \Omega = \sum_{i=1}^N [\alpha_x (x_i - x^f)^2 + \alpha_u (u_i - u^f)^2] + \lambda_x \sum_{i=1}^N [\Delta x_i]^2 + \lambda_u \sum_{i=1}^N [\Delta u_i]^2 \quad (2.4)$$

$$\text{s.t.} \quad x^l \leq x_i \leq x^u, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.5)$$

$$u^l \leq u_i \leq u^u, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.6)$$

$$\Delta x^l \leq \Delta x_i \leq \Delta x^u, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.7)$$

$$\Delta u^l \leq \Delta u_i \leq \Delta u^u, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.8)$$

Donde los superíndices l y u representan los límites inferiores y superiores, respectivamente. Debido a que este es un enfoque de optimización sin derivadas, no deben utilizarse ecuaciones relacionadas con el despliegue del algoritmo de CPM. La solución de un problema de CPM requiere el cálculo en línea o de retroalimentación de las acciones de control capaces de conducir al sistema al punto de operación objetivo de una manera óptima. Dado que esto normalmente implica el uso de un modelo dinámico explícito para el cálculo de tales acciones de control, y suponemos que tal modelo no está disponible, tenemos que implementar un algoritmo de CPM de una manera diferente cuando se utiliza un enfoque de optimización sin derivadas. Esto significa que en cualquier momento se calculó una serie de acciones de control (dadas por el horizonte de predicción) pero, en el espíritu de la estrategia de CPM, sólo se implementó la primera de esas acciones de control descartando las restantes. Cuando se hizo disponible una nueva medición, se repitió la solución del problema de control óptimo de lazo cerrado representado por las ecuaciones 2.4 - 2.8 y así sucesivamente hasta que se alcanzaron las condiciones objetivo.

Destacamos que se utilizaron modelos de simulación de procesos dinámicos no lineales de los sistemas abordados (en particular de la columna de destilación) para realizar los cálculos

de optimización. En particular, para el cuarto caso de estudio, se utilizó un método de control predictivo de modelos no lineal de OLD para el cálculo en línea de las acciones de control.

2.3. Implementación del método de la región de confianza de OLD

BOBYQA (Bound Optimization BY Quadratic Approximation) es un código de optimización libre de derivadas, propuesto por Powell (2009)⁴², que aproxima el comportamiento de la función objetivo a una interpolación cuadrática polinomial. Este enfoque de optimización encuentra el mínimo de una función objetivo $J(u)$ sujeto a restricciones simples:

$$\min J(u) \quad \text{tal que} \quad u^{low} \leq u \leq u^{up}$$

donde u es un vector de decisión n -dimensional.

En cada iteración k , se utiliza un polinomio cuadrático para aproximar el comportamiento de la función objetivo:

$$Q(u_i^k) = J(u_i^k), \quad i = 1, \dots, m$$

El modelo de aproximación cuadrática $Q^k(u)$ puede asumir la siguiente forma:

$$Q^k(u) = a^k + (u - u_0^k)^T f^k + \frac{1}{2} (u - u_0^k)^T F^k (u - u_0^k)$$

note que en esta forma a^k es un escalar, f^k es el Jacobiano y F^k representa la matriz Hessiana. También note que el término u_0^k significa la aproximación del vector de decisión en la iteración k .

Para resolver el problema de optimización libre de derivadas, se despliega un método de región de confianza de gradiente truncado. El problema de optimización se ejecuta para optimizar el modelo de aproximación cuadrática de la función objetivo. En cada iteración se calcula el radio de la región de confianza. El problema de optimización termina cuando el radio de la región de confianza se hace más pequeño que un valor objetivo dado. Más detalles

sobre la implementación del algoritmo BOBYQA se pueden encontrar en la publicación original⁴².

2.4. Definición del Problema

El problema a resolver en esta tesis se puede describir como sigue. Dado:

- Una función objetivo que representa las transiciones de grado o producto.
- Un sistema de caja negra (ya sea un sistema industrial o de laboratorio o una simulación por ordenador) a partir del cual se registra sólo información de entrada y salida sobre el rendimiento dinámico de dicho sistema.
- Un conjunto de restricciones simples para los estados del sistema.
- Suponemos que los valores numéricos de las derivadas del sistema de la función objetivo no están disponibles.

Entonces el problema consiste en calcular el valor de tiempo del conjunto de acciones de control $\mathbf{u}(t)$ de manera que la función objetivo alcance su valor óptimo, lo que significa que la solución óptima del problema de transición dinámica del producto puede tomar el sistema desde una posición inicial $\mathbf{x}_0(t)$ a un estado estacionario final $\mathbf{x}_f(t)$ en la mejor forma posible.

Capítulo 3

Casos de estudio

En esta sección se lleva a cabo la transición dinámica óptima del producto de varios sistemas de procesamiento bajo diferentes suposiciones de modelado. Los tres primeros ejemplos se refieren a sistemas dinámicos en los que se dispone de un modelo dinámico, mientras que una columna de destilación binaria, desplegada como cuarto ejemplo, se utiliza para demostrar las ventajas que ofrece la OLD para la optimización dinámica de sistemas cuando no existe un modelo dinámico explícito .

3.1. Ecuación diferencial fundamental

El primer caso de estudio trata de la ecuación diferencial fundamental que dice lo siguiente:

$$\frac{dy}{dt} = -ay(t) + bu(t) \quad (3.1)$$

donde y es la variable de estado, t es la variable independiente, u es una variable de control, y a, b son constantes con $a = b = 1$.

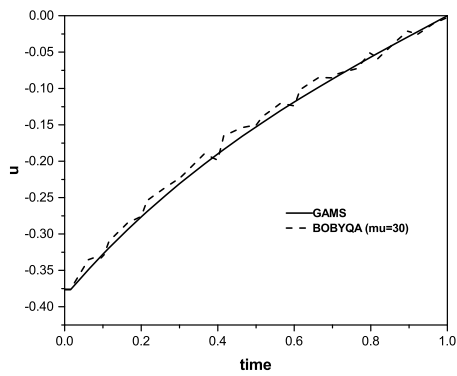
Por lo tanto, la función objetivo de la transición de estado penalizado, que incluye la discretización del modelo matemático dinámico, es:

$$\min \Omega = \frac{1}{2} \int_0^1 (y^2 + u^2) dt + \mu \mathbf{F}(y, \dot{y}) \quad (3.2)$$

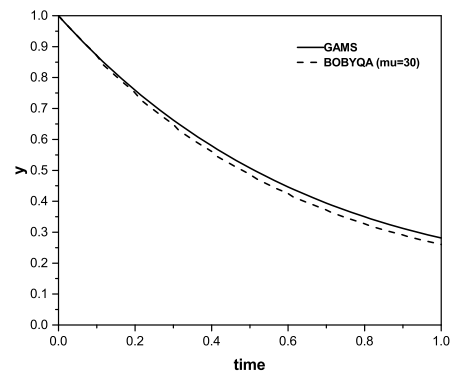
donde $\mathbf{F}(y, \dot{y})$ representa una función que describe el modelo dinámico discretizado en

función de los estados (y), derivadas de los estados (\dot{y}) y μ es un parámetro de penalización. La Figura 3.1 muestra las transiciones dinámicas óptimas calculadas por el solver CONOPT incrustado en el entorno de optimización GAMS⁷ y utilizando una implementación en Fortran del optimizador BOBYQA⁴². Los vectores de condiciones iniales $[y_0, u_0]$ y las condiciones objetivo de transición $[y^f, u^f]$ están dadas por $[1, -0.375]$ y $[0.3, 0]$, respectivamente. Como se muestra en la Figura 3.1, el problema de transición dinámica en BOBYQA se resolvió utilizando dos valores diferentes del parámetro de penalización μ . Observamos una oscilación de la respuesta de la variable manipulada para valores de μ pequeños reflejados como una desviación de la variable de estado con respecto a la solución obtenida usando el modelo dinámico como una restricción explícita del problema de optimización (ver Figuras 3.1 (a-b)). Como era de esperar, a medida que el valor de μ se incrementa, la oscilación en las variables manipuladas prácticamente desaparece y las dos soluciones óptimas de transición dinámica son similares (ver Figuras 3.1 (c-d)). El valor de las funciones objetivo utilizando GAMS y BOBYQA son 0.193 y 0.1879, respectivamente.

