

Plan 298 Ing. Químico

Asignatura 44337 OPTIMIZACION DE PROCESOS QUIMICOS

Grupo 1

Presentación

Optimización de procesos. Programación matemática. Diseño óptimo de procesos

Process Optimization, Mathematical Programming, Optimal process design

The course will be given in two groups: one in Spanish and another one in English

Up to date information about the course can be found in:

<http://www.isa.cie.uva.es/~prada/>

La información actualizada de la asignatura se encuentra en:

<http://www.isa.cie.uva.es/~prada/>

Gestión mediante Moodle en:

<http://docenweb.isa.cie.uva.es/moodle/>

Programa Básico

Introducción.

Optimización sin restricciones.

Programación Lineal.

Optimización no lineal con restricciones

Problemas mixto enteros

Introducción a la secuenciación y planificación de procesos batch.

Con aplicaciones a la Ingeniería Química

Objetivos

Con esta asignatura se pretende que el alumno aprenda a formular problemas de toma de decisiones usando técnicas de optimización, conozca los distintos tipos de problemas así como los fundamentos de los algoritmos de resolución numérica y aprenda a aplicarlos en algunos problemas prácticos relacionados con la industria de procesos.

Programa de Teoría

Español / English

1 Introducción. Toma de decisiones óptimas. Modelos, grados de libertad, funciones objetivo. Conceptos matemáticos básicos. Convexidad. Tipos de problemas de optimización. Campos de aplicación.

2 Optimización sin restricciones. Condiciones de extremo. Problemas de una variable. Método del gradiente más pronunciado. Métodos tipo Newton. Métodos basados en evaluaciones de la función. Formulación de problemas.

3. Programación Lineal (LP). Método simplex. Teoría de la dualidad. Sensibilidad de las soluciones. Métodos de punto interior. Formulación de problemas.

4 Optimización con restricciones. Multiplicadores de Lagrange. Ejemplos. Condiciones de KKT. Programación cuadrática (QP). Funciones de penalización. Programación no-lineal (NLP). Métodos SQP, GRG y CP. Convexificación. Software NLP. Formulación de problemas. Métodos estocásticos de optimización. Aplicaciones al diseño óptimo de procesos

5 Problemas mixto enteros (MILP). Algoritmo Branch and Bound. Formulación de condiciones lógicas. Formulación de problemas.

6 Introducción a la secuenciación y planificación de procesos batch. Cartas de Gantt.

Outline Syllabus:

- 1 INTRODUCTION. Optimal decisions. Basic concepts: Models, degrees of freedom, cost functions. Convexity. Types of optimization problems. Fields of Application.
- 2 UNCONSTRAINED OPTIMIZATION. Extremum conditions. Monovariate optimization methods. Multivariate methods: Methods based on gradient evaluations. Newton's methods. Methods based on function evaluation. Problem formulation
3. LINEAR PROGRAMMING (LP). The simplex method. Duality theory. Sensibility of the solutions. Interior point methods. Problem formulation.
- 4 CONSTRAINT OPTIMIZATION. Lagrange multipliers. Examples. KKT conditions. Quadratic Programming (QP). Penalty functions. Non-linear Programming (NLP): SQP, GRG and CP methods. Convexification. NLPSoftware. Problem formulation. Stochastic optimization methods. Optimal process design.
- 5 MIX INTEGER OPTIMIZATION (MILP). Logical conditions formulation. Branch and Bound algorithm. Problem formulation.
- 6 BATCH PROCESSES. Introduction to batch processes scheduling and planning. Gantt charts.

La información actualizada de la asignatura se encuentra en:
<http://www.isa.cie.uva.es/~prada/>

Programa Práctico

Español / English

Las prácticas tienen como objetivo:

- Aprender a formular problemas de distintos tipos en términos de optimización
- Aprender a utilizar software comercial de optimización
- Ilustrar la teoría y aplicarla utilizando dicho software a problemas de distinta complejidad.

Constituyen una parte importante de la asignatura. Se utilizarán la toolbox de Optimización de Matlab y el paquete GAMS. Por grupos se realizarán prácticas de:

- 1 Optimización de funciones mono y multivariantes con Matlab.
 - 2 Lenguaje de modelado GAMS. Resolución e interpretación de soluciones de problemas LP con GAMS/CPLEX.
 - 3 Miniproyecto de diseño y optimización (NLP y MIP) de procesos con GAMS.
- Los alumnos deberán entregar un informe sobre cada una de las prácticas que han realizado, el cual será tenido en cuenta en la valoración final.

LAB WORK

Practical work is oriented to learn commercial optimization tools and apply them in practical decision making problems.

The Matlab Toolbox optimization, as well as GAMS will be used. Practical work includes:

- 1 Learn the tools and apply non constrained optimization methods with Matlab
 - 2 GAMS environment. Solving LP and NLP problems
 - 3 Process design and optimal operation point mini-project with GAMS
-

Evaluación

Para la evaluación de la materia se realizará un examen con dos partes: una de problemas y otra de teoría y cuestiones. El alumno puede encontrar problemas típicos en el apartado de Documentos.

Para aquellos alumnos que obtengan una nota superior a 4 en el examen, el miniproyecto tendrán un peso del 30 % en la nota final.

La información actualizada de la asignatura se encuentra en:
<http://www.isa.cie.uva.es/~prada/>

Bibliografía

Optimization of Chemical Processes, T.F. Edgar, D.M. Himmelblau, L.S. Lasdon, McGraw Hill, 2ª edición, 2001
Systematic Methods of Chemical Process Design, L.T. Biegler, I.E. Grossmann, A.W. Westerberg, Prentice Hall 1997
Engineering Optimization, G.V. Reklaitis, A. Ravindran, K.M. Ragsdell, J. Wiley 1983