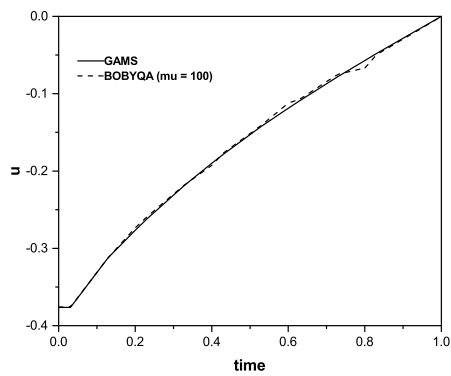
Cuando se utiliza un modelo matemático dinámico explícito para las transiciones de producto, se debe cumplir el conjunto de restricciones del modelo. Además, en el enfoque de transcripción, este conjunto de restricciones debe ser aproximado por la discretización del modelo continuo original. En este trabajo, la función $\mathbf{F}(y, \dot{y})$, que aparece en la ecuación 10 y semejantes, representa un modelo matemático dinámico así discretizado. Aunque nuestro objetivo es resolver problemas dinámicos de transición de producto utilizando un enfoque de optimización libre de derivadas, también se incluyó la solución óptima de tal problema, cuando la información de los gradientes estaba disponible como en los primeros 3 casos de estudio, utilizando el enfoque de transcripción y moviendo la discretización dinámica del modelo $\mathbf{F}(y, \dot{y})$ en la función objetivo como término de penalización. Esto nos permitiría comparar enfoques de optimización sin gradientes y libre de derivadas para resolver problemas de transiciones dinámicas de producto. Por supuesto, cuando la información de los gradientes está disponible, puede ser más eficaz resolver el problema como un problema de optimización completamente restringido en lugar de penalizar la función objetivo.



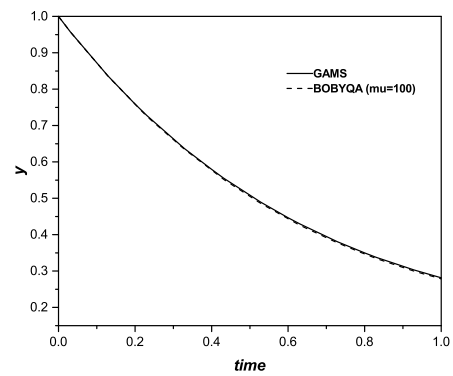
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 3.1: Comparación de los resultados óptimos de optimización dinámica para la ecuación diferencial ordinaria fundamental. El problema de optimización se resolvió mediante el enfoque de transcripción para la discretización del sistema y desplazando el sistema dinámico discretizado a la función objetivo utilizando los solucionadores CONOPT y BOBYQA. (a) y (b) para 10 elementos finitos y $\mu = 30$, (c) y (d) para 5 elementos finitos y $\mu = 100$.

3.2. Reactor de Hicks

Para calcular las trayectorias de transición de producto, se utilizó el modelo CSTR propuesto por Hicks y Ray²⁸. Debido a que el conjunto de parámetros original utilizado por estos autores no condujo a múltiples estados estacionarios, algunos de los valores de los parámetros se modificaron con el fin de terminar con un mapa de multiplicidad. En forma adimensional el modelo está dado por:

$$\frac{dy_1}{dt} = \frac{1 - y_1}{\theta} - k_{10}e^{-N/y_2}y_1 \quad (3.3)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = \frac{y_f - y_2}{\theta} - k_{10}e^{-N/y_2}y_1 - \alpha U(y_2 - y_c) \quad (3.4)$$

donde y_1 representa la concentración adimensional (c/c_f), y_2 es la temperatura adimensional (T_r/Jc_f), y_c es la temperatura adimensional del refrigerante (T_c/Jc_f), y_f es la temperatura de alimentación sin dimensiones (T_f/Jc_f), y u es la velocidad de flujo del refrigerante, c y T_r son la concentración y la temperatura del reactor, respectivamente. La Tabla 3.1 contiene los valores numéricos de los parámetros utilizados en este trabajo. En la Figura 3.2 se muestra un mapa de multiplicidad de estados estacionarios.

Tabla 3.1: Parámetros utilizados para el reactor de Hicks de estados estacionarios múltiples.

Parámetro	Valor	Descripción
θ	20	Tiempo de residencia
J	100	$(-\Delta H)/(\rho C_p)$
c_f	27.6	Condensación de alimentación
α	1.95×10^{-4}	Área de transferencia de calor adimensional
T_f	300	Temperatura de alimentación
k_{10}	300	Factor preexponencial
T_c	290	Temperatura del refrigerante
N	5	$E_1/(RJc_f)$

Como función objetivo se impone el requisito del tiempo de transición mínimo entre el estado estacionario inicial y el final deseado:

$$\min \Omega = \int_0^t \{\alpha_1(y_1(t) - y_1^d)^2 + \alpha_2(y_2(t) - y_2^d)^2 + \alpha_3(u(t) - u^d)^2\} dt + \mu \mathbf{F}(\mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}) \quad (3.5)$$

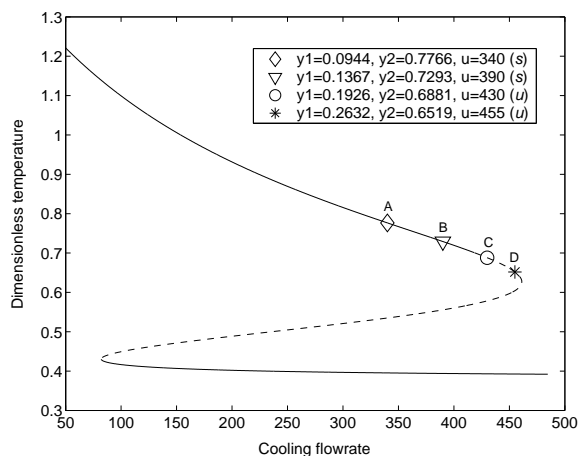
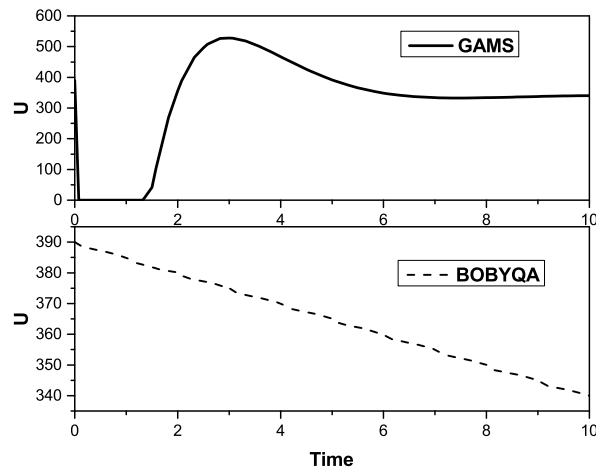


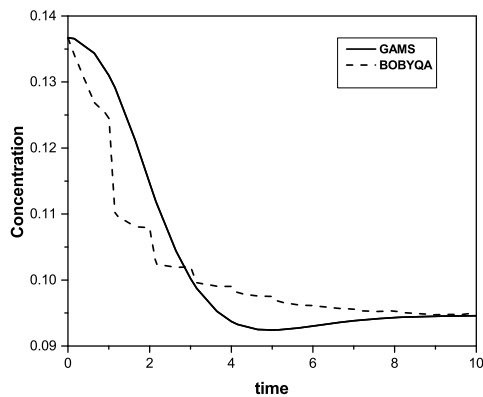
Figura 3.2: Mapa de multiplicidades en estado estacionario para el reactor de Hicks. La línea continua representa estados estacionarios estables, mientras que la línea discontinua representa estados estacionarios inestables.

donde el superíndice d representa los valores deseados u objetivo, $\alpha_1 = 1 \times 10^7$, $\alpha_2 = 5 \times 10^3$, $\alpha_3 = 1 \times 10^{-1}$ son los pesos utilizados para subrayar la importancia de la y_1, y_2 y u de las variables de decisión. Similar al caso de estudio anterior, el término $\mathbf{F}(\mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}})$ es una función que representa el modelo dinámico discretizado y $\mu = 3 \times 10^7$ es un parámetro de penalización. Como se muestra en la Figura 3.2, asumimos que una transición del producto desde el estado estacionario B al estado estacionario A se llevará a cabo. Las transiciones óptimas del producto se muestran en la figura 3.3. Como se muestra, la trayectoria de transición dinámica óptima utilizando un modelo dinámico explícito resulta ser diferente de la solución calculada cuando no se utilizan modelos dinámicos y sus derivadas relacionadas. De hecho, a partir de la Figura 3.3 (a) la solución óptima encontrada por BOBYQA es sólo una rampa lineal entre el valor inicial y final de las variables manipuladas. Por otro lado, la solución óptima encontrada usando un modelo dinámico explícito implica, inicialmente cerrar la válvula de control y luego abrirla hasta un límite superior. Las Figuras 3.3 (b-c) muestran la respuesta dinámica de los estados como resultado de imponer las acciones de control mostradas en la Figura 3.3 (a). Observamos que independientemente del enfoque de optimización dinámica, en ambos casos el tiempo de transición mínimo resulta ser el mismo, es decir, la transición del producto se logra en un tiempo de transición similar. Podemos concluir que la política de transición dinámica óptima de OLD no se ve agresiva en el sentido de que evita el comportamiento de sobrepaso en la temperatura del reactor como se muestra en la figura 3.3 (c). El valor de las funciones objetivo utilizando GAMS y BOBYQA son 292.411 y 1.223×10

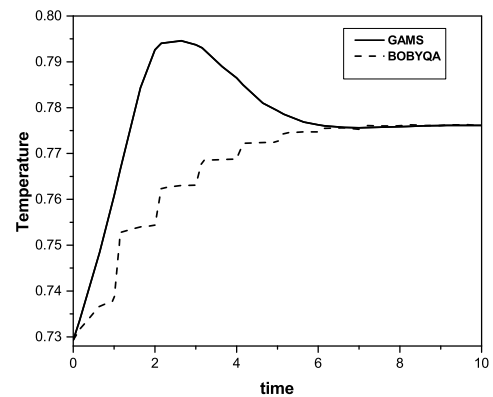
-3 , respectivamente.



(a)



(b)



(c)

Figura 3.3: Comparación de los resultados de transición dinámica óptima del producto para el reactor de Hicks usando un modelo dinámico explícito resuelto usando los optimizadores CONOPT y BOBYQA. 10 elementos finitos con tres puntos de colocación interna se utilizaron para la discretización del modelo dinámico.

3.3. Reactor Bioquímico Isotérmico

En este caso de estudio se aborda el problema óptimo de transición de grado de producto de un reactor bioquímico isotérmico propuesto por Agrawal et al¹. El modelo adimensional se expresa de la siguiente forma:

$$\frac{dx_1}{dt} = -x_1 + Da(1 - x_2) \exp(x_2/\gamma)x_1 \quad (3.6)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -x_2 + Da(1 - x_2) \exp(x_2/\gamma)(1 + \beta)/(1 + \beta - x_2) \quad (3.7)$$

donde x_1 es la concentración celular normalizada, x_2 es la conversión del sustrato y Da es el número de Damköhler. Usando $\beta = 0.1$ y $\gamma = 0.4$, obtenemos el diagrama de bifurcación representado en la Figura 3.4 para x_2 , mientras que los estados estacionarios nominales se muestran en la Tabla 3.2. Cabe señalar que en este caso x_1 y x_2 son las variables de salida, mientras que, Da es la variable manipulada. Para comparar la calidad de las políticas óptimas de transición del producto, realizamos una transición del producto desde el estado inicial estable A hasta el estado final final B .

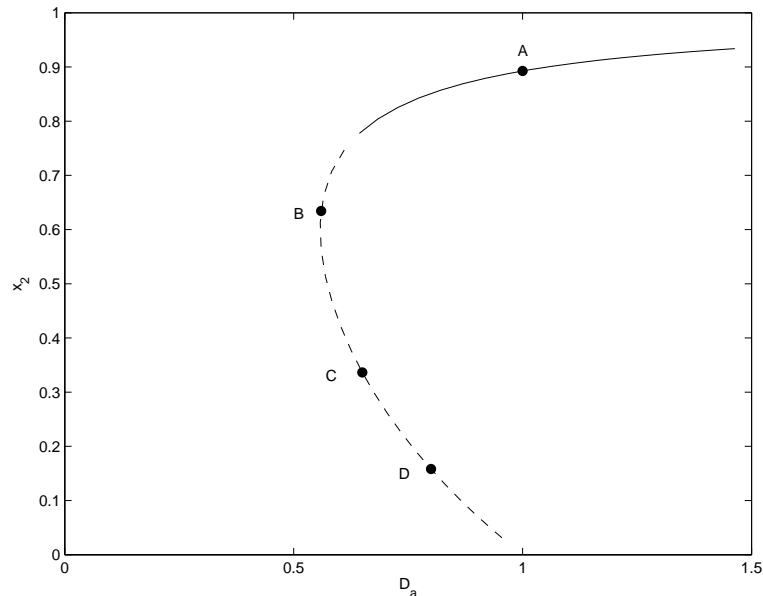


Figura 3.4: Diagrama de estados estacionarios múltiples para el reactor bioquímico.

Tabla 3.2: Estados estacionarios nominales para el reactor bioquímico

	A	B	C	D
x_1	0.1683	0.2685	0.2335	0.1354
x_2	0.8926	0.6343	0.3363	0.1581
Da	1	0.56	0.65	0.8

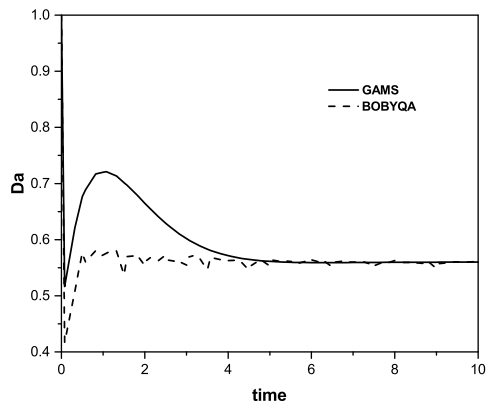
En este caso se impone la siguiente función objetivo de tiempo de transición mínimo entre el estado de equilibrio inicial y el deseado final:

$$\min \Omega = \int_0^t \{\alpha_{x_1}(x_1(t) - x_1^d)^2 + \alpha_{x_2}(x_2(t) - x_2^d)^2 + \alpha_{D_a}(Da(t) - Da^d)^2\} dt + \mu \mathbf{F}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \quad (3.8)$$

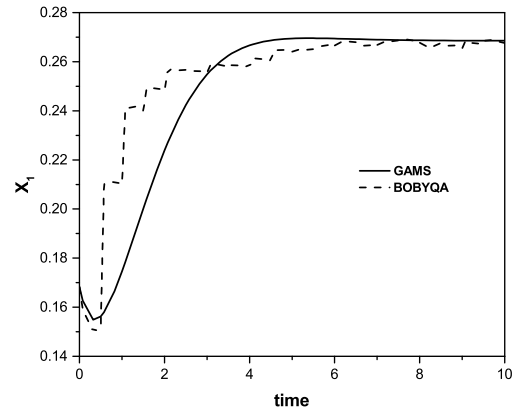
donde el superíndice d representa los valores deseados u objetivo. Para este problema $\alpha_{x_1} = 1 \times 10^1$, $\alpha_{x_2} = 1 \times 10^2$ y $\alpha_{D_a} = 1 \times 10^1$. Como en los casos anteriores, el término $\mathbf{F}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}})$ es una función que representa el modelo dinámico discretizado y $\mu = 5$ es el parámetro de penalización. Asumimos que una transición desde el estado estacionario inicial A al estado estacionario final B (sver Figura 3.4) puede llevar se a cabo. Las transiciones óptimas del producto se muestran en la Figura 3.5. Como se muestra, esta vez las soluciones óptimas de transición dinámica del producto, utilizando el modelo explícito discretizado y el modelo dinámico libre de derivadas, no son tan diferentes. Inicialmente, como se muestra en la Figura 3.5 (a), la solución óptima de la OLD tiene un comportamiento de subestimación más grande. Sin embargo, este comportamiento inicial parece ser útil para evitar el comportamiento de superación mostrado por la solución óptima que utiliza el modelo dinámico explícito completo. También debe observarse que las dos estrategias óptimas de transición dinámica del producto presentan esencialmente el mismo valor del tiempo de transición. El valor de las funciones objetivo utilizando GAMS y BOBYQA son 8×10^{-3} y $1,48 \times 10^{-1}$, respectivamente.

3.4. Transiciones dinámicas de producto utilizando un modelo de simulación de caja negra en ASPEN

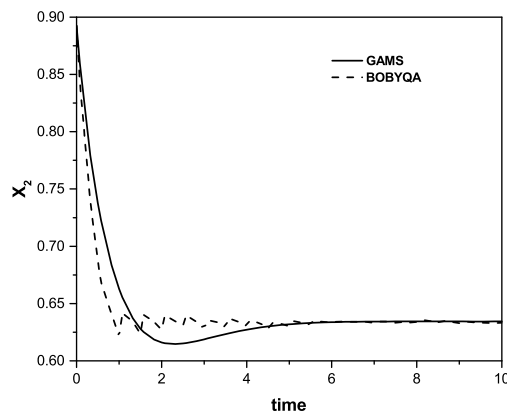
En esta sección se proporciona un ejemplo del entorno típico en el que los métodos de OLD representan una ventaja sobre las estrategias de optimización basadas en gradientes: no se dispone de un modelo matemático dinámico explícito del sistema subyacente ni de sus gradientes. Aprovechamos el hecho de que hay algunos simuladores de procesos comerciales que han incorporado potentes modelos matemáticos de primeros principios. Comúnmente, tales simuladores de procesos tienen capacidades de optimización limitadas, la mayoría de ellas relacionadas con escenarios de simulación de procesos en estado estacionario. En estos



(a)



(b)



(c)

Figura 3.5: Comparación de los resultados de transición dinámica óptima del producto para el reactor bioquímico utilizando un modelo dinámico explícito resuelto utilizando los optimizadores CONOPT y BOBYQA. 20 elementos finitos con tres puntos de colocación interna se utilizaron para la discretización del modelo dinámico.

entornos de simulación, los algoritmos de optimización dinámica no están disponibles y son difíciles de implementar o están limitados a un tipo de técnicas lineales de CPM. Esto es cierto especialmente para los simuladores de procesos secuenciales, ya que en entornos de simulación orientados en ecuaciones, debido a la estructura del simulador, la optimización dinámica puede estar disponible. En cualquier caso, en este caso de estudio se supondrá que un modelo típico de caja negra con dinámica de primeros principios está disponible. En este sistema de caja negra proporcionamos valores de las variables manipuladas y registramos las respuestas del sistema. Usando este escenario de caja negra, construimos y resolvemos un problema de transición de producto de OLD capaz de tomar el sistema dinámico de un punto inicial a un punto objetivo final de una manera óptima usando un ambiente de optimización de CPM no lineal.

Se construyó un modelo dinámico no lineal de una columna de destilación binaria de benceno/tolueno utilizando el entorno de simulación ASPEN Dynamics. La corriente de alimentación equimolar está compuesta por un caudal total de 1000 kmol/h a 100 C y 5 bar. La columna de destilación tiene 12 etapas y condensador total, el número de la etapa de alimentación es 6 y se cuenta desde arriba hacia abajo. Además, en el condensador la columna funciona a 1 bar con una caída presión de 0,1 bar por etapa. Utilizamos el riguroso módulo de equilibrio vapor-líquido **RadFrac** disponible en Aspen Plus. Además, el método Chao-Seader fue utilizado para los cálculos de equilibrio líquido-vapor. Además, los valores de la relación de reflujo y la carga térmica del rehervidor se fijaron en 6.3457 y 26.568 GJoules, respectivamente. Bajo estas condiciones de procesamiento, la fracción molar de benceno en la corriente de destilado es 0.8, mientras que la fracción molar de tolueno en la corriente de fondo es también de 0.8. Figura 3.6 muestra el diagrama de flujo de la simulación en estado estacionario de la columna desplegada para obtener un modelo dinámico de la columna de destilación binaria utilizando el modo *Pressure Driven* disponible en ASPEN PLUS³⁰.

Para probar el desempeño del esquema de control de CPM de OLD se examinaron los siguientes escenarios de lazo cerrado: (a) control de composición de un punto de la corriente de destilado, (b) control de composición de un punto de la corriente de fondo y (c) de los flujos de destilado y de fondo. Para controlar la fracción molar de benceno en la corriente de destilado se utilizó el caudal de reflujo másico como variable manipulada, mientras que la fracción molar de tolueno en la corriente de fondo se controló utilizando la carga térmico

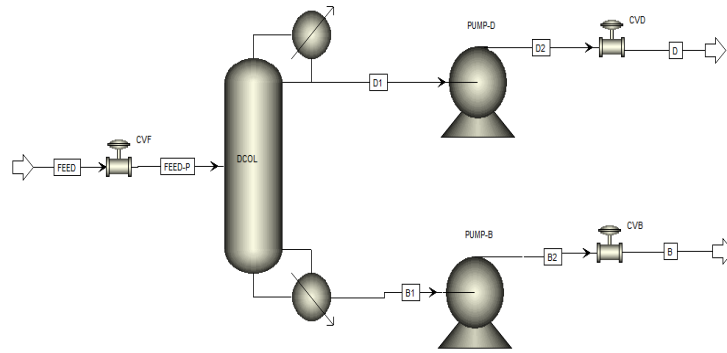


Figura 3.6: Diagrama de flujo de la columna de destilación benceno-tolueno. La presión de descarga en las bombas PUMP-D y PUMP-B es de 6 bares. La presión de salida en las válvulas de control CVD y CVB es de 3 bares. Además, se estableció un tiempo de residencia de 5 minutos, para dimensionar el acumulador y los tanques de sumidero.

del rehervidor como variable manipulada. Cabe destacar que también se incluyeron los lazos de control primario proporcional-integral (PI). En consecuencia, la presión de la columna se reguló usando la carga térmica del condensador, se controló el nivel del condensador usando el flujo del destilado y se controló el nivel del rehervidor utilizando el flujo de los fondos. La Tabla 3.3 muestra los valores de las ganancias de Ziegler y Nichols y tiempos integrales para cada uno de los lazos de control primarios. Además, para comparar el desempeño del sistema de control CPM de OLD, dos controladores de composición PI también se sintonizaron. Estos valores de ajuste del controlador se encontraron desplegando la herramienta Autoajuste disponible en Aspen Dynamics.

Tabla 3.3: Valores de los parámetros del controlador PI de Ziegler-Nichols para los lazos primarios (tres primeros lazos de control) y de control de la composición secundaria del sistema de la columna de destilación benceno-tolueno.

Lazo	Variable controlada	Variable manipulada	Ganancia	Tiempo integral	Acción
1	Presión columna	Carga térmica condensador	20	12	Inversa
2	Nivel condensador	Flujo del destilado	20	1000	Directa
3	Nivel rehervidor	Flujo de los fondos	20	20	Directa
b	Fracción mol Benzene	Reflujo másico	24.93	9.5	Inversa
t	Fracción mol Tolueno	Carga térmica rehervidor	6.135	7.5	Inversa

Como se discutió anteriormente, para aproximarse al cálculo en lazo cerrado de las transiciones dinámicas óptimas de producto, usamos una formulación de CPM de OLD para la

función objetivo. La formulación de la función objetivo para el control de la composición de un punto es la siguiente:

$$\min \Omega_i = \sum_{j=1}^N [\alpha^x (x_{ij} - x_i^d)^2 + \alpha^u (u_{ij} - u_i^d)^2] + \alpha^x \sum_{j=1}^N [\Delta x_{ij}]^2 + \alpha^u \sum_{j=1}^N [\Delta u_{ij}]^2, \quad i = [b, t] \quad (3.9)$$

donde x representa la fracción mol que es la variable controlada, u representa la variable manipulada, N es el horizonte de predicción y control, el superíndice d representa los valores deseados u objetivo. Por otra parte, el índice i representa el número de lazos de control que en este caso, de acuerdo con la Tabla 3.3, sólo puede tomar los siguientes valores: $i = b, t$ (por ejemplo, $i = b$ significa el control de la fracción molar de benceno, mientras que $i = t$ significa el control de la fracción molar de tolueno). Además, Δx y Δu tienen definiciones similares como en las ecuaciones 2.2 and 2.3. Finalmente, α^x y α^u son funciones de ponderación para la composición y la variable manipulada, respectivamente. De forma similar, para el control de la doble composición de la columna de destilación se utilizó la siguiente forma de la función objetivo:

$$\min \Omega = \sum_{i=b}^t \sum_{j=1}^N [\alpha_i^x (x_{ij} - x_i^d)^2 + \alpha_i^u (u_{ij} - u_i^d)^2] + \sum_{i=b}^t \alpha_i^x \sum_{j=1}^N [\Delta x_{ij}]^2 + \sum_{i=b}^t \alpha_i^u \sum_{j=1}^N [\Delta u_{ij}]^2 \quad (3.10)$$

Independientemente del tipo de control de composición, se aplicaron los siguientes límites sobre las variables controladas y manipuladas:

$$0 \leq x_b \leq 1 \quad (\text{concentraci3n benceno})$$

$$0 \leq x_t \leq 1 \quad (\text{concentraci3n tolueno})$$

$$26.0923 \leq u^b \leq 62.957 \quad (\text{reflujo masico [Ton/hr]})$$

$$26.56 \leq u^t \leq 41.86 \quad (\text{carga termica rehervidor [GJ/hr]})$$

Además, se utilizaron los siguientes valores de las funciones de ponderación: $\alpha_b^x = 1$, $\alpha_t^x = 1$, $\alpha_b^u = 1$ and $\alpha_t^u = 0.1$

3.4.1. Control de composición de un punto en la corriente de destilado

En este caso de estudio se realizan dos transiciones dinámicas de producto: (a) a partir del estado estacionario inicial dado por $[x_0^b, R_0]=[0.8, 26.0923]$, al estado estacionario objetivo dado por $[x_f^b, R_f]=[0.9, 36.700]$ y (b) la transición del producto en la dirección opuesta. Aquí, x^b representa la fracción mol del benceno, R es el reflujo másico [Ton/hr], mientras que los subíndices 0 y f representan los valores iniciales y finales, respectivamente. Hemos supuesto que las mediciones en línea de la fracción molar de benceno en la corriente de destilado estarán disponibles cada 30 min y que la longitud del horizonte de predicción/control N es 5. Además, que la composición de los fondos no se controló. Para implementar ambas transiciones dinámicas de producto se procede de la siguiente manera. (1) En primer lugar, inicializamos la simulación con las condiciones de estado estacionario, (2) entonces, cambiamos al modo dinámico y (3) ejecutamos la simulación dinámica durante 30 minutos, (4) detenemos la simulación, (5) usamos los valores de el reflujo másico y la concentración de benceno en el optimizador BOBYQA de OLD como variables de decisión y se resuelve el problema de OLD; BOBYQA produce el nuevo valor calculado del reflujo másico a implementar en el entorno de simulación. Se repiten los pasos (3) - (5) cuando estén disponibles nuevas mediciones hasta que se alcance el estado estacionario objetivo.

En la Figura 3.7 se muestran las transiciones óptimas de producto usando un enfoque de CPM no lineal y el optimizador de la región de confianza BOBYQA de OLD. Como se puede notar, el optimizador BOBYQA es capaz de realizar las transiciones dinámicas del producto solicitado. Una de las cosas a notar a partir de los resultados mostrados en la figura 3.7 es que las transiciones del producto no son simétricas, lo que significa que el comportamiento dinámico de la columna de destilación de benceno / tolueno es un sistema no lineal. Además, se requería un número relativamente pequeño de acciones de control para alcanzar los estados estacionarios objetivo. Además, debe destacarse que los resultados de optimización dinámica se obtuvieron sin utilizar un modelo dinámico explícito de la columna de destilación y/o sus gradientes, lo que representa una ventaja cuando un modelo dinámico no está disponible o no es diferenciable. El valor de la función objetivo es 5.67×10^{-4} .

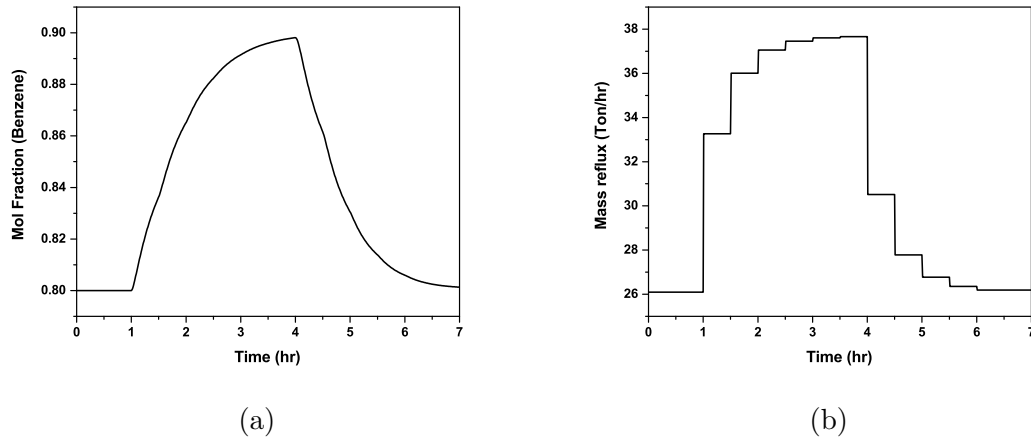


Figura 3.7: Control en un punto de la fracción molar de benceno en la corriente de destilado usando el enfoque MPC-OLD. El tiempo de muestreo se fijó en 30 min.

3.4.2. Control de composición de un punto en la corriente de fondo

En este caso, la fracción molar de tolueno en la corriente de fondo se controló en lazo cerrado utilizando la carga térmica del rehervidor como variable manipulada. Debe hacerse hincapié en que la fracción molar del benceno en la corriente de destilado no estaba bajo control en lazo cerrado. En este caso se trataron dos transiciones de producto: a) desde el estado estacionario inicial dado por $[x_0^t, Q_0] = [0.8, 26.5681]$, al estado estacionario objetivo dado por $[x_f^t, Q_f] = [0.9, 29.99]$, (b) también se abordó la transición del producto en la dirección opuesta. Al igual que en el caso anterior, x^t representa la fracción molar de tolueno, Q es la carga térmica del rehervidor [GJ / hr], mientras que los subíndices 0 y f representan valores iniciales y finales, respectivamente. En la Figura 3.8 se muestran los resultados de las variables controladas y manipuladas. Como puede observarse, los resultados son aceptables en términos de lograr las transiciones del producto de una manera relativamente suave. Globalmente hablando y como se esperaba, el control de un punto no fue un problema importante usando el enfoque de CPM de OLD. El valor de la función objetivo es 4.08×10^{-4} .

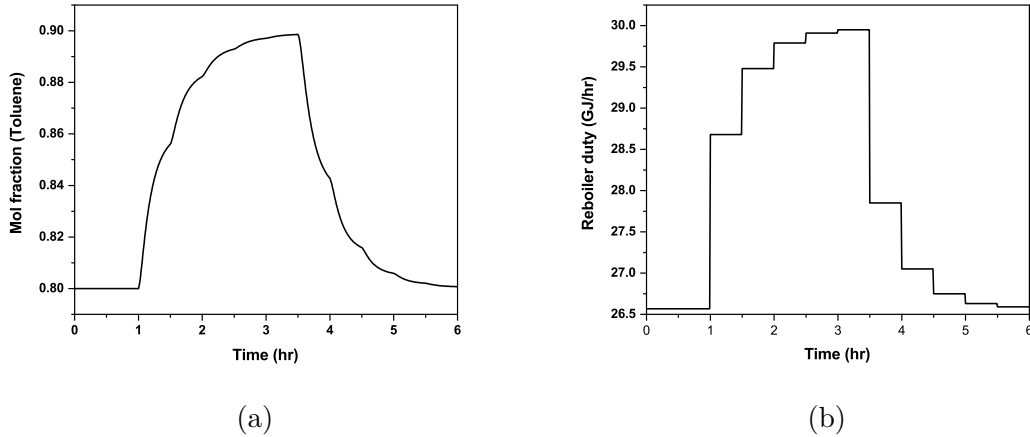


Figura 3.8: Control en un punto de la fracción molar de tolueno en la corriente de fondos usando el enfoque CPM-OLD. El tiempo de muestreo se fijó en 30 min.

3.4.3. Control dual de composición de los flujos de destilado y de fondos

El problema más desafiante e interesante en el control de destilación convencional se refiere al control simultáneo de la fracción molar de la corriente de destilado y de la corriente de fondo. El problema es difícil de manejar debido a las interacciones comúnmente fuertes entre tales lazos de control y grandes retrasos en las mediciones. Debido a su naturaleza multivariable y su capacidad para tratar con sistemas no lineales, los controladores CPM no lineales son una buena opción para abordar el problema de control de composición dual en columnas de destilación convencionales. En la Figura 3.9 se muestran los resultados de lazo cerrado para el flujo de destilado y de fondo.

Los estados estacionarios inicial y final se dan de la siguiente manera:

$[x_0^b, x_0^t, R_0, Q_0] = [0.8, 0.8, 26.092, 26.5681]$ y $[x_f^b, x_f^t, R_f, Q_f] = [0.9, 0.9, 62.657, 41.73]$, respectivamente.

De forma similar a los 2 problemas de control de un punto anteriores, se intentaron dos transiciones de producto: (a) desde su estado estacionario inicial hasta el estado estacionario objetivo y (b) en la dirección opuesta. Como se observa en la Figura 3.9, el controlador CPM de OLD es capaz de realizar las transiciones de producto solicitadas en un número relativamente pequeño de pasos de control. Además, la respuesta en lazo cerrado es lo suficientemente suave en cualquier dirección de transición. El valor de la función objetivo es

5.44×10^{-1} .

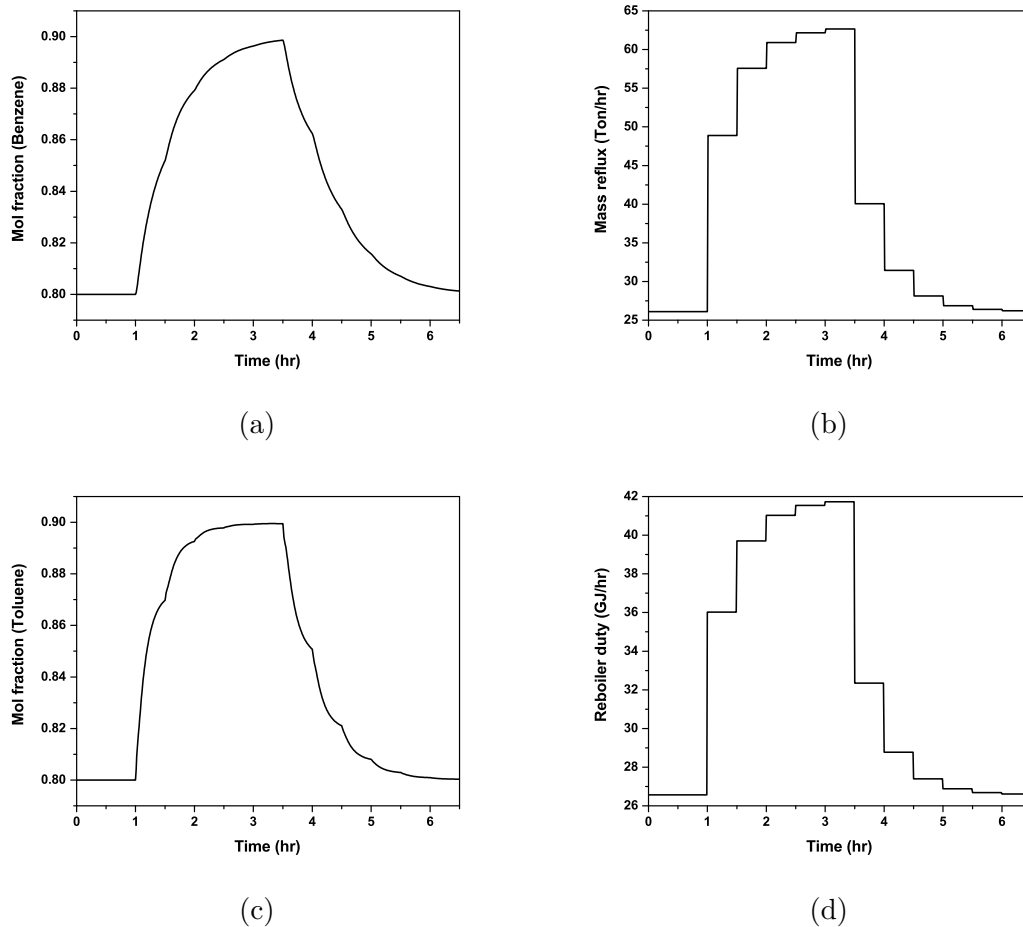


Figura 3.9: Control en dos puntos de la fracción molar de benceno en la corriente de destilado y de la fracción molar de tolueno en la corriente de fondo usando el enfoque CPM-OLD. El tiempo de muestreo se fijó en 30 min.

Comparación con los controladores proporcionales-integrales

En esta sección se realizó una comparación entre el desempeño de los controladores CPM-OLD y el comportamiento a lazo cerrado correspondiente obtenido de estructuras de control PI simples. Intuitivamente, esperábamos una mejor respuesta en lazo cerrado de los controladores CPM-OLD porque usan más información con respecto al sistema controlado. Además, la presencia del retardo de medición relativamente largo crea serios problemas al desplegar sistemas de control PI. Por consiguiente, en la Figura 3.10 los resultados en lazo cerrado se comparan usando el sistema de control CPM-OLD y un sistema de control PI de Ziegler-Nichols cuando se intentó el control de composición en un punto de la corriente

de destilado. Está claro que incluso para un control de composición de punto único, el controlador PI no puede realizar la transición de producto solicitada. La razón principal del mal desempeño del controlador PI tiene que ver con la longitud del tiempo de muestreo. Dado que los escenarios de control restantes mostraron una respuesta a lazo cerrado similar al implementar el sistema de control PI, sólo se muestra la comparación del control a lazo cerrado de la corriente de destilado.

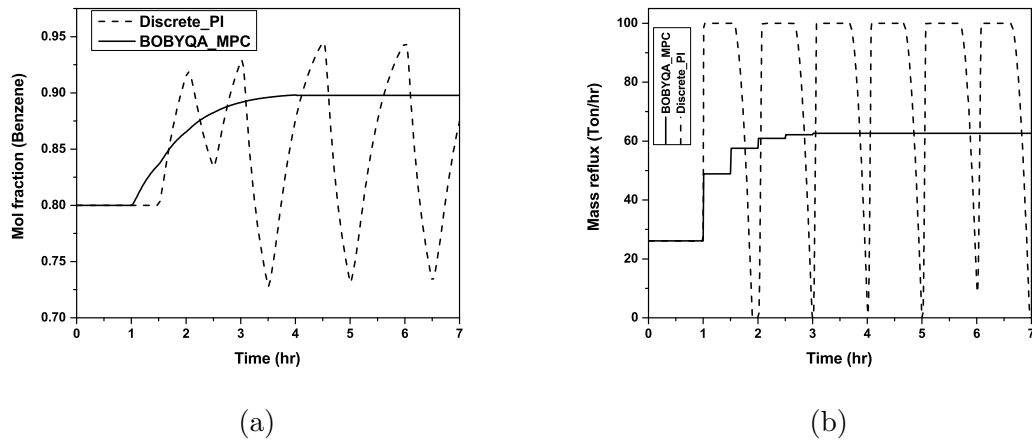


Figura 3.10: Comparación del control en un punto de la fracción molar de benceno en la corriente de destilado frente a un controlador PI de Ziegler-Nichols. El tiempo de muestreo se fijó en 30 min.

Conclusiones

Existen algunas situaciones prácticas en Ciencia e Ingeniería donde el despliegue de herramientas de optimización puede traer importantes beneficios medidos en términos de indicadores económicos, de salud y de medio ambiente. Comúnmente, el desarrollo de un buen modelo matemático es un primer requisito para aplicar las herramientas formales de optimización basadas en gradientes. Hay algunas situaciones en las que tales modelos pueden ser difíciles de obtener debido a la complejidad involucrada en la construcción de equipos experimentales para fines de verificación de modelos o parámetros fiables del modelo. En otros casos prácticos, el modelo matemático sólo puede estar disponible en forma de un gran programa informático o en un entorno de simulación. En ninguno de estos casos, ningún modelo explícito estaría disponible para propósitos de optimización. Bajo estos escenarios, las técnicas de OLD pueden proporcionar una manera efectiva y eficiente de resolver problemas de optimización para los cuales no hay información de gradientes disponible. En particular, en este trabajo hemos desplegado OLD para abordar las soluciones de tales problemas. Cuando el problema de optimización implica algunas variables de decisión, los algoritmos del OLD tienen un buen desempeño. Hemos demostrado que con el uso de un marco de CPM, el problema óptimo de transición dinámica de producto puede ser resuelto eficientemente utilizando un modelo dinámico incorporado en el simulador de procesos ASPEN. Como trabajo futuro abordaremos los siguientes problemas: (a) sistemas de procesamiento que involucren incertidumbre, (b) sistemas no diferenciables y (c) escenarios de diseño que involucran variables de decisión discretas.

Trabajo a Futuro

- Sistemas de procesamiento que involucren incertidumbre.
- Sistemas no diferenciables.
- Escenarios de diseño que involucren variables de decisión discretas.
- Proponer estrategias de control más avanzadas.

Productos de Investigación

- Presentación en el XXXVII Encuentro Nacional de la AMIDIQ (2016) del trabajo:

Free-derivative optimization of product transitions in continuous systems

- Publicación del artículo de investigación:

Product Dynamic Transitions Using a Derivative-Free Optimization Trust-Region Approach. Israel Negrellos-Ortiz, Antonio Flores-Tlacuahuac, and Miguel Angel Gutiérrez-Limón. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. **2016** 55 (31), 8586-8601

DOI: 10.1021/acs.iecr.6b00268

Bibliografía

- [1] P. Agrawal, C. Lee, H. C. Lim, and D. Ramkrishna. Theoretical investigations of dynamic behavior of isothermal continuous stirred tank biological reactors. *Chemical Engineering Science*, 37(3):453–462, 1982.
- [2] M. Asadollahi, G. Naevdal, M. Dadashpour, and J. Kleppe. Production optimization using derivative free methods applied to brugge field case. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 114:22–37, 2014.
- [3] M. Asteasuain, A. Bandoni, C. Sarmoria, and A. Brandolin. Simultaneous process and control system design for grade transition in styrene polymerization. *Chemical Engineering Science*, 61(10):3362–3378, 2006.
- [4] L. Biegler. *Nonlinear Programming*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2010.
- [5] L. T. Biegler. An overview of simultaneous strategies for dynamic optimization. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 46(11):1043–1053, 2007.
- [6] V. Botelho, I. de Souza Moreira, J. O. Trierweiler, G. A. Neumann, and M. Farenzena. 8th ifac symposium on advanced control of chemical processes estimation of kinetic parameters of a polymerization reactor using real data. *IFAC Proceedings Volumes*, 45(15):685 – 690, 2012.
- [7] A. Brooke, D. Kendrick, Meeraus, and R. A. Raman. *GAMS: A User’s Guide*. GAMS Development Corporation, 1998, <http://www.gams.com>.
- [8] Y. Cao, S. Li, L. Petzold, and R. Serban. Adjoint sensitivity analysis for differential-

- algebraic equations: The adjoint dae system and its numerical solution. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 24(3):1076–1089, 2003.
- [9] A. Cervantes, S. Tonelli, A. Brandolin, J. Bandoni, and L. Biegler. Large-scale dynamic optimization for grade transitions in a low density polyethylene plant. *Computers & Chemical Engineering*, 26(2):227–237, 2002.
- [10] C. Chatzidoukas, J. Perkins, E. Pistikopoulos, and C. Kiparissides. Optimal grade transition and selection of closed-loop controllers in a gas-phase olefin polymerization fluidized bed reactor. *Chemical Engineering Science*, 58(16):3643–3658, 2003.
- [11] M. Clerc. *Particle Swarm Optimization*. Wiley, 2006.
- [12] A. Conn, N. Gould, A. Sartenaer, and P. Toint. Convergence properties of an augmented lagrangian algorithm for optimization with a combination of general equality and linear constraints. *SIAM, J. Optim.*, 6(3):674–703, 1996.
- [13] A. Conn, K. Scheinberg, and P. Toint. Recent progress in unconstrained nonlinear optimization without derivatives. *Mathematical Programming*, 79:397–414, 1997.
- [14] A. Conn, K. Scheinberg, and L. Vicente. *Introduction to Derivative-Free Optimization*. SIAM, 2009.
- [15] J. S. Daehlen, G. O. Eikrem, and T. A. Johansen. Nonlinear model predictive control using trust-region derivative-free optimization. *Journal of Process Control*, 24(7):1106–1120, 2014.
- [16] J. Debling, G. Han, J. Kuijpers, J. VerBurg, J. Zacca, and W. Ray. Dynamic modeling of product grade transitions for olefin polymerization processes. *AIChE Journal*, 40(3):506–520, 1994.
- [17] J. Dennis and B. Schnabel. *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*. SIAM, 1987.
- [18] A. Dowling, S. Vetukuri, and L. Biegler. Optimization strategies for pressure swing adsorption cycle synthesis. *AIChE Journal*, 58(12):3777–3791, 2012.

- [19] C. Echeverria, O. Isebor, and L. Durlofsky. Application of derivative-free methodologies to generally constrained oil production optimisation problems. *Int. J. Mathematical Modelling and Numerical Optimization*, 2(2):134–161, 2011.
- [20] M. Fischer and X. Jiang. Numerical optimisation for model evaluation in combustion kinetics. *Applied Energy*, 156:793–803, 2015.
- [21] A. Flores-Tlacuahuac, J. Alvarez, E. Saldívar-Guerra, and G. Oaxaca. Optimal transition and robust control design for exothermic continuous reactors. *AIChE Journal*, 51(3):895–908, 2005.
- [22] A. Flores-Tlacuahuac, L. T. Biegler, and E. Saldívar-Guerra. Optimal Grade Transitions in the HIPS Polymerization Process. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45(18):6175–6189, 2006.
- [23] A. Flores-Tlacuahuac, S. T. Moreno, and L. T. Biegler. Global optimization of highly nonlinear dynamic systems. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 47(8):2643–2655, 2008.
- [24] F. Forouzanfar and A. Reynolds. Well-placement optimization using derivative-free method. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 109:96–116, 2013.
- [25] D. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. Addison-Wesley, 1989.
- [26] A. Griewank and A. Walther. *Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*. SIAM, 2008.
- [27] C. Guilani and E. Camponogara. Derivative-free methods applied to daily production optimization of gas-lifted oil fields. *Computers & Chemical Engineering*, 75:60–64, 2015.
- [28] G. A. Hicks and W. H. Ray. Approximation methods for optimal control synthesis. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 49(4):522–528, 1971.
- [29] R. Hooke and T. A. Jeeves. Direct search solution of numerical and statistical problems. *J. ACM*, 8(2):212–229, 1961.
- [30] A. Jana. *Process Simulation and Control Using Aspen*. PHI Learning, 2012.

- [31] D. Koller and S. Ulbrich. Optimal control of hydroforming processes. *PAMM*, 11(1):795–796, 2011.
- [32] S. Korkel, H. Qu, G. Rucker, and S. Sager. Derivative based vs. derivative free optimization methods for nonlinear optimum experimental design. In W. Zhang, W. Tong, Z. Chen, and R. Glowinski, editors, *Current Trends in High Performance Computing and Its Applications*, pages 339–344. Springer Berlin Heidelberg, 2005.
- [33] O. Kramer, D. Echeverria, , and S. Koziel. Derivative-free optimization. In S. Koziel and X.-S. Yang, editors, *Computational Optimization, Methods and Algorithms*, pages 61–83. Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- [34] H. M.A. and D. Seborg. *Nonlinear Process Control*. Prentice-Hall, 1997.
- [35] K. McAuley and J. MacGregor. Optimal grade transition in a gas phase polyethylene reactor. *AIChE Journal*, 32(10):1564–1576, 1992.
- [36] P. Morales and A. Flores-Tlacuahuac. Muti-objective nonlinear model predictive control of semibatch polymerization reactors. *Macromolecular Reaction Engineering*, 6(6-7):252–264, 2012.
- [37] J. A. Nelder and R. Mead. A simplex method for function minimization. *The Computer Journal*, 7(4):308–313, 1965.
- [38] J. Nocedal and S. Wrioth. *Numerical Optimization*. Springer, 2006.
- [39] R. H. Nyström, R. Franke, I. Harjunkoski, and A. Kroll. Production campaign planning including grade transition sequencing and dynamic optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 29(10):2163–2179, 2005.
- [40] C. Onnen, R. Babuška, U. Kaymak, J. M. Sousa, H. B. Verbruggen, and R. Isermann. Genetic algorithms for optimization in predictive control. *Control Engineering Practice*, 5(10):1363–1372, 1997.
- [41] B. Patil, E. Maia, and L. Ricardez-Sandoval. Integration of scheduling, design, and control of multi product chemical processes under uncertainty. *AIChE Journal*, 61(8):2456–2470, 2015.

- [42] M. J. D. Powell. The bobyqa algorithm for bound constrained optimisation without derivatives. *Report No. DAMTP 2009/NA06, University of Cambridge, UK*, 2009.
- [43] A. Prata, J. Oldenburg, A. Kroll, and W. Marquardt. Integrated scheduling and dynamic optimization of grade transitions for a continuous polymerization reactor. *Computers & Chemical Engineering*, 32(3):463–476, 2008.
- [44] L. Rios and N. Sahinidis. Derivative-free optimization: A review of algorithms and comparison of software implementations. *J. Glob. Optim.*, 56:1247–1293.
- [45] H. Sarimveis and G. Bafas. Fuzzy model predictive control of non-linear processes using genetic algorithms. *Fuzzy Sets and Systems*, 139(1):59–80, 2003.
- [46] M. Schafer, B. Karasozen, Y. Uludag, K. Yapici, and O. Ugur. Numerical method for optimizing stirrer configurations. *Computers & Chemical Engineering*, 30:183–190, 2005.
- [47] L. Schilling, F. Niekiet, N. Stock, and B. Hartke. Computer-assisted synthesis optimization of inorganic-organic hybrid compounds using the local optimisation algorithm bobyqa. *ChemPlusChem*, 79:863–871, 2014.
- [48] G. Strang. *Computational Science and Engineering*. Wellesley, MA: Wellesley-Cambridge Press, 2007.
- [49] S. Terrazas-Moreno, A. Flores-Tlacuahuac, and I. Grossmann. Simultaneous design, scheduling, and optimal control of a methyl-methacrylate continuous polymerization reactor. *AIChE Journal*, 54(12):3160–3170, 2008.
- [50] V. Torczon. On the Convergence of Pattern Search Algorithms. *SIAM Journal on Optimization*, 7(1):1–25, 1997.
- [51] O. Ugur, B. Karasozen, M. Schafer, and K. Yapici. Derivative free optimisation methods for optimising stirrer configurations. *European Journal of Operational Research*, 191:853–863, 2008.
- [52] P. Van der Lee, T. Terlaky, and T. Woudstra. A new approach to optimizing energy systems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:5297–5310, 2001.

- [53] F. Vanden Berghen and H. Bersini. Condor, a new parallel, constrained extension of powell's uobyqa algorithm: Experimental results and comparison with the dfo algorithm. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 181(1):157–175, 2005.
- [54] A. Waechter. *An Interior Point Algorithm for Large-Scale Nonlinear Optimization with Applications in Process Engineering*. PhD thesis, Carnegie Mellon University, 2002.
- [55] J. Weng, Z. Sao, X. Chen, X. Gu, Z. Yao, L. Feng, and L. Biegler. A novel strategy for dynamic optimization of grade transition processes based on molecular weight distribution. *AIChE Journal*, 60(7):2498–2512, 2014.